«مجله علمی تخصصی علوم و فنون سازندگی»

سال سوم ، شماره۱، فصل بهار ۱۴۰۱؛ صفحه ۵۷ الی ۶۲

علمی– تخصصی

شبیه‌سازی فرآیند تولید اسید فسفریک با استفاده از روش دی هیدرات

سجاد مبینی[1*]، مهدی خرقانی[2]

۱- دکترای تخصصی (مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی، دانشگاه کاشان)

۲- دکترای تخصصی(عضو هیئت علمی وابسته پژوهشکده سازندگی خاتم‌الانبیاء(ص))

(دریافت: ۱۴۰۰/۰۴/۰۲، پذیرش: ۱۴۰۱/۰۳/۰۳)

چکیده

در حال حاضر تنها واحد تولید اسید فسفریک به روش شیمی تر در کشور، شرکت آریا فسفریک جنوب با ظرفیت تولید ۳۸۱ هزار تن در سال محلول اسید فسفریک با غلظت ۵۰ درصد است. با توجه به نیاز گسترده به این اسید در کشور نیاز به طراحی و ساخت واحد جدیدی برای تولید اسید فسفریک به شدت احساس می‌گردد. طراحی و احداث صنایع نیازمند شناخت مبانی تئوری و برخورداری از دیدگاه‌های عملی و تجربی متناسب با شرایط اقتصادی و فرهنگی حاکم و دانش فنی موجود جامعه، به‌منظور نیل به اهداف تولید می‌باشد. بررسی فنی و بهینه‌سازی شرایط تولید اسید فسفریک به روش دی هیدرات نیز در راستای همین اهداف انجام می‌گیرد. بحث بهینه‌سازی فرآیندها همواره با دشواری‌ها و پیچیدگی‌های فراوانی همراه است. از مهم‌ترین چالش‌های پیش رو می‌توان به دسترسی به اطلاعات فرآیندی همچون خلوص مواد اولیه، محدودیت‌های دما، فشار و شدت‌جریان‌ها، محدودیت استفاده از معادلات و قوانین پدیده‌های انتقال است. در این پروژه سعی بر آن شده است تا با استفاده از نرم‌افزار قدرتمند اسپن پلاس یک واحد تولید اسید فسفریک را با توجه به نیاز کشور و خاک مورداستفاده در این واحد طراحی و شبیه‌سازی نماییم. آزمایش‌های مختلف بر روی نمونه دریافتی از شرکت ملی مس ایران انجام گردید و بر اساس نتایج حاصل از این آنالیزها طراحی فرآیند انجام شد و نتایج حاصل از شبیه‌سازی در پایان اضافه گردید.

کلیدواژه‌ها: اسید فسفریک، فرآیند دی هیدرات، خاک فسفاته، شبیه‌سازی، بهینه‌سازی

۱. مقدمه

اسید فسفریک یک اسید معدنی است که کاربردهای متعددی در صنایع مختلف دارد. این اسید را می‌توان به دو روش کوره‌ای (dry process) و مرطوب (wet process) تهیه نمود. درروش مرطوب خاک فسفات دار با یک اسید همچون کلریدریک، نیتریک و سولفوریک واکنش داده و تولید اسید فسفریک می‌نماید. در این فرآیند عمدتاً از اسیدسولفوریک استفاده می‌شود که واکنش کلی آن به‌صورت زیر است:

$$(3Ca3\ (PO4)2CaF2 + 10H2SO4 + 20H2O \rightarrow 6H3PO4 + 10CaSO4.2H2O\ (s) + 2HF \quad (۱)$$

در واکنش بالا می‌توان دو مرحله سنتیکی را در نظر گرفت. مرحله اول، واکنش خاک فسفات دار و اسید سولفوریک و مرحله دوم کریستالیزاسیون ژیپسم است. در حقیقت منظور این است که مرحله واکنش و مرحله کریستالیزاسیون می‌توانند به صورت مجزا مدل‌سازی شوند.

واکنش‌های سیال جامد به دلیل کاربرد صنعتی همواره موردتوجه خاصی بوده‌اند. قسمت عمده کارهای انجام‌شده بر واکنش‌های گاز جامد متمرکز شده است و مدل‌های گوناگونی نیز ارائه‌شده است که هرکدام کاربرد خاصی دارد. در اکثر این مدل‌ها سعی شده رابطه‌ای برای درصد تبدیل برحسب زمان ارائه شود. برای مطالعه راجع به این مدل‌ها می‌توان به مراجع [۱و۲و۳] رجوع نمود.

تشکیل لایه فراورده باقیمانده بر روی ذرات جامد یک مشکل بزرگ در این واکنش‌هاست، زیرا از نفوذ واکنش‌دهنده‌ها و

* نویسنده مسئول: sajad.mobini@gmail.com

محصولات جلوگیری می‌کند. بیان ریاضی این مسئله موردتوجه یک نمونه از SIM[1] بسیاری از محققین بوده است. مدل ساده این تلاش‌هاست لیکن در این مدل سطح بیرونی ذره ثابت در نظر گرفته می‌شود. با توجه به اینکه اندازه ذره جامد در حین واکنش کاهش می‌یابد و از طرفی بخشی از لایه فراورده روی آن را می‌پوشاند و با توجه به اختلاف چگالی بین لایه فرآورده و جامد، می‌توان به این نتیجه رسید که باید تغییر اندازه ذره در نظر گرفته شود.

ایده‌های مختلفی در واکنش‌های سیال-جامد بکار گرفته شده‌اند یکی از آن‌ها استفاده از تئوری موازنه جمعیت است که در حقیقت یک مبنای آماری دارد و در تبلور نیز بکار می‌رود. این ایده در ابتدا توسط Bhatia [۴] بکار برده شد. در مدل Bhatia اثر لایه فرآورده در نظر گرفته نشده و به همین خاطر در اینجا کاربری ندارد. واکنش‌های فاز جامد در یک مقاله مروری [۵] بررسی‌شده‌اند و سازوکارهای گوناگون در آنجا ذکرشده است.

در واکنش بین خاک فسفات و اسیدسولفوریک، فسفات موجود در خاک (در اینجا مقدار آن به‌طور مرسوم برحسب درصد P_2O_5 بیان می‌شود) استخراج می‌گردد و تبدیل به اسید فسفریک می‌گردد و ژیپسم نیز تولید می‌گردد. بازده این استخراج به شرایط عملیاتی مانند غلظت اسیدسولفوریک، دور همزن، دما و اندازه ذرات وابسته است و ارتباط تنگاتنگی با بازده مرحله تبلور دارد. اقتصاد واحد بستگی شدیدی به این بازده دارد. مهم‌ترین مسئله این است که مقدار فسفات موجود در خاک تا حد ممکن استخراج گردد. پوشش ذرات خاک توسط سولفات کلسیم یکی از مهم‌ترین عوامل هدر رفتگی خاک فسفات است. به‌عنوان‌مثال در یک واحد با ظرفیت ۲۰۰،۰۰۰ تن در سال P_2O_5 و با فرض خاک فسفاته با نرخ ۸۰ دلار چنانچه یک درصد از فسفات موجود در خاک استخراج نگردد ارزش خاک هدررفته حدود نیم میلیون دلار در سال است که رقم چشمگیری است. ازآنجایی‌که خاک فسفات در ایران از خارج تأمین می‌شود که ارزبری بالایی دارد، بایستی حداکثر P_2O_5 ممکن از خاک استخراج گردد که این خود نیازمند مطالعه عمیق و کامل استخراج P_2O_5 از خاک فسفات است.

به‌منظور بالا بردن در صد استخراج P2O5 از خاک فسفات و به حداقل رساندن پدیده پوشش ابتدا اسید فسفریک برگشتی از قسمت فیلتراسیون در راکتور اول با خاک فسفات باید مخلوط شود، تا خاک فسفات با اسید فسفریک طبق واکنش ساده شده زیر حل شود:

$$Ca3(PO4)2 + 4H3PO4 \rightarrow 3Ca(H2PO4)2 \quad (۲)$$

در راکتور دوم نیز بایستی اسیدسولفوریک وارد فرآیند شود تا با مونوکلسیم فسفات تشکیل‌شده در راکتور اول وارد واکنش شده و اسید فسفریک آزاد شود:

$$3Ca(H2PO4)2 + 3H2SO4 + 6H2O \rightarrow 6H3PO4 + 3CaSO4{\cdot}2H2O\ (s) \quad (۳)$$

P2O5 استخراج‌نشده از خاک در راکتور اول نیز در این راکتور طبق واکنش زیر استخراج می‌شود:

$$Ca3(PO4)2 + 3H2SO4 + 6\ H2O \leftrightarrow 3CaSO4{,}2H2O(s) + 3H3PO4 \quad (۴)$$

همچنین ممکن است اسید فسفریک برگشتی و اسیدسولفوریک در راکتور اول باهم مخلوط شده و در راکتور دوم خاک فسفات وارد فرآیند شود.

به‌طورکلی تجربیات عملیاتی و همچنین مطالعات مقدماتی نشان می‌دهند که میزان استخراج P2O5 از خاک فسفات بستگی به عوامل زیر دارد:

۱-طبیعت خاک فسفات (منبع، نوع سنگ، ترکیب شیمیایی سنگ و ...)

۲-اندازه دانه‌های خاک

۳-غلظت اسیدسولفوریک

۴-دمای فرآیند

۵-دور همزن

۶-نسبت آمیختگی اسید با خاک

آزمایش‌های زیادی به‌منظور بررسی عوامل فوق انجام‌گرفته است که تأثیر این عوامل در مقالات مختلف آمده است.

بیشتر اطلاعات سنتیکی ارائه‌شده [۶-۱۱] مربوط به استفاده از خاک برای تولید کودها و یا در تولید سوپر فسفات‌ها می‌باشند و مستقیماً قابل‌استفاده در تولید اسید فسفریک نیستند. سنتیک حل شدن خاک برحسب نوع و منبع خاک متفاوت است. آهنگ حل شدن بر واحد سطح تابعی از غلظت یون هیدروژن، سطح ذرات و دماست [۱۲]. نتایج سنتیکی متفاوتی گزارش‌شده‌اند، مثلاً ۸۰٪ تبدیل در ۳۰ دقیقه [۱۳] تا ۹۵٪ تبدیل در یک دقیقه [۱۴].

یک متغیر مهم که در واکنش دهی خاک فسفات مؤثر است توزیع اندازه ذرات خاک است [۱۵]. مطالعات سینتیکی منتشر شده بیشتر به بررسی اثر پارامترهای عملیاتی روی میزان استخراج از خاک پرداخته‌اند و تلاش‌های ریاضی انجام‌شده بسیار محدودند. به دلیل پیچیده بودن و دخالت شمار زیادی از عوامل و حتی برهم‌کنش عوامل بالا روابط مفید ریاضی که بیانگر همه پارامترها باشد در مقالات آزاد ارائه نشده است. رابطه‌ای برای آهنگ حل شدن فسفات‌های متفاوت در اسید فسفریک ارائه‌شده است [۱۶] لیکن اثر پارامترهای لازم را در برندارد. در مطالعه تولید سوپر فسفات از خاک فسفات اثر اندازه ذرات، دما، غلظت اسید و نسبت اسید به خاک بررسی شده و برای رابطه بندی اثر

[1] Sharp Interface Model

متقابل پارامترها از یک‌چند جمله‌ای درجه دوم استفاده گردیده است [۱۷]. ولی به دلیل اینکه مدل ریاضی فوق با معیارهای فیزیکی و علمی قابل توجیه نیست، نتایج به‌دست‌آمده نیز دارای خطای زیادی هستند.

مطالعات اخیر بیشتر بر روی خاک هایی که به تازگی کشف شده‌اند و یا بر محور استفاده از خاک‌هایی با درصد P_2O_5 کمتر واقع‌شده‌اند [۱۸،۱۹،۲۰].

پدیده پوشش ذرات خاک توسط سولفات کلسیم یکی از عوامل هدر رفتگی خاک فسفات است، مطالعات پژوهشگران پیرامون این پدیده منحصر به بررسی‌های مختصری است و بیشتر به‌طور توجیهی به تفسیر آن پرداخته‌اند [۱۴،۱۵،۲۱]. تأثیر این پدیده در مطالعات سینتیکی کمتر فرمول‌بندی شده است درصورتی‌که از عوامل مؤثر در کاهش بازده است.

مدل‌سازی و شبیه‌سازی فرآیند روشی کم‌هزینه و مؤثر برای شناخت دقیق فرآیند و بهبود عملکرد آن و تحلیل رفتار دینامیک سیستم بیش از بروز مسائل فرایندی می‌باشد. امروزه استفاده از کامپیوتر برای مدل‌سازی و شبیه‌سازی فرآیندهای شیمیایی، یکی از مهم‌ترین زمینه‌های مهندسی شیمی را تشکیل می‌دهد. مدل‌سازی به معنی توصیف ماهیت سیستم و انجام موازنه‌های جرم و انرژی در قالب معادلات ریاضی، نیازمند حل هم‌زمان تعداد زیادی معادله جبری و دیفرانسیلی و دسترسی به تعداد زیادی ثوابت و ضرایب سینتیکی و ترمودینامیکی می‌باشد. مقایسه قابلیت‌های هر یک از نرم‌افزارهای موجود و انتخاب نرم‌افزار مناسب، به میزان وسعت کتابخانه عملیاتی آن و میزان دقت و فراوانی داده‌های ترموفیزیکی موجود در آن وابسته است. بر همین اساس در این مقاله سعی شده است فرآیند تولید اسید فسفریک با روش دی هیدرات با نرم‌افزار اسپن پلاس شبیه‌سازی شود و بر اساس خاک دریافتی از شرکت ملی مس ایران بهینه‌سازی گردد.

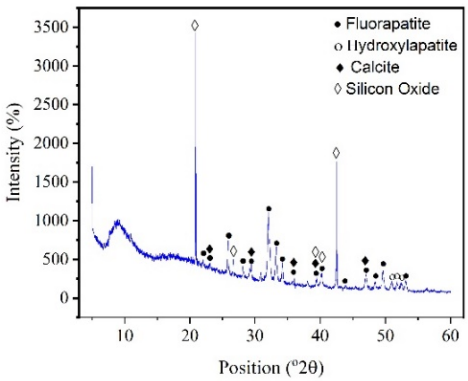
۲. روش تحقیق

در این بخش به مدل سازی و شبیه سازی فرآیند تولید اسید فسفریک با استفاده از نرم‌افزار اسپن پلاس می‌پردازیم. بر همین اساس ابتدا برخی خواص خاک فسفات موردنظر می‌بایست موردبررسی قرار گیرد. بدین منظور این بخش در دو قسمت موردبررسی قرار گرفت. بخش تجربی شامل بررسی خواص فیزیکی و ترکیب خاک فسفات و بخش مدل سازی و شبیه سازی فرآیند با استفاده از نرم‌افزار ASPEN PLUS. در بخش تجربی خاک فسفات دریافتی، با استفاده از تکنیک‌های XRD، XRF، ICP و توزیع اندازه ذرات به دو صورت دستگاهی و سرندی آنالیز گردید. در بخش شبیه‌سازی از نرم‌افزار Aspen Plus به‌منظور شبیه‌سازی فرآیند تولید اسید فسفریک و به دست آوردن پارامترهای فیزیکی ترکیبات استفاده گردید. فرآیند دی هیدرات شامل بخش‌های مختلفی همچون راکتورهای حمله و هضم، فلش کولرها، واحدهای فیلتراسیون و تغلیظ اسید فسفریک و بخش فیلتراسیون است. تمرکز ما در این شبیه‌سازی بر روی راکتورهای ورود اسیدسولفوریک و هضم که به‌عنوان قلب فرآیند شناخته می‌شوند، می‌باشد. فرآیند اصلی در این پژوهش به کمک چهار راکتور Rstoic به‌منظور شبیه‌سازی بخش راکتوری و دو راکتور RCSTR به‌منظور بررسی فرآیند کریستالیزاسیون مدل شده است. دیگر تجهیزات مورداستفاده شامل پمپ‌ها، میکسرها، اسپیلیترها و فلش درام هستند.

۳. نتایج و بحث

۳-۱. بخش تجربی

نتایج XRD در شکل ۱ نشان داده‌شده است. همان‌طور که در شکل مشاهده می‌گردد فاز اصلی در این خاک فلوروآپاتیت با ساختار هگزاگونال مطابق با رفرنس کارت JCPDS 96-901-0505 است که پیک‌های مربوط به این فاز در شکل نشان داده‌شده است. همچنین تشکیل فاز هیدرو کسی آپاتیت نیز در ساختار مشاهده می‌گردد. پیک‌های موجود در زوایای ۲۰/۹، ۲۵/۸، ۳۹/۴، ۴۰/۲ و ۴۲/۵ درجه مربوط به ساختار هگزاگونال سیلیکون اکساید (JCPDS 033-1161-00) و زوایای موجود در زوایای ۲۳/۱، ۲۹/۲، ۳۵/۸، ۳۹/۴، ۴۷/۰ و ۴۹/۶ درجه مربوط به فاز کلسیت با ساختار هگزاگونال است (JCPDS 096-901-6023). پیک‌های مربوط به این فازها در شکل ۱ مشخص‌شده‌اند. همچنین فاز هماتیت تا حدودی در این ساختار قابل‌تشخیص است.



شکل (۱). الگوی XRD مربوط به نمونه خاک مورداستفاده در این پروژه

ترکیب درصد عناصر در این خاک نیز با استفاده از طیف‌نگاری فلورسانس اشعه X (XRF) انجام پذیرفت. نتایج در جدول ۱ آورده شده است. همان‌طور که مشاهده می شود عمده

عناصر موجود در خاک مربوط به عناصر کلسیم و فسفر است که با توجه به آنالیز XRD مربوط به فازهای فلوروآپاتیت و کلسیت هستند. همچنین نتایج ICP درصد عناصر فسفر و کلر را به ترتیب ۱۳/۴ و ۰/۱۵ درصد وزنی نشان داد. این نتایج به‌منظور تعیین ترکیب درصد خوراک ورودی به راکتور در بخش شبیه‌سازی مورداستفاده قرار می‌گیرد.

جدول (۱). آنالیز XRF بر اساس درصد وزنی عناصر موجود در خاک مورداستفاده در این پژوهش

ترکیب	درصد وزنی	ترکیب	درصد وزنی
P_2O_5	۳۰/۷	K_2O	<۰/۰۱
CaO	۵۴/۳	SO_3	۰/۴
SiO_2	۵/۴	BaO	۰/۲
Al_2O_3	۰/۵	SrO	۰/۴
Fe_2O_3	۰/۲	La&Lu	<۰/۰۱
MgO	۰/۶	Cl	<۰/۰۱
Na_2O	۰/۲	L.O.I	۷/۱

به‌منظور شبیه‌سازی فرآیندهای دارای فاز جامد داشتن توزیع اندازه ذرات فاز جامد از نکات کلیدی می‌باشد. بر همین اساس توزیع اندازه ذرات با استفاده از دستگاه particle size master شرکت سرامیک صنعتی اردکان اندازه‌گیری شد. همان‌طور که مشاهده می‌شود d90 ذرات برابر ۸۴۰µm و d50 برابر ۴۲۳µm به‌دست‌آمده است. بر اساس اندازه‌گیری ذرات با استفاده از الک‌های با مش‌های مختلف (آنالیز سرندی) d90 ذرات برابر µm ۸۴۱ و d54 برابر µm ۲۵۰ به دست آمد.

با توجه به نتایج آنالیز توزیع اندازه ذرات حدود ۲۶٪ ذرات دارای اندازه‌ای بیش از µm ۵۰۰ هستند. درروش دی هیدرات لازم است اندازه ذرات زیر ۵۰۰µm قرار گیرند تا به‌صورت کامل در واکنش شرکت کنند و باعث افت راندمان در تولید محصول نگردد. به همین دلیل لازم است بر روی نمونه خاک دریافتی قبل از استفاده عملیات خردایش انجام گیرد تا d90 ذرات به کمتر از µm ۵۰۰ کاهش یابد.

۳-۲. شبیه‌سازی فرآیند:

برای وارد نمودن ترکیبات در نرم‌افزار شناخت و آنالیز خاک فسفات و همچنین شناخت دقیق واکنش‌هایی که در طول فرآیند انجام می‌شود و محصولات حاصل از این واکنش‌ها ضروری است. بر همین اساس آنالیز XRD و XRF از خاک موردنظر انجام‌شده که نتایج آن در بخش قبلی تشریح گردید. در شبیه‌سازی، ما ترکیب فسفات موجود در سنگ را به‌عنوان مخلوطی از فلوراپاتیت ($Ca_3(PO_4)_2\cdot CaF_2$) و کلسیم فسفات ($Ca_3(PO_4)_2$) در نظر می‌گیریم. همچنین ترکیبات کربناتی به‌صورت کلسیم کربنات در نظر گرفته می‌شوند و از ترکیب کلسیم فلوراید برای توصیف ترکیبات فلوئور بیش ازآنچه در ترکیب آپاتیت است استفاده می‌گردد. در این کار و با توجه به آنالیز XRF از سایر ناخالصی‌ها صرف‌نظر می‌کنیم.

همان‌طور که در بخش‌های قبل نیز ذکر شد و با توجه به PFD فرآیند، فلوراپاتیت در راکتور اول و دوم ابتدا در تماس با اسید فسفریک جریان برگشتی قرار می‌گیرد و سپس در راکتور دوم تحت واکنش با اسیدسولفوریک قرار می‌گیرد. درنتیجه واکنش‌های زیر بر روی خاک فسفات به‌صورت متوالی انجام می‌پذیرد:

$$Ca3(PO4)2\cdot CaF2(s) + 6H3PO4(aq) \rightarrow 4Ca(H2PO4)2(aq) + 2HF(g)$$

$$Ca3(PO4)2(s) + 4H3PO4(aq) \rightarrow 3Ca(H2PO4)2(aq)$$

$$Ca(H2PO4)2(aq) + H2SO4(aq) + nH2O \rightarrow 2H3PO4(aq) + CaSO4\cdot nH2O(s)$$

$$Ca3(PO4)2\cdot CaF2(s) + 10H2SO4(aq) + 20\ H2O \leftrightarrow 10CaSO4.2H2O(s) + 6H3PO4(aq) + 2HF(g)$$

$$Ca3(PO4)2(s) + 3H2SO4(aq) \rightarrow 2H3PO4(aq) + 3CaSO4(s)$$

همچنین کلسیم کربنات مطابق با واکنش زیر با اسیدسولفوریک وارد واکنش می‌شود:

$$CaCO3(s) + H2SO4(aq) + H2O \rightarrow CaSO4.2H2O(s) + CO2(g)$$

با توجه به توضیحات بالا و این واکنش‌ها و محصولات حاصل از آن‌ها، ترکیبات را برای نرم‌افزار تعریف می‌نماییم.

لازم و ضروری است که گونه‌های یونی که در فاز مایع در راکتورها و در طول فرآیند ایجاد می‌شوند را نیز تعریف نماییم. توصیف دقیق تعادل شیمیایی گونه‌های یونی و مولکولی، و همچنین غیره ایده آل بودن محلول حاصل غالباً بسیار دشوار است، اما این امر به دلیل پیشرفت چشمگیر در چهارچوب نظری و توانایی فن‌آوری شبیه‌سازهای فرآیند مانند Aspen تا حدودی قابل‌اجرا شده است. یکی از قابلیت‌های نرم‌افزار Aspen در مقایسه با نرم‌افزارهای مشابه، قابلیت و انعطاف آن در مدل‌سازی سیستم‌های الکترولیتی می‌باشد. سیستم‌های الکترولیتی به سیستم‌هایی اطلاق می شود که در آن چند نمک یا ماده یونی با انحلال در یک حلال سیستمی متشکل از یون‌ها و مولکول در فاز مایع که با فازهای رسوب جامد و گاز در حال تعادل می‌باشند، به وجود می‌آورند. اصولاً با توجه به ماهیت این سیستم‌ها، روش تعریف محلول و روش پیش‌بینی خواص در آن‌ها با سیستم‌های مولکولی متداول متفاوت است. با توجه به پیچیدگی های مدل‌سازی واحدهای الکترولیتی، در اکثر موارد از مدل‌سازی دقیق این واحدها صرف‌نظر می‌شود.

اساس جدول ۲ استخراج گردیده‌اند:

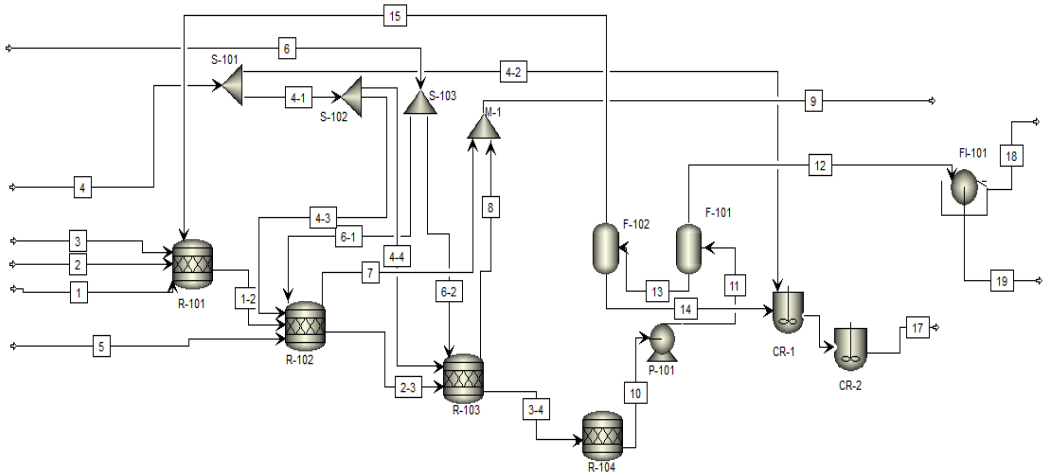
همچنین معـاد له ثا بت تعـادل برای واکنش های تعـادلی به‌صورت زیر ارائه گردیده است:

$$\ln(K_{eq}) = A + \frac{B}{T} + C\ln(T) + DT + E\frac{P-P_{ref}}{P_{ref}}$$

در این معادله Keq ثابت تعادل، T دما، P فـ شار و Pref فـ شار اسـتاندارد اسـت. A، B، C، D و E نیز ثوابت رابطه هسـتند که بر

جدول (۲). ثوابت معادله مورد استفاده برای محاسبه ثابت تعادل واکنش های تعادلی الکترولیتی

Stoicheiometry	Stoicheiometry				
	A	B	C	D	E
$H_2O + HPO_4^{2-} \leftrightarrow H_3O^+ + PO_4^{3-}$	−3.945	−5114	0	−0.037	0
$H_2O + H_2PO_4^- \leftrightarrow H_3O^+ + HPO_4^{2-}$	8.590	−4601	0	−0.046	0
$H_3PO_4 + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + H_2PO_4^-$	19.937	−3734	0	−0.054	0
$2\,H_2O \leftrightarrow OH^- + H_3O^+$	132.89	−13445	−22.47	0	0



شکل (۳). فلوشیت فرآیند تولید اسید فسفریک

یکی از مهم‌ترین مراحل مدل‌سازی و شبیه‌سازی یک فرآیند انتخاب مدل ترمودینامیکی مناسب برای فرآیند است که بتواند با کمترین خطا رفتار ترمودینامیکی ترکیبات و برهم‌کنش‌های بین آن‌ها را محاسبه نماید. به همین منظور در این پروژه از مدل ENRTL به‌عنوان مدل اصلی استفاده گردید. همچنین از مدل SOLID به‌عنوان مدل کمکی استفاده گردید.

بخش کلیدی و اصلی فرآیند شبیه‌سازی راکتورهای واکنش و راکتورهای مربوط به رشد کریستال‌ها است. پیش از شروع شبیه سازی لازم است واکنش‌های شیمیایی که در طول فرآیند در راکتورها و سایر بخش‌ها انجام می شود را در شاخه Reaction وارد نماییم. فلوشیت فرآیند شبیه‌سازی در شکل ۲ نشان داده شده است. توضیحات و اسامی جریان‌ها و بلوک‌ها بر اساس این فلوشیت می‌باشد.

پس از انجام شبیه‌سازی واحد این شبیه‌سازی بر اساس آنالیز خاک اعلام‌شده در این پژوهش بهینه‌سازی و هماهنگ‌سازی گردید. با اجرای شبیه‌سازی با این شرایط و بهینه‌سازی انجام‌شده، ترکیب درصد و خواص فیزیکی جریان‌های مختلف به دست آمد. ترکیب جریان نهایی خروجی از این واحد شبیه‌سازی‌شده در جدول زیر با نتایج تجربی مقایسه شده است.

۴. نتیجه‌گیری

یک واحد تولید اسید فسفریک به روش دی هیدرات با استفاده از نرم‌افزار اسپن پلاس و بر اساس نمونه خاک دریافتی از شرکت ملی مس ایران شبیه‌سازی شد. خاک فسفاته مورد آنالیز قرار گرفت و نتایج آن ارائه گردید. واحد بر مبنای این آنالیزها شبیه‌سازی گردید و نتایج به دست آمد. همان‌طور که در نتایج به‌دست‌آمده است در جریان نهایی kg/h ۴۶۴۷۰ اسید فسفریک بر مبنای P_2O_5 به‌دست‌آمده است و مقدار ژیپسوم تولیدی حدود kg/h ۷۰۰۰۰ است. نتایج حاصل از این شبیه سازی برای جریان نهایی از واحد با نتایج تجربی دریافت شده از واحد مربوط مقایسه شد. همان‌طور که مشاهده شد نتایج شبیه‌سازی تطابق قابل قبولی با نتایج تجربی داشت و میزان بازدهی واحد با شرایط اعمال شده در بهینه سازی نسبت به نتایج واحد صنعتی بالاتر به دست آمد. درنهایت در بخش فیلتراسیون ۹۸ درصد اسید بازیابی گردید.

۵. مراجع

[1] https://www.usgs.gov/centers/nmic/phosphate-rock-statistics-and-information, (n.d.).

[2] phosphoric-acid-chemical-economics-handbook, Www.Ihsmarkit.Com. (2016).

[3]https://www.openpr.com/, (n.d.).

[4] https://www.marketresearchfuture.com/reports/phosphate-market-1921, (n.d.).

[5]https://www.nipna.ir/, (n.d.).

[6] www.fao.org, (n.d.).

[7]www.smtnews.ir/mine/, (n.d.).

[8]B.V. Salas, M.S. Wiener, J.R.S. Martinez, and Phosphoric Acid Industry: Problems and Solutions, in: Phosphoric Acid Ind. Probl. Solut. 2017.

[9]P. Becker, phosphats and phosphoric acid, Fertil. Sci. Technol. Ser. 6 (1989).

[10]B.V. Salas, M.S. Wiener, J.R.S. Martinez, and Phosphoric Acid Industry: Problems and Solutions, in: Chapter 4, 2010: pp. 141–157.

[11] Member companies of The, E.F.M.A. (EFMA), Production of Phosphoric Acid, in: 2000: pp. 14–22.