Tarbiat Modares University

Journal of
Applied Research in Chemical-Polymer Engineering

journal homepage: www.arcpe.modares.ac.ir

Research Paper

# Modeling of Kavian Petrochemical Hydrogen Purification Industrial Unit by Pressure Swing Adsorption Process

Mohammad Javad Ghane, Iman Khonsha *

*Department of Chemical Engineering, Faculty of Engineering, Shi.C., Islamic Azad University , Shiraz, Iran*

ARTICLE INFO

Received 2025-06-08
Revised 2025-07-09
Accepted 2025-07-12
Available online 2025-09-22
ISSN: 2588-5316
Online ISSN: 2588-5324

**Keywords:**

Pressure Swing adsorption

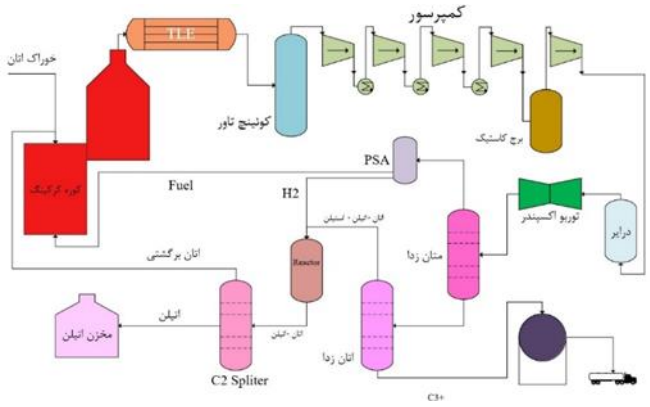
Hydrogen Purification

Modeling

Kavian Petrochemical

Rung-kutta gill

GRAPHICAL ABSTRACT




## ABSTRACT

**Research subject:** Modeling of the Pressure Swing Adsorption (PSA) process at Kavian Petrochemical, applied for hydrogen purification.

**Research approach:** In this study, process and structural optimizations of the PSA system were performed to improve hydrogen quality using process modeling based on the Runge–Kutta Gill method in MATLAB. This work represents the first attempt in Iran to apply such modeling and optimization for the PSA unit of the Kavian Petrochemical Olefin Plant.

**Main results:** In order to investigate the effect of pressure on this process, the pressure of the adsorption stage was varied from 20 to 40 bar. The results showed that increasing the pressure from 20 to 25 bar raised the hydrogen purity by 0.53%, after which it decreased by 0.29% with a further increase in pressure up to 40 bar. Pressure changes also affected hydrogen recovery and productivity: increasing the pressure from 20 to 40 bar resulted in a 51.27% decrease in hydrogen recovery and a 51.28% decrease in hydrogen productivity. Based on the simulation results, if high hydrogen purity is desired, the optimal pressure is 25 bar. However, if recovery and productivity are important, it is better to keep the pressure as low as possible, because a 0.53% increase in hydrogen purity with increasing pressure corresponds to a decrease in hydrogen production of approximately 5 tons per ton of adsorbent per year. To validate the model, the simulation results were compared with industrial data. The results of this comparison showed that the error between the simulation results and industrial data was very small, about one percent.

* Corresponding author: iman.khonsha@iau.ac.ir – ORCID: 0000-0002-1752-0104

Copyright@ 2025, The Authors. This open-access article is published under the terms of the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License which permits Share (copy and redistribute the material in any medium or format) and Adapt (remix, transform, and build upon the material) under the Attribution-NonCommercial terms.

نشریه پژوهش‌های کاربردی مهندسی شیمی–پلیمر

آدرس صفحه: www.arcpe.modares.ac.ir

مقاله تحقیقاتی

# مدلسازی واحد صنعتی خالص‌سازی هیدروژن پتروشیمی کاویان توسط فرایند جذب سطحی تناوب فشار

محمد جواد قانع ، ایمان خنشا *

گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد شیراز، شیراز، ایران

## چکیده

**موضوع تحقیق:** مدلسازی فرایند جذب سطحی تناوب فشار (Pressure Swing Adsorption, PSA) در پتروشیمی کاویان که برای خالص‌سازی هیدروژن استفاده می‌شود.

**روش تحقیق:** در این تحقیق فرایند PSA و بهینه‌سازی متغیرهای مؤثر بر کیفیت هیدروژن با استفاده از مدلسازی فرایند به روش رانگ کاتا گیل( Rung-kutta gill) با استفاده از نرم‌افزار متلب به‌صورت نوآورانه برای واحد الفین پتروشیمی کاویان برای اولین بار در ایران انجام شد و برای اولین بار بهینه‌سازی فرایندها برای افزایش بهره‌وری تولید شبیه‌سازی شد.

**نتایج اصلی:** به منظور بررسی اثر فشار برای این فرایند، فشار مرحله جذب از ۲۰ bar تا ۴۰ bar تغییر داده شد. نتایج نشان داد با افزایش فشار از ۲۰ bar تا ۲۵ bar خلوص هیدروژن به اندازه ۰/۵۳٪ افزایش و سپس با افزایش بیشتر فشار تا ۴۰ بار به میزان ۰/۲۹٪ کاهش یافته است. تغییرات فشار بر روی بازیابی و بهره‌وری هیدروژن نیز تأثیرگذار بود؛ به‌طوری که افزایش فشار از ۲۰ تا ۴۰ بار منجر به کاهش ۵۱/۲۷ درصدی بازیابی هیدروژن و کاهش ۵۱/۲۸ درصدی بهره‌وری هیدروژن شد. براساس نتایج شبیه‌سازی، در صورتی که خلوص بالای هیدروژن مدنظر باشد فشار بهینه، ۲۵ بار تعیین شد. اما در صورتی که بازیابی و بهره‌وری اهمیت داشته باشد بهتر است فشار تا حد امکان پایین باشد زیرا افزایش ۰/۵۳٪ درصدی خلوص هیدروژن با افزایش فشار به معنای کاهش تولید هیدروژن به میزان حدوداً ۵ تن به ازای هر تن جاذب در سال است. به منظور اعتبارسنجی مدل، نتایج حاصل از مدل‌سازی با داده‌های صنعتی مورد مقایسه قرار گرفت. نتایج حاصل از این مقایسه نشان می‌دهد میزان خطا بین نتایج حاصل از مدل‌سازی با داده‌های صنعتی بسیار جزیی و حدود یک درصد است.

**کلیدواژه‌ها**

جذب سطحی تناوب فشار

خالص‌سازی هیدرژن

مدلسازی

پتروشیمی کاویان

رانگ کاتا گیل

**اطلاعات مقاله**

دریافت: ۱۴۰۴/۰۳/۱۸

بازنگری: ۱۴۰۴/۰۴/۱۸

پذیرش: ۱۴۰۴/۰۴/۲۱

دسترس آنلاین: ۱۴۰۴/۰۶/۳۱

ISSN: 2588-5316

Online ISSN: 2588-5324

* نویسنده مسئول: iman.khonsha@iau.ac.ir – ORCID: 0000-0002-1752-0104

کپی‌رایت © ۲۰۲۵، نویسندگان. این مقاله به صورت دسترسی آزاد منتشر شده و تحت مجوز بین‌المللی Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 قرار دارد. بر اساس این مجوز، شما می‌توانید این مطلب را در هر قالب و رسانه‌ای کپی، بازنشر و بازآفرینی کنید و یا آن را ویرایش و بازسازی نمایید، به شرط آنکه نام نویسنده را ذکر کرده و از آن برای مقاصد غیرتجاری استفاده کنید.

## ۱ مقدمه

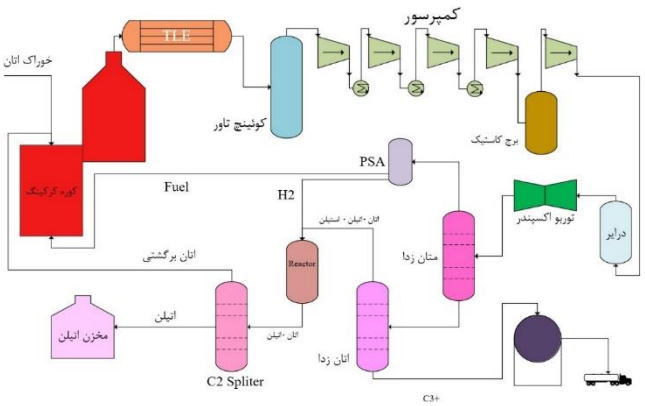
در سال‌های اخیر، کاربرد هیدروژن به عنوان جایگزین سوخت فسیلی به‌طور گسترده مورد تحقیق قرار گرفته است. علاقه روزافزونی به استفاده از هیدروژن به عنوان حامل انرژی در آینده نزدیک وجود دارد. فرایندهای هیدرو دی آلکالیشن(Hydro de alkalization)، هیدرو دی سولفوریشن(Hydro desulfurization) و هیدروکراکینگ (Hydro cracking) عمده‌ترین مصرف‌کنندگان هیدروژن در پالایشگاه‌های نفت هستند. هیدروژن همچنین به‌عنوان عامل هیدروژن‌دار کننده و در تولید متانول استفاده می‌شود. علاوه بر این، در فیزیک و مهندسی کاربردهای زیادی دارد؛ مثلاً در جوشکاری هیدروژنی، به عنوان گاز حفاظتی و در خنک کننده‌های روتور(Rotor coolers) در ژنراتورهای برقی کاربرد دارد. هیدروژن خالص یا مخلوطی از هیدروژن و نیتروژن به‌عنوان گاز ردیاب مورد استفاده قرار می‌گیرد. هیدروژن توسط روش‌های مختلفی تولید می‌شود. از جمله فرایند هابر (Haber process) که برای تولید آمونیاک استفاده می‌شود و الکترولیز نمک طعام برای تولید کلر. همچنین، فرایند تبدیل با بخار (Steam reforming) گازهای طبیعی، روشی رایج در صنایع برای تولید هیدروژن است. در فرایند تبدیل با بخار، محصول، ترکیبی از هیدروژن و گازهای دیگر است که هدف تولید گاز هیدروژن خالص است. بنابراین جدا کردن گاز هیدروژن از مخلوط گازی، یکی از مسائل مهم است که در سال‌های اخیر مورد مطالعه محققان قرار گرفته است[۱]. در سال‌های اخیر، بررسی‌های زیادی بر روی تصفیه هیدروژن با فناوری غشا انجام شده است. برای مثال، چنگ و همکاران از غشاهای آلومینا، زئولیت(ZSM-5)، پالادیوم و آلیاژ Pd–Ag برای جداسازی هیدروژن از مخلوط گازهای شهری که شامل $H_2$، $CH_4$، $CO_2$ و CO است، استفاده کردند. نتایج نشان داد که استفاده از غشا ZSM-5 همراه با غشاهای نازک پالادیوم و آلیاژ Pd–Ag، توانایی جذب هیدروژن را نسبت به غشا آلومینا تجاری افزایش می‌دهد[۲]. با توجه به نقش مهم غشاهای Pd (ساخته‌شده از پالادیوم همراه با مواد دیگر) در تصفیه هیدروژن، محققان به کشف روش‌های مختلف ساخت این نوع غشا علاقمند شدند. برای نمونه، یانگ و همکاران، غشاهای ترکیبی Pd/Vycor را با استفاده از آبکاری بدون جریان از هر دو روش معمول بر پایه هیدرازین (Hydrazine) و روش اصلاح‌شده با فرمالدهید ساختند [۳]. همچنین، یانگ و همکاران غشاهای متراکم Pd/SS-316L را با روش آبکاری بدون جریان و فرایند جدید مبتنی بر آبکاری بدون جریان و اسمز تولید کردند که میزان عبور هیدروژن در این غشا حدود پنج برابر بیشتر و پایداری حرارتی بهتری دارد[۴]. روش‌های تجاری متفاوتی برای جداسازی گازها وجود دارد، مانند استخراج، تقطیر و جذب. فرایندهای جذب، به‌ویژه جذب تناوب فشار (Pressure Swing Adsorption, PSA)، روشی مهم برای جداسازی گازها هستند. جذب تناوب فشار، فناوری مناسب، کم‌هزینه و کم‌مصرف است که در کارخانه‌های صنعتی برای جداسازی گازها به کار می‌رود، بنابراین تمایل فزاینده‌ای به استفاده از این فرایند برای خالص‌سازی گازهای مختلف مانند هیدروژن وجود دارد. با توجه به مزایای استفاده از روش PSA در جداسازی گازها، توسعه قابل توجهی در سامانه‌های جذب تناوب فشار صورت گرفته است[۵]. برای مثال، فناوری بستر لایه‌ای که از مواد جذب کننده مختلف تشکیل شده است، جایگزین نوآورانه و جذابی برای جداسازی چندجزئی گازها محسوب می‌شود[۶]. در این روش جدید، در ورودی ستون، یک جذب‌کننده ضعیف قرار می‌گیرد که مواد دیگر مانند آب را بیشتر جذب می‌کند و پس از آن، لایه اصلی قرار دارد. این ترتیب کمک می‌کند حجم جاذب کاهش یابد و بهره‌وری هر جذب‌کننده افزایش یابد. با توجه به مزایای این فناوری، محققان به بررسی تأثیر پارامترهای مختلف بر عملکرد این روش علاقه‌مند شده‌اند. برای مثال، چلندی و توندور نشان دادند که طول نسبی لایه‌ها تأثیر قابل‌توجهی بر میزان بهره‌وری و تولید واحد PSA دارد[۷]. ریگه و همکاران کارایی واحد PSA را برای جداسازی هوا مورد بررسی قرار دادند، مطالعه آن‌ها شامل تحلیل یک بستر واحد و یک بستر لایه‌ای با استفاده از دو نوع جاذب مختلف بود و هدف اصلی تعیین مقدار بهینه مواد جذب‌کننده بر اساس شرایط عملیاتی خاص گزارش شد. همچنین جداسازی $CO_2$ با استفاده از فرایند PSA در سال‌های اخیر به عنوان یکی از موضوعات پژوهشی جذاب مورد توجه قرار گرفته است[۸]. هیدروژن به‌عنوان یکی از مهم‌ترین حامل‌های انرژی نوظهور، کاربرد فراوانی دارد؛ بنابراین، تصفیه هیدروژن با استفاده از فرایند PSA در سال‌های اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفته است. برنامه‌های پژوهشی مختلفی برای بهبود عملکرد این فناوری انجام شده است؛ مانند مدل‌سازی سامانه‌های PSA با چندمرحله و یک‌کاره، و همچنین طراحی سامانه‌های فشرده لایه‌ای برای جداسازی CO و $CO_2$ در مخلوط‌های $H_2/CO/CO_2$ که در پیل‌های سوختی کاربرد دارد[۹]. برای نمونه، نیکولیچ و همکاران فرایندی شبیه‌سازی کردند که در آن هیدروژن خالص از گازهای حاصل از شکست با بخار متان تولید می‌شود، و نشان دادند که تغییر پارامترهای مختلف، از جمله دما، تأثیر قابل توجهی در فرایند جذب و جداسازی دارد [۱۰]. در تحقیق مشابه خالص‌سازی هیدروژن توسط فرایندPSA ، کربن فعال لایه‌ای/زئولیت از مخلوط جریان خوراک حاوی ناخالصی‌های $CO_2$، $CH_4$، CO و $N_2$ با شبیه‌سازی مورد مطالعه قرار گرفت. این مدل در شبیه‌سازی فرایند PSA با طرح چرخه هشت مرحله‌ای اعمال شد. شبیه‌سازی چند ستونی نشان داد که اتصال ستون‌ها، که ناخالصی‌های موجود در جریان‌های مورد استفاده برای فشار مجدد و پاکسازی را در نظر می‌گیرد، منجر به عملکرد فرایند ضعیف‌تری می‌شود. با این شبیه‌سازی، بازیابی هیدروژن، خلوص و بهره‌وری به ترتیب ٪۵۲/۱۱ ٪۹۹/۹۹۵۸ و ۵۹/۹ $molH_2/kg.day$ به‌دست آمد. همچنین نشان داد که افزودن لایه زئولیت، خلوص و بازیابی فرایند را، هرچند به میزان کم، تا مقدار محدود کننده بهبود می‌بخشد که پس از آن لایه کربن فعال برای حفظ دی‌اکسیدکربن بسیار کوچک می‌شود[۱۱]. تحقیق دیگری به طور سامانه‌ای فرایند PSA چند بستر(Polybed) $H_2$ را بررسی کرد و آخرین پیشرفت‌های فنی را برجسته کرده و ادغام بهینه آن را در خوشه‌های صنعتی مورد بحث قرار می‌دهد. فرایند PSA پلی‌بستر سفارشی که برای تولید هم‌زمان هیدروژن با خلوص بالا و دی اکسید کربن($CO_2$) طراحی شده است، نیز با توجه به دستورالعمل‌های بین‌المللی اخیر با هدف کاهش انتشار $CO_2$ و تولید هیدروژن آبی بررسی شد و برای تولید هیدروژن فوق خالص (۹۹/۹۹ درصد) با توان عملیاتی بالا(>240 MMSCFD) و بازیابی بالای ۹۰ درصد در نظر گرفته می‌شود[۱۲]. در پژوهش دیگر مطالعه جامع از عملکرد فرایند PSA چندجزئی، شش بستری و دو جاذب برای تصفیه هیدروژن از گازهای

سوخت پالایشگاهی انجام شده است. بسترهای PSA شامل لایه اولیه از ژل سیلیکا هستند که برای به دام انداختن هیدروکربن‌های سنگین‌تر و لایه دوم از جاذب کربن فعال برای به دام انداختن هیدروکربن‌های سبک‌تر استفاده می‌شود. مدل شبیه‌سازی از این فرایند بر اساس برخی آزمایش‌های انجام شده با استفاده از واحد PSA شش بستری در مقیاس آزمایشگاهی توسعه داده شده و تأیید شده است. مقایسه بین عملیات تک جاذب (یعنی فقط کربن فعال) و دو جاذب، مزیت سامانه دوم را نشان می‌دهد که در آن هیدروکربن‌های با وزن مولکولی بالاتر مانند بوتان در خوراک وجود دارند. بوتان به شدت روی کربن فعال جذب می‌شود و با کاهش فشار ساده به سختی واجذب می‌شود. با این حال، این مورد در جذب آن روی ژل سیلیکا صدق نمی‌کند. از این رو، لایه اولیه ژل سیلیکا به‌طور مؤثر از تخریب تدریجی لایه کربن فعال جلوگیری می‌کند. مطالعات پارامتری دیگر نشان می‌دهند که سامانه جاذب دوگانه در مقایسه با عملیات تک جاذب، به دلیل کاهش ظرفیت جذب کل در مقایسه با سامانه قبلی، منجر به نفوذ سریع‌تر هیدروکربن‌های سبک‌تر می‌شود. به‌طورخاص، کنترل شرایط عملیاتی به‌گونه‌ای که جبهه بوتان در لایه سیلیکاژل و جبهه متان در لایه کربن فعال پایدار بماند، از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است[۱۳]. در تحقیقی دیگر مدل ریاضی مرتبه اول برای تخمین بازده محصولات کک‌سازی تأخیری با استفاده از مدل ولک(Volk) به‌عنوان مبنا پیشنهاد شده است. ضرایب اصلاح شده مدل ولک برای سطح صنعتی به‌ترتیب برای پیش‌بینی بازده گاز، بنزین، گازوئیل و کک ۰/۶۳۴، ۰/۵۸۹، ۱ و ۱/۱۱۶ است. در مقایسه با سایر مدل‌ها، مدل پیشنهادی، روند بسیار نزدیک و مشابهی را با داده‌های صنعتی در پیش‌بینی بازده نشان داد و میانگین خطا برای تولید گاز ٪۰/۲۵ بود [۱۴]. در پژوهشی دیگر ابتدا مدلی از مخزن گاز تا حدی تخلیه شده با استفاده از شبیه‌ساز تجاری CMG ساخته شد. پس از اعتبارسنجی، از این مدل برای ارزیابی پارامترهای مورد نظر استفاده شد. برای این منظور، تقریباً ٪۵۰ از مخزن در ابتدا تخلیه شد و پس از آن به مدت یک سال گاز بالشتک (cushion gas) تزریق شد. متعاقباً، فرایند ذخیره‌سازی هیدروژن در یک دوره ۱۰ ساله انجام شد. این تحقیق تأثیر پارامترهای مختلف، از جمله مدت زمان و نرخ تزریق و تولید هیدروژن، زمان خیساندن و مدت زمان تزریق گاز بالشتک، استفاده از گاز ترش به‌عنوان گاز بالشتک و غلظت $H_2S$ در آن، بر خلوص و ضریب بازیابی هیدروژن تولیدی را بررسی می‌کند. نتایج نشان داد که افزایش نرخ تزریق و تولید هیدروژن، خلوص و ضریب بازیابی آن را افزایش می‌دهد. کاهش دوره تزریق در حالی که افزایش دوره استخراج، خلوص را کاهش می‌دهد اما بازیابی را بهبود می‌بخشد، مشروط بر اینکه دوره استخراج از دوره تزریق تجاوز نکند. افزایش زمان تزریق گاز بالشتک و فاصله بین تزریق و ذخیره‌سازی هیدروژن، خلوص و ضریب بازیابی هیدروژن را پشتیبانی می‌کند. علاوه بر این، در ترکیب گاز بالشتکی، افزایش نسبت $H_2S$به بالای ٪۷۰ در مخلوط گاز ترش، خلوص و بازیابی هیدروژن را به‌ترتیب تقریباً ٪۲ و ٪۳ کاهش می‌دهد که پتانسیل $H_2S$ را به‌عنوان یک گاز بالشتکی تأیید می‌کند. [۱۵] در این پژوهش، با استفاده از مدل‌سازی و شبیه‌سازی، افزایش بازده تولید گاز هیدروژن پتروشیمی کاویان مورد بررسی قرار گرفت و شکاف پژوهشی موجود در این حوزه پوشش داده شد. به‌عنوان نوآوری، برای نخستین بار در ایران، واحد PSA پتروشیمی کاویان شبیه‌سازی و بهینه‌سازی گردید. واحد PSA مورد بررسی در این تحقیق شامل چهار بستر است که هر یک از آن‌ها از سه لایه جاذب مختلف تشکیل شده است. برای اعتبارسنجی مدل ریاضی توسعه یافته به منظور پیش‌بینی عملکرد واحد، از داده‌های آزمایشگاهی بهره گرفته شد.

## ۲ بخش تجربی

### ۲-۱ مواد و فرایندها

مواد شیمیایی مورد نیاز به منظور سنتز نانو جاذب از شرکت‌های آلدریچ و مرک خریداری شده و بدون خالص‌سازی اضافی به کار گرفته شدند. آزمون طیف‌سنجی فروسرخ تبدیل فوریه (FT-IR) با استفاده از دستگاه Shimadzu FT-IR 8300 صورت گرفت. تصاویر میکرسکوپ الکترونی عبوری (TEM) با استفاده از دستگاه فیلیپس EM208 با افزایش ولتاژ ۱۰۰ کیلووات گرفته شد. دستگاه میکرسکوپ الکترونی روبشی (FE-SEM) به منظور بررسی و مطالعه مورفولوژی سطحی نانو ذرات مورد استفاده قرار گرفت. توزیع اندازه ذرات (DLS) با به کارگیری دستگاه HORIBA-LB550 انجام گرفت. هم‌دمای جذب-واجذب نیتروژن با به کارگیری روش Brunauer-Emmett-Teller (BET) به منظور بررسی تخلخل و سطح ویژه نانو ذرات سنتزی مورد استفاده قرار گرفت. پلاسمای جفت‌شده القایی (ICP) به منظور تعیین غلظت یون‌ها استفاده شد.




**شکل ۱** طرحواره واحد الفین پتروشیمی کاویان

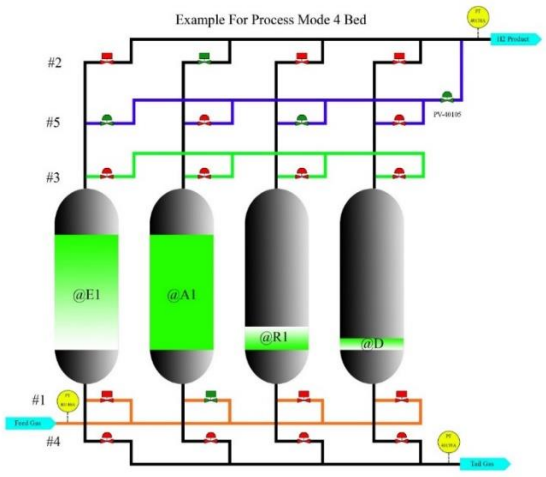
**Figure 1** Schematic of Kavian Petrochemical Olefin Unit

مطابق شکل فوق در این فرایند، مخلوطی از بخار و اتان وارد کوره‌ها می‌شود تا اتیلن تولید شود. کوره‌های شکست، هسته مرکزی فرایند تولید اتیلن هستند. مخلوط اتان و بخار در دو مرحله در کوره‌ها عبور می‌کند. کاهش سریع دمای جریان خروجی از کوره‌ها بسیار حیاتی است تا از ایجاد واکنش‌های جانبی ناخواسته جلوگیری شود. از جمله واکنش‌های جانبی، تشکیل پلیمرها از مونومرها در دماهای بالا است. بنابراین، محصولات پس از خروج از کوره‌ها باید سریعاً در مبادله‌کننده حرارتی (Transfer Line Exchanger, TLE) خنک شوند تا واکنش‌های ناخواسته کنترل شود. سپس محصولات با آب، در برج سردسازی، خنک شده و ناخالصی‌های آن‌ها مثل کک و نظایر آن شسته می‌شوند. محصولات حاصل از برج خنک‌کننده در کمپرسورهای سانتریفیوژ (Centrifugal compressors) طی ۵ مرحله فشرده می‌شوند و بعد از هر مرحله دوباره به دمای محیط برمی‌گردند. این فشار بالا در دمای محیط برای مایع‌کردن مخلوط گازی برای خوراک واحد تقطیر

مورد نیاز است. با توجه به وجود محصولات جانبی مانند مونواکسیدکربن، دی‌اکسیدکربن و مواد آلوده‌کننده گوگرد در پس‌ماندهای کوره‌های گازی، از فرایندهای جداسازی برای حذف این اجزا استفاده می‌شود. حضور دی‌اکسیدکربن می‌تواند موجب تشکیل هیدرات و رسوب آن‌ها شود و گوگرد نیز ممکن است کاتالیزورها را در راکتورها مسموم کند. غلظت دی‌اکسیدکربن باید کمتر از ۰/۱ قسمت در میلیون(ppm) باشد تا خلوص نهایی اتیلن که به واحد پلیمری‌شدن (Polymerization) تغذیه می‌شود، افزایش یابد. حذف گازهای اسیدی در برج قلیایی انجام می‌شود. این برج بعد از کمپرسورها قرار دارد؛ زیرا فرایند جذب با افزایش فشار، بهتر صورت می‌گیرد. بعد از برج حذف گازهای اسیدی و قبل از ورود به واحد تقطیر باید اطمینان حاصل کرد که گاز کاملاً خشک است. بنابراین از بستر جاذب رطوبت استفاده می‌شود و رطوبت گاز در خروجی بررسی می‌شود. بعد از خشک شدن گاز، درشیر ژول تامسون (Joule–Thomson) یا دستگاه توربو اکسپندر (Turboexpander)، فشار به یکباره کاهش می‌یابد که این عمل باعث افت شدید دما و میعان مخلوط گازی و آماده‌شدن خوراک برای ورود به بخش تقطیر می‌شود. خروجی توربو اکسپندر پس از ورود به کولد باکس (Cold box)، به‌صورت بهینه با سایر جریان‌های ورودی تبادل دما می‌کند این جریان پس از انجام پیش گرمایش اولیه، وارد بخش تقطیر و برج دی‌متانایزر (Demethanizer) می‌شود تا در آنجا متان و گازهای سبک از بخش بالای برج جداسازی شوند. خروجی بالا که غنی از گازهای سبک است بخشی به واحد PSA و مابقی به‌عنوان سوخت به کوره‌ها ارسال می‌شود. جزئیات واحد PSA در بخش مربوطه بررسی خواهند شد. پس از برج متان‌زدا، سیال زیر برج وارد برج اتان‌زدا می‌شود که $C_2$ (اتان، اتیلن، استیلن) از بالا و $C_3^+$ از پایین به‌عنوان محصول جانبی به سمت تانک ذخیره مربوطه خارج می‌شود. پیش از ورود جریان فرایندی به برج تقطیر نهایی، لازم است استیلن به‌طور کامل حذف شود؛ بدین منظور، مخلوط گازی ابتدا وارد راکتور هیدروژناسیون (Hydrogenation reactor) می‌شود تا با تزریق هیدروژن تولیدی واحد PSA، از حذف کامل استیلن اطمینان حاصل شود و این امر در خروجی راکتور با حسگرهای بسیار دقیق و منظم چک و بررسی می‌شود. در برج آخر دو ماده اتان و اتیلن وجود دارد که اتان از بالا به‌عنوان خوراک به کوره‌ها بر می‌گردد و اتیلن محصول از وسط برج گرفته و به کمپرسور برای مایع‌سازی و ارسال هدایت می‌شود.

### ۲-۱-۱ واحد PSA

این واحد برای تصفیه هیدروژن در واحد اولفین پتروشیمی کاویان استفاده می‌شود. در فرایند جذب سطحی تناوب فشار گازهای خاص در فشار بالا جذب و در فشار پایین آزاد می‌شوند. آلودگی‌های اصلی جریان ورودی به این واحد شامل متان و گازهای سبک دیگر است. در واحد PSA معمولاً ۴ درام (بستر) فعال یا بیشتر وجود دارد. PSA پتروشیمی کاویان دارای ۴ بستر است. هر بستر در فرایند چرخه‌ای یکسان از جذب و بازیابی قرار می‌گیرد. این چرخه‌ها به نحوی برنامه‌ریزی شده‌اند که همزمان در حال انجام باشد، در حالی که یکی در مرحله جذب است، سایر بسترها در مراحل مختلف بازیابی قرار دارند. به‌منظور افزایش قابلیت اطمینان سامانه، امکان تغییر از حالت چهار بستر به حالت سه بستر وجود دارد، یا به‌صورت دستی (برای تعمیر و نگه‌داری، بررسی‌های دوره‌ای و سرویس مجموعه شیرها) یا به‌صورت خودکار (بر اساس منطق کنترل). در مدار خودکار تغییر به حالت سه بستر، زمانی انجام می‌شود که سامانه کنترل، اختلال عمده در عملکرد یکی از بسترها مشاهده کند یا مشکلی در تجهیزات اندازه‌گیری یا کارت I/Oرا شناسایی کند. فرایند بازسازی (بازیابی) در سه مرحله انجام می‌شود: کاهش فشار برای پاک‌سازی، پاک‌سازی در فشار پایین و افزایش فشار مجدد به فشار جذب. چرخه کامل جذب و بازیابی که شامل تمام مراحل است، دوره کامل محسوب می‌شود. هر مخزن با سه لایه متفاوت از جاذب‌های تجاری پر شده. این جاذب‌ها در ترکیباتشان متفاوت هستند؛ برای مثال، زئولیت بخش اصلی یکی از بسترها است، در حالی که اکسیدآلومینا جزء اصلی بستری دیگر است. ترتیب مشخصی برای قرارگیری این سه لایه جاذب وجود دارد؛ لایه اول، جاذب الک مولکولی (Molecular Sieve) برای مولکول‌های کوچک است که در ورودی خوراک قرار دارد، لایه دوم، لایه‌ای از کربن فعال است. پس از آن لایه سوم، لایه الک مولکولی برای مولکول‌های بزرگ قرار دارد. جاذب‌های تجاری قادر به جداسازی اجزای خاصی هستند؛ در واقع، یک نوع جاذب نمی‌تواند تمامی اجزای شیمیایی را جذب کند. بر اساس خاصیت انتخاب‌گری جاذب‌های تجاری، واحدهای PSA که برای جدا کردن فقط یک جزء از مخلوط استفاده می‌شوند، باید از یک نوع جاذب خاص بهره‌برداری شود. اما در مواردی که چندین جزء از مخلوط گاز جدا شوند، معمولاً از دو یا چند نوع جاذب برای فرایند جذب استفاده می‌شود. شکل ۲ ساختار کلی این واحد را نشان می‌دهد. نحوه اتصال بسترها به یکدیگر و تبادل گاز بین ستون‌ها در هر مرحله در این شکل مشخص است. شیرهای کنترل به‌صورت خودکار باز و بسته می‌شوند تا عملکرد واحد PSA را از یک مرحله به مرحله دیگر بر اساس قانونی که در جدول ۱ نشان داده شده است، تغییر دهند.




**شکل ۲** ساختار کلی واحد PSA

**Figure 2** General structure of PSA unit

**جدول ۱** مراحل بسترها در حالت ۴ بستره

**Table 1** Bed stages in 4-bed mode

| Bed | Stage | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **A** | E1 | PP1 | D | P1 | R1 | R0 | A1 | A2 |
| **B** | A1 | A2 | E1 | PP1 | D | P1 | R1 | R0 |
| **C** | R1 | R0 | A1 | A2 | E1 | PP1 | D | P1 |
| **D** | D | P1 | R1 | R0 | A1 | A2 | E1 | PP1 |

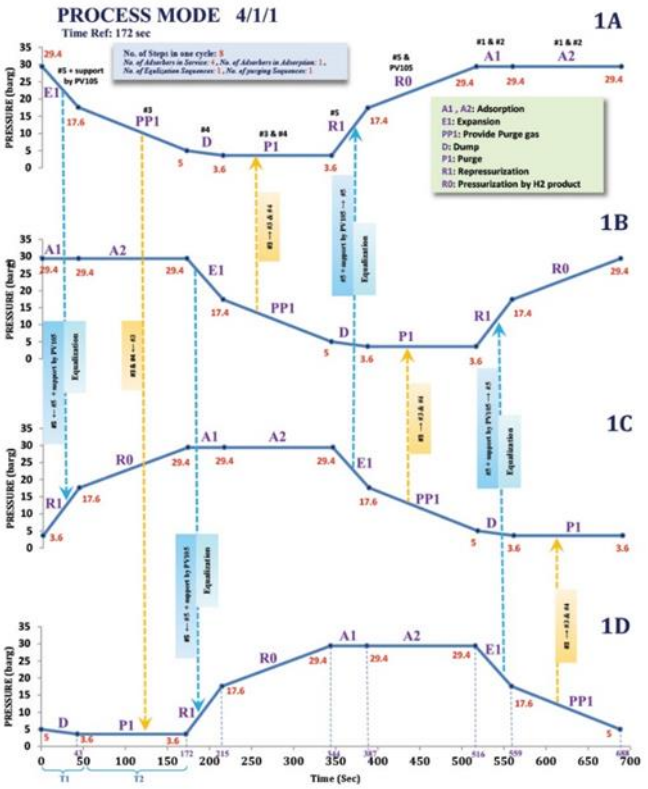
در جدول فوق کلمات اختصاری مراحل مختلف حالت ۴ بستره بدین شرح است: A1 و A2 بیانگر جذب،E1 بیانگر دفع،PP1 بیانگر پرج اولیه، D بیانگر تخلیه،P1 بیانگر تخلیه، R1 فشارگیری اولیه و R0 بیانگر فشارگیری تا فشار عملیات با محصول هیدروژن است.

برای نشان دادن عملکرد واحد PSA، تغییرات فشار در چهار ستون طی هر زیرچرخه در شکل ۳ نمایش داده شده است. در زیرچرخه نخست، بستر «B»در فشار ۲۹/۴ بار به عنوان بستر جذب عمل می‌کند. در ادامه و طی زیر چرخه دوم، وظیفه جذب به بستر«C» منتقل می‌شود. بنابراین، در اولین زیرچرخه لازم است فشار بستر افزایش یابد تا برای ورود به مرحله جذب در زیرچرخه دوم آماده شود. در این مرحله، بستر «A» که به تازگی از حالت جذب خارج شده است، با تخلیه فشار خود به درام C، از ۲۹/۴ به ۱۷/۶ بار کاهش فشار می‌یابد و در نتیجه فشار بستر C را از ۳/۶ تا ۱۷/۶ بار افزایش می‌یابد. در این مرحله بستر D در حال تخلیه فشار به مسیر Tail است. در مرحله دوم بستر B همچنان در جذب قرار دارد و بستر C که برای مرحله جذب آماده می‌شود با هیدروژن محصول تا فشار ۲۹/۴ بار فشارگیری می‌شود، از مابقی فشار بستر A که در حال سپری کردن مراحل دفع است برای جاروکردن و پاکسازی کامل بستر D از هرگونه ناخالصی احتمالی استفاده می‌شود و در حالی که بستر D در فشار ثابت ۳/۶ بار به سمت Tail است، فشار بستر A از ۱۷/۶ تا ۵ بار کاهش می‌یابد. در نتیجه بستر C آماده ورود به مرحله جذب و بستر B آماده ورود به مرحله کاهش فشار و دفع است و بستر D در حال آماده‌سازی برای فشارگیری و ورود به مرحله جذب و بستر A در وضعیت تخلیه فشار و جاروی سیال احتمالی ناخالص به سمت Tail است و این چرخه برای هر بستر تکرار می‌شود.

## ۲-۲ فرضیات و مدل‌سازی

به منظور مدل‌سازی فرایند PSA ابتدا المانی را در ناحیه‌ای دو فازی (گاز-جامد) در نظر گرفته می‌شود. موازنه‌های جرم، انرژی و مومنتوم باید در این المان نوشته و حل شوند. با این حال، برای ساده‌سازی روابط لازم است ابتدا برخی فرضیاتی درنظر گرفته شود. این فرضیات عبارتند از:

- ✓ فاز گاز ایده‌آل در نظر گرفته شده است.
- ✓ در طول مراحل جذب و زدایش، فشار کل و دما بر حسب زمان ثابت است.
- ✓ در طی مراحل فشار زنی، معادل‌سازی فشار و تخلیه فشار کل به‌صورت غیرخطی و با زمان تغییر می‌کند.
- ✓ برای جریان، مدل قالبی پراکنده محوری ( Axially Dispersed Plug Flow Model) درنظر گرفته شده است.
- ✓ از هم‌دمای لانگمویر- فرندلیچ چندجزئی برای بیان روابط تعادلی اجزای گاز استفاده شده است.
- ✓ روابط نیروی محرکه خطی (Linear Driving Force, LDF) برای بیان سرعت انتقال جرم به‌کار رفته است.




**شکل ۳** تغییرات فشار در چهار ستون طی هر زیرچرخه

**Figure 3** Pressure changes in the four columns during each sub cycle

با توجه به اینکه تمامی فرایندهای انتقال جرم، حرارت و مومنتوم در فرایند خالص‌سازی هیدروژن انجام می‌گیرد، لذا معادلات پدیده‌های انتقال در مدل‌سازی مورد بررسی قرار می‌گیرد. همچنین برای حل عددی معادلات پدیده‌های سه‌گانه انتقال از معادله رانگ کاتا گیل استفاده شده است که این روش حل عددی در مقالات مشابه استفاده شده است[۱] و نتایج مطلوبی از آن حاصل می‌شود.

بر اساس فرضیات ذکرشده معادلات سامانه در ادامه بیان شده‌اند.

موازنه جرم به‌صورت معادله (۱) بیان می‌شود

(۱) نرخ انباشت = نرخ اتلاف جرم –نرخ جرم خروجی- نرخ جرم ورودی

این معادله به زبان ریاضی به شکل معادله (۲) است.

(۲)

$$-D_L\frac{\partial^2 y_i}{\partial z^2}+y_i\frac{\partial u}{\partial z}+u\left(\frac{\partial y_i}{\partial z}+y_i\left(\frac{1}{P}\frac{\partial P}{\partial z}-\frac{1}{T}\frac{\partial T}{\partial z}\right)\right)+\frac{\partial y_i}{\partial t}+y_i\left(\frac{1}{P}\frac{\partial P}{\partial t}-\frac{1}{T}\frac{\partial T}{\partial t}\right)+\left(\frac{\rho_P RT}{P}\right)\left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon}\right)\frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t}=0$$

در معادله (۲) y غلظت جزء i، u سرعت، z ضخامت المان، t زمان،T دما، P فشار کل، $\rho$ چگالی، $\varepsilon$ تخلخل و R ثابت گازهاست[۱۶].

موازنه انرژی عبارتست از:

(۳)

$$-K_L\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}+\varepsilon\rho_g C_{p.g}\left(u\frac{\partial T}{\partial z}+T\frac{\partial u}{\partial z}\right)+\left(\varepsilon_t\rho_g C_{P.s}\right)\frac{\partial T}{\partial t}-\rho_B\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t}(-\Delta\bar{H}_i)\right)+\frac{2h_i}{R_{B.i}}(T-T_w)=0$$

در معادله (۳) $\rho_g$ : چگالی گاز، $C_{p,g}$: ظرفیت گرمایی گاز، $T$ : دمای سامانه، $K_L$: ضریب پراکندگی حرارتی محوری، $h_i$: ضریب جابجایی انتقال حرارت

درون بستر، $R_{Bi}$: شعاع درونی بستر، $T_w$: دمای دیواره بستر، $\rho_B$: چگالی توده و $\Delta\overline{H}_i$: تغییر آنتالپی جذب سطحی برای جزء $i$، $\varepsilon_i$: ضریب تخلخل کل (مجموع ضریب تخلخل بستر و دانه‌های جاذب) و $C_{p,s}$: ظرفیت گرمایی جاذب است[۱۷].

معادله انتقال حرارت بستر به شکل زیر است.

$$\frac{\partial T_w}{\partial t} = \left[\frac{2\pi R_{B,i} h_i}{\rho_w C_{P,w} A_w}\right](T - T_w) - \left[\frac{2\pi R_{B,o} h_o}{\rho_w C_{P,w} A_w}\right](T_w - T_{atm}) \quad (۴)$$

در معادله (۴) $C_p$ ظرفیت گرمایی ویژه، R قطر، Z ضخامت المان، A مساحت سطح المان، T دما، $\rho$ چگالی، t زمان و h ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی است[۱۸].

موازنه مومنتم برابر است با:

(۵)

$$\frac{\partial P}{\partial t} - D_L\frac{\partial^2 P}{\partial z^2} + P\frac{\partial u}{\partial z} + u\frac{\partial P}{\partial z} + PT\left(-D_L\frac{\partial^2}{\partial z^2}\left(\frac{1}{T}\right) + \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{T}\right) + u\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{T}\right)\right) - 2D_L T\frac{\partial P}{\partial z}\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{T}\right) + \rho_P RT\left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon}\right)\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t} = 0$$

در معادله (۵) $D_L$ ضریب انتقال جرم، u سرعت، z ضخامت المان، t زمان، T دما، P فشار کل، $\rho$ چگالی، $\varepsilon$ تخلخل و R ثابت گازهاست[۱۹].

پس از به‌دست‌آوردن معادلات حاکم بر سامانه می‌بایست روشی برای حل آن‌ها انتخاب کرد که در این تحقیق روش رانگ کاتا گیل مرتبه چهارم استفاده شده است که در ادامه توضیح داده خواهد شد[۲۰]. در روش رانگ کاتا گیل داریم اگر $\frac{dy}{dx} = f(x,y)$ برای به‌دست‌آوردن $y_{n+1}$ در نقطه $x_{n+1} = x_n + h$ در معادله (۶) داریم:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}\left(k_1 + (\sqrt{2}-1)k_2 + (2-\sqrt{2})k_3 + k_4\right) \quad (۶)$$

که ثوابت آن به‌صورت روابط ۷ الی ۱۰ به‌دست می‌آید:

$$k_1 = hf(x_n, y_n) \quad (۷)$$

$$k_2 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right) \quad (۸)$$

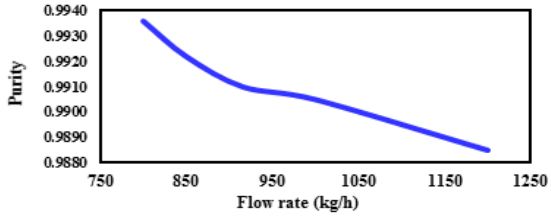
$$k_3 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{\sqrt{2}-1}{2}k_2\right) \quad (۹)$$

$$k_4 = hf\left(x_n + h, y_n - \frac{\sqrt{2}}{2}k_2 + \frac{\sqrt{2}+1}{2}k_3\right) \quad (۱۰)$$

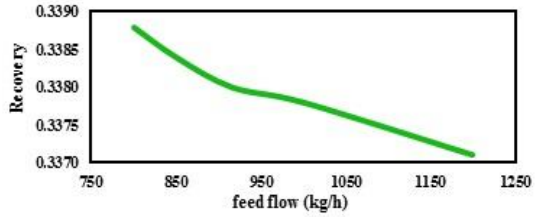
## ۳ بحث و نتایج

### ۳-۱ اثر شدت جریان بر خلوص، بازیابی و بهره‌وری هیدروژن

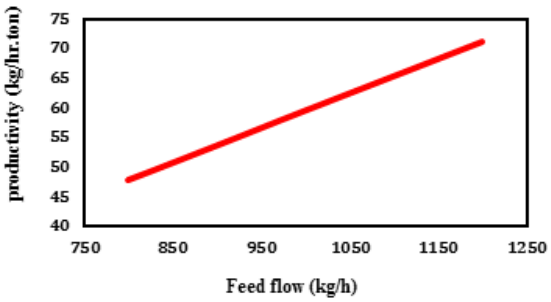
در شکل ۴ اثر شدت جریان خوراک بر خلوص هیدروژن تولیدی قابل مشاهده است. که با افزایش دبی خوراک از ۸۰۰ kg/h به ۱۲۰۰ منجر به کاهش خلوص هیدروژن از ۹۹/۴ درصد به ۹۸/۸ درصد شده است. افزایش دبی خوراک در فشار ثابت ۲۹/۴ بار در حین فرایند جذب صورت می‌گیرد. با افزایش دبی خوراک ورودی، میزان دبی جریان خروجی هیدروژن خالص‌سازی‌شده نیز افزایش می‌یابد، اما به‌دلیل افزایش دبی و در نتیجه اشباع سریع‌تر جاذب‌های بستر، خلوص هیدروژن تولیدی کاهش می‌یابد که این کاهش خلوص هیدروژن بر روی بازیابی و بهره‌وری نیز تأثیر منفی می‌گذارد. شکل‌های ۵ و ۶ به‌ترتیب اثر دبی خوراک ورودی بر روی بازیابی و بهره‌وری را نشان می‌دهند. بازیابی هیدروژن عبارتست از میزان هیدروژن استحصال‌شده در محصول خروجی فرایند به‌ازای جاذب مصرفی. همان‌طور که در شکل ۵ مشخص است افزایش دبی خوراک در فشار ثابت تأثیر آنچنانی بر روی کاهش بازیابی هیدروژن نداشته است و نهایتاً باعث ٪ ۰/۶ کاهش در خلوص هیدروژن شده است؛ بنابراین انتظار می‌رود میزان بازیابی هیدروژن با افت چشمگیری روبرو نشود و می‌توان از این افت جزئی چشم‌پوشی کرد. این در شرایطی است که طبق نتایج موجود در شکل ۶ بهره‌وری هیدروژن از kg/hr. ۴۸ ton به ۷۲ kg/hr.ton افزایش یافته است. در حقیقت، در ازای کاهش ٪ ۰/۶ خلوص هیدروژن می‌توان میزان بهره‌وری را به اندازه ٪ ۵۱/۳۳ افزایش داد و بازیابی تقریباً هیچ افتی نکند. افزایش بهره‌وری هیدروژن به این دلیل است که افزایش میزان محصول‌گیری (افزایش دبی محصول) در شرایطی اتفاق افتاده است که خلوص و بازیابی افت آنچنانی نداشته‌اند.




**شکل ۴** اثر دبی خوراک ورودی بر روی خلوص هیدروژن
**Figure 4** Effect of inlet feed flow rate on hydrogen purity




**شکل ۵** اثر دبی خوراک ورودی بر روی بازیابی هیدروژن
**Figure 5** Effect of feed inlet flow rate on hydrogen recovery

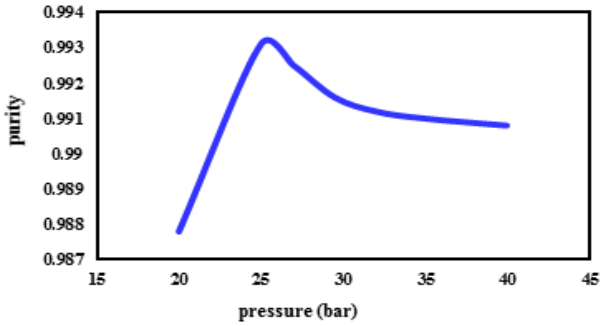



**شکل ۶** اثر دبی خوراک ورودی بر روی بهره‌وری هیدروژن
**Figure 6** Effect of feed inlet flow rate on hydrogen productivity

### ۳-۲ اثر فشار مرحله جذب بر خلوص، بازیابی و بهره‌وری هیدروژن

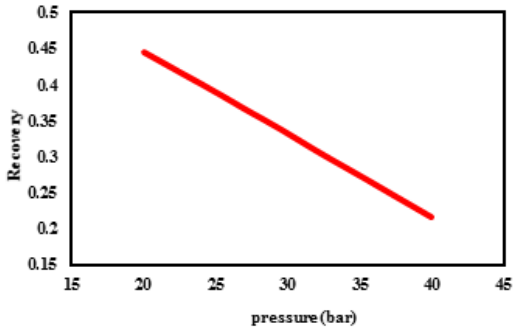
بر اساس نتایج به‌دست‌آمده از شکل ۷ با افزایش فشار از ۲۰ bar تا ۲۵ bar خلوص هیدروژن به اندازه ٪ ۰/۵۳ افزایش یافت و افزایش فشار از ۲۵ bar تا ۴۰ bar منجر به ٪ ۰/۲۹ کاهش خلوص هیدروژن شد. لذا با افزایش فشار

مرحله جذب، خلوص هیدروژن ابتدا افزایش و پس از آن اندکی کاهش یافته است. در واقع در ابتدا افزایش فشار منجر به افزایش نفوذ گازهای ناخالص و در نتیجه افزایش میزان جذب ناخالصی می‌شود. اما ادامه افزایش فشار منجر به کاهش جریان خروجی می‌شود و این به معنی حضور بیشتر ناخالصی بر روی بستر در یک زمان معین است. اما از آنجا که میزان جاذب و ظرفیت جذب درون ستون ثابت است، افزایش فشار به‌تدریج باعث می‌شود تا جاذب زودتر اشباع شود و در نتیجه خلوص هیدروژن کاهش می‌یابد. به‌عبارت دیگر، افزایش فشار ستون جذب تا جایی سودمند است که میزان ناخالصی‌های موجود در ستون از حد ظرفیت جاذب‌ها فراتر نروند. به‌طورکلی می‌توان نتیجه گرفت با افزایش فشار مرحله جذب می‌توان به نسبت ظرفیت بستر، میزان جذب ناخالصی را افزایش یابد.



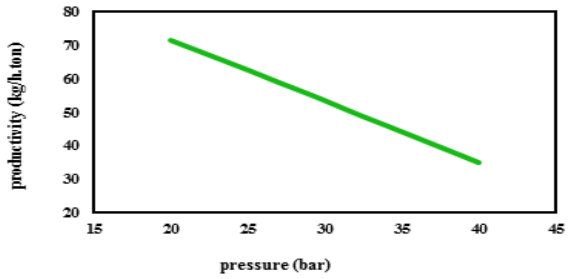

**شکل ۷** اثر فشار مرحله جذب بر خلوص هیدروژن خروجی
**Figure 7** Effect of absorption stage pressure on output hydrogen purity

شکل ۸ و ۹ به‌ترتیب اثر فشار مرحله جذب بر روی بازیابی و بهره‌وری هیدروژن را نشان می‌دهد. افزایش فشار منجر به کاهش میزان بازیابی و بهره‌وری می‌شود. از آن‌جا که بهره‌وری و بازیابی هیدروژن تابع مستقیم میزان دبی محصول خروجی است، افزایش فشار از ۲۰ تا ۴۰ بار منجر به کاهش ۵۱/۲۷ درصدی بازیابی هیدروژن و کاهش ۵۱/۲۸ درصدی بهره‌وری هیدروژن می‌شود. لذا افزایش فشار گزینه مناسبی برای افزایش بازیابی و بهره‌وری هیدروژن نیست.

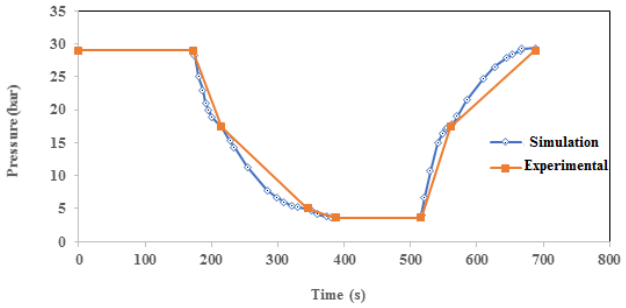



**شکل ۸** اثر فشار مرحله جذب بر بازیابی هیدروژن خروجی
**Figure 8** Effect of absorption stage pressure on outlet hydrogen recovery

شکل ۱۰ مقایسه نمودارهای حاصل از داده‌های واقعی گرفته‌شده از مجتمع پتروشیمی کاویان و داده‌های حاصل از مدل‌سازی با نرم افزار متلب است. نقاط آبی مربوط به تغییرات فشار شبیه‌سازی و نقاط نارنجی مربوط به تغییرات فشار تجربی است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، داده‌ها هم‌پوشانی خوبی دارند و اختلاف موجود قابل قبول است.




**شکل ۹** اثر فشار مرحله جذب بر روی بهره‌وری هیدروژن خروجی
**Figure 9** Effect of absorption stage pressure on output hydrogen productivity




**شکل ۱۰** مقایسه نمودار واقعی و مدل‌سازی
**Figure 10** Comparison of real and modeling graphs

به‌منظور اعتبارسنجی مدل، نتایج حاصل از مدل‌سازی با داده‌های صنعتی مورد مقایسه قرار گرفت. جدول ۲ نتایج حاصل از این مقایسه را نشان می‌دهد. مطابق جدول میزان خطا بین نتایج حاصل از مدل‌سازی با داده‌های صنعتی بسیار جزیی و حدود یک درصد است.

**جدول ۲** نتایج حاصل از مقایسه داده‌های واقعی و مدل‌سازی و محاسبه درصد خطا
**Table 2** Results from comparing real and modeling data and calculating the error percentage

| Hydrogen parameters | Real | Model | Error |
|---|---|---|---|
| $H_2$ Purity | 99.99 | 99.10 | 0.89 |
| $H_2$ Recovery | 0.347 | 0.338 | 0.57 |
| $H_2$ productivity (kg/ h) | 55.118 | 54.485 | 1.14 |

## ۴ نتیجه‌گیری

در این پژوهش، فرایند PSA و بهینه‌سازی متغیرهای مؤثر بر کیفیت هیدروژن با استفاده از مدل‌سازی فرایند به روش رانگ کاتا گیل (Rung-kutta gill) با استفاده از نرم‌افزار متلب به‌صورت نوآورانه برای واحد الفین پتروشیمی کاویان برای اولین بار در ایران انجام و برای اولین بار بهینه‌سازی فرایندها برای افزایش بهره‌وری تولید شبیه‌سازی شد. تغییرات دبی ورودی خوراک از ۸۰۰ kg/h به ۱۲۰۰ kg/h منجر به کاهش خلوص هیدروژن از ۹۹/۴ درصد به ۹۸/۸ درصد شد. نتایج نشان دادند که کاهش ۰/۶ درصدی خلوص هیدروژن محصول با افزایش دبی خوراک، تأثیر چندانی بر روی بازیابی هیدروژن نداشت و بازیابی تنها ۰/۵ درصد کاهش یافت. اما از سوی

مقابل، بهره‌وری به میزان قابل‌توجهی افزایش یافت به‌طوری که با افزایش دبی خوراک از ۸۰۰ kg/h به ۱۲۰۰ kg/h میزان بهره‌وری هیدروژن تولیدی از ۴۸ kg/hr.ton به ۷۲ kg/hr.ton تغییر کرد و این به معنای افزایش ۵۱/۳۳ درصدی آن است. لذا می‌توان گفت چنانچه خلوص بالای هیدروژن محصول بسیار حائز اهمیت باشد، دبی ورودی باید تا حد امکان پایین نگه داشته شود، اما در صورتی که این کاهش ۰/۶ درصدی خلوص هیدروژن جهت استفاده از آن مانعی ایجاد نکند، بهتر است تا با افزایش دبی خوراک میزان بهره‌وری را افزایش داد. زیرا با افزایش مقیاس زمانی، تأثیر افزایش ۵۰ درصدی بهره‌وری بسیار چشم‌گیر می‌شود؛ به‌طوری که تغییرات دبی ورودی خوراک از ۸۰۰ kg/h به ۱۲۰۰ kg/h منجر به افزایش حدوداً ۲۱۰ تن تولید هیدروژن به ازای هر تن جاذب در سال می‌شود. همچنین، افزایش فشار از ۲۰ bar تا ۲۵ bar موجب افزایش خلوص هیدروژن به میزان ٪۰/۵۳ شد، در حالی که افزایش فشار از ۲۵ bar تا ۴۰ bar، خلوص هیدروژن را حدود ٪۰/۲۹ کاهش داد. بنابراین، افزایش فشار ستون جذب تا حدی مفید است که میزان ناخالصی‌های موجود در ستون از ظرفیت جاذب‌ها فراتر نروند. به‌طور کلی، می‌توان نتیجه گرفت با افزایش فشار مرحله جذب می‌توان به نسبت ظرفیت بستر، میزان جذب ناخالصی را افزایش یابد. از طرفی دیگر افزایش فشار از ۲۰ تا ۴۰ بار منجر به کاهش ۵۱/۲۷ درصدی بازیابی هیدروژن و کاهش ۵۱/۲۸ درصدی بهره‌وری هیدروژن می‌شود. لذا افزایش فشار گزینه مناسبی برای افزایش بازیابی و بهره‌وری هیدروژن نیست.

## مراجع


1. Rahimpour M.R., Ghaemi M., Jokar S.M., Dehghani O., Jafari M., Amiri S., Raeissi S., The enhancement of hydrogen recovery in PSA unit of domestic petrochemical plant, *Chemical Engineering Journal*, 226: p. 444-459. 2013.
2. Duca, D., Frusteri, F., Parmaliana, A., Deganello, G., Selective hydrogenation of acetylene in ethylene feedstocks on Pd catalysts. *Applied Catalysis A: General*, 146(2): p. 269-284. 1996.
3. Mathias, P.M., et al., Correlation of multicomponent gas adsorption by the dual-site Langmuir model. Application to nitrogen/oxygen adsorption on 5A-zeolite. *Industrial & engineering chemistry research*, 35(7): p. 2477-2483. 1996.
4. Sawalha, M.F., et al., Thermodynamic and isotherm studies of the biosorption of Cu (II), Pb (II), and Zn (II) by leaves of saltbush (Atriplex canescens). *The Journal of Chemical Thermodynamics*, 39(3): p. 488-492. 2007.
5. Dundar, M., C. Nuhoglu, and Y. Nuhoglu, Biosorption of Cu (II) ions onto the litter of natural trembling poplar forest. *Journal of Hazardous Materials*. 151(1)p. 86-95 .2008.
6. Mack, C., et al., Biosorption of precious metals. *Biotechnology advances*, 25(3): p. 264-271. 2007.
7. Delle Site, A., Factors affecting sorption of organic compounds in natural sorbent/water systems and sorption coefficients for selected pollutants. A review. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 30(1): p. 187-439. 2001.
8. Ngah, W.W., et al., Adsorption of chromium from aqueous solution using chitosan beads. *Adsorption*, 12(4): p. 249-257. 2006.
9. Deng, L., et al., Biosorption of copper (II) from aqueous solutions by green alga Cladophora fascicularis. *Biodegradation*, 18(4): p. 393-402. 2007.
10. Hamri, N., Imessaoudene, A., Hadadi, A., Cheikh, S., Boukerroui, A., Bollinger, J.-C., Amrane, A., Tahraoui, H., Tran, H.N., Ezzat, A.O. Enhanced Adsorption Capacity of Methylene Blue Dye onto Kaolin through Acid Treatment: *Batch Adsorption and Machine Learning Studies*. 16, 243. 2024.
11. Ana M. Ribeiro, Carlos A. Grande, Filipe V.S. Lopes, José M. Loureiro, Alírio E. Rodrigues, A parametric study of layered bed PSA for hydrogen purification, *Chemical Engineering Science*, 63, p. 5258 - 5273, 2008.
12. Luberti M., Ahn H., Review of Polybed pressure swing adsorption for hydrogen purification, *International Journal of Hydrogen Energy*, 47, p. 10911 -10933, 2022.
13. Malek A. and Farooq S., Hydrogen Purification from Refinery Fuel Gas by Pressure Swing Adsorption, *AIChE Journal* 44(9), p. 1985-1992, 1998.
14. Ahmadlouydarab M, Hosseini S.S, Muhammad Ali H, Asadzadeh N, A Precise Mathematical Correlation to Estimate Product Yield of Delayed Coking Units, *Journal of Chemical and Petroleum Engineering*, 57(1): p.13- 25, 2023.
15. Ramsari M, Jafari A, Namdar H, Khoozan D, Roomi A. Effect of Operating Parameters on the Injection of Carbon Dioxide and Sour Gas as Cushion Gas in the Process of Underground Hydrogen Gas Storage, *Journal of Applied Research of Chemical-Polymer Engineering*, 8 (1) p. 1-11, 2024.
16. LaCava, A. and N. Lemcoff, Single bed pressure swing adsorption process to generate high purity nitrogen. *Gas separation & purification*, 10(2) p. 113-115. 1996.
17. Lopes, F.V., et al., Effect of ion exchange on the adsorption of steam methane reforming off-gases on zeolite 13X. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 55(1): p. 184-195. 2010.
18. Mendes, A.M., Costa C.A., and Rodrigues A.E., Analysis of nonisobaric steps in nonlinear bicomponent pressure swing adsorption systems. Application to air separation. *Industrial & engineering chemistry research*, 39(1): p. 138-145. 2000.
19. Mendes, A.M., C.A. Costa, and A.R.E. Rodrigues, Oxygen separation from air by PSA: modelling and experimental results: Part I: isothermal operation. *separation and purification technology*, 24(1-2): p. 173-188. 2001.
20. Lopes, F.V., C.A. Grande, and A.E. Rodrigues, Fast-cycling VPSA for hydrogen purification. *Fuel*, 93: p. 510-523. 2012.