

آنالیز انرژی فرآیند تولید همزمان دی متیل اتر سبز، برق پاک، بخار داغ و آب تازه با استفاده از انرژی زمین گرمایی و آب دریا

آرمین فضل‌نژاد^{۱*}، بیتا کریمی^۲، آرمین حسن پور^۳

۱ گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، ایران

۲ دانشکده مهندسی شیمی و نفت، دانشگاه سمنان، سمنان، ایران

۳ دانشکده مهندسی شیمی و مواد، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود، ایران

اطلاعات مقاله

چکیده



واژه‌های کلیدی:

الکترولیز آب، سنتز متانول،
دی متیل اتر سبز، انرژی زمین گرمایی،
سیکل رانکین، آنالیز انرژی.

Keywords:

Water electrolysis,
Methanol synthesis,
Green dimethyl ether,
Geothermal energy,
Rankine cycle,
Energy analysis.

دریافت: ۱۳/۰۳/۱۴۰۴

پذیرش: ۱۹/۰۸/۱۴۰۴

نوع مقاله: علمی - پژوهشی

این پژوهش به تولید دی‌متیل‌اتر (DME) سبز از طریق هیدروژناسیون CO₂ بازیافتی می‌پردازد. هیدروژن مورد نیاز از الکترولیز آب تامین می‌شود و CO₂ از صنایع جمع‌آوری می‌گردد. این مواد ابتدا به متانول و سپس به DME تبدیل می‌شوند. شبیه‌سازی اولیه بازده انرژی این فرآیند را ۵۱/۲۷٪ نشان داد. برای تامین برق مورد نیاز الکترولیز، دو سیکل رانکین (با سیال زمین گرمایی به عنوان منبع انرژی) - یکی دمابالا و دیگری دمابالین - به فرآیند اصلی تجمع شدند. این ادغام نه تنها برق مورد نیاز الکترولیز (۱۳۱۸ کیلووات) و کل واحد را تامین کرد، بلکه ۴۳۲ کیلووات برق پاک اضافی نیز تولید نمود. علاوه بر این، از گرمای تلف شده سیکل‌ها ۷/۵ تن در ساعت آب شیرین (از شیرین‌سازی آب دریا) و ۷/۵ تن در ساعت بخار داغ ۲۴۰ درجه سلسیوس برای مصارف گرمایشی استحصال شد. تجمیع این سیستم‌ها با منبع زمین گرمایی، تولید DME را به ۶۶ کیلوگرم بر ساعت رساند و بازده انرژی کلی فرآیند را به‌طور چشمگیر به ۷۵/۳٪ افزایش داد. بهینه‌سازی شبکه‌های حرارتی با آنالیز پینچ نیز منجر به حذف کامل بار گرمایی کمکی (هیتِر) و کاهش ۱۱٪ بار سرمایی کمکی (کولِر) (کیلووات) شد. آنالیز حساسیت نشان داد که افزایش ۱۰٪ توان الکترولیز (کیلووات)، کاهش ۵۰٪ دمای راکتور متانول (درجه سلسیوس) و کاهش ۳۳٪ نسبت H₂ به CO₂ در خوراک واحد متانول (نسبت مولی)، می‌تواند تولید DME را ۳۲٪ افزایش داده (کیلوگرم بر ساعت) و بازده انرژی را از ۷۵/۳٪ به ۷۵/۷٪ برساند. این بازده انرژی به‌دست آمده در مقایسه با مطالعات مشابه بسیار بالا ارزیابی می‌شود.

مقدمه

موجب گرمایش جهانی می‌شوند [۱]. هیدروژن به دلیل پاک و عدم تولید آلاینده، گزینه‌ای مناسب برای آینده انرژی است [۲]. با این حال،

رشد جمعیت و افزایش تقاضای انرژی، استفاده از منابع تجدیدپذیر را ضروری کرده است. سوخت‌های فسیلی با انتشار CO₂ و گازهای گلخانه‌ای

*عهددار مکاتبات

+E-mail: ar.fazlinezhad@mail.um.ac.ir

ارجاع: آرمین فضل‌نژاد، بیتا کریمی، آرمین حسن پور، آنالیز انرژی فرآیند تولید همزمان دی متیل اتر سبز، بخار داغ و آب تازه با استفاده از انرژی زمین گرمایی و آب دریا، نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران، (۴۴): ۱۲۵ تا ۱۴۵ (۱۴۰۴).

بازده اگزرژی و کاهش کربن به $0.5 \text{ tonCO}_2/\text{ton feed}$ نشان دادند. ژانگ^۹ و همکاران [۱۷] یک ساختار نوین برای فرآیند پلی‌ژنراسیون با استفاده از گاز محل دفن زباله (LFG)، هیدروژن تجدیدپذیر و چرخه زمین‌گرایی پیشنهاد دادند. راندمان انرژی و اگزرژی این سیستم به ترتیب به $59/5\%$ و $77/29\%$ میزان انتشار دی‌اکسیدکربن به عدد منفی -0.161 کیلوگرم CO_2 به ازای هر کیلوگرم محصول رسید. میرشقیعی^{۱۰} و همکاران [۱۸] طرح تولید همزمان هیدروژن و آب آشامیدنی با روش اسمز معکوس و تامین برق از طریق یک سیکل رانیکن را که با سیال زمین‌گرایی کار می‌کرد را بررسی کردند. بازده به بازده انرژی حدود 82% رسیدند. نتایج نشان داد این طرح به حدود $1/98$ میلیون دلار هزینه سرمایه‌گذاری و نرخ بازگشت سرمایه حدود ۴ سال دارد. اوکاتی^{۱۱} و همکاران [۱۹] نشان دادند که دما و فشار راکتور از مهم‌ترین پارامترها در آنالیز حساسیت می‌باشد. آن‌ها مطرح نمودند که آنالیز حساسیت می‌تواند تاثیر مستقیمی بر بهبود و عملکرد فرآیند از نقطه نظر انرژی بگذارد که مبنای این تحقیق نیز قرار گرفته است. ادنان^{۱۲} و موکتی^{۱۳} [۲۰] در بررسی اقتصادی تولید دی‌متیل اتر سبز با الکترولیز آب به این نتیجه رسیدند که اگر هزینه تولید هر کیلوگرم هیدروژن 52 کیلووات ساعت انرژی ببرد فرآیند از نظر اقتصادی به صرفه قلمداد می‌شود. همچنین اگر میزان انتشار دی‌اکسید کربن برای هر کیلووات ساعت برق مصرفی کمتر از 19 گرم باشد فرآیند دوستار محیط زیست برآورد می‌شود. کوفیر^{۱۴} و همکاران [۲۱] در پژوهشی به بررسی تولید DME از پسماندهای کشاورزی و جنگلی پرداختند. آن‌ها نتیجه‌گیری کردند که هزینه تولید دی‌متیل اتر سبز با این روش در مقایسه با الکترولیز آب کمتر محاسبه می‌شود مگر آنکه برق الکترولیز به شکل تجدیدپذیر و ارزان تامین شود. مانگالیندان^{۱۵} و همکاران [۲۲] نشان دادند که قیمت تمام شده تولید هیدروژن بیش‌ترین اثر را بر صرفه اقتصادی فرآیند دارد. گوانگ^{۱۶} وین و همکاران [۲۳] تولید دی‌متیل اتر سبز از ضایعات برنج را بررسی کردند. آن‌ها به بازدهی انرژی 75% و هزینه تولید 1433 دلار بر هر کیلوگرم دی‌متیل اتر و تولید $1/4$ کیلوگرم CO_2 به ازای هر کیلوگرم دی‌متیل اتر دست پیدا کردند. استایرینگ^{۱۷} [۲۴] و همکاران تاکید نمودند که دی‌متیل اتر 77% رد پای کربن کمتری از تولید سوخت‌های دیزلی رایج دارد. پنگ^{۱۸} و همکاران [۲۵] در مسیر تبدیل پسماند

ذخیره‌سازی هیدروژن دشوار بوده و معمولاً به صورت حامل‌های مایع مانند متانول، دی‌متیل اتر (DME) و آمونیاک انجام می‌شود [۳] متانول یکی از محصولات شیمیایی پرمصرف است که در تولید فرمالدئید، بیودیزل، و MTBE استفاده می‌شود و همچنین به عنوان سوختی با آلودگی کمتر در نظر گرفته می‌شود [۴]. دی‌متیل اتر (DME)، مشتق اصلی از متانول، در چین به عنوان جایگزینی برای گاز مایع و دیزل استفاده می‌شود DME ارزش حرارتی بالاتری نسبت به متانول دارد و به عنوان سوخت سبز و کم‌آلاینده شناخته می‌شود [۵، ۶]. موزم و همکاران [۷] یک تحلیل ترمو-اقتصادی از تولید یکپارچه هیدروژن، متانول و دی‌متیل اتر انجام دادند و نشان دادند هزینه تولید DME با توجه به نوع الکترولیزر بین 1141 تا 1471 دلار به‌ازای هر تن متغیر است. اگرچه الکترولیز SOEC هزینه کمتری داشت، اما PEM و آلکالین به دلیل عملکرد در دمای پایین‌تر مشکلات عملیاتی کمتری داشتند. ابوسالیم^۱ و همکاران [۸] فرآیندی یکپارچه شامل چرخه Allam-Fetvedt، SOE و سنتز غیرمستقیم DME ارائه کردند که بازده انرژی را 14% بهبود داد و انتشار کربن را به 0.3 کیلوگرم به‌ازای هر کیلوگرم DME کاهش داد. ژو^۲ و همکاران [۹] با ترکیب گازی‌سازی زیست‌توده و الکترولیز قلیایی به بازدهی انرژی 53% اگزرژی 49% و ROI حدود ۷ سال رسیدند. محمد م. العتیبی^۳ و عبدالعزیز آ. الطرکی^۴ [۱۰] با استفاده از انرژی خورشیدی و بهینه‌سازی حرارتی، کاهش بیش از 99% انتشار CO_2 و بهبود بیش از 50% کارایی انرژی را گزارش کردند. اندریا شریبر^۵ و همکاران [۱۱] نشان دادند که اثرات زیست‌محیطی به منبع برق بستگی دارد و برق بادی می‌تواند انتشار گازهای گلخانه‌ای را بین $3/6$ تا $0/6$ $\text{kgCO}_2\text{eq/L}$ کاهش دهد. مارچلو د‌فالکو^۶ و همکاران [۱۲] نیز تولید DME و متانول از CO_2 بازیافتی و هیدروژن سبز را از نظر اگزرژی امکان‌پذیر دانستند. ژو و همکاران [۱۳] سیستمی پلی‌ژنراسیون تولید دی‌متیل اتر با بازده انرژی $49/54\%$ و اگزرژی $41/12\%$ ارائه دادند که ROI آن $7/12$ سال بود. بیانچی^۷ و همکاران [۱۴] امکان‌سنجی e-fuels با استفاده از PEMEC را بررسی کردند و نشان دادند مصرف برق بالا می‌باشد (۱۱-۱۲ kWh/kg)، اما پاک‌تر از ریفرمینگ متان است. کاریتا و همکاران [۱۵]، تولید DME از زیست‌توده با بازده انرژی $59/5\%$ و سهم 91% آلاینده‌گی از گازی‌ساز گزارش کردند. پررا^۸ و همکاران [۱۶] تولید متانول و DME از ضایعات نخل را با بهبود 10 - 15%

(۱) Abousalmia
(۳) Alotaibi
(۵) Schreiber
(۷) Bianchi
(۹) Xang
(۱۱) Okati
(۱۳) Mukti
(۱۵) Mangalindan
(۱۷) Styring

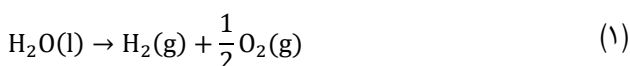
(۲) Xu
(۴) Alturki
(۶) De Falco
(۸) Perera
(۱۰) Mir Shafiei
(۱۲) Adnan
(۱۴) Kufier
(۱۶) Quang
(۱۸) Peng

با این حال، بهره‌گیری از انرژی زمین‌گرمایی کمتر مورد توجه قرار گرفته است. نوآوری پژوهش حاضر استفاده از یک سیکل آلی دوگانه زمین‌گرمایی برای تأمین برق الکترولیز است. علاوه بر این، از گرمای اتلافی سیکل برای نمک‌زدایی آب دریا و تولید همزمان آب آشامیدنی و بخار گرمایشی استفاده شده و بدین ترتیب تنوع محصولات انرژی افزایش یافته است. در این پژوهش نه تنها برق مورد نیاز کل واحد تأمین می‌شود، بلکه مازاد آن نیز قابلیت فروش دارد. همچنین، یک مطالعه یکپارچه‌سازی انرژی به منظور کاهش بارهای حرارتی جانبی و یک تحلیل حساسیت عملیاتی برای پارامترهایی چون توان الکترولیز، دما و فشار راکتورهای متانول و DME انجام شده است. این تحلیل محدوده بهینه پارامترها و پنجره عملیاتی مطلوب فرآیند را مشخص می‌سازد.

شرح فرآیند و روش انجام کار

شرح فرآیند

در این پژوهش به آنالیز انرژی و آنالیز عملیاتی فرآیند تجمیع شده تولید همزمان دی متیل اتر و برق پرداخته شده است. در حالت پایه مطابق شکل شماره ۱ مخلوط آب و پتاسیم هیدروکساید وارد الکترولیز می‌شود. آب به یون‌های هیدروژن و یون‌های هیدروکسید تفکیک می‌شود. یون‌های هیدروژن الکترون دریافت می‌کنند تا گاز هیدروژن تشکیل دهند، در حالی که یون‌های هیدروکسید الکترون از دست می‌دهند تا به گاز اکسیژن تبدیل شوند. این یون‌ها به ترتیب از طریق کاتد و آند به همراه محلول قلیایی از الکترولیز خارج می‌شوند و سپس وارد جداکننده‌های گاز-مایع می‌شوند، جایی که گازها از محلول قلیایی جدا می‌شوند. پس از جداسازی، محلول‌های قلیایی در سمت کاتد و آند به داخل یک میکسر برای مخلوط کردن پمپ می‌شوند. سپس محلول مخلوط شده توسط یک خنک‌کننده تا دمای مورد نیاز خنک می‌شود و سپس دوباره به الکترولیز کننده جریان می‌یابد تا یک چرخه مداوم تشکیل شود. در دما و فشار اتاق (دمای ۲۵ درجه سلسیوس، فشار ۱۰۱/۳۲۵ کیلوپاسکال)، آب مایع به H_2 گازی و O_2 گازی الکترولیز می‌شود و فرآیند واکنش را می‌توان با معادله زیر بیان کرد:



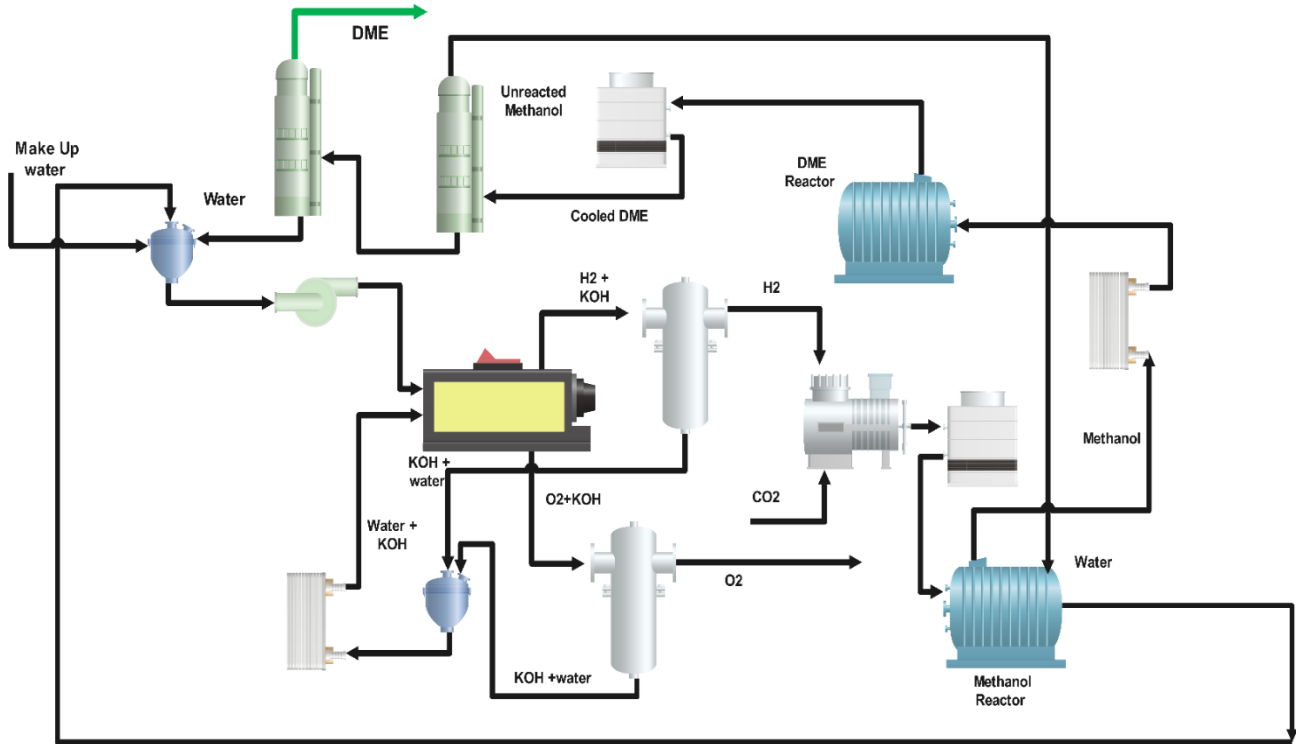
آنتالپی واکنش مولی استاندارد، تغییر آنتروپی واکنش مولی استاندارد و تغییر انرژی آزاد گیبس واکنش مولی استاندارد این واکنش به شرح زیر است:

به دی متیل اتر نتیجه گرفتند که بازده انرژی تولید دی متیل اتر سبز حدود ۴۷٪ است و بیشترین اثر را بر اقتصادی بودن فرآیند بخش الکترولیز دارد. ژانگ^۱ و همکاران [۲۶] تولید همزمان متانول-DME-کربنات را از پلاستیک بررسی کردند و بازده انرژی ۷۷٪ گزارش کردند. ژو و همکاران [۲۷] در یک فرآیند یکپارچه شده تولید دی متیل اتر، آب آشامیدنی و حرارت را از طریق الکترولیز آب با استفاده از نور خورشید دنبال نمودند. میزان کربن منتشر شده ۰/۲۷ کیلوگرم CO_2 به ازای هر کیلووات ساعت تولید انرژی بدست آمد. آل عزیز^۳ و همکاران [۲۸] تولید هیدروژن تجدید پذیر برای تولید الفین با استفاده از انرژی باد و خورشید را بررسی نمودند. آن‌ها نشان دادند ترکیب بهینه انرژی‌های تجدیدپذیر ترکیبی از انرژی خورشید - باد و باتری می‌باشد. طی مطالعه سعیدی^۴ و صفری‌پور^۵ [۲۹] نشان دادند که گازهای دورریز در پالایشگاه‌ها منبعی خوبی برای پیاده سازی تولید سوخت‌های سنتزی می‌باشند. پورعلی^۶ و همکاران [۳۰] به بررسی تولید هیدروژن از ریفرمینگ خشک متان پرداختند و نشان دادند یکی از راه‌های تأمین خوراک واحدهای سوخت‌های سنتزی ریفرمینگ خشک گاز طبیعی می‌باشد. همچنین آن‌ها توانایی مدل راکتور تعادلی را در پیش بینی واکنش نشان دادند. کشاورز^۷ و همکاران [۳۱] به اهمیت بهینه‌سازی چند هدفه در مطالعه بازده انرژی اشاره نمودند. نیک سیرت^۸ و همکاران [۳۲] نشان دادند که می‌توان از انرژی حاصل از ضایعات در شیرین کردن آب دریا بهره برد و انرژی سیستم شیرین سازی مبتنی بر تبخیر چند مرحله‌ای را تأمین نمود.

در سال‌های اخیر، تولید سوخت‌های زیستی نظیر دی متیل اتر (DME) از منابع تجدیدپذیر و بازیافتی به دلیل ردپای کربن پایین توجه گسترده‌ای را جلب کرده است DME به عنوان یکی از جایگزین‌های مناسب سوخت دیزل مطرح است و در صورت تولید مبتنی بر انرژی‌های تجدیدپذیر، ردپای کربن کمتری نسبت به تولید از گاز طبیعی دارد. مهم‌ترین عامل در کاهش هزینه و انتشار گازهای گلخانه‌ای در این فرآیند، تأمین هیدروژن مورد نیاز است. دی اکسید کربن نیز عمدتاً از طریق خالص سازی جریان‌های صنعتی مانند نفت و گاز، سیمان و فولاد تأمین می‌شود. استفاده از هیدروژن سبز حاصل از الکترولیز آب، راهکاری مؤثر برای بهینه‌سازی اقتصادی و زیست‌محیطی تولید DME است. مرور مطالعات پیشین نشان می‌دهد پژوهش‌ها عمدتاً بر یکپارچه‌سازی فرآیندها، کاهش اتلاف انرژی و افزایش تنوع سبد انرژی تمرکز داشته‌اند. در این طرح‌ها معمولاً CO_2 و H_2 به متانول و سپس متانول به DME تبدیل شده و برق مورد نیاز الکترولیز با فناوری‌هایی نظیر سیکل آلی رانکین، سیکل فوق بحرانی CO_2 ، انرژی خورشیدی و بادی تأمین شده است.

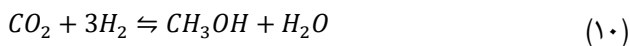
(۱) Zhang
(۳) Ale Aziz
(۵) Safaripour
(۷) Keshavarz

(۲) Zhou
(۴) Saedi
(۶) Pour Ali
(۸) Niksirat

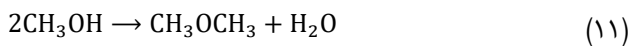


شکل ۱- نقشه جریان های فرآیند تولید دی متیل اتر بدون در نظر گرفتن تولید برق (حالت پایه)

از صنایع مختلف مخلوط شده و پس از عبور از کمپرسور بین فشار ۵۰ تا ۶۰ اتمسفر فشرده می‌شود و در محدوده دمایی ۲۰۰ تا ۲۵۰ درجه سلسیوس وارد راکتور سنتز متانول می‌شود. کاتالیست انتخاب شده برای سنتز، Cu/ZnO می‌باشد [۳۳]، واکنش‌های گرمازای زیر در طول سنتز در نظر گرفته می‌شود:



مخلوط خروجی راکتور پس از سرد سازی وارد بخش جدا کننده شده و متانول تولیدی از گازهای واکنش نداده (هیدروژن + CO₂) و آب جدا می‌شود. به جهت بالاتر بردن بازدهی واکنش و جلوگیری از اتلاف انرژی، گازهای واکنش نداده به ابتدای راکتور باز گردانده می‌شوند. تمام متانول تولید شده پیش گرم شده و سپس به راکتور سنتز دی متیل اتر وارد می‌شود. مطابق واکنش زیر متانول به دی متیل اتر تبدیل شده و سپس محصول خروجی جهت جداسازی اجزا به بخش جداسازی فرستاده می‌شود. واکنش اصلی صورت گرفته در راکتور به صورت زیر است:



در بخش جداسازی در اولین برج تقطیر متانول جدا شده و به ابتدای راکتور بازگردانده می‌شود. سپس در برج بدوم آب و محصول نهایی دی متیل اتر از یکدیگر جدا می‌شوند.

$$\Delta_r H_m^0 = 285.83 \text{ kJ/mol} \quad (۲)$$

$$\Delta_r S_m^0 = 163.343 \text{ J/mol} \cdot \text{K} \quad (۳)$$

$$\Delta_r G_m^0 = \Delta_r H_m^0 - T \cdot \Delta_r S_m^0 = 237.13 \text{ kJ/mol} \quad (۴)$$

در فرآیند الکترولیز آب قلیایی، بیشتر انرژی ورودی برای الکترولیز آب استفاده می‌شود و بخش کوچک باقی مانده برای غلبه بر مقاومت و تبدیل آن به گرما استفاده می‌شود و تبدیل انرژی در الکترولیز را می‌توان با فرمول زیر بیان کرد:

$$P = W + Q \quad (۵)$$

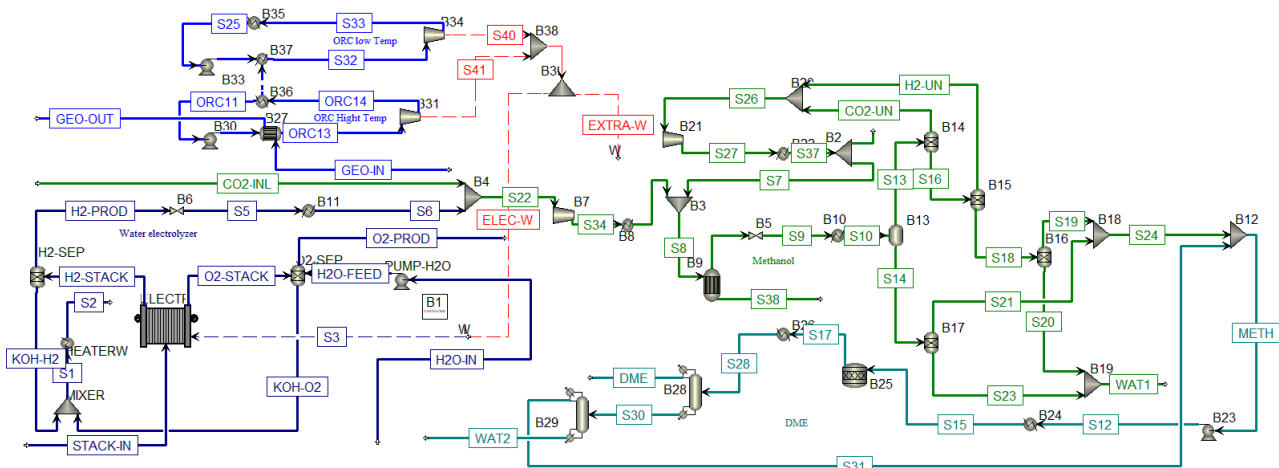
که در آن P نشان دهنده توان ورودی (W)؛ W نشان دهنده توان الکترولیتی (W) و Q نشان دهنده توان حرارتی (W) است. توان ورودی، توان الکترولیتی و توان حرارتی را می‌توان با فرمول‌های زیر محاسبه کرد:

$$P = n \cdot I \cdot E \quad (۶)$$

$$W = n \cdot I \cdot E_{\Delta H} \quad (۷)$$

$$Q = P - W \quad (۸)$$

که در آن E نشان دهنده ولتاژ ورودی (V)؛ E_{ΔH} نشان دهنده ولتاژ حرارتی (V)؛ n نشان دهنده تعداد سلول‌های الکترولیز؛ I نشان دهنده جریان عملیاتی (A) است. هیدروژن بدست آمده با CO₂ آزاد شده



شکل ۲ - نمایی از نقشه واحد شبیه سازی شده در اسپن پلاس در حالت تجمیع شده

خواص محلول های الکترولیت ارائه می شود بهره برده شده است. مطابق شکل ۲ مخلوط ۶۵٪ آب و ۳۵٪ پتاسیم هیدروکساید به عنوان الکترولیت ورودی وارد الکترولایزر شده و مخلوط اکسیژن و الکترولیت از آنند و مخلوط هیدروژن و الکترولیت از کاتد وارد جداکننده ها می شوند.

در این جداکننده ها گاز هیدروژن خالص از بخش کاتد و گاز اکسیژن خالص از بخش آنند بدست می آید. سپس الکترولیت مصرف نشده مجدداً دوباره به الکترولایزر برگشت داده می شود. در مسیر برگشت به علت افت درجه حرارت یک پیش گرم کن قبل از الکترولایزر تعبیه شده است تا دمای جریان را به دمای مطلوب الکترولایزر در ۸۰ درجه سلسیوس برساند. همچنین جهت جبران آب مصرفی در فرآیند یک جریان آب جبرانی یا make up در نظر گرفته می شود. این جریان در پمپ فشارش افزایش پیدا کرده و به الکترولایزر تزریق می شود. پارامترهای عملیاتی به کار رفته و ابزارهای به کار رفته در شبیه سازی در جدول ۱ و ۲ گزارش شده است. آب مصرفی در الکترولایزر الزاماً می تواند از آب دریا تامین نشود. می توان بخشی از آب را از آب تولید شده در فرآیند دی متیل اتر بدست آورد و مابقی را از دیگر منابع مورد استفاده قرار داد. هر چند یک راه نیز استفاده از انرژی مازاد فرآیند برای کلر زدایی و نمک زدایی آب دریا و استفاده از آن در تولید هیدروژن می باشد.

شبیه سازی بخش تولید متانول و دی متیل اتر

هیدروژن تولید شده در بخش الکترولایزر آب پایه اصلی گاز سنتز برای تولید متانول است. لازم به ذکر است که هیدروژن تولیدی نیز قابلیت استفاده در صنایع برشکاری - تولید مواد شیمیایی مانند کلروبنزن - فرآیند گازی سازی و خوراک واحدهای اکسیداسیون مانند تولید فرمالدهید را دارد [۳۴]. CO₂ از صنایع آلاینده ای مانند نفت و گاز - پتروشیمی - سیمان و ... جذب می شود و جهت کاربردهای مختلف از جمله تولید گاز سنتز استفاده می شود.

شبیه سازی و بهبود فرآیند

در این مطالعه چند واحد مختلف جهت تولید سبد متنوعی از حالات مختلف انرژی در نظر گرفته شده است و توسط نرم افزار شبیه ساز Aspen Plus نسخه ۱۴ شبیه سازی شده است. در این شبیه سازی واحدهای زیر در کنار یکدیگر تجمیع شده اند که در ادامه ابزارهای مختلف به کار رفته برای شبیه سازی و مقدار پارامترهای عملیاتی ذکر شده است. به علت حضور ترکیبات قطبی از متانول و دی متیل اتر کل فرآیند به جز بخش الکترولایزر آب با معادله NRTL مدل سازی شده است. همچنین فاز گاز نیز توسط معادله SRK به علت وجود CO₂ مدل سازی شده است. بخش الکترولایزر به علت ماهیت متفاوت شیمیایی با معادله حالت دیگری بررسی شده است که در بخش الکترولایزر به آن اشاره شده است.

- الکترولایزر آب جهت تولید هیدروژن
- سنتز متانول جهت تولید متانول از هیدروژن تولیدی و CO₂ کپچر شده از صنایع
- سنتز دی متیل اتر جهت تولید DME از کل متانول تولید شده
- سیکل آلی رانکین دما بالا و سیکل آلی رانکین دما پایین که با انرژی سیال زمین گرمایی کار می کند جهت تولید برق مورد نیاز کل واحد و انرژی اضافی

با تجمیع واحدهای ذکر شده تولید همزمان دی متیل اتر به عنوان سوخت پاک و منبع گرمایش از آب و همچنین تولید برق از طریق انرژی زمین گرمایی و سیکل رانکین فراهم می شود. در شکل شماره ۱ نمایی از فرآیند شبیه سازی شده در اسپن پلاس قرار داده شده است.

شبیه سازی الکترولایزر آب

برای شبیه سازی تولید هیدروژن، از ابزار الکترولایزر از نوع الکترولایزر آلکالینی در اسپن پلاس استفاده شده است. جهت شبیه سازی بهتر محلول الکترولیت از بسته Electrolyte NRTL که جهت مدل سازی

جدول ۳- مشخصات عملیاتی مورد استفاده در شبیه سازی واحد سنتز متانول [۳۵]

نام تجهیز استفاده شده در اسپن پلاس	واحد	مقدار	نام تجهیز یا پارامتر عملیاتی
Compr	بار	۵۱	فشار کمپرسور خوراک
rGibbs	درجه سلسیوس	۲۴۰	دمای راکتور
Sep	درجه سلسیوس	۲۵	دمای تجهیزات جداسازی

جدول ۴- مشخصات عملیاتی مورد استفاده در شبیه سازی واحد سنتز دی متیل اتر [۳۷]

نام تجهیز استفاده شده در اسپن پلاس	واحد	مقدار	نام تجهیز یا پارامتر عملیاتی
Heater	درجه سلسیوس	۲۵۰	دمای پیش گرم کن راکتور
RStoic	درجه سلسیوس	۳۵۰	دمای راکتور
Cooler	درجه سلسیوس	۱۷۰	دمای سرد سازی بعد از راکتور
RadFac	-	۱۸ سینی ۳/۹۴ مولی	برج تقطیر اول تعداد سینی نسبت جریان برگشتی نسبت محصول مقطر به خوراک
RadFac	-	۳۰ سینی ۱/۳۷ مولی	برج تقطیر اول تعداد سینی نسبت جریان برگشتی نسبت محصول مقطر به خوراک

فرض تعادلی بودن راکتور در یک بازه دمایی ۲۲۰ تا ۲۸۰ درجه سلسیوس اعتبار دارد. گامرو و همکاران [۳۵] و مورا و همکاران [۳۶] بر این حقیقت که راکتور تعادلی سنتز متانول در تمام شرایط عملیاتی معتبر نیز صحه گذاشته‌اند. راکتور تعادلی علی‌رغم ساده‌تر کردن شبیه سازی دارای محدودیت‌هایی است که راکتور سینتیکی آن را بر طرف می‌نماید. به خصوص اگر واکنش در بازه‌های مورد بررسی قرار گیرد که کاتالیست دچار کاهش فعالیت شده و یا دما آن قدر پایین باشد که واکنش فعالیت خود را از دست دهد. بدین سبب در این پژوهش در جهت حفظ سادگی شبیه سازی و جلوگیری از ورود به پیچیدگی‌های سینتیکی سنتز متانول راکتور تعادلی در بازه ۲۲۰ تا ۲۸۰ درجه سلسیوس به کار رفته است و دمای عملیاتی راکتور روی ۲۴۰ سلسیوس تنظیم شده است. اما لازم به ذکر است که در خارج از این بازه راکتور تعادلی دارای محدودیت بوده و می‌بایست پژوهشگران برای بررسی دقیق راکتور در تمام بازه‌های عملیاتی سینتیک واکنش‌های کاتالیستی را نیز در نظر بگیرند. راکتور بر مبنای حداقل کردن انرژی آزاد گیبس کار کرده و ترکیب % خروجی را پیش بینی می‌نماید. مبنای عملکردی این راکتور ترمودینامیکی

جدول ۱- پارامتر های عددی شبیه سازی الکترولایزر [۳۴]

واحد	مقدار عددی	پارامتر شبیه سازی
-	۶۵٪ جرمی آب - ۳۵٪ جرمی KOH	ترکیب درصد الکترولیت ورودی
کیلوگرم بر ساعت	۱۵۰۰	دبی جریان الکترولیت ورودی
سلسیوس	۸۰	دمای جریان ورودی
سلسیوس	۸۰	دمای الکترولایزر
اتمسفرف	۵	فشار الکترولایزر
کیلووات	صفر	گرمای اتلافی در الکترولایزر
کیلووات	۱۰۰۰	برق ورودی به الکترولایزر
-	۱	تعداد Stack
-	۶۰	تعداد سلول های استک
کیلوژول بر کیلوگرم	۱۰۰٪	بازدهی HHV

جدول ۲- ابزار های شبیه سازی الکترولایزر در اسپن پلاس

نام ابزار مورد استفاده در اسپن پلاس	نام وسیله فرآیندی
Electrolyzer	الکترولایزر آلکالین
Sep	جداکننده های آند و کاتد
Pump	پمپ آب جبرانی
Heater	پیش گرم کن

بدین جهت CO₂ با هیدروژن به نسبت مولی ۱ به ۲/۵ تا ۳ مخلوط می‌شود. مخلوط گازی بدست آمده تا فشار نزدیک به ۵۱ بار فشرده می‌شود و وارد راکتور سنتز متانول می‌گردد. در این راکتور که گرمای آن نیز است بخشی از گاز سنتز به متانول (حدود ۳۵ تا ۴۰٪) تبدیل شده و باقی مانده گاز سنتز بدست آمده جهت جلوگیری از هدر رفت منابع مالی و انرژی به ابتدای راکتور بازگردانده و بازیافت می‌شود. گاز خروجی از راکتور از فاز مایع که عمدتاً متانول و آب است جدا می‌شود. سپس در برج دیگری آب از متانول جدا می‌شود و متانول خالص بدست می‌آید. آب مورد استفاده جهت مصارف دیگر ذخیره سازی شده و تمام متانول تولیدی به واحد سنتز دی متیل اتر ارسال می‌شود. متانول تولید شده جهت ارسال به واحد دی متیل اتر ابتدا پیش گرم می‌شود. سپس وارد راکتور می‌شود و واکنش گرمایی را طی می‌کند. مخلوطی گازی حاصل تا دمای محیط سرد شده و در برج تقطیر اول دی متیل اتر تولید شده و در برج دوم آب تولیدی و متانول واکنش نداده جدا می‌شوند. دی متیل اتر به عنوان محصول نهایی در نظر گرفته شده و آب جهت مصارف جانبی ذخیره سازی می‌شود. همچنین متانول واکنش نداده به ابتدای راکتور سنتز متانول بازگردانده می‌شود. جدول ۳ و ۴ پارامتر های عملیاتی و نوع ابزار مورد استفاده در اسپن پلاس را به ترتیب برای واحد متانول و دی متیل اتر نشان می‌دهد. مطابق جدول ۳ در شبیه سازی راکتور سنتز متانول از یک راکتور تعادلی - ترمودینامیکی استفاده شده است. لازم به ذکر است

در این پژوهش شامل دو سیکل رانکین ارگانیک (ORC) به صورت پیکربندی بالا-پایین و یک چیلر جذبی لیتیوم-برمید می باشد [۳۸]. در ابتدا، سیال داغ استخراج شده از چاه زمین گرمایی با دمای حدود ۲۱۰ درجه سلسیوس و دبی جرمی ۱۰ کیلوگرم بر ثانیه، به کمک یک پمپ وارد اواپراتور ORC اول (ORC1) شده و حرارت خود را به سیال عامل R123 منتقل می نماید. داده های عملیاتی سیکل مانند دمای ورودی و دبی سیال بر اساس پژوهش علی مرادی و همکاران [۳۰] که به شبیه سازی تولید برق از سیال زمین گرمایی اقدام نمودند استناد شده است. سپس این سیال، پس از تبادل حرارتی و انتقال انرژی، به درون چاه تزریق مجدد می شود. سیال عامل پس از تبخیر در اواپراتور وارد توربین ORC1 شده و توان مکانیکی لازم جهت تولید برق فراهم می شود. در ادامه، سیال خروجی از این توربین که هنوز حاوی مقدار قابل توجهی انرژی است، وارد یک مبدل حرارتی می شود تا انرژی آن به سیکل ORC دوم (ORC2) که با آمونیاک به عنوان سیال عامل کار می کند، منتقل گردد. در ORC دوم نیز با تبخیر سیال عامل و عبور از توربین، برق تولید می شود. این توان الکتریکی مستقیماً جهت تأمین انرژی مورد نیاز واحد مورد الکترو لایزر و انرژی مصرفی کمپرسورهای واحد متانول و پمپها مورد استفاده قرار می گیرد. در این سیکل دبی سیال عامل در سیکل دما بالا ۲۰۰ تن بر ساعت و میزان افزایش فشار در پمپ ۵ بار می باشد از سویی میزان دبی سیال عامل سیکل دما پایین ۳۰ تن بر ساعت و افزایش فشار در پمپ ۵ بار در نظر گرفته شده است [۳۸]. در سیکل های مورد مطالعه به علت بالاتر بودن دمای اشباع میرد R123 از این میرد در سیکل حرارتی دمای بالا استفاده شده است. از آن سو به علت پایین تر بودن دمای اشباع آمونیاک از آمونیاک به عنوان سیال عامل سیکل فشار پایین بهره برده شده است.

نتایج و بحث

اعتبار سنجی شبیه سازی

شبیه سازی این پژوهش از سه بخش اصلی الکترو لیز آب - ستر متانول و ستر دی متیل اتر تشکیل شده است. در این بخش شبیه سازی مربوط به هر کدام از این بخش ها نسبت به اطلاعات آزمایشگاهی یا شبیه سازی گزارش شده در منابع معتبر علمی اعتبار سنجی می شود. در مطالعات انجام شده در مراجع [۳۹، ۴۰] داده های آزمایشگاهی جهت یک پیل سوختی در دمای ۷۵ درجه سلسیوس و فشار ۷ اتمسفر برای اندازه گیری ولتاژ دو سر پیل بر حسب چگالی های مختلف شدت جریان الکتریکی (آمپر بر متر مربع) گزارش شده است. مرجع [۳۹] یک مدل ریاضی جهت پیش بینی ولتاژ در بازه چگالی شدت جریان ۰ تا ۵۰۰۰ آمپر ارائه کرده است که مبنای محاسبات در ماژول الکترو لیز اسپن پلاس در این مطالعه است. در مرجع ذکر شده روابط تجربی جهت محاسبه مقدار اکسیژن و هیدروژن تولیدی

معادلات ۱۲ تا ۱۶ می باشد. در راکتور سنتر متانول معمولاً از کاتالیست $\text{CuO-ZnO-Al}_2\text{O}_3$ استفاده می شود. کاتالیست در نظر گرفته شده در راکتور تبدیل متانول به دی متیل اتر ژئولایت ZSM-5 فرض شده است.

به منظور تعیین شرایط تعادلی، از اصل کمینه سازی انرژی آزاد گیبس استفاده شده است:

$$G^t = \sum_{i=1}^N n_i \mu_i \quad (12)$$

در این رابطه، μ_i و n_i به ترتیب بیانگر پتانسیل شیمیایی و تعداد مول های جزء i می باشند. معادله ۱۳ برای یک گاز ایده آل به صورت زیر تعریف می شود:

$$G^t = G^0 + RT \ln \left(\frac{f_i}{f_i^0} \right) \quad (13)$$

که در آن T دما، R ثابت گاز عمومی، f_i فوگاسیته جزء i و f_i^0 فوگاسیته استاندارد گاز را نشان می دهد. همچنین G^0 انرژی آزاد گیبس استاندارد را نشان می دهد. معادله ۱۴ برای گاز ایده آل در قالب فشار به شکل زیر بیان می شود:

$$\mu_i = G_i^0 + \frac{\phi_i P_i}{P^0} \quad (14)$$

که در آن ϕ ضریب فوگاسیته و P فشار گاز است. نتایج تجربی نشان می دهد که مقادیر f و P در یک بازه مشخص همگرا شده و فشار به سمت صفر میل می کند. در چنین شرایطی، معادله ۱۵ به شکل زیر بازنویسی می گردد:

$$\mu_i = \Delta G_{f,i}^0 + RT \ln(y_i) \quad (15)$$

در این رابطه $\Delta G_{f,i}^0$ انرژی آزاد گیبس در حالت تعادل و y_i کسر مولی جزء i را نشان می دهد. با ترکیب روابط ۱۲ تا ۱۵، معادله ۱۶ به دست می آید:

$$G^t = \sum_{i=1}^N n_i \Delta G_{f,i}^0 + \sum_{i=1}^N n_i RT \ln \left(\frac{n_i}{n_t} \right) \quad (16)$$

در نهایت، مجموعه ای از مقادیر n_i که منجر به کمینه شدن انرژی آزاد گیبس کل می شود، از طریق معادله ۱۶ محاسبه شده و برای شبیه سازی توزیع محصولات آزمایشگاهی به کار گرفته می شود.

سیکل آلی رانکین با انرژی زمین گرمایی

یک سامانه مبتنی بر انرژی زمین گرمایی جهت تولید همزمان برق و دی متیل اتر ارائه شده است. هدف اصلی از این طراحی، استفاده از انرژی تجدید پذیر زمین گرمایی به منظور تأمین توان مورد نیاز فرآیند الکترو لیز آب، تأمین برق کمپرسورهای واحد متانول و پمپها و تولید هیدروژن سبز با خلوص بالا است. سامانه مورد بررسی

جدول ۵- مقایسه مقادیر مدل و شبیه‌سازی مرجع [۳۷] در سنتز دی متیل اتر

نام ماده	ترکیب درصد شبیه سازی	ترکیب درصد مرجع [۳۳]	%خطا نسبی
دی متیل اتر	۰/۴۰۹	۰/۴۱۲	۱
متانول	۰/۱۸۲	۰/۱۸۸	۳
آب	۰/۴۰۹	۰/۴۰۰	۲

در مرجع [۳۷] توافق خوبی وجود دارد و نشان می‌دهد مدل در نظر گرفته شده به خوبی می‌تواند رفتار فرآیند تولید دی متیل اتر را پیش بینی نماید. طبق جدول ۵ ترکیب درصد دی متیل اتر با اختلاف ۱٪ و ترکیب درصد متانول با ۳٪ نسبت به مرجع پیش بینی شده است که از توانایی خوب شبیه سازی در پیش بینی میزان دی متیل تولیدی دارد.

آنالیز انرژی

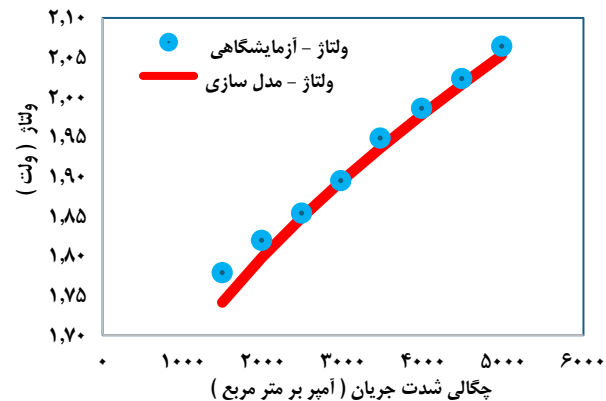
در این بخش واحد شبیه سازی شده برای تولید دی متیل اتر از نظر انرژی مورد آنالیز قرار گرفته است. در ابتدا بدون تامین برق مورد نیاز واحد از طریق انرژی‌های تجدید پذیر و بدون انتگراسیون سیکل ORC واحد تولید دی متیل اتر مورد بررسی قرار گرفته است که سناریو شماره ۱ نامیده می‌شود. سپس برق مورد نیاز از سیکل تامین شده و به نوعی انتگراسیون انرژی در فرآیند اعمال می‌شود. در دو حالت میزان مصرف انرژی و بازدهی انرژی بدست آمده و شرایط واحد قبل و بعد از انتگراسیون مورد تحلیل انرژی قرار گرفته است.

تحلیل انرژی فرآیند قبل از انتگراسیون

در این بخش سناریو اول از جهت انرژی مورد بحث قرار می‌گیرد. در سناریو اول کل برق مورد نیاز از قبیل الکترولیز، پمپ‌ها و کمپرسورها از طریق گزینه‌های غیر تجدیدپذیر مانند سوختن گاز و یا تولید برق از توربین‌های بخار تامین می‌شود. همچنین کلیه مبدل‌های سرد کننده و خنک کننده از نوع تجهیزات جانبی به ترتیب با جریان جانبی هواخنک - بخار و روغن داغ در نظر گرفته می‌شود. جهت محاسبه بازدهی انرژی فرآیند رابطه ۱۷ مطابق زیر تعریف می‌شود. در این رابطه P انرژی الکتریکی لازم برای الکترولیز و کمپرسورها و پمپ‌ها Qh بارحرارتی لازم برای مبدل‌های گرم کننده و LHV ارزش حرارتی دی متیل اتر تولیدی می‌باشد.

$$\eta = \frac{m_{DME}LHV_{DME}}{P_{elec} + P_{pump,comp} + Q_h} \quad (17)$$

شکل ۴ الف نمودار سنکی جریان‌های انرژی و ۴ ب بازدهی انرژی هر بخش را نشان می‌دهد. طبق این شکل برق ورودی به الکترولیز ۱۰۰۰ کیلووات در نظر گرفته می‌شود. با این میزان برق ورودی ۸۵۰ کیلووات هیدروژن تولید می‌شود که نشان می‌دهد



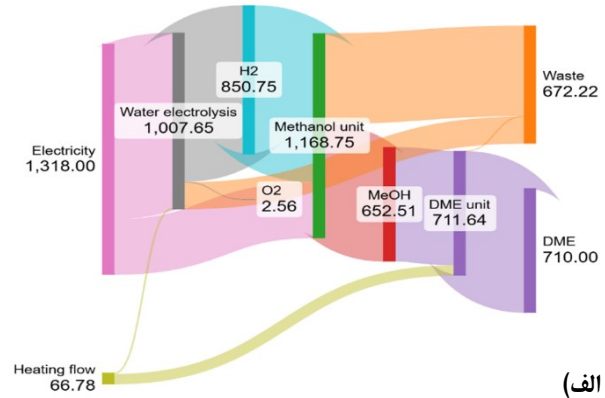
شکل ۳- نمودار اعتبار سنجی داده‌های مدل و آزمایشگاهی الکترولیز آلکالینی

به صورت تابعی از میزان شدت جریان، اختلاف پتانسیل و به تبع آن توان ورودی الکترولیزر ارائه شده است. بدین جهت با استفاده از روابط موجود در این مرجع مدل الکترولیز کد نویسی شده و نتایج حاصل با داده‌های آزمایشگاهی در شکل ۳ مقایسه شده است. مطابق نمودار مدل سازی به خوبی داده‌های آزمایشگاهی را پیش بینی کرده است. میانگین خطای نسبی حدود ۰/۸٪ و بیش‌ترین و کم‌ترین خطای مدل در بین داده‌های به ترتیب ۲٪ و ۰/۰۵٪ می‌باشد. این نشان می‌دهد که توافق خوبی بین مقادیر مدل و داده‌های وجود دارد که می‌تواند سبب شود مدل الکترولیز آلکالینی ارائه شده برای شبیه سازی با اطمینان به کار گرفته شود.

از آنجا که شبیه سازی واحد متانول امری پیچیده است بسیاری از پژوهش‌ها از راکتورهای ترمودینامیکی بر مبنای حداقل کردن انرژی آزاد گیبس جهت تخمین توزیع محصول در راکتور تولید متانول بهره برده‌اند. بدین جهت در این پژوهش نیز از راکتورهای ترمودینامیکی و تعادلی برای تخمین ترکیب درصد محصولات واحد متانول بهره گرفته شده است. طبق شبیه سازی صورت گرفته در مرجع [۳۵] مقدار درصد تبدیل CO₂ جهت تبدیل به متانول در یک راکتور تعادلی ۱۷٪ گزارش شده است. این راکتور در فشار ۵۱ بار و دمای ۲۴۰ درجه سلسیوس بررسی شده است. نتایج این شبیه سازی در دما و فشار مشابه حاکی از درصد تبدیل حدودا ۱۹٪ در فرآیند دارد. مقدار درصد خطای نسبی بدست آمده بین نتایج این شبیه سازی و نتایج [۳۵] حدود ۱۱٪ می‌باشد که خطای نسبتا قابل قبولی بوده و نشان از مناسب بودن راکتور تعادلی انتخاب شده برای شبیه سازی واحد متانول را دارد. اگر برگشت جریان به ابتدای راکتور در نظر گرفته نشود %خطای نسبی به حدود ۵/۸٪ می‌رسد که از توافق خوب داده‌های مقاله مرجع و این شبیه سازی دارد.

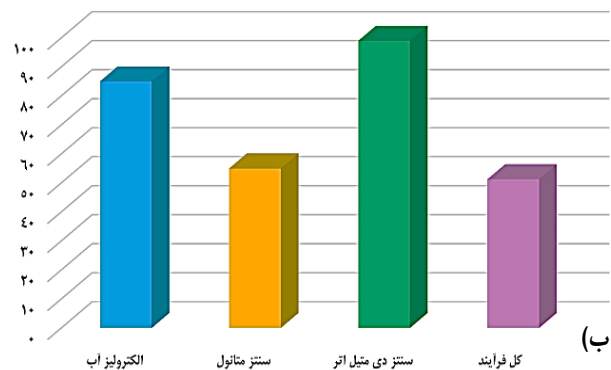
سنتز دی متیل اتر از متانول در یک راکتور استوکیومتری در اسین پلاس توسط [۳۷] مورد شبیه سازی و بررسی قرار گرفته است. در شرایط عملیاتی مشابه بین شبیه سازی صورت گرفته در این پژوهش و داده‌های گزارش شده (دمای ۳۵۰ درجه سلسیوس و فشار ۱۰ بار)

طبق نتایج شبیه سازی با ۱۳۸۴ کیلووات انرژی ورودی حدود ۶۴ کیلوگرم بر ساعت دی متیل اتر و ۱۱۰ کیلوگرم بر ساعت متانول بدست آمده است که البته تمام متانول صرف تبدیل به دی متیل اتر شده است. بدین ترتیب در واحد پیشنهادی برای تولید هر ۱ کیلوگرم بر ساعت دی متیل اتر به ۲۱ کیلووات انرژی نیاز است. برای تولید هیدروژن مورد نیاز این میزان تولید از دی متیل اتر در هر یک ساعت ۲۲۶ کیلوگرم آب مصرف می شود که نشان می دهد برای تولید هر ۱ کیلوگرم در ساعت دی متیل اتر از الکترولیز آب و متانول نیاز به حدود ۳/۵ کیلوگرم آب بر ساعت نیاز است.



(الف)

بازدهی انرژی



(ب)

شکل ۴- الف) نمودار سنکی جریان های انرژی، ب) بازدهی انرژی بخش های مختلف و بازدهی کل

انتگراسیون مبدل های حرارتی

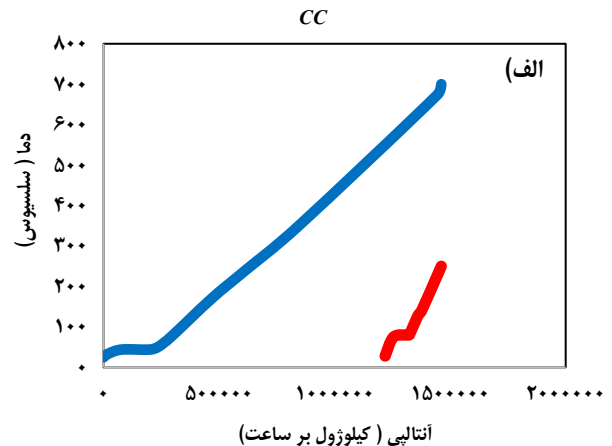
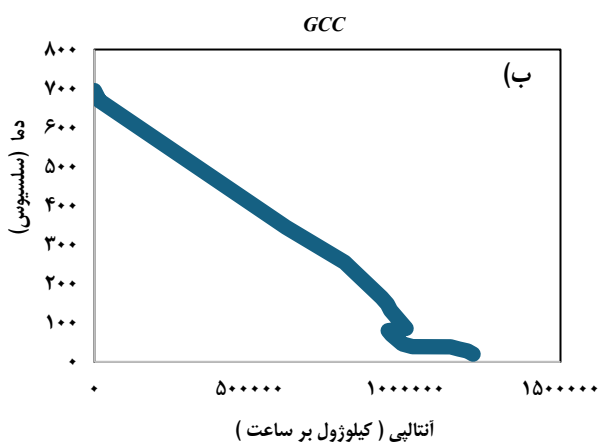
در واحد شبیه سازی شده ۱۱ مبدل حرارتی موجود است که از این یازده مبدل ۷ مبدل وظیفه خنک کردن جریان و ۴ مبدل وظیفه گرم کردن جریان هارا به عهده دارند. در بخش مبدل های سرد کننده تجهیزات جانبی هوا - آب خنک کن و مبرد و در بخش مبدل های گرم کننده تجهیزات جانبی گرم روغن داغ و بخار فشار بالا مورد استفاده قرار گرفته است. در جدول ۶ جزئیات مبدل های حرارتی گزارش شده است. همان طور که در این جدول مشخص است ۲۶۱۵۳۵ کیلوژول بر ساعت بار حرارتی تجهیزات جانبی گرم و ۱۴۴۲۸۸۴ کیلوژول بر ساعت میزان تجهیزات جانبی سرد مورد نیاز می باشد.

مطابق شکل ۵ اگر استراتژی پینچ و انتگراسیون انرژی مد نظر قرار داده شود بارهای جانبی مصرفی به حداقل می رسد. شکل ۵ الف و ب نمودار Grand Composite Curve و Composite Curve لیست جریان ها را نشان می دهد. مطابق این نمودار در حالت بهینه تمام نیاز گرمایش فرآیند از طریق جریان های فرآیندی قابل تامین است و همچنین این امکان وجود دارد که بار حرارتی تجهیزات جانبی سرد مورد نیاز نیز کاهش یابد. بدین ترتیب مطابق این شکل یک مساله آستانه نهایی یا Threshold مطرح است که در آن مقدار حداقل یکی از تجهیزات جانبی ها صفر شده است و نقطه پینچ فرآیندی مشخصی وجود ندارد. در این واحد دو نقطه پینچ شناسایی شده می شود که هر دو آنها پینچ های تجهیزات جانبی به ترتیب با دمای (گرم ۳۰ درجه سلسیوس، سرد ۲۰ درجه سلسیوس) و (گرم ۴۰ درجه سلسیوس و سرد ۳۰ درجه سلسیوس) می باشد. به جهت انتگراسیون فرآیند و بازیابی حرارت، اتصال جریان ها و مبدل های فرآیندی فرآیند اعمال شده است. بر اساس شکل ۶ سیزده مبدل حرارتی در نظر گرفته شده است که از هشت مبدل تجهیزات جانبی بوده و پنج مبدل فرآیندی و از جهت بازیابی حرارت به کار گرفته شده است. مبدل های فرآیندی طبق آرایش پیشنهادی مبدل های حرارتی به صورت زیر است:

بازدهی بخش الکترولیز حدود ۸۵٪ است. هیدروژن تولیدی وارد واحد متانول می شود. از طرفی میزان برق مصرفی کمپرسورهای واحد متانول حدود ۳۱۸ کیلووات تخمین زده می شود. بدین ترتیب در نهایت متانول تولیدی با انرژی خروجی ۶۵۲ کیلووات بدست می آید که نشان از بازدهی انرژی حدود ۵۵٪ در واحد متانول دارد. سپس متانول تولیدی با حدود ۶۶ کیلووات انرژی گرمایی ترکیب شده و به واحد سنتز دی متیل اتر ارسال می شود تا در نهایت دی متیل اتر با ارزش حرارتی ۷۱۰ کیلووات تولید شود. بدین ترتیب بازدهی تولید دی متیل اتر حدود ۹۹٪ بدست می آید. طبق شکل ۴ الف و رابطه ۱۲ بازدهی انرژی کل فرآیند ۵۱/۲۷٪ می باشد و حدود ۶۷۲ کیلووات از ۱۳۸۴ کیلووات انرژی تلف می شود. مطابق شکل بیشترین اتلاف انرژی در واحد سنتز متانول مشاهده می شود و بیشترین بازدهی انرژی مرتبط با واحد سنتز دی متیل اتر است. لذا بیشترین اثر را بر بازدهی انرژی اتلاف های انرژی واحد سنتز متانول داشته است. به علت فشار بالای مورد نیاز در فرآیند سنتز متانول گاز سنتز تا فشار ۵۱ بار فشرده شده و سپس در جهت رسیدن به راکتور تا دمای ۲۴۰ درجه سلسیوس خنک می شود. سپس خروجی راکتور نیز جهت جداسازی تا دمای ۲۵ درجه سلسیوس خنک شده و گاز وارد بخش جداسازی می شود.

جدول ۶ - جزئیات مبدل‌های حرارتی در واحد

کد مبدل	مبدل	بار حرارتی (کیلوژول بر ساعت)	دمای ورودی	دمای خروجی	نوع
E1	گرم کننده جریان برگشتی آب و الکترولیت	۲۳۱۶۹	۷۵	۸۰	گرم کن
E2	پیش گرم کن راکتور دی متیل اتر	۱۷۱۵۷۸	۲۸	۲۵۰	گرم کن
E3	ریبویلر برج تقطیر جداسازی دی متیل اتر	۶۸۷۳	۱۲۷	۱۴۳	گرم کن
E4	ریبویلر برج تقطیر جداسازی متانول واکنش نداده	۴۱۲۳۸	۷۵	۸۱	گرم کن
E5	خروجی الکترولیز	۱۸۶۷۵	۷۵	۲۵	سرد کننده
E6	خروجی کمپرسور واحد متانول	۲۹۷۷۹۸	۷۰۰	۲۴۰	سرد کننده
E7	خنک کننده گاز سنتز واکنش نداده	۵۲۲۹۳۰	۶۷۴	۲۴۰	سرد کننده
E8	خنک کننده خروجی راکتور متانول	۳۹۹۳۸۶	۲۴۰	۲۵	سرد کننده
E9	خروجی راکتور دی متیل اتر	۴۳۲۲۹	۳۵۰	۱۷۰	سرد کننده
E10	کندانسور برج تقطیر اول	۱۲۱۸۰۳	۴۴	۴۳	سرد کننده
E11	کندانسور برج تقطیر دوم	۵۷۷۳۷	۵۱	۳۳	سرد کننده



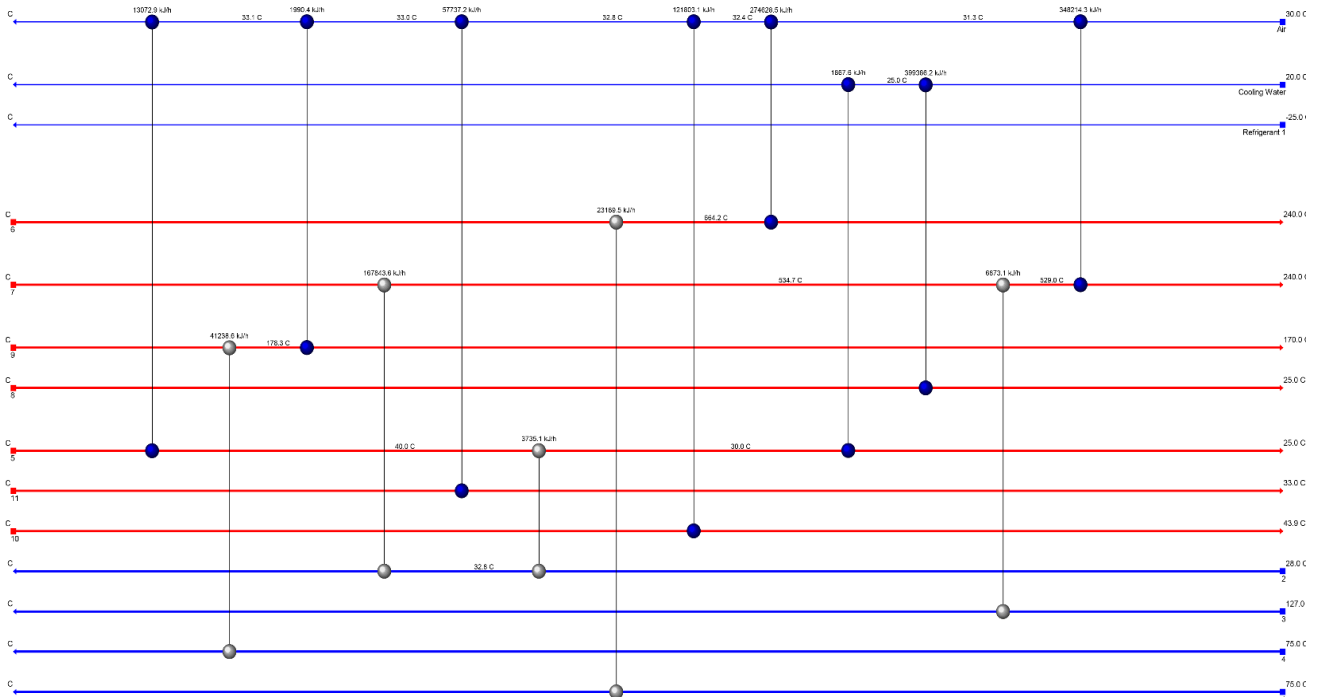
شکل ۵ - نمودار (الف) نمودار composite curve، (ب) نمودار Grand Composite Curve

انتگراسیون باعث شده است که مصرف مبرد به صفر برسد و از سبب بارهای جانبی سرد خارج شود. این بهبود سبب کاهش هزینه‌های انرژی و جاری فرآیند می‌شود. چرا که هزینه‌های خرید انرژی گرم به صفر رسیده و از طرفی مبرد به عنوان یکی از هزینه‌برترین تجهیزات جانبی سرد از چرخه خارج شده است و تمام نیاز واحد از آب و هوا تامین می‌شود.

اعمال سیکل رانکین و انرژی زمین گرمایی

سیال زمین گرمایی یک منبع قابل توجه از انرژی به صورت تجدیدپذیر است. الکتروولایزر ۱ مگاوات برق مصرف می‌نماید که تامین این انرژی از منابع فسیلی سبب افزایش آلاینده‌گی می‌شود. سیکل آلی رانکین به عنوان یک راهکار مناسب برای تولید برق پاک همواره مد نظر است. اما چالش اصلی آن تامین یک منبع انرژی گرم برای تبخیر کننده است. بدین جهت سیال زمین گرمایی با دبی ۱۰ کیلوگرم بر ثانیه وارد یک سیکل آلی رانکین می‌شود که با سیال

- اتصال جریان برگشتی به الکترولیز با جریان خروجی از کمپرسور خوراک واحد متانول
 - اتصال جریان محصول خروجی از راکتور دی متیل اتر با ریبویلر برج تقطیر دوم واحد دی متیل اتر
 - اتصال خوراک پیش گرم شده راکتور دی متیل اتر در دو مرحله ابتدا با جریان داغ واکنش نداده در راکتور سنتز متانول و در مرحله دوم اتصال جریان با هیدروژن خروجی از الکترولیز
 - اتصال ریبویلر برج تقطیر اول واحد دی متیل اتر به جریان گاز داغ خروجی از کمپرسور خوراک واحد متانول
 بر اساس شبکه طراحی شده بار تجهیزات جانبی سرد به ۱۲۹۱۰۰۰ کیلوژول بر ساعت و بار تجهیزات جانبی گرم به صفر رسیده است. بار حرارتی تجهیزات جانبی سرد بین آب و هوای خنک کن تقسیم شده است. این نشان می‌دهد تمام نیاز گرمایش واحد از خود واحد تامین می‌شود و هم زمان میزان مصرف تجهیزات جانبی‌های سرد حدود ۱۱٪ کاهش یافته است. از طرفی



شکل ۶- شبکه مبدل های حرارتی بعد از اعمال انتگراسیون در نرم افزار Aspen Energy (مبدل های سفید: فرآیندی - مبدل های آبی: خنک کننده ها)

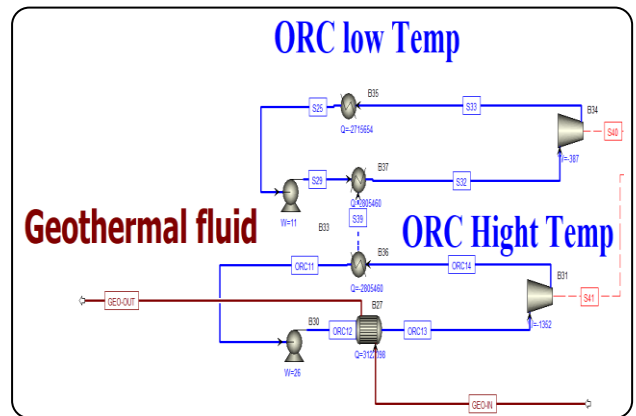
جدول ۷- نتایج شبیه سازی جریان های سیکل های آلی

جریان سیکل آلی	دما (سلسیوس)	فشار (بار)	ترکیب درصد
ORC11	۲۵	۱	R123
ORC12	۲۵	۶	R123
ORC13	۱۲۰	۶	R123
ORC14	۸۲	۱	R123
S29	۵	۱۵	آمونیاک
S32	۹۲	۱۵	آمونیاک
S33	۶۶	۱۰	آمونیاک
S25	۵	۱۰	آمونیاک
Geo -in	۲۱۰	۱	آب
Geo -out	۱۰۰	۱	آب

و مجدد جهت احیا دما و دریافت گرما به زمین تزریق می شود و با دریافت انرژی از زمین دوباره به دمای ۲۱۰ درجه سلسیوس رسیده و به مدار تولید برق بر می گردد. این برق تولیدی توانایی تامین برق الکترولایزر و برق پمپ و کمپرسورهای کل واحد را دارد و از سویی برق اضافه نیز به عنوان برق پاک در اختیار قرار می دهد که در بخش بعدی با جزئیات بیش تری درباره آن صحبت می شود.

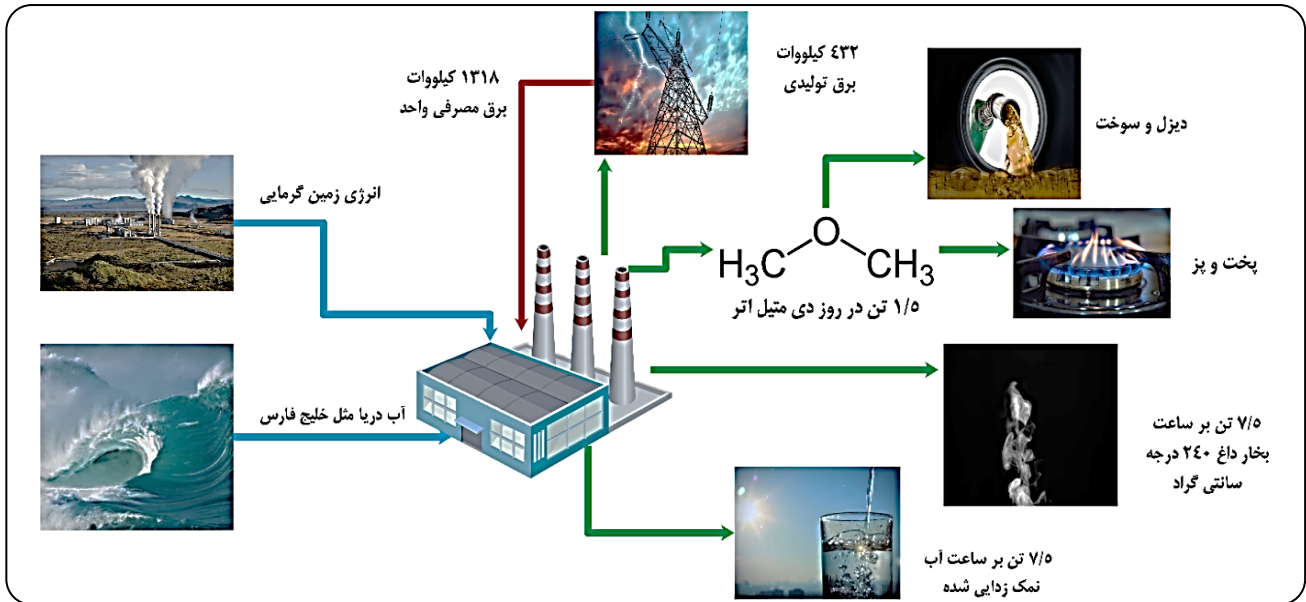
توزیع محصولات و آنالیز انرژی بعد از انتگراسیون

در فرآیند متانول ۵٪ از جریان واکنش ندها (شامل ۶۵٪ مولی هیدروژن و ۳۵٪ مولی CO₂) در دمای ۲۴۰ درجه سلسیوس و فشار ۵۲ بار به عنوان جریان اتلافی و پرچ در نظر گرفته شده است که با در نظر گرفتن یک توربین گازی فشار گاز سنتر خروجی تا ۲ اتمسفر انداخته می شود



شکل ۷- دو سیکل آلی رانکین شبیه سازی شده که با انرژی زمین گرمایی کار می کند.

عامل R123a کار می کند. جدول مشخصات دما و فشار سیال عامل در این سیکل آلی را که توسط نرم افزار اسپن پلاس مطابق شکل ۷ شبیه سازی شده است را نشان می دهد. در سیکل آلی دما بالا حدود ۱۳۵۱ کیلووات برق از طریق توربین تولید می شود. در کندانسور به جهت استفاده از انرژی سیال عامل یک چیلر جذبی در نظر گرفته می شود و یک سیکل آلی دما پایین که با آمونیاک کار می کند راه اندازی می شود. سیال عامل R123a بعد از خروج از توربین انرژی خود را به آمونیاک می دهد و سیکل دوم به کار می افتد. در این سیکل دما پایین حدود ۳۸۶ کیلووات برق نیز بدست می آید. سیال زمین گرمایی نیز که در دمای ۲۱۰ درجه سلسیوس وارد تبخیر کننده سیکل دما بالا شده بود در دمای ۱۰۰ درجه سلسیوس از تبخیر کننده سیکل اول خارج شده



شکل ۸- توزیع محصولات بدست آمده از واحد تجمیع یافته

مازاد از سیال عامل آمونیاک دفع می شود. طبق شبیه سازی صورت گرفته در اسپن پلاس این حرارت می تواند حدود ۱۵ تن در ساعت آب شور دریا را وارد فرآیند نمک زدایی کرده و ۱۴/۴ تن در ساعت آب نمک زدایی شده در دمای ۲۴۰ درجه سلسیوس و حدود ۰/۶ شورابه با غلظت ۹۸٪ نمک بدست آید. این ۱۴/۴ بخار بدست آمده می تواند به دو بخش با نسبت ۵۰٪ مساوی تقسیم شود و ۷/۲ تن بر ساعت بخار داغ جهت گرمایش و ۷/۲ تن آب تازه نمک زدایی شده بدست آید. از این ۷/۲ تن بر ساعت حدود ۰/۲ تن بر ساعت آب جبرانی در الکترولیز تامین می شود. مابقی آب بدست آمده می تواند جهت تولید آب آشامیدنی در اختیار تصفیه خانه ها و شبکه آب شهری قرار گیرد. بازده انرژی در فرآیند انتگراسیون شده طبق رابطه ۱۸ توسط نسبت جریان های مفید انرژی (محصولات) به نسبت انرژی کل ورودی (زمین گرمایی و آب دریا است بدست می آید).

$$\eta = \frac{mDME + LHVDME + H_{steam} + H_{water} + W_{elec}}{H_{geothermal} + H_{sea\ water}} \quad (18)$$

در این رابطه H آنتالپی جریان های بخار و آب تازه خروجی و سیال زمین گرمایی ورودی و آب دریا می باشد. جهت شبیه سازی نمک زدایی آب دریا ۴٪ نمک و ۹۶٪ جرمی آب در نظر گرفته شده است که نزدیک به ترکیب درصد آب خلیج فارس می باشد [۴۰]. مرجع ذکر شده مبنای انتخاب غلظت آب دریا ورودی به فرآیند نمک زدایی می باشد. فرآیند نمک زدایی در نظر گرفته شده در این مطالعه با روش حرارت دهی و تبخیر چند مرحله ای (MSF) کار می کند.

شکل ۹ نمودار سنکی فرآیند انتگراسیون شده را نشان می دهد. مطابق شکل با اعمال سیکل آلی رانکین دما بالا و دما پایین تمام

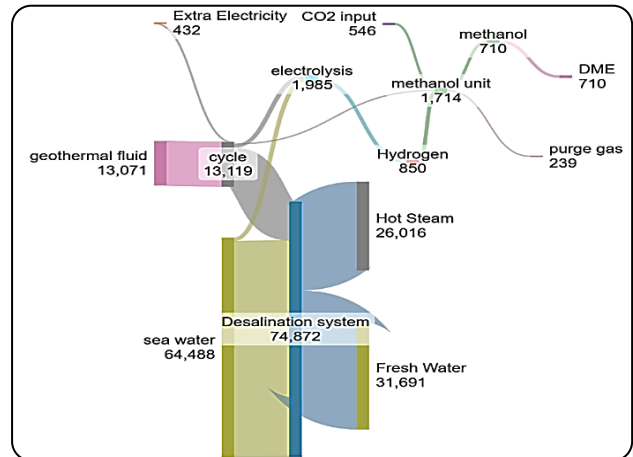
و از این جریان ائتلافی ۱۴ کیلووات برق نیز تولید می شود. با اصلاح فوق در فرآیند و اعمال انتگراسیون فرآیند از دیدگاه پینچ و اعمال سیکل آلی و انرژی زمین گرمایی بهبودهای زیر در فرآیند رخ می دهد:

- صفر شدن بار حرارتی مورد نیاز گرم کننده
- ۱۱٪ کاهش تجهیزات جانبی سرد فرآیند با حذف مبرد (کیلووات)
- تامین ۱۰۰٪ برق مورد نیاز الکترولیز (کیلووات) و ۱۰۰٪ برق مورد نیاز کمپرسورها (کیلووات) و پمپ های موجود در فرآیند
- تولید برق اضافی پاک
- تولید حرارت با تولید بخار از آب
- تولید آب شیرین
- تولید دی متیل اتر به عنوان سوخت

شکل ۸ مقدار دقیق محصولات بدست آمده از فرآیند را پس از اصلاح و اعمال انتگراسیون انرژی نشان می دهد. (این رو متوجه نشدم کدوم شکل است). بر طبق این شکل از دو منبع پاک انرژی زمین گرمایی و آب دریا جهت ورودی های فرآیند استفاده می شود. همچنین CO_2 نیز از صنایع جذب شده و وارد این فرآیند می شود. پس از فرآیند شبیه سازی شده که شرح داده شد ۱/۵ تن در روز دی متیل اتر سبز تولید می شود که یک سوخت پاک و تجدید پذیر برای حمل و نقل به خصوص دیزل و یا منبع انرژی برای پخت و پز به حساب می آید. این میزان دی متیل اتر تولیدی برای راه انداختن ۲۳ کامیون برای یک ساعت کافی می باشد. علاوه بر این ۱۳۱۸ کیلووات برق مصرفی واحد به طور کامل توسط فرآیند سیکل آلی به شکل تجدید پذیر تامین می شود و علاوه بر آن حدود ۴۰۰ کیلووات برق اضافه جهت تزریق به شبکه یا فرآیند بالادست تولید می شود. در سیکل آلی شبیه سازی شده حدود ۱۱ مگاوات انرژی



شکل ۱۰- بازدهی انرژی بخش‌های مختلف فرآیند انتگراسیون شده و فرآیند اولیه



شکل ۹- نمودار سنکی برای فرآیند انتگراسیون شده

آنالیز حساسیت پارامترهای عملیاتی

تغییر پارامترهای عملیاتی مانند دما و فشار مستقیماً بر کیفیت محصول فرآیند اثر گذار است. بدین جهت مطالعه آنالیز حساسیت سبب می‌شود محدوده تغییر مناسب پارامترهای عملیاتی مشخص شود و قضاوت گردد که کدام پارامترها در زمره مهم‌ترین و اثرگذارترین متغیرهای عملیاتی قرار دارد. بدین جهت در هر یک از بخش‌های فرآیند متغیرهای عملیاتی به جهت آنالیز حساسیت در نظر گرفته شده است. در بخش الکترولیز میزان برق مصرفی الکترولیز، در واحد سنتز متانول دما، فشار راکتور و نسبت هیدروژن به CO_2 خوراک راکتور به عنوان پارامترهای مورد بررسی در نظر گرفته شده است. نوع آنالیز حساسیت به کار رفته به این صورت است که پارامتر مورد بررسی ثابت در یک بازه مشخص تغییر کرده و سایر پارامترها در مقدار اولیه ثابت نگه داشته می‌شوند. از آنجا که مدل راکتور دی متیل اتر از نوع راکتور تبدیلی با درصد تبدیل مشخص است دما و فشار اثر قابل توجهی بر میزان دی متیل اتر تولیدی ندارد بدین جهت در لیست پارامترهای عملیاتی آنالیز حساسیت قرار داده نشده است و تنها عامل اثر گذار دبی خوراک ورودی است که آن نیز تابع مشخصات عملیاتی واحد متانول است.

اثر توان مصرفی الکترولیزر

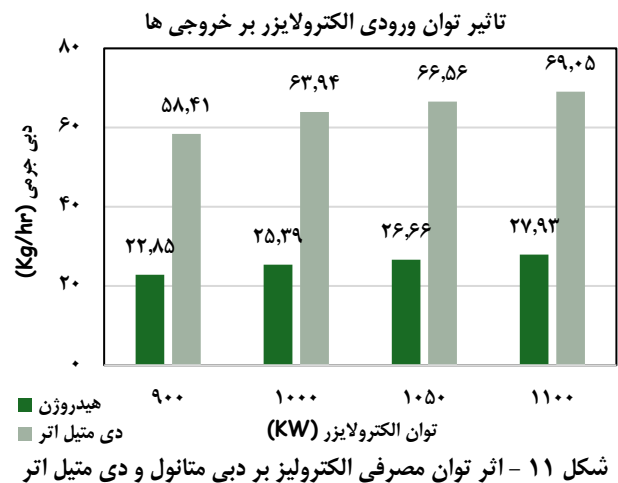
توان مصرفی الکترولیزر در حدود ۱ مگاوات در نظر گرفته شده است. در این بخش فرض شده است میزان برق تامین شده به اندازه ۱۰٪ از حالت پایه شبیه سازی کمتر و بیش تر شود. مطابق شکل ۱۱ با کاهش توان ورودی به اندازه ۱۰٪ مقدار دبی متانول ۱۰٪ کاهش داشته است و به ۲۲/۸۵ کیلوگرم بر ثانیه رسیده است. از سویی با همین میزان کاهش توان ورودی مقدار دبی دی متیل اتر تولیدی حدود ۸/۶٪ کاهش یافته است. در نقطه مقابل با افزایش توان ورودی به ۱۱۰۰ کیلووات مقدار متانول تولیدی ۱۰٪ افزایش یافته و مقدار دی متیل اتر تولیدی نیز ۸٪ افزایش یافته است.

برق مورد نیاز واحد تامین شده است. و برق اضافی نیز در دسترس قرار می‌گیرد. بازده سیکل آلی رانکین شبیه سازی شده حدود ۱۳٪ است و بخش اعظمی از انرژی وارد شده توسط انرژی زمین گرمایی به هوای اطراف یا سیال خنک کننده کندانسور تلف می‌شود. اگر از فرآیند به شکل تجمیع یافته در نظر گرفته شود اما هیچ استفاده‌ای از گرمای خروجی از سیکل که حدود ۱۳ مگاوات می‌باشد نشود بازده انرژی کل فرآیند در حدود ۹٪ بدست می‌آید. زیرا بخش اعظمی از انرژی ورودی زمین گرمایی در حال منتقل شدن به محیط یا هوای خنک کننده است. در فرآیند تجمیع یافته علاوه بر در نظر گرفتن سیکل آلی تولید هم زمان بخار و آب آشامیدنی از طریق نمک زدایی آب دریا و تامین آب الکترولیز نیز از همین بخش در شبیه سازی در نظر گرفته شد که بهبود قابل توجهی در بازدهی کل فرآیند نسبت به حالتی که هیچ گونه انتگراسیونی صورت نگیرد بدست می‌آید. شکل ۱۰ توزیع بازدهی انرژی در بخش‌های مختلف فرآیند را بعد از اعمال انتگراسیون انرژی نشان می‌دهد. همان‌طور که مشخص است با انتگراسیون و استفاده از گرمای اتلافی بازدهی کل انرژی فرآیند از ۵۲٪ تا ۷۷٪ افزایش می‌یابد این بازدهی انرژی در یک فرآیند تجمیع یافته چند منفعت اصلی را نسبت به فرآیندی که هیچ گونه انتگراسیونی ندارد ایجاد می‌کند که به شرح زیر است:

- قطع وابستگی فرآیند به انرژی گرمایی از بیرون
- تامین برق از طریق انرژی‌های تجدید پذیر و تولید برق اضافی
- کاهش CO_2 تولید شده و مصرف CO_2 در فرآیند سنتز متانول
- استفاده از گرمای اتلافی در سیکل رانکین جهت تولید بخار

داغ جهت گرمایش و تولید آب آشامیدنی از آب دریا این نشان می‌دهد که قبل از انتگراسیون به ازای هر ۱ واحد انرژی ورودی ۰/۵ واحد انرژی مفید بدست می‌آید اما با انتگراسیون می‌توان به ازای همین مقدار انرژی ورودی ۰/۷۶ انرژی مفید بدست آورد که این نشان می‌دهد میزان تولید انرژی مفید ۵۲٪ افزایش داشته و اتلاف‌های انرژی تا ۴۸٪ کاهش یافته است.

در دمای کمتر از ۲۲۰ درجه سلسیوس محدودیت‌های سینتیکی مطرح می‌باشد. از آنجا که راکتور در نظر گرفته شده از نوع تعادلی می‌باشد صرفاً مدل سازی ترمودینامیکی واکنش مطرح بوده است و میزان متانول و به دنبال آن دی متیل اتر تولیدی پیوسته افزایش می‌یابد. مطابق شکل ۱۱ با توجه به اثر محدودیت‌های سینتیکی، بازه مطلوب برای در نظر گرفتن تغییرات دمای راکتور متانول ۲۸۰ تا ۲۲۰ درجه سلسیوس می‌باشد که در مرجع [۲۸] به این موضوع اشاره گردیده است. در این بازه یک تعادل مناسب بین ترمودینامیک و سینتیک برقرار است که سبب می‌شود نتایج راکتور تعادلی در این بازه دارای اعتبار باشد. مطابق شکل ۱۲ الف با ۶۰ درجه سلسیوس کاهش دمای راکتور از ۲۸۰ تا ۲۲۰ درجه سلسیوس دبی متانول تولید شده در حدود ۳۳٪ افزایش می‌یابد. به عبارتی با ۲۰٪ کاهش دما ۳۳٪ بهبود در تولید متانول رخ می‌دهد. این در حالی است که با این کاهش دما مقدار افزایش دی متیل اتر در حدود ۳۱٪ است. این نشان می‌دهد کاهش دما به نفع هردو فرآیند است اما حساسیت مقدار متانول تولید شده به تغییرات دمای راکتور سنتز متانول مقداری از دبی دی متیل اتر اندکی بیش تر است. نتایج توصیه می‌کند که دمای هردو راکتور تا محدوده ۲۲۰ درجه سلسیوس کاهش یابد تا ظرفیت تولید افزایش یابد. کاهش بیش تر دما سبب کاهش فعالیت کاتالیست و پایین آن سرعت واکنش می‌شود. برای تحلیل جامع تر این بخش از دما می‌بایست در مدل سازی راکتور اثر سینتیک واکنش هم دیده شود. مطابق شکل ۱۲ ب، فشار پارامتری است که اثر کاملاً مستقیم بر میزان دبی هر دو محصول متانول و دی متیل اتر دارد. مطالعات نشان می‌دهد که فشار بالای ۵۰ اتمسفر فشار ایده آل و مورد نیاز است برای بازدهی بهتر راکتور متانول می‌باشد. همان طور که مشخص است با افزایش فشار راکتور متانول دبی هر دو محصول پیوسته افزایش می‌یابد. حتی با افزایش فشار راکتور متانول از ۵۰ تا ۷۰ بار شیب تغییرات دبی متیل اتر از متانول نیز بیش تر است. افزایش فشار چالش‌های خاص خود را نیز دارد. افزایش فشار راکتور به اندازه ۲۰٪ باعث می‌شود که برق مورد نیاز کمپرسور متانول نیز به همین میزان افزایش یابد. با توجه به آنکه در واحد مقداری برق اضافی نیز موجود است یک راهکار می‌تواند استفاده از این انرژی جهت افزایش فشار باشد. اما از سویی افزایش فشار سبب نصب کمپرسورهای بیش تر و بزرگ تر، نصب جداساز مایع و گاز و نصب سیستم سرد کننده قوی تری می‌شود که این مجموعه دلایل هزینه‌های سرمایه‌گذاری و حتی انرژی افزایش می‌دهد. جهت قضاوت آنکه آیا این تغییرات به سوددهی بیشتر واحد منتهی می‌شود یا خیر یک آنالیز اقتصادی دقیق مورد نیاز است. شکل ۱۲ ج، اثر ترکیب درصد خوراک گازی راکتور متانول را نشان می‌دهد. طبق این شکل در ابتدا با افزایش نسبت هیدروژن به CO₂ مقدار تولید هر دو محصول پیوسته افزایش پیدا می‌کند.



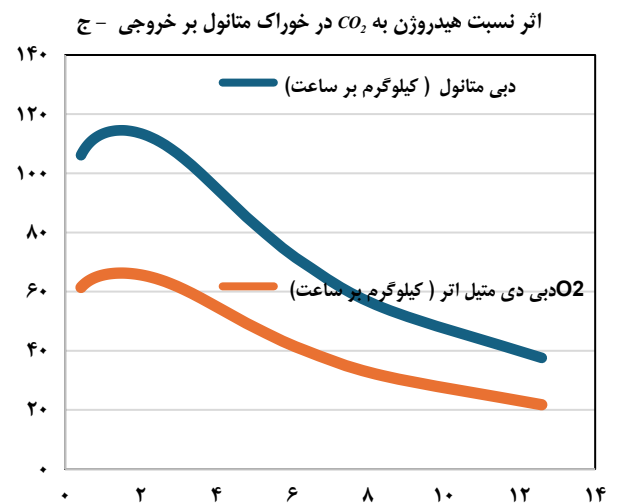
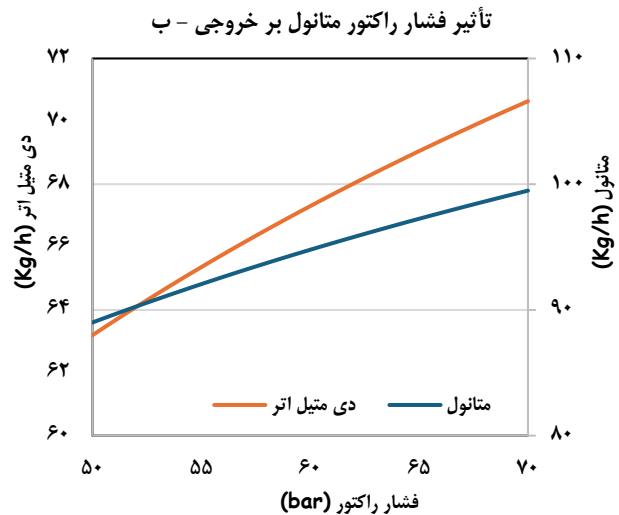
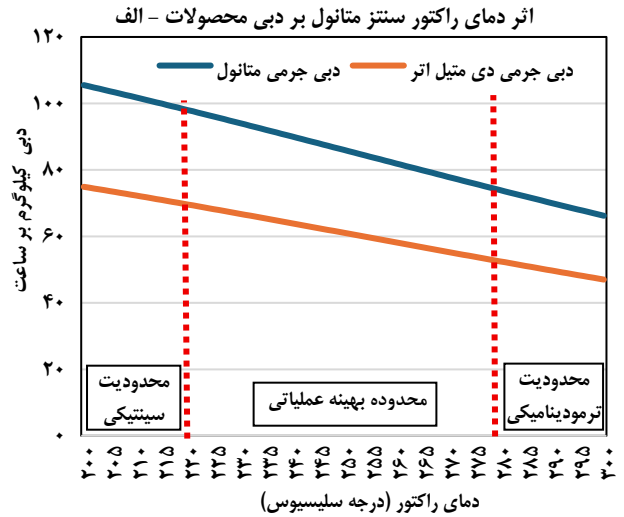
این یافته‌ها نشان می‌دهد کاهش یا افزایش توان ورودی الکترولایزر مستقیماً مقدار دبی متانول و دی متیل تولید شده کم یا زیاد می‌کند. علت امر آن است که با افزایش میزان توان الکترولایزر دبی هیدروژن تولید شده نیز افزایش می‌یابد. هیدروژن خوراک واحد متانول می‌باشد. لذا با افزایش هیدروژن تولید شده تعادل ترمودینامیکی واکنش سنتز متانول به سمت مصرف بیش تر هیدروژن جا به جا شده و متانول تولیدی افزایش می‌یابد. از آن سو متانول نیز مستقیماً به دی متیل تبدیل می‌شود و افزایش مقدار آن در درصد تبدیل مشخص از راکتور دی متیل اتر سبب افزایش متانول مصرفی و تولید بیش تر دی متیل اتر می‌شود. نتایج نشان می‌دهد تغییر ۱۰٪ در توان الکترولایزر با همین نسبت بر مقدار تولید شده اثر می‌گذارد اما اثر آن بر مقدار دی متیل اتر کمتر می‌باشد. این نشان می‌دهد علی‌رغم تأثیر هردو پارامتر دبی متانول حساسیت بیش تری به توان الکترولایزر دارد. این نشان می‌دهد افزایش توان الکترولایزر یک تأثیر مثبت در بهبود میزان تولید محصول است. از آنجا که اکنون در فرآیند حدود ۴۳۲ کیلووات برق اضافی موجود است این پتانسیل وجود دارد که حتی تا ۲۰ یا ۳۰٪ میزان توان الکترولایزر را افزایش داد و میزان دبی دی متیل اتر تولید شده را افزایش داد. البته با افزایش دبی هیدروژن - متانول و دی متیل اتر برق مصرفی واحد متانول نیز افزایش می‌یابد و می‌بایست این افزایش توان الکترولایزر در محدوده‌ای باشد تا کل برق اضافی موجود بتواند نیاز واحد را تامین نماید.

اثر پارامترهای عملیاتی راکتور سنتز متانول

از آنجا که هردو فرآیند سنتز متانول و سنتز دی متیل اتر گرمازا می‌باشند کاهش دما از جهت ترمودینامیکی به نفع هر دو واکنش است. زیرا با کاهش دما تعادل در جهت تولید گرما جا به جا شده و به نفع محصولات تغییر می‌کند. از سویی باید توجه داشت که در دمای کمتر از ۲۲۰ درجه سلسیوس کاتالیست فرآیند سنتز متانول فعالیت کمی دارد و سرعت واکنش کاهش می‌یابد. به عبارتی

وقتی این نسبت به محدوده $1/5$ تا $2/5$ وارد می‌شود یک رشد کند داشته و به محدوده بیشینه خود می‌رسد. بعد از این محدوده با شیبی تند میزان تولید هردو محصول کاهش می‌یابد. علت این رفتار آن است که تا یک نسبت مشخص تعادل ترمودینامیکی واکنش میل به مصرف هیدروژن و CO_2 دارد. از آنجا که CO_2 ماده محدود کننده واکنش است تا یک مقدار مشخص از دی بی آن واکنش به سمت تولید محصول حرکت می‌کند. اما وقتی میزان دی بی CO_2 شود و نسبت هیدروژن به کربت افزایش یابد تعادل به جای تولید محصول بیش تر جا به جا شده و به سمت واکنش دهنده ها منتقل می‌شود. بدین ترتیب تولید هر دو محصول کاهش می‌نماید. بر اساس نتایج بدست آمده نسبت تقریباً $1/5$ تا $1/6$ مقدار تولید محصول را در بهینه ترین حالت ممکن قرار می‌دهد. لازم به ذکر است که دی بی متانول به تغییرات ترکیب درصد گاز سنتز حساسیت بیش تری نشان می‌دهد. در شرایط پایه نسبت ترکیب درصدها در حدود $2/5$ می‌باشد که یک راه جهت نزدیک شدن به محدوده بهینه افزایش دی بی CO_2 می‌باشد. با توجه به حضور منابع عظیم تولید کننده کربن این امر مورد غیر قابل دسترسی نمی‌باشد و می‌تواند پیاده سازی شود. اما از آنجا که دی بی خوراک مقداری افزایش می‌یابد بار انرژی کمپرسورها و بار حرارتی فرآیند را مقداری افزایش داده و دستخوش تغییر قرار می‌دهد.

بر اساس نتایج بدست آمده از آنالیز حساسیت با تغییر پارامترهای عملیاتی می‌توان بهبودهایی در فرآیند انتگراسیون شده ایجاد کرد. بدین ترتیب میزان بار الکترولایزر در حد 10% افزایش پیدا کرده و به $1/1$ مگاوات می‌رسد. دمای راکتور سنتز متانول روی 200 درجه سلسیوس قرار داده می‌شود و از سویی نسبت هیدروژن و CO_2 روی مقدار بهینه $1/67$ تنظیم می‌شود. با این تغییرات مقدار دی بی محصول دی متیل افزایش داشته و بر روی بازدهی انرژی نیز مقداری اثر گذار است. مطابق شکل ۱۳ با به کار بستن راهکارهای آنالیز حساسیت میزان دی بی تولید دی متیل اتر از 560 تن در سال به 740 تن در سال می‌رسد که این رشد 32% را بر میزان محصول نشان می‌دهد. از سویی برق مصرفی کمپرسورها 64 کیلووات افزایش می‌یابد که این مهم از 433 کیلووات برق اضافی تامین می‌شود. بدین جهت برق اضافی موجود در واحد حدود 15% کاهش می‌یابد. از آن سو با افزایش دی بی متانول ارزش حرارتی محصول خروجی نیز از حدود 710 کیلووات به حدود 1036 کیلووات افزایش پیدا می‌کند. بر آیند این نتایج بازدهی انرژی را به مقدار بسیار اندکی بهبود می‌دهد و از $75/3\%$ به $75/7\%$ می‌رساند. اگر هدف تولید برق اضافی بیش تر باشد عملیات فرآیند قبل از نتایج آنالیز حساسیت ترجیح داده می‌شود. اما اگر هدف اندکی بازدهی انرژی بیش تر و افزایش قابل توجه بر ظرفیت تولید دی متیل اتر باشد عملیات فرآیند بعد از در نظر گرفتن آنالیز حساسیت مورد توجه خواهد بود.



شکل ۱۲- اثر پارامترهای عملیاتی راکتور سنتز متانول بر دی بی متانول و دی متیل اتر. الف) دمای راکتور (ب) فشار راکتور (ج) نسبت CO_2 و هیدروژن در خوراک

جدول ۸ - نرخ و ترکیب درصد جریان‌های شبیه‌سازی شده در فرآیند یکپارچه شده

نام جریان	دبی مولی کیلومول بر ساعت	% مولی متانول	% مولی هیدروژن	% مولی CO ₂	% مولی آب	% مولی دی‌متیل اتر	% مولی آمونیاک	% مولی مبرد	% مولی KOH	% مولی اکسیژن
Stack in	۶۳/۴۷	-	-	-	۸۵	-	-	-	۱۵	-
KOH-H2	۱۶/۷۲	-	-	-	۶۰	-	-	-	۴۰	-
KOH-O2	۴۶/۷۵	-	-	-	۹۳	-	-	-	۷	-
H2-Stack	۳۰/۵۷	-	۴۵	-	۳۳	-	-	-	۲۱	-
O2-Stack	۳۹/۸۵	-	-	-	۷۵	-	-	-	۷	۱۷
H2-Prod	۱۳/۸۵	-	۱۰۰	-	-	-	-	-	-	-
O2-Prod	۶/۹۲	-	-	-	-	-	-	-	-	۱۰۰
CO2-INL	۸/۳	-	-	۱۰۰	-	-	-	-	-	-
S22	۲۲/۱۵	-	۶۲	۳۸	-	-	-	-	-	-
S7	۲۹/۳۴	-	۶۲	۳۸	-	-	-	-	-	-
S8	۵۱/۴۹	-	۴۸	۵۲	-	-	-	-	-	-
S9	۴۴/۰۹	۹	۳۱	۵۱	۸	-	-	-	-	-
S13	۴۰/۱۹	۶	۳۴	۵۶	۳	-	-	-	-	-
S14	۳/۹	۳۰	-	-	۷۰	-	-	-	-	-
S16	۱۷/۳	۱۴	۸۰	-	۶	-	-	-	-	-
CO2-UN	۲۲/۸۸	-	-	۱۰۰	-	-	-	-	-	-
H2-UN	۱۳/۷۸	-	۱۰۰	-	-	-	-	-	-	-
S18	۳/۵۱	۷۲	-	-	۲۸	-	-	-	-	-
S19	۲/۵۴	۱۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
S20	۰/۹۷	-	-	-	۱۰۰	-	-	-	-	-
S21	۱/۱۵	۱۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
S23	۲/۷۵	-	-	-	۱۰۰	-	-	-	-	-
WAT1	۳/۷۲	-	-	-	۱۰۰	-	-	-	-	-
S24	۳/۶۹	۱۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
METH	۴/۵۳	۹۹/۵	-	-	-	۰/۵	-	-	-	-
S17	۴/۵۳	۴۰	-	-	۲۰	۴۰	-	-	-	-
DME	۱/۸۲	-	-	-	-	۱۰۰	-	-	-	-
S30	۲/۷	۳۲	-	-	۶۸	-	-	-	-	-
S31	۰/۸۳	۹۷	-	-	-	۳	-	-	-	-
WAT2	۱/۸۷	۱	-	-	۹۹	-	-	-	-	-
GEO in	۳۹۹۶	-	-	-	۱۰۰	-	-	-	-	-
GEO out	۳۹۹۶	-	-	-	۱۰۰	-	-	-	-	-
ORC11	۱۳۰۷	-	-	-	-	-	-	۱۰۰	-	-
S32	۱۷۶۱	-	-	-	-	-	۱۰۰	-	-	-

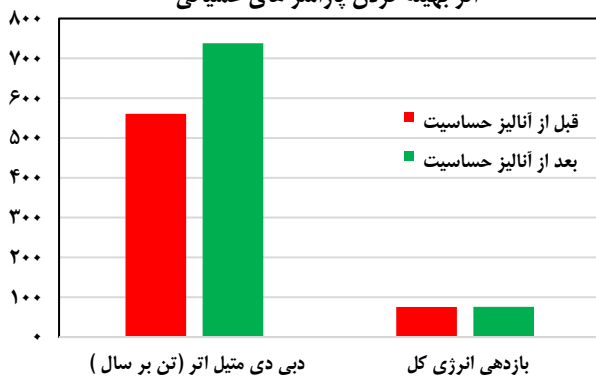
نرخ جریان‌های شبیه‌سازی شده

در شکل ۲ جریان‌های شبیه‌سازی شده در فرآیند نام‌گذاری و مشخص شده‌اند. در این بخش به جهت روشن شده جزئیات فرآیند برای خواننده نرخ جریان‌ها و ترکیب درصد آن‌ها در ادامه در جدول ۸ گزارش شده است. در این جدول دبی‌ها به صورت مولی بر حسب کیلومول بر ساعت و ترکیب درصدها به صورت % مولی گزارش شده‌اند.

نتیجه‌گیری

نیاز روز افزون به انرژی سبب می‌شود که پژوهشگران به دنبال راه‌حل‌های کم‌هزینه، پاک و پایدار برای انرژی باشند.

اثر بهینه‌کردن پارامترهای عملیاتی



شکل ۱۳- مقایسه بازدهی انرژی و دبی دی‌متیل اتر بعد از اعمال راهکارهای آنالیز حساسیت و شرایط پایه فرآیند

آلایندگی و هزینه‌های آن به شکل دقیق‌تر مشخص شود. از سویی نیاز به توضیح است که به علت عدم بررسی‌های اقتصادی و زیست محیطی و آنالیز انرژی پایدار بودن و به صرفه بودن و دوستدار محیط زیست بودن راهکار ارائه شده نیاز به مطالعه و امکان سنجی همه جانبه دارد و ادعای این مقاله مبتنی بر توجیه پذیر بودن ایده استفاده شده از جهت انرژی می‌باشد. آنالیز 4E برای این کار به همراه بهینه سازی یکی از اهداف گروه نویسندگان این مقاله برای آینده می‌باشد. تجهیزات کلیدی مانند الکترولایزرها، کمپرسورها و سیکل‌های رانکین دارای هزینه‌های سرمایه‌ای بالایی هستند. با این حال، باید توجه داشت که رویکرد یکپارچه سازی فرآیند به دنبال افزایش ارزش افزوده و کاهش هزینه‌های عملیاتی در بلندمدت است. تولید همزمان دی‌متیل اتر (DME)، برق، بخار و آب شیرین باعث می‌شود که درآمد حاصل از فروش چندین محصول، هزینه‌های اولیه را جبران کند. این مدل اقتصادی پایدارتر از سیستم‌های تک‌محصولی است. هزینه‌های الکترولایزرهای PEM و سایر تجهیزات کلیدی به دلیل پیشرفت‌های سریع در حال کاهش است. انتظار می‌رود با افزایش مقیاس تولید این تجهیزات، هزینه‌های سرمایه‌ای در آینده نزدیک به شدت پایین بیاید. این روند به طور غیرمستقیم در تحلیل‌های اقتصادی لحاظ شده است. سیستم‌های پیشنهادی، به ویژه الکترولایزرها و سیکل‌های رانکین، به صورت ماژولار قابل طراحی و گسترش هستند. این به این معنی است که می‌توان با افزودن ماژول‌های بیشتر، ظرفیت تولید را به سادگی افزایش داد، بدون اینکه نیاز به بازطراحی کامل سیستم باشد. محدودیت‌های جغرافیایی منابع زمین‌گرمایی یک واقعیت غیرقابل انکار است. با این حال، در مناطقی که منابع زمین‌گرمایی با دمای مناسب و پایدار وجود دارد، این سیستم می‌تواند منبع انرژی بسیار پایدار باشد. برخلاف انرژی خورشیدی یا بادی که نوسان دارند، انرژی زمین‌گرمایی به صورت ۲۴ ساعته در دسترس است و فرآیند را پایدار نگه می‌دارد. نکته مهم این است که مدل مفهومی این سیستم می‌تواند با سایر منابع انرژی تجدیدپذیر مانند انرژی خورشیدی یا بادی نیز سازگار شود. به عنوان مثال، در مناطقی که انرژی زمین‌گرمایی در دسترس نیست، می‌توان از برق تولیدی از نیروگاه‌های خورشیدی یا بادی برای تأمین انرژی الکترولایزرها استفاده کرد. این سیستم به عنوان یک پلتفرم انعطاف‌پذیر طراحی شده است، و یک راه‌حل محدود به یک منبع انرژی خاص نمی‌باشد. در نهایت، ما معتقدیم که این مطالعه یک تحلیل پایه و نقطه شروع برای بررسی یک رویکرد نوآورانه است و به هیچ وجه ادعای ارائه یک راه‌حل تجاری کامل را ندارد.

انرژی‌های تجدید پذیر در شکل‌های مختلف‌های می‌تواند برای رسیدن به این هدف کمک کننده باشد. به خصوص اگر استفاده از انرژی‌های تجدیدپذیر به صورتی پیاده سازی شود که بتواند شکل‌های مختلف انرژی اعم از برق، سوخت، گرمایش و ... را فراهم کند. در این پژوهش برای رسیدن به این هدف شبیه سازی تولید دی متیل اتر به عنوان یک سوخت پاک برای موتورهای دیزل و پخت و پز مورد هدف قرار گرفت. برای تولید دی متیل اتر از متانول، نسبت به شبیه سازی تولید متانول سبز از طریق ترکیب CO_2 و هیدروژن بدست آمده از الکترولیز آب دریا اقدام شد. جهت تأمین برق الکترولایزر آب دو سیکل آلی رانکین جهت تأمین برق از طریق گرمای سیال زمین گرمایی در نظر گرفته شد. نتایج نشان داد این فرآیند جمع شده می‌تواند برق خود را به شکلی پاک و از طریق انرژی تجدیدپذیر زمین گرمایی تأمین نماید. علاوه بر آن دی متیل اتر را بر پایه هیدروژن سبز تولید و سبب مصرف CO_2 و کربن‌زدایی بیش‌تر می‌شود. بدین ترتیب در وهله اول سوخت پاک مانند دی متیل به علاوه برق اضافی جهت تزریق به شبکه در فرآیند حاصل شد. همچنین از اتلاف‌های حرارتی سیکل رانکین امکان تولید هم زمان بخار داغ برای گرمایش و نمک زدایی آب دریا برای تولید آب آشامیدنی فراهم شد. نتایج نشان داد بازده انرژی بدون انتگراسیون اختلاف بسیار فاحشی با زمانی که فرآیند به شکل جمع یافته بررسی می‌شود دارد و حدود ۲۶٪ بهبود در بازدهی انرژی کل فرآیند مشاهده شد. رویکرد پینچ در طراحی شبکه مبدل‌های حرارتی سبب شد نیاز به سیال گرم کننده در فرآیند از بین برود و نیاز به گرمایش از جریان‌های فرآیندی فراهم گردد. در انتها آنالیز حساسیت انجام شده بر روی دما، فشار راکتور متانول، ترکیب درصد خوراک واحد متانول و میزان توان مصرفی الکترولیز نشان داد که کاهش دما، افزایش فشار و افزایش توان الکترولایزر سبب افزایش ظرفیت تولید دی متیل اتر می‌شود. همچنین در این آنالیز یک نسبت بهینه برای ترکیب درصد خوراک واحد متانول بدست آمد. با این رویکردها ظرفیت تولید دی متیل اتر از حالت قبل از آنالیز حساسیت حدود ۳۳٪ افزایش یافت و بازده انرژی اندکی در حدود ۰/۵٪ بهبود یافت. نتایج نشان داد شبیه سازی صورت گرفته از این واحد جمع یافته با دقت خوبی خروجی‌ها را پیش بینی می‌نماید و نشان می‌دهد که این ایده با بازدهی انرژی مناسبی یک سید متنوع از انواع مشتقات انرژی اعم از سوخت، برق، گرمایش و آب تازه را بر اساس انرژی تجدیدپذیر زمین گرمایی و آب دریا در اختیار قرار می‌دهد. این مطالعه جهت بررسی‌های تکمیلی در آینده نیاز به تحلیل کامل انرژی اقتصادی و محیط زیستی دارد تا میزان

حروف یونانی		فهرست علائم و نشانه‌ها	
φ_i	ضریب فوگاسیته	ΔH_{rm}	آنتالپی استاندارد واکنش (ژول بر مول)
f_i	فوگاسیته	ΔS_{rm}	آنتروپی استاندارد واکنش (ژول بر مول)
f_i^0	فوگاسیته استاندارد	ΔG_{rm}	انرژی آزاد گیبس واکنش (ژول بر مول)
η	بازدهی	T	دما (سلسیوس)
μ	پتانسیل شیمیایی	P	توان (وات)
		Q	گرما (ژول)
		I	شدت جریان (آمپر)
		n_i	تعداد مول جز دلخواه i
		G^t	انرژی گیبس
		G^0	انرژی گیبس استاندارد
		P_i	فشار جزئی جز i

منابع

- [1] Stewart K., Lair L., De La Torre B., Phan N.L., Das R., Gonzalez D., Lo R.C., Yang Y., Modeling and Optimization of an Alkaline Water Electrolysis for Hydrogen Production, in: 2021 IEEE Green Energy and Smart Systems Conference (IGESSC), IEEE, Long Beach, CA, USA, 1-6 (2021).
- [2] Amores E., Sánchez M., Rojas N., Sánchez-Molina M., Renewable Hydrogen Production by Water Electrolysis, in: Sustainable Fuel Technologies Handbook, Elsevier, 271-313 (2021).
- [3] Papadias D.D., Peng J.-K., Ahluwalia R.K., Hydrogen Carriers: Production, Transmission, Decomposition, and Storage, *International Journal of Hydrogen Energy*, **46**: 24169-24189 (2021).
- [4] Niu J., Liu H., Jin Y., Fan B., Qi W., Ran J., Comprehensive Review of Cu-Based CO₂ Hydrogenation to CH₃OH: Insights from Experimental Work and Theoretical Analysis, *International Journal of Hydrogen Energy*, **47**: 9183-9200 (2022).
- [5] Chernyak S.A., Corda M., Dath J.-P., Ordonsky V.V., Khodakov A.Y., Light Olefin Synthesis from a Diversity of Renewable and Fossil Feedstocks: State-of-the-Art and Outlook, *Chem. Soc. Rev.*, **51**: 7994-8044 (2022).
- [6] Fasihi M., Breyer C., Global Production Potential of Green Methanol Based on Variable Renewable Electricity, *Energy Environ. Sci.*, **17**: 3503-3522 (2024).
- [7] Muazzam Y., Yousaf M., Zaman M., Elkamel A., Mahmood A., Rizwan M., Adnan M., Thermo-Economic Analysis of Integrated Hydrogen, Methanol and Dimethyl Ether Production Using Water Electrolyzed Hydrogen, *Resources*, **11**: 85 (2022).
- [8] Abousalmia A., Karagoz S., Design and Simulation of an Integrated Process for the Co-Production of Power, Hydrogen, and DME by Using an Electrolyzer's System, *Energies*, **18**: 2446 (2025).
- [9] Xu W., Yang L., Niu Z., Wang S., Wang Y., Zhu Z., Cui P., Thermodynamic and Economic Analysis of a Novel DME-Power Polygeneration System Based on the Integration of Biomass Gasification and Alkaline Electrolysis of Water for Hydrogen Production, *Energy*, **314**: 134185 (2025).

- [10] Alotaibi M.M., Alturki A.A., Optimizing Renewable Energy Integration for Sustainable Fuel Production: A Techno-Economic Assessment of Dimethyl Ether Synthesis via a Hybrid Microgrid-Hydrogen System, *Fuels*, **5**: 176-209 (2024).
- [11] Schreiber A., Troy S., Weiske S., Samsun R.C., Peters R., Zapp P., Kuckshinrichs W., Comparative Well-to-Tank Life Cycle Assessment of Methanol, Dimethyl Ether, and Oxymethylene Dimethyl Ethers Via the Power-to-Liquid Pathway, *Journal of CO₂ Utilization*, **82**: 102743 (2024).
- [12] De Falco M., Natrella G., Capocelli M., Popielak P., Sołtysik M., Wawrzyńczak D., Majchrzak-Kucęba I., Exergetic Analysis of DME Synthesis from CO₂ and Renewable Hydrogen, *Energies*, **15**: 3516 (2022).
- [13] Xu W., Zhang J., Wu Q., Wang Y., Zhao W., Zhu Z., Wang Y., Cui P., Energy, Exergy and Economic (3E) Analyses of a Novel DME-Power Polygeneration System with CO₂ Capture Based on Biomass Gasification, *Applied Energy*, **374**: 124031 (2024).
- [14] Bianchi F.R., Risso R., Cardona L., Bove D., Cannizzaro F., Bonardi L., Palmisani E., Bosio B., Feasibility analysis of e-Hydrogen, e-Ammonia and e-Methanol Synthesis Compared with Methane to Fuel Production, *Fuel*, **384**: 133938 (2025).
- [15] Im-orb K., Piroonlerkgul P., Sustainability Analysis of the Bio-Dimethyl Ether (Bio-DME) Production Via Integrated Biomass Gasification and Direct DME Synthesis Process, *Renewable Energy*, **208**: 324-330 (2023).
- [16] Perera J.A., Ng Z.W., Salema A.A., Chew I.M.L., Exergy Analysis of Integrated Methanol and Dimethyl-Ether Co-production Towards Net Zero Waste Emission, *Bioenerg. Res.*, **17**: 2282-2298 (2024).
- [17] Zhang L., Asadollahzadeh M., Seikh A.H., Agrawal M.K., Minzha W., Proposal and Comprehensive Study of an Integrated Polygeneration Process Relying on Landfill Gas, Renewable Hydrogen, and binary geothermal cycle, *Separation and Purification Technology*, **327**: 124897 (2023).
- [18] Mirshafiee S.A., Kahani M., Ahmadi M.H., Energy and Exergy Analysis of a Multi-Generation System for Power, Freshwater, and Hydrogen Production Using Geothermal Water, *J Therm Anal Calorim* (2025).
- [۱۹] آرمین اوکاتی، محمدرضا خانی، بابک شکری، شبیه‌سازی فرآیند گازی‌سازی پلاسمایی زیست‌توده با استفاده از نرم‌افزار اسپین‌پلاس، نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران، **۴۲(۲)**: ۳۶۵ تا ۳۷۲ (۱۴۰۲).
- [20] Adnan M.A., Fajar Mukti N.I., Dimethyl Ether as a Future Energy Vector: Economic Feasibility and Environmental Sustainability, *Renewable Energy*, **256**: 124043 (2026).
- [21] Kofler R., Campion N., Hillestad M., Meesenburg W., Clausen L.R., Techno-Economic Analysis of Dimethyl Ether Production from Different Biomass Resources and Off-Grid Renewable Electricity, *Energy Fuels*, **38**: 8777-8803 (2024).
- [22] Mangalindan J.R., Mahnaz F., Vito J., Suphavilai N., Shetty M., Tandem Cu/ZnO/ZrO₂-SAPO-34 System for Dimethyl Ether Synthesis from CO₂ and H₂: Catalyst Optimization, *Techno-Economic, and Carbon-Footprint Analyses, ACS Eng., Au* **5**: 267-283 (2025).

- [23] Quang Vinh H., Phi Yen D.H., Tan L.M., Viet T.T., techno-Economic and Environmental Assessment for a Polygeneration and Low Emission Bio-Dme Production from Rice Straw in Vietnam, *AEJ*, **15**: 65-76 (2025).
- [24] Styring P., Sanderson P.W., Gell I., Skorikova G., Sánchez-Martínez C., Garcia-Garcia G., Sluijter S.N., Carbon Footprint of Power-to-X Derived Dimethyl Ether Using the Sorption Enhanced DME Synthesis Process, *Front. Sustain.*, **3**: 1057190 (2022).
- [25] Peng S., Tang Y., Tang J., Wang X., Liang X., Huang H., Zheng Z., Ma X., Renewable Dimethyl Ether Production Under the Integration from Municipal Solid Waste Oxy-Fuel Combustion and Water Electrolyze: Insights from advanced exergy and exergoeconomic perspectives, *International Journal of Hydrogen Energy*, **141**: 253-265 (2025).
- [26] Zhang S., Wang S., Cui Z., Li K., Tian W., Co-Gasification Polygeneration System Based on Multi-Criteria Evaluation and Machine Learning Optimization for the Synergistic Valorization of Biomass and Plastic Waste, *Energy Conversion and Management*, **345**: 120334 (2025).
- [27] Zhou J., Ren J., Zhu L., He C., Turning Waste Into Energy Through a Solar-Powered Multi-Generation System With Novel Machine Learning-Based Life Cycle Optimization, *Chemical Engineering Science*, **307**: 121348 (2025).
- [۲۸] فرید آل عزیز، نسیم طاهونی، محمدحسن پنجه شاهی، تامین هیدروژن و الکتریسیته موردنیاز یک واحد تولید الفین با استفاده از انرژی‌های تجدیدپذیر، *نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران*، **۴۳(۲)**: ۹۳ تا ۱۱۱ (۱۴۰۳).
- [۲۹] مجید سعیدی، مریم صفری پور، بررسی روش‌های بازیابی و مدیریت گازهای دورریز واحدهای صنعتی به منظور بازگشت به چرخه انرژی، *نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران*، **۴۱(۴)**: ۳۲۷ تا ۳۵۴ (۱۴۰۱).
- [۳۰] حانیه پورعلی، پیمان تقوی ایشکوه، رضا خوش بین، عرفان آقایی، آنالیز تعادل ترمودینامیکی تولید هیدروژن به روش فرایند ریفورمینگ خشک متان با استفاده از روش حداقل سازی انرژی آزاد گیبس، *نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران*، **۴۲(۲)**: ۴۰۵ تا ۴۱۷ (۱۴۰۲).
- [31] Keshavarz H., Heydarinasab A., Vaziri A., Ardjmand M., Multi Objective Optimization of Shell and Tube Heat Exchanger with PCM Based Nanofluid Using Exergy Analyses and Adoptive Genetic Algorithm, *Iran. J. Chem. Chem. Eng. (IJCCE)*, **43(10)**: 3772-3783 (2024).
- [32] Niksirat M., Riyazat E., Rezakhani N., Feasibility Assessment of Using Refuse Derived Fuel as an Energy Source of the Multi-Effect Desalination with Thermal Vapor Compression of Seawater Desalination System, *Iran. J. Chem. Chem. Eng. (IJCCE)*, **43(8)**: 3079-3087 (2024).
- [33] Beck A., Newton M.A., Van De Water L.G.A., Van Bokhoven J.A., The Enigma of Methanol Synthesis by Cu/ZnO/Al₂O₃-Based Catalysts, *Chem. Rev.*, **124**: 4543-4678 (2024).
- [34] Bi X., Wang G., Cui D., Qu X., Shi S., Yu D., Cheng M., Ji Y., Simulation Study on the Effect of Temperature on Hydrogen Production Performance of Alkaline Electrolytic Water, *Fuel*, **380**: 133209 (2025).
- [35] Puig-Gamero M., Argudo-Santamaria J., Valverde J.L., Sánchez P., Sanchez-Silva L., Three Integrated Process Simulation Using Aspen Plus®: Pine Gasification, Syngas Cleaning and Methanol Synthesis, *Energy Conversion and Management*, **177**: 416-427 (2018).

- [36] Moura C.P.C., De Araujo Filho M.A., Villardi H.G.D., Cavalcante R.M., Young A.F., *Process Simulation and Economic Evaluation of an Integrated Production Plant for Methanol, Acetic Acid and DME Synthesis Via Sugarcane Bagasse Gasification*, *Energy Conversion and Management*, **286**: 117051 (2023).
- [37] Luyben W.L., *Improving The Conventional Reactor/Separation/Recycle DME Process*, *Computers & Chemical Engineering*, **106**: 17-22 (2017).
- [38] Alirahmi S.M., Assareh E., Pourghassab N.N., Delpisheh M., Barelli L., Baldinelli A., *Green Hydrogen & Electricity Production Via Geothermal-Driven Multi-Generation System: Thermodynamic Modeling and Optimization*, *Fuel*, **308**: 122049 (2022).
- [39] Gambou F., Guilbert D., Zasadzinski M., Rafaralahy H., *A Comprehensive Survey of Alkaline Electrolyzer Modeling: Electrical Domain and Specific Electrolyte Conductivity*, *Energies*, **15**: 3452 (2022).
- [40] Moossa B., Trivedi P., Saleem H., Zaidi S.J., *Desalination in the GCC Countries- A Review*, *Journal of Cleaner Production*, **357**: 131717 (2022).