

آموزش جامع شبیه سازی
فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار:

ASPEN PLUS



مدرس : مهدی رازی فر



بهمن ۱۳۹۱



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

ASPEN PLUS

جلسه اول

- تعریف مدل سازی و شبیه سازی فرآیندها
- معرفی نرم افزار ASPEN و شروع کار با نرم افزار
- آشنایی با روش انتخاب ترکیبات از بانک اطلاعاتی ASPEN و تعریف ترکیبات جدید
- انتخاب روش ترمودینامیکی مناسب و طریقه معرفی آن در ASPEN
- آشنایی با ASPEN PROPERTIES (ترسیم منحنی های خواص محاسبه شده با معادله ترمودینامیکی)
- ترسیم نمودارهای خواص جریان (Dew / Bubble , PT , TV , PV)
- آشنایی با Property Set ها
- تمرین ها

مدل سازی و شبیه سازی فرآیند

شبیه سازی یا مدل سازی ریاضی در واقع تبدیل کیفیت های فیزیکی و رابطه متقابل این کیفیت ها به کمیت های عددی و روابط ریاضی است. بدین ترتیب یک مدل ریاضی شامل متغیر ها و مجموعه معادلات وابسته به آنهاست که می تواند تأثیر متقابل این متغیر ها را، همانطور که در دنیای واقعی اتفاق می افتد نشان دهد. از این رو یک مدل ریاضی وسیله بسیار مناسبی در دست تحلیل گری است که با توسل به آن می تواند رفتار یک سیستم را پیش از اعمال واقعی تغییرات پیش بینی کند. این خاصیت بخصوص در مورد سیستم هایی که امکان اعمال واقعی تغییرات در آنها محدود است، بسیار مفید و کار آمد است. یکی از مثال های مشخص این نوع سیستم ها فرآیند های شیمیایی است. در این مورد بدلیل تعداد زیاد متغیر های عملیاتی و مخارج و مخاطرات زیاد تجربه کردن تغییر در هر یک از این متغیر ها، وجود یک مدل ریاضی که بتواند امکان انجام تجربیات مختلف را به سادگی در اختیار تحلیل گر قرار دهد، بسیار ارزشمند و قابل توجه است. بدین جهت شبیه سازی فرآیند ها همیشه مورد توجه بوده و فعالیت های گسترده ای در این مورد صورت گرفته است. از یک نظر شبیه سازی فرآیند ها در واقع اعمال معادلات موازنه جرم و انرژی به همراه شرایط تعادل فاز ها در یک سیستم است که معمولاً جهت سهولت کار به حالت پایای سیستم بسنده می شود. در این حالت با اعمال شرایط تعادل ترمو دینامیکی مجموعه معادلاتی بوجود خواهد آمد که در کنار معادلات متداول موازنه جرم و انرژی مجموعه معادلات همزمانی را تشکیل می دهند که در واقع به مدل ریاضی فرآیند تعبیر می شود. مدل ها غالباً به سه دسته تئوری، نیمه تجربی و تجربی تقسیم می شوند. مدل های تئوری به طور کامل بر اساس قوانین تئوری استوارند مانند راکتور همزن دار که در صنعت کاربرد کمتری را دارد. مدل های نیمه تجربی بر پایه روابط تئوری و با استفاده از نتایج اصلاحات تجربی بوجود می آیند. معادلات حالت از این دسته اند. مدل های تجربی صرفاً بر اساس روابط تجربی شکل گرفته اند. با اینکه محدود کردن شرایط تعادل به تعادل فاز ها و حذف واکنش های شیمیایی به میزان زیادی از پیچیدگی این مجموعه معادلات کلی می کاهد، با این همه حل این معادلات تنها با توسل به روش های پیچیده محاسبات عددی و بهره جویی از امکانات محاسبات کامپیوتری امکان پذیر است. بر نامه های شبیه سازی فرآیند در واقع بسته های نرم افزاری هستند که تشکیل و حل این معادلات را مقدور می سازند به عبارت دیگر شبیه سازی عبارت است از بکار گیری مدل ها و ایجاد ارتباط بین آنها برای توصیف عملی و علمی شرایط و حالات یک سیستم و تعیین خروجی های آن با توجه به داده های ورودی، لذا تکرار شبیه سازی در حالات و شرایط مختلف ورودی می تواند ما را در طراحی فرآیند یاری کند. آنچه مسلم است این دقت و میزان انحراف از نتایج تجربی است که ضامن اعتبار و اهمیت یک مدل یا یک شبیه ساز است. مهمترین موارد کاربرد شبیه ساز ها در بررسی عملکرد، رفع تنگناها و مشکلات فرآیندی، ایجاد تغییرات در شرایط عملیاتی و پیش بینی نتایج حاصل از آن می باشد در بعضی موارد می توان از شبیه ساز ها برای انجام و بررسی آزمایشات پیچیده که تکرار آنها در عمل مستلزم وقت و هزینه بسیار زیاد است سود برد. از دیگر موارد کاربرد شبیه سازی، افزایش مقیاس واحد های آزمایشگاهی می باشد که موجب حذف مرحله ساختن واحد نیمه صنعتی می گردد. از این روست که در سال های اخیر شبیه ساز های بسیاری در غالب بسته های نرم افزاری تهیه و به بازار عرضه شده اند. به کمک این نرم افزار ها می توان حتی واحد های پیچیده ای چون پالایشگاه ها را به منظور طراحی، توسعه، بهبود عملیات و رفع تنگناها به راحتی در مدت زمان، بسیار کوتاهی شبیه سازی و بهینه سازی نمود. در این میان از نرم افزار هایی چون ASPEN PLUS, PRO/II, ASPEN, CHEMSHARE, HEXTRAN HYSIM می توان نام برد که در دنیا کاربرد وسیعی دارند. مقایسه قابلیت های هر یک از نرم افزار های موجود و انتخاب نرم افزار مناسب، به میزان وسعت اطلاعات کتابخانه ای و میزان دقت و فراوانی داده های ترموفیزیکی موجود در آن وابسته می باشد.

به طور کلی در شبیه سازی یک فرآیند شیمیایی مهمترین قسمت انتخاب مدل های خواص فیزیکی برای پیش بینی خواص فیزیکی و ترمودینامیکی سیستم است. زیرا خواص فیزیکی در محاسبات مربوط به تمامی مدل های توصیف کننده سیستم دخالت دارند و هر نوع خطای احتمالی در انتخاب یک مدل مناسب برای هر خاصیت فیزیکی موجب بروز خطا در نتایج شبیه سازی کل سیستم خواهد شد. در این میان مهمترین خواص مورد نیاز برای انجام محاسبات اصلی بر اساس یک معادله حالت بدست می آید. این خواص شامل حجم مولی، آنتالپی، انرژی آزاد گیبس و ضرایب فوگاسیته برای کلیه مواد موجود در فرآیند می گردند. به همین خاطر انتخاب یک معادله حالت مناسب برای توصیف رفتار ترمودینامیکی مواد موجود در فرآیند قسمت عمده ای از یک شبیه سازی را تشکیل می دهد.

- مدل سازی فرآیند

منظور از مدل سازی فرآیند توصیف ماهیت سیستم تولید (موازنه های جرم و انرژی) در قالب معادلات ریاضی است. این معادلات عموماً غیر خطی و به شکل معادلات جبری، دیفرانسیلی و یا مخلوط آنهاست که این معادلات همگی به صورت اطلاعات کتابخانه ای در نرم افزارهای شبیه سازی ذخیره شده اند که از کنار هم قرار دادن این معادلات، مدلی از فرآیند ساخته می شود.

- شبیه سازی فرآیند

منظور از شبیه سازی فرآیند یعنی بدست آوردن اطلاعات خروجی (به طور مثال مشخصات محصول) از طریق حل مدل های فوق بر اساس اطلاعات ورودی (به طور مثال مشخصات خوراک) و اطلاعات مربوط به مشخصات دستگاه های فرآیندی (که بخشی از آنها توسط کاربر به نرم افزار داده می شود)، است.

کاربرد های یک نرم افزار جامع شبیه سازی در مهندسی فرآیند

- ۱- مطالعه و بررسی گزینه های مختلف خط تولید از نظر افزایش ظرفیت واحد با هدف طراحی و ساخت واحد
- ۲- جلوگیری از اشتباهات پر خرج در طراحی و ساخت واحد
- ۳- استفاده از اطلاعات حاصل از شبیه سازی در طراحی دستگاه ها، تجهیزات مکانیکی، پاپینگ، ابزار دقیق، سیستم های برقی و سازه و ساختمان و قابلیت اتصال و انتقال اطلاعات نرم افزارهای شبیه سازی به نرم افزارهای طراحی این سیستم ها
- ۴- پیش بینی عملکرد فرآیند در شرایط مختلف عملیاتی و تعیین نقطه بهینه عملکرد فرآیندی از لحاظ کاهش هزینه های عملیاتی (مصرف آب، انرژی و...)، تعیین حداکثر ظرفیت های تولید فرآیند، بررسی صحت عملکرد های سیستم های کنترل موجود و تنظیم مجدد آنها و...
- ۵- تبادل اطلاعات با نرم افزارهای دیگر به صورت دو طرفه، توانایی دست ورزی در اطلاعات کتابخانه ای، افزودن مدل های دلخواه کاربر و اجرای برنامه طبق روش دلخواه کاربر.

معرفی نرم افزار ASPEN

در سال ۱۹۷۰ تعدادی از دانشجویان دانشگاه MIT اقدام به نوشتن برنامه کامپیوتری برای شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی کردند. با گذشت زمان و موفقیت هایی که در این زمینه حاصل شد در سال ۱۹۸۰ اقدام به پایه گذاری شرکت ASPEN TECH نمودند. در حال حاضر این شرکت بزرگترین شرکت فعال در زمینه شبیه سازی فرآیند های شیمیایی در جهان است. نرم افزار ASPEN جزء کاملترین و قوی ترین مجموعه های نرم افزارهای شبیه سازی است و بخش های مختلف آن در قالب مجموعه ASPEN Engineering Suit به صورت بسته های مستقل نرم افزاری ارائه می گردند. بسته نرم افزاری ASPEN PLUS از مهمترین اعضاء این مجموعه می باشد و به عنوان پایه سایر بسته های ASPEN استفاده می گردد. بدین معنی که می توان شبیه سازی دقیق تر و تخصصی فرآیندهای مختلف از قبیل ستون های تقطیر، مبدل های حرارتی و... را در داخل

بسته های مربوطه انجام داده و نتایج حاصله را در ASPEN PLUS جایگزین نمود. در جدول (۱) به برخی از بسته های نرم افزاری موجود در Aspen Engineering Suit اشاره شده است:

جدول (۱) : بسته های نرم افزاری موجود در Aspen Engineering Suit

بسته نرم افزاری	توضیحات
Aspen Plus	مدل سازی و شبیه سازی فرآیندها در حالت پایا
Aspen Dynamics	شبیه سازی فرآیندها در حالت دینامیک
Aspen Batch Plus	شبیه سازی فرآیندهای ناپیوسته
Aspen Polymer Plus	شبیه سازی فرآیندهای پلیمری
Aspen OLI	طراحی فرآیندهای پایه محیط های آبی الکترولیتی
Aspen Chromatograph	شبیه سازی دقیق فرآیندهای کروماتوگرافی در حالت دینامیک
Aspen Properties	انجام محاسبات و ارزیابی خواص فیزیکی
Aspen B-Jac	طراحی مبدل های حرارتی
Aspen Aerotran	طراحی حرارتی کولر های حرارتی
Aspen Hetran	طراحی حرارتی مبدل های پوسته و لوله
Aspen Teams	طراحی مکانیکی مبدل های پوسته لوله و مخازن تحت فشار
Aspen Pinch	بهینه سازی شبکه مبدل های حرارتی و انرژی مصرفی
Aspen Split	طراحی و تحلیل برج های تقطیر
Aspen ADSIM	مدل سازی فرآیندهای جذب در حالت دینامیک
Aspen Traflow	شبیه سازی دینامیکی خطوط لوله دو فازی نفت و گاز
Aspen Icarus	برآورد اقتصادی و ارزیابی اقتصادی طرح ها
Aspen BPE	ارزیابی فرآیند تجاری
Aspen PEP	مدل های پیش ساخته فرآیندهای رایج
Aspen Utilities	نرم افزار مدل سازی
Aspen Custom Modeler	توسعه و ایجاد مدل های دلخواه
Aspen Zygad	مهندسی فرآیند یکپارچه

روش حل معادلات در ASPEN PLUS

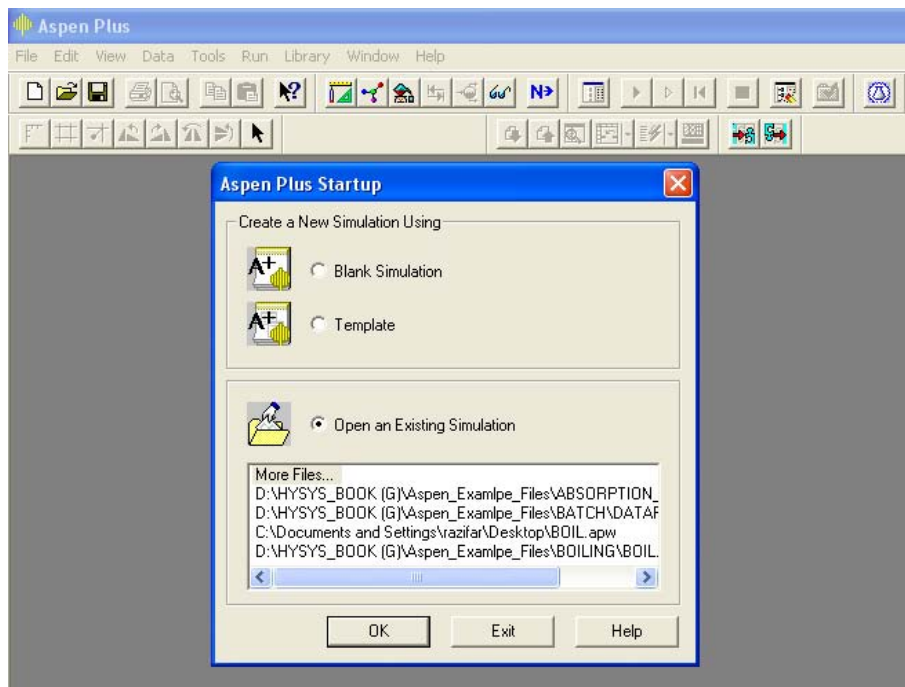
تا نسخه ۱۰/۲ حل دسته معادلات ریاضی (جبری، دیفرانسیلی، خطی یا غیر خطی) حاصل از موازنه های جرم و انرژی مربوط به مدلسازی تجهیزات مختلف فرآیندی همراه با معادلات ترمودینامیکی و سایر معادلات دیگر به روش حل پی در پی (Sequential Modular) بوده است ولی از ورژن ۱۰/۲ به بعد ASPEN PLUS قادر است به هر دو روش حل پی در پی (Sequential Modular) و روش حل همزمان (Equation Oriented or Simultaneous) دسته معادلات را حل کند. لازم به ذکر است که در نسخه های جدید روش حل پیش فرض روش حل پی در پی (Sequential Modular) می باشد.

مزایا و معایب این دو روش عبارتند از:

در الگوریتم محاسباتی آن هیچ حلقه ای وجود ندارد.	مزایا	روش EO
برای حل به تعداد زیادی حدس اولیه نیاز دارد. جهت همگرایی به حدس اولیه های خوبی نیاز دارد. به حافظه محاسباتی زیادی نیاز دارد.	معایب	
روش حل آن ساده تر است. به حافظه محاسباتی زیادی نیاز ندارد.	مزایا	روش SM
حل مسائل بهینه سازی در آن دشوار است. در حل جریان های برگشتی زیاد خوب عمل نمی کند.	معایب	

شروع کار با نرم افزار ASPEN PLUS :

پس از نصب برنامه Aspen Plus، از منوی Start در قسمت Desktop کامپیوتر از طریق مسیر زیر برنامه را اجرا می کنیم:
Start \ Programs \ Aspen Tech \ Aspen Engineering Suit \ Aspen Plus 11.1 \ Aspen Plus User Interface
در این صورت جعبه Aspen Plus Start Up ظاهر می شود.

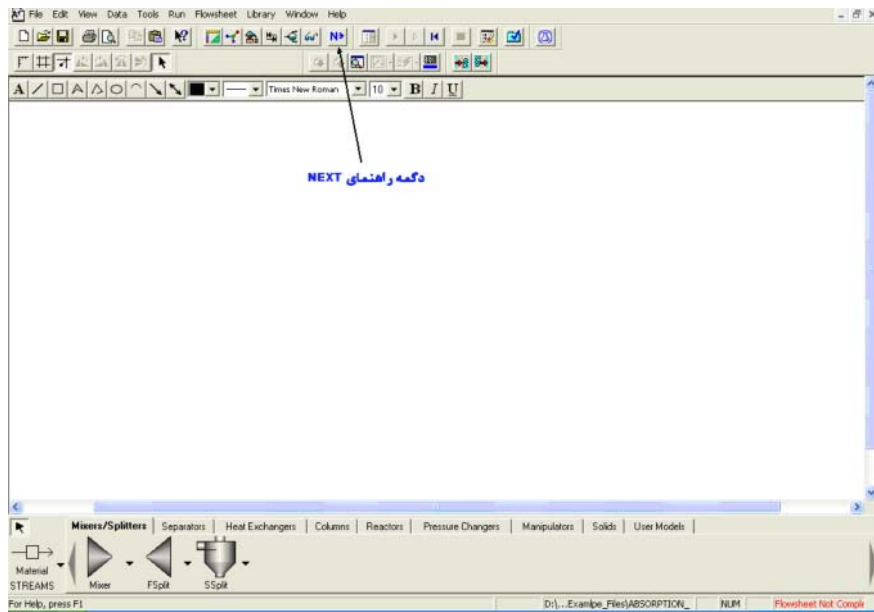


گزینه های زیر قابل انتخاب خواهند بود:

- Blank Simulation : در صورت انتخاب این گزینه تنظیمات محیط شبیه سازی بر اساس واحد از پیش تعریف شده نرم افزار است و در هنگام شبیه سازی می توان آنها را تغییر داد.
 - Template : با انتخاب این گزینه می توان محیط شبیه سازی را بر اساس واحدهایی که قصد استفاده از آنها را داریم با انتخاب الگوی مناسب، از ابتدا به صورت پیش فرض تنظیم کرد.
- مواردیکه در صورت استفاده از هر Template در Aspen Plus به صورت پیش فرض مد نظر قرار می گیرد در ستون سمت راست پنجره محاوره ای Next لیست شده است. انواع Template هایی که در ASPEN PLUS وجود دارند عبارتند از:

General – Gas Processing – Electrolytes – Chemicals – Air Separation – Pyrometallurgy – Pharmaceuticals – Petroleum – Hydrometallurgy – Specialty Chemicals - Solids

پس از این مرحله Flow Sheet برنامه Aspen Plus ظاهر خواهد شد:



دکمه راهنمای NEXT :



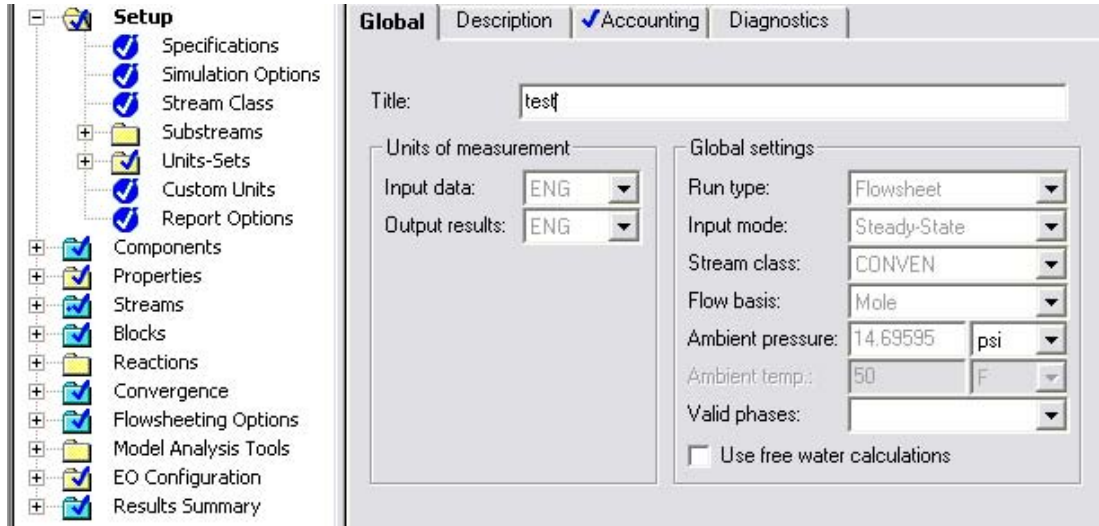
به کمک این دکمه می توان مراحل شبیه سازی را گام به گام به جلو هدایت کرده و تکمیل نمود.

معرفی علائم در وضعیت های مختلف برای آگاهی از وضعیت خطاها و صحت عملکردها

کلیه علائم موجود در ASPEN برای نمایش وضعیت داده های ورودی و خروجی محاسبه شده توسط سیستم به قرار جدول ذیل هستند :

	Input form	Required input complete
	Input form	Required input incomplete
	Input form	No data entered
	Mixed form	Input and Results
	Results form	No results present (calculations have not been run)
	Results form	Results available without Errors or Warnings (OK)
	Results form	Results available with Warnings
	Results form	Results available with Errors
	Results form	Results inconsistent with current input (input changed)
	Input folder	No data entered
	Input folder	Required input incomplete
	Input folder	Required input complete
	Results folder	No results present
	Results folder	Results available – OK
	Results folder	Results available with Warnings
	Results folder	Results available with Errors
	Results folder	Results inconsistent with current input (input changed)

پس از ورود به صفحه Flow Sheet نرم افزار ASPEN PLUS، ابتدا باید از طریق منوی Data به ترتیب اطلاعات مربوط به Set Up، Components و Properties را وارد سیستم نمود. ابتدا در صفحه Specification مربوط به پوشه Set Up اطلاعات مربوط به Global و Accounting را می بایست وارد سیستم نمود تا چک مارک های آبی ظاهر شوند در غیر اینصورت برنامه در حین اجرا دچار خطا خواهد شد.



Title : در این قسمت عنوان پروژه وارد می شود.

Input Data/Output Data : در این قسمت نوع آحاد اندازه گیری ورودی ها و خروجی ها وارد می شود.

Run Type : انتخاب نوع محیط کار با Aspen Plus که عبارتند از:

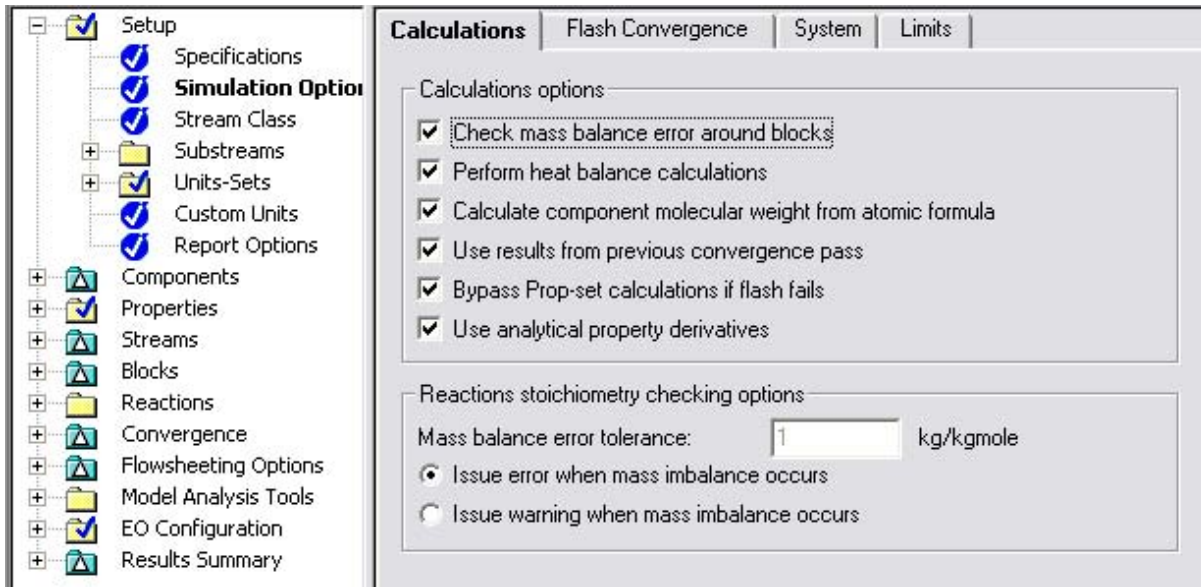
- **Flow Sheet** : برای کار در محیط شبیه سازی
- **Assay Data Analysis** : برای کار در محیط نفتی (محاسبه خصوصیات مربوط به برش های نفتی و نفت خام و تعیین اجزاء فرضی) استفاده می شود.
- **Data Regression** : از مهمترین کاربردهای آن محاسبه ضرایب interaction معادلات حالت فیزیکی بکار رفته از انطباق اطلاعات اندازه گیری شده VLE و LLE مواد خالص و یا مخلوط هاست.
- **Properties Plus** : با کمک آن می توان فایل خاصیت را تولید نمود و به نرم افزارهای دیگر لینک شد.
- **Property Analysis** : با کمک آن می توان منحنی های تعادلی را رسم کرده و در نتیجه سازگاری معادله حالت انتخاب شده را با خواص فیزیکی محاسبه شده مقایسه نمود. همچنین با کمک آن می توان بدون ایجاد شاخه جریان، جداول خصوصیات فیزیکی مربوط به مواد مختلف را ایجاد نمود.
- **Property Estimation** : در تخمین پارامترهای مجهول معادلات حالت کاربرد دارد.

Input Model : محیط شبیه سازی را از نظر پایدار یا ناپایدار بودن مشخص می کند.

Stream Class : نوع شاخه جریان ها در محیط شبیه سازی از نظر نوع اطلاعات ورودی را مشخص می کند که در فصل مربوط به شبیه سازی فرآیندهای جامد مفصلاً توضیح داده شده است.

فرم Simulation Option

صفحه Simulation Option گزینه دوم از پوشه Set up است. اولین صفحه این فرم صفحه Calculations می باشد که شامل گزینه های زیر است:



قسمت Calculations Option :

– گزینه Check mass balance error a round blocks :

با انتخاب این گزینه ASPEN محاسبات مربوط به موازنه جرم حول هر بلوک را با دقت $1/10000$ انجام می دهد. با فعال کردن این گزینه می توان پی برد که موازنه جرم در کدام قسمت فرآیند رعایت نشده است. چنین خطایی معمولاً در راکتورها در اثر رعایت نکردن استوکیومتری واکنش ها رخ می دهد. در صورتی که این گزینه فعال نشود چنین خطاهایی گزارش نخواهند شد.

– گزینه Perform heat balance calculations :

با انتخاب این گزینه ASPEN محاسبات مربوط به موازنه انرژی (محاسبات مربوط به آنتالپی، آنتروپی و انرژی آزاد گیبس) را انجام می دهد. در صورت غیر فعال بودن این گزینه فقط محاسبات مربوط به موازنه جرمی انجام می شود. در اینصورت دیگر نمی توان از جریان های کار و گرما استفاده کرد و زمان مورد نیاز برای شبیه سازی هم کاهش می یابد. در صورت انتخاب این گزینه از واحدهای عملیاتی زیر نمی توان استفاده کرد:

Flash3 – Flash2 – Heater – Rstoic – Ryield – Rplug – RCSTR – Rbatch – DSTWU – Distil– Decanter – CCD – Swash

– گزینه Calculate component molecular weight from atomic formula :

با انتخاب این گزینه ASPEN جرم مولکولی ترکیبات را با استفاده از تعداد اتم ها و جرم اتمی هر کدام از اتم ها که روش دقیق تری است، محاسبه می کند. در صورت عدم انتخاب این گزینه، ASPEN از جرم مولکولی موجود در بانک اطلاعاتی خود برای ترکیبات استفاده می کند.

– گزینه Use results from previous convergence pass :

به طور پیش فرض ASPEN در موقع انجام محاسبات تکرار برای هر دور جدید محاسبات، آخرین نتایج محاسبه شده قبلی را به عنوان حدس اولیه جدید در تکرار جدید استفاده می کند. در صورت غیر فعال شدن این گزینه در هر دور جدید از محاسبات از حدس اولیه های جدید استفاده می شود. معمولاً زمانی که پس از انجام چند دور محاسباتی همگرایی اتفاق نیافتاد می توان این گزینه را غیر فعال کرد.

لازم به ذکر است که برای هر کدام از بلوک ها هم در فرم Block Option در صفحه Simulation Option می توان جداگانه این تنظیمات را انجام داد.

گزینه Bypass prop-set calculation if flash fails :

به طور پیش فرض ASPEN در موقع انجام محاسبات فلش اگر به خطایی برخورد کند دیگر به محاسبه بقیه خصوصیات ترمودینامیکی نمی پردازد. در صورتی که این گزینه فعال شود در صورت بروز خطا محاسبات مربوط به همه خواص ترمودینامیکی انجام می شود. بهتر است جهت جلوگیری از خطاهای بیشتر همیشه این گزینه غیر فعال باشد.

قسمت Reactions Stoichiometry Checking Option :

Mass Balance error tolerance -

در این قسمت تلورانس خطا برای موازنه جرم در راکتور با استفاده از استوکیومتری واکنش تعریف می شود.

Issue error when mass imbalance occurs -

با فعال کردن این گزینه در صورتی که ASPEN در طول محاسبات مربوط به موازنه جرم با خطایی مواجه شود در پنجره Control Panel یک پیغام خطا ظاهر شده و ادامه محاسبات متوقف می شود.

Issue warning when mass imbalance occurs -

با فعال کردن این گزینه در صورتی که ASPEN در طول محاسبات مربوط به موازنه جرم با خطایی مواجه شود و میزان خطا هم بیشتر از مقدار تلرانس وارد شده باشد ادامه محاسبات متوقف نمی شود. برای بدست آوردن نتایج دقیق و قابل اطمینان سعی شود از این گزینه استفاده نشود.

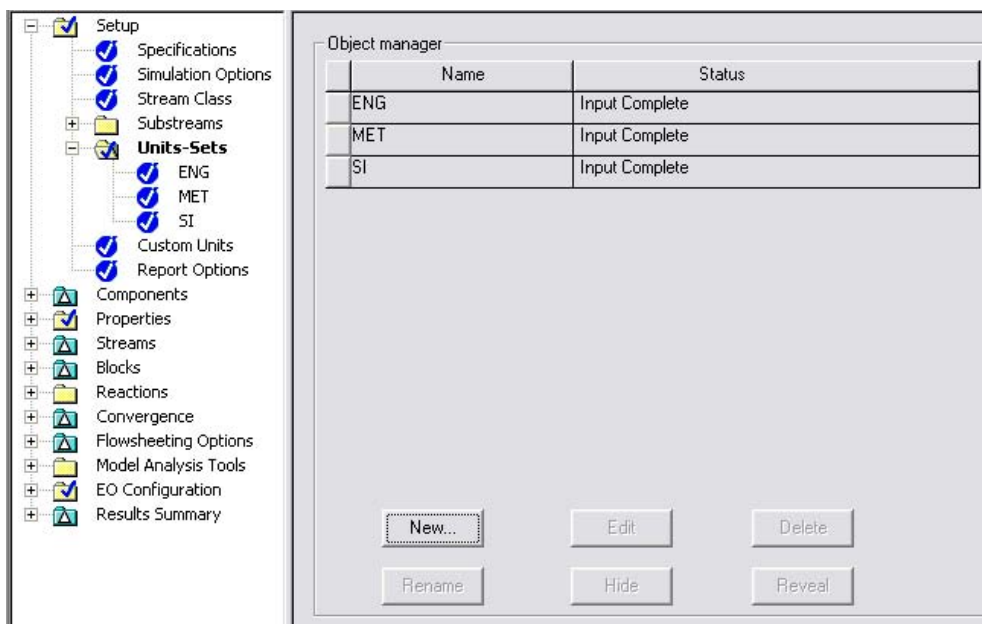
فرم Stream Class

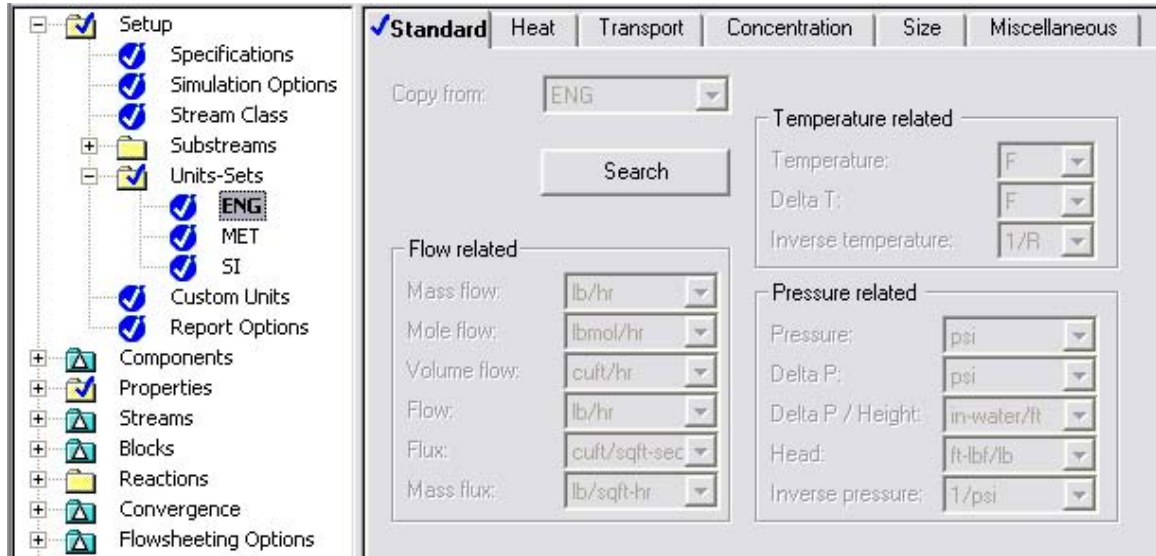
در ستون Data Browser در پوشه Set up صفحه ای به نام Stream Class وجود دارد که در این فرم به تنظیمات مربوط به نوع جریان های موجود در فرآیند و تعیین خصوصیات آنها پرداخته می شود.

واحد های اندازه گیری

در ستون Data Browser در پوشه Set up صفحه ای به نام Unit sets وجود دارد که وقتی این پوشه باز می شود فرم های مربوط به همه انواع سیستم واحد های اندازه گیری قابل مشاهده می باشد.

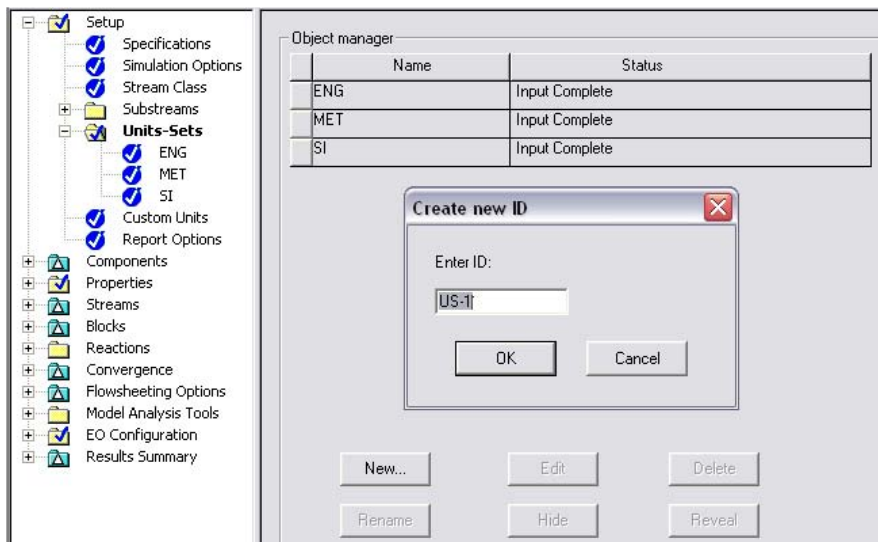
با کلیک کردن روی هر کدام از این فرم ها می توان آنها را فعال کرده و خصوصیات و واحد های اندازه گیری مربوط به آنها را در صفحات Standard, Heat, Transport, Concentration, Size, Miscellaneous مشاهده نمود.



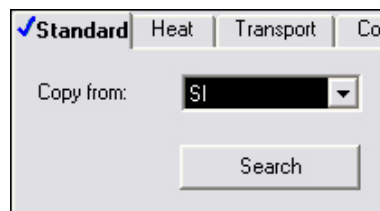


ایجاد یک واحد اندازه گیری جدید

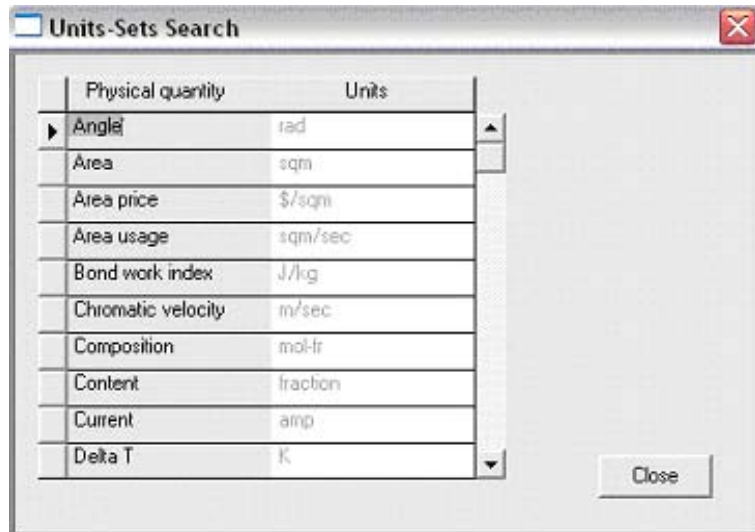
جهت اینکار ابتدا روی پوشه Unit Sets کلیک کرده و در سمت راست پنجره Data Browser، در پنجره Object Manager روی دکمه New کلیک می کنیم. پنجره Create New ID باز شده و نام واحد اندازه گیری مورد نظر خود را وارد کرده و روی دکمه OK کلیک می کنیم.



در اینصورت پنجره مربوط به فرم واحد اندازه گیری جدید باز می شود. از قسمت Copy Form یک سیستم واحد اندازه گیری که بیشترین نزدیکی به سیستم واحد اندازه گیری جدید را داشته باشد انتخاب کرده ؛ سپس هر کدام از کمیت ها را که نیاز به تغییر واحد دارند انتخاب نموده و واحد مناسب برای آن را تعیین می کنیم.



در تمام فرم های مربوط به سیستم واحد اندازه گیری می توان از دکمه Search برای مشاهده تمامی کمیت ها به ترتیب حروف الفبا استفاده نموده و تغییرات مورد نظر خود را در همین قسمت اعمال کرد.



فرم Report Option

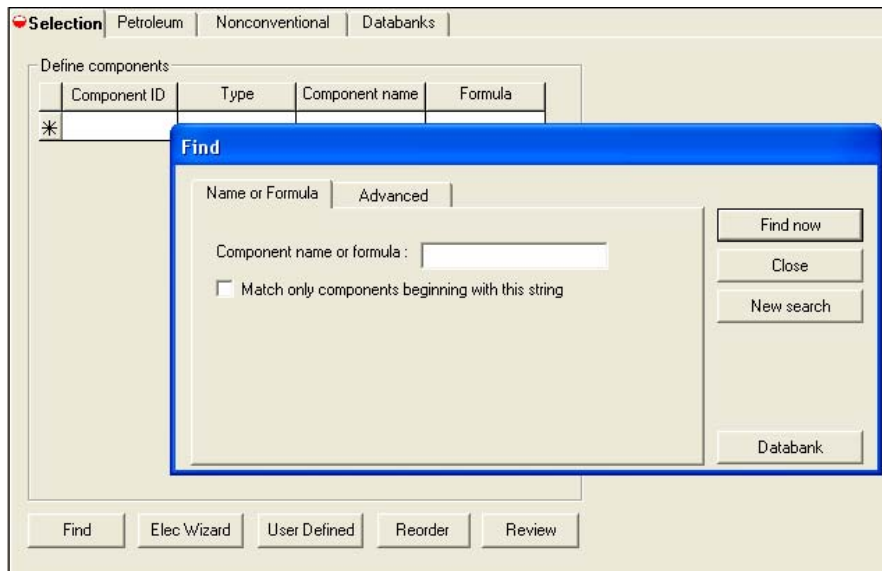
در این قسمت کاربر قادر خواهد بود تا تمام تنظیمات مورد نظر خود را در رابطه با فرم گزارش ASPEN انجام دهد.

انتخاب ترکیبات از بانک اطلاعاتی ASPEN

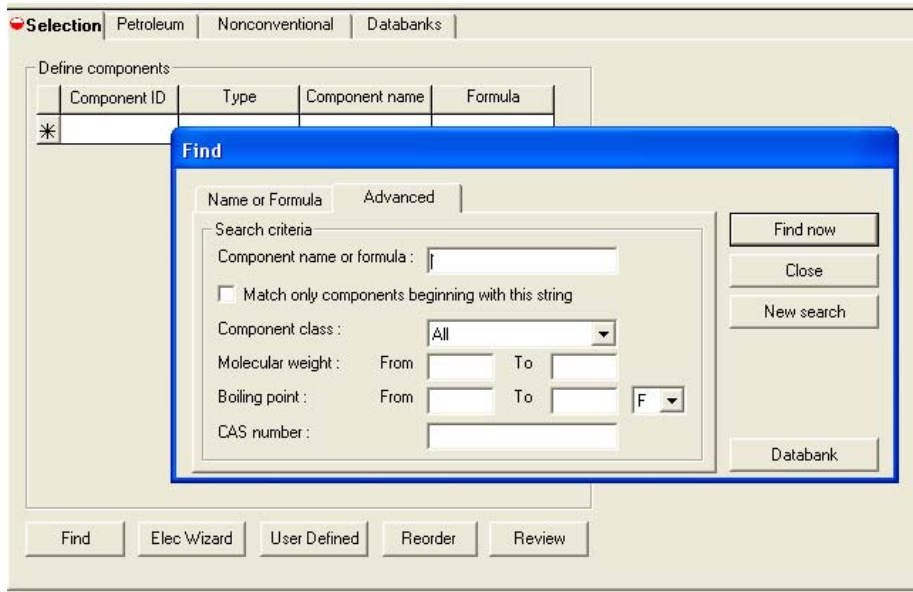
از منوی DATA (یا زیر پوشه Component از پوشه Set up) گزینه Component را انتخاب می کنیم سپس در قسمت Component ID فرمول یا نام ترکیب را وارد می کنیم. در صورتی که فرمول یا نام ترکیب وارد شده با اطلاعات موجود در Data Bank همخوانی نداشت، در اینصورت از دکمه Find برای یافتن ترکیب مورد نظر استفاده می کنیم. در اینصورت امکان دو نوع جستجو به کمک Find وجود خواهد داشت.

(۱) در صفحه Name or Formula چند حرف ابتدایی از نام یا فرمول ماده مورد نظر را وارد کرده و دکمه

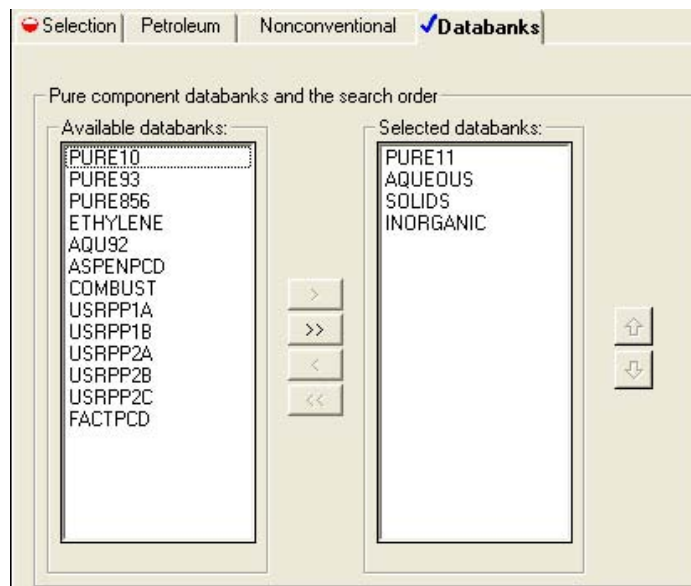
Find Now را کلیک می کنیم.



در صفحه Advanced با وارد کردن هر ترکیبی از اطلاعات: نام یا فرمول ترکیب، طبقه بندی ماده، وزن ماده، نقطه جوش، شماره CAS عمل جستجو را انجام می دهیم:



در ضمن جهت دسترسی به بانک اطلاعاتی ترکیبات موجود در ASPEN باید وارد قسمت Data Bank از پنجره Component Specification شد. در صورتی که تمایل داشته باشیم در شبیه سازی از بانک اطلاعاتی خاصی استفاده کنیم می بایست آن بانک اطلاعاتی را از قسمت Available Databanks به قسمت Selected Databanks منتقل کنیم.



با انتخاب عنوان هر کدام از این Databank ها توضیحات مربوط به آن در زیر صفحه نمایش داده خواهد شد. از فلش های سمت راست این صفحه برای تعیین ترتیب بانک های اطلاعاتی برای جستجوی پارامترها و اطلاعات لازم استفاده می شود.

تعریف ترکیبات جدید در ASPEN

برای تعریف ترکیبات جدید در ASPEN که در بانک اطلاعاتی موجود نیستند (ترکیبات متداول، جامد و نامتداول) کاربر می تواند با حرکت در مسیر User Defined (Data\Component\Specification\User Defined)، از طریق پنجره User Defined Component Wizard ترکیب جدید را معرفی نماید. پس از تعریف ماده، فرمول ماده و انتخاب نوع آن (Conventional, Solids, Nonconventional) کلید Next فعال شده و می توانیم اطلاعات دیگر را حسب نوع ماده انتخاب شده وارد سیستم نماییم:

Welcome to the User Defined Component Wizard, the quickest way to enter properties for User Defined Component. This wizard will lead you through the steps to enter the required physical properties for the User Defined Component based on its type.

Component ID: Type:

Formula:

The required properties for Conventional components are

Molecular weight, normal boiling point, molecular structure, vapor pressure and ideal heat gas capacity.

Click Next> to continue or Finish to accept the component and exit.

Cancel <Back Next> Finish

الف : تعیین خصوصیات ماده Conventional :

پس از انتخاب نوع ماده Conventional در صفحه User Defined Component Wizard و ورود به صفحه بعدی از طریق دکمه NEXT ، اطلاعات جدول زیر در صورت امکان پر می شود.

Component ID: A Formula: A

Enter available physical properties

Molecular weight:

Normal boiling point: F

Specific gravity at 60 deg F:

Standard enthalpy of formation: Btu/lbmol

Standard Gibbs energy of formation: Btu/lbmol

در این صفحه ، آنتالپی استاندارد تشکیل گاز ایده آل در 25 C (DHFORM) برای فرآیندهایی که نیاز به محاسبه آنتالپی دارد ، کاربرد دارد و انرژی آزاد گیبس استاندارد تشکیل (DGFORM) هم برای فرآیندهایی که شامل واکنش شیمیایی است و فرآیندهایی که در آنها از راکتور گیبس استفاده می شود کاربرد دارد. در این مرحله در صورتیکه نیاز به وارد کردن اطلاعات بیشتر (تعریف ساختار مولکولی ، داده های تعادلی فشار بخار ، ضرایب معادله آنتوین برای محاسبه فشار بخار ، داده های ظرفیت حرارتی گاز ایده آل و ضرایب پلی نومیال ظرفیت حرارتی گاز ایده آل) در مورد ماده مورد نظر باشد از طریق دکمه NEXT ، وارد صفحه بعدی می شویم:

Conventional Component Additional Data

Select additional properties or data to enter

1 Molecular structure

2 Vapor pressure data

3 Extended Antoine vapor pressure coefficients

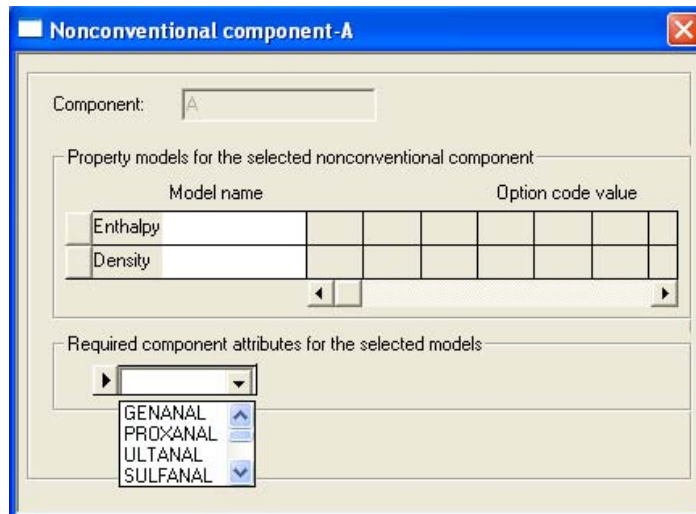
4 Ideal gas heat capacity data

5 Ideal gas heat capacity polynomial coefficients

Click buttons 1 to 5 to enter additional properties or data.

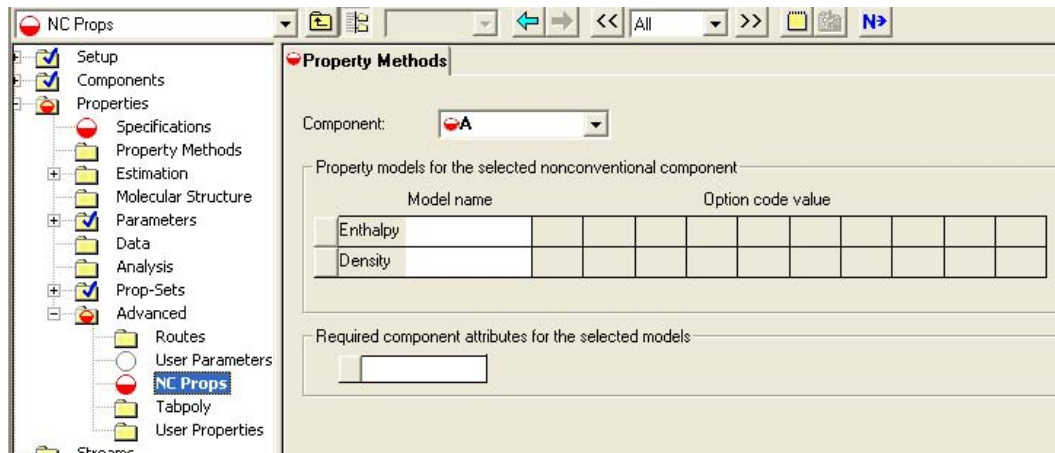
ب : تعیین خصوصیات ماده NonConventional :

پس از انتخاب نوع ماده NonConventional در صفحه User Defined Component Wizard و ورود به صفحه بعدی از طریق دکمه NEXT ، جدول زیر ظاهر خواهد شد.



این صفحه شامل دو قسمت است که در قسمت اول (Property models for the selected nonconventional component) برای محاسبه آنتالپی و دانسیته ماده NonConventional یک مدل انتخاب می کنیم. بر مبنای مدل انتخاب شده در قسمت دوم (Required component attributes for the selected models) یک نوع از خصوصیات ماده NonConventional که در همین فصل توضیح داده شد ، ظاهر خواهد شد.

خصوصیات ماده NonConventional ای را که وارد کردیم در فرم NcProps مطابق شکل زیر قابل مشاهده است:

**ج : تعیین خصوصیات ماده Solid :**

پس از انتخاب نوع ماده Solid در صفحه User Defined Component Wizard و ورود به صفحه بعدی از طریق دکمه NEXT ، جدول زیر ظاهر خواهد شد.

در این صفحه ، آنتالپی استاندارد تشکیل جامد برای فرآیندهایی که نیاز به محاسبه آنتالپی دارد ، کاربرد دارد و انرژی آزاد تشکیل جامد هم برای فرآیندهایی که شامل واکنش شیمیایی است و فرآیندهایی که در آنها از راکتور گیبس استفاده می شود کاربرد دارد. در این مرحله در صورتیکه نیاز به وارد کردن اطلاعات بیشتر (تعریف ساختار مولکولی ، داده های تعادلی فشار بخار ، ضرایب معادله آنتونین برای محاسبه فشار بخار ، داده های ظرفیت حرارتی جامد و ضرایب پلی نومیال ظرفیت حرارتی جامد) در مورد ماده مورد نظر باشد از طریق دکمه NEXT ، وارد صفحه بعدی می شویم:

انتخاب روش ترمودینامیکی مناسب (PROPERTY PACKAGE)

انتخاب روش ترمودینامیکی مناسب یکی از مهمترین پارامترها در موفقیت شبیه سازی فرآیند است. روش های ترمودینامیکی موجود در ASPEN امکان تعیین خواص مخلوط های از محدوده سیستم های هیدروکربن های سبک تا سیستم های مخلوط های پیچیده برش های نفتی و سیستم های شیمیایی به شدت غیر ایده آل را فراهم می کنند. برای سیستم های به شدت غیر ایده آل لازم است تا داده های آزمایشگاهی جهت بهبود محاسبات به نرم افزار معرفی شوند. معادلات ترمودینامیکی می بایست قادر باشند تا خواص ترمودینامیکی و انتقالی سیستم را محاسبه کنند. خواص ترمودینامیکی عبارتند از:

❖ ضریب فوگاسیته

❖ آنتالپی

❖ آنتروپی

❖ انرژی آزاد گیبس

❖ حجم

و خواص انتقالی عبارتند از:

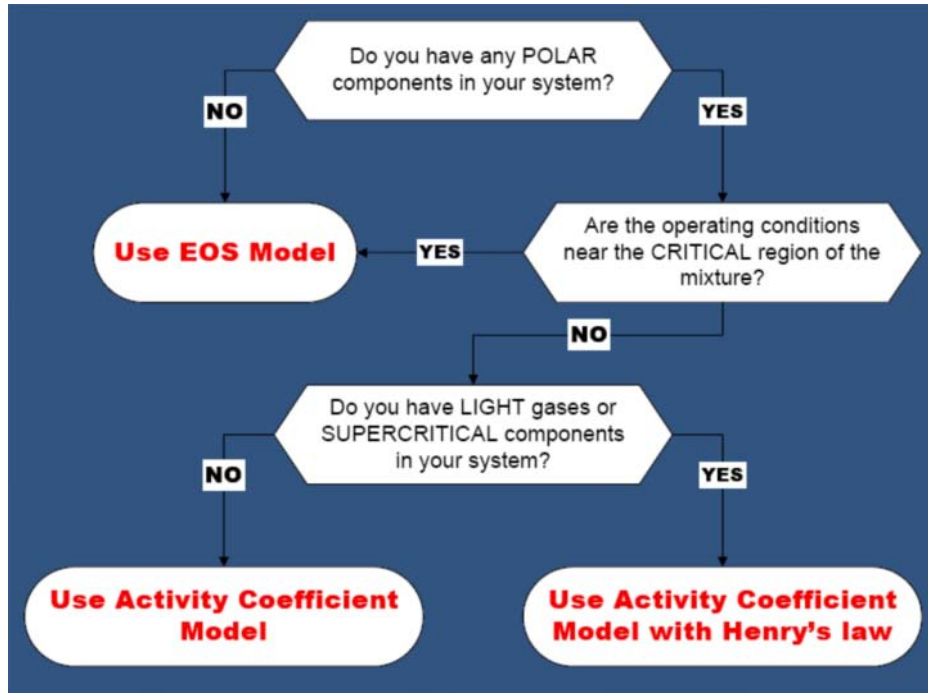
❖ ویسکوزیته

❖ ضریب هدایت حرارتی

❖ ضریب نفوذ

❖ کشش سطحی

در شکل زیر طریقه انتخاب روش ترمودینامیکی مناسب و در جدول بعدی مقایسه کاربردی مدل های اکتیویته و معادلات حالت را نشان می دهد.



طریقه انتخاب روش ترمودینامیکی مناسب

مقایسه کاربردی مدل های اکتیویته و معادلات حالت

معادلات حالت	مدل های اکتیویته
برای محلول های غیر ایده آل مناسب نیستند.	برای مایعات به شدت غیر ایده آل می توانند استفاده شوند.
در نواحی بحرانی سازگار هستند.	در نواحی بحرانی ناسازگار هستند.
برای هر دو فاز مایع و گاز می توانند استفاده شوند.	فقط برای فاز مایع سازگار هستند و برای فاز گاز از معادله حالت باید استفاده کرد.
جهت برون یابی پارامترها با دما به خوبی عمل می کند.	پارامترهای دو تایی به شدت وابستگی دمایی دارند.

به بیان دیگر می توان گفت :

- معادلات حالت برای ترکیبات هیدروکربنی در بازه وسیعی از شرایط عملیاتی مناسب می باشند اما کاربرد آنها محدود به سیستم های غیر قطبی یا مواد مختصر قطبی است.
- برای سیستم های شیمیایی غیر ایده آل یا قطبی بهتر است از سیستم ترمودینامیکی دو گانه استفاده گردد. در این حالت یک معادله حالت برای پیش بینی ضرایب فوگاسیته فاز بخار (معمولاً سیستم IDEAL GAS، یا معادلات حالت PR, RK, SRK) و یک مدل ضریب فعالیت برای فاز مایع انتخاب می شود.
- مدل های اکتیویته برای محدوده فشار های معمولی و برای مواقعی استفاده می شوند که رفتار سیستم به تغییرات فشار وابستگی زیادی را نشان دهد. در این حالت انتخاب این مدل ها برای شبیه سازی باید با دقت و احتیاط زیادی انجام شود و تنظیم پارامترهای این مدل ها باید بر اساس نمونه های مشاهده شده از داده های تجربی انجام شود و لذا این مدل ها را نمی توان برای شرایط عملیاتی آزمایش نشده استفاده کرد.

• برای سیستم هایی که فشار یا دمای عملیاتی بالاتر از دما یا فشار بحرانی یک یا چند جزء باشد بهتر است حتی در صورت وجود مواد قطبی از معادلات حالت اصلاح شده از جمله PRSV (PR اصلاح شده) که قوانین اختلاط در آن لحاظ شده استفاده کرد.

در ASPEN مدل های ترمودینامیکی مورد نظر در (PROPERTY PACKAGE) به چهار صورت معادلات حالت ایده آل، معادلات حالت، معادلات ضریب فعالیت و معادلات ترمودینامیکی برای سیستم های خاص دسته بندی می شوند. تعداد زیادی از این معادلات ترمودینامیکی، مدل های ساخته شده توسط شرکت ASPEN TECH می باشند. در جدول زیر به معرفی معادلات حالت و مدل های اکتیویته موجود در ASPEN اشاره شده است. در این قسمت به یک مثال کاربردی در رابطه با استفاده معادلات حالت و اکتیویته در محاسبه ثابت تعادل ترمودینامیکی محلول ها اشاره می شود:

محاسبه K با استفاده از معادلات حالت (EOS) :

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{\hat{\phi}_i^L}{\hat{\phi}_i^V}, \quad \ln \hat{\phi}_i^V = \int_0^P (Z-1) \frac{dP}{P}$$

محاسبه K با استفاده از معادلات اکتیویته :

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{\gamma_i \hat{f}_i}{\hat{\phi}_i^V P}$$

معرفی معادلات حالت و مدل های اکتیویته موجود در ASPEN

❖ معادلات ترمودینامیکی حالت ایده آل :

Ideal Property Methods

Ideal Property Method	K-Value Method
IDEAL	Ideal Gas/Raoult's law/Henry's law
SYSOP0	Release 8 version of Ideal Gas/Raoult's law

❖ معادلات حالت :

Equation-of-State Property Methods

Equation-of-State Property Method	K-Value Method
BWR-LS	BWR Lee-Starling
LK-PLOCK	Lee-Kesler-Plöcker
PENG-ROB	Peng-Robinson
PR-BM	Peng-Robinson with Boston-Mathias alpha function
PRWS	Peng-Robinson with Wong-Sandler mixing rules
PRMHV2	Peng-Robinson with modified Huron-Vidal mixing rules
PSRK	Predictive Redlich-Kwong-Soave
RKSWS	Redlich-Kwong-Soave with Wong-Sandler mixing rules
RKSMHV2	Redlich-Kwong-Soave with modified Huron-Vidal mixing rules
RK-ASPEN	Redlich-Kwong-ASPEN
RK-SOAVE	Redlich-Kwong-Soave
RKS-BM	Redlich-Kwong-Soave with Boston-Mathias alpha function
SR-POLAR	Schwartzentruber-Renon

❖ معادلات ضریب فعالیت :

Activity Coefficient Property Methods

Activity Coefficient Property Method	Liquid Phase Activity Coefficient Method	Vapor Phase Fugacity Coefficient Method
B-PITZER	Bromley-Pitzer	Redlich-Kwong-Soave
ELECNRTL	Electrolyte NRTL	Redlich-Kwong
ENRTL-HF	Electrolyte NRTL	HF Hexamerization model
ENRTL-HG	Electrolyte NRTL	Redlich-Kwong
NRTL	NRTL	Ideal gas
NRTL-HOC	NRTL	Hayden-O'Connell
NRTL-NTH	NRTL	Nothnagel
NRTL-RK	NRTL	Redlich-Kwong

❖ معادلات ترمودینامیکی برای سیستم های خاص:

Property Methods for Special Systems

Property Methods for Special Systems	K-Value Method	System
AMINES	Kent-Eisenberg amines model	H ₂ S, CO ₂ , in MEA, DEA, DIPA, DGA solution
APISOUR	API sour water model	Sour water with NH ₃ , H ₂ S, CO ₂
BK-10	Braun K-10	Petroleum
SOLIDS	Ideal Gas/Raoult's law/Henry's law/solid activity coefficients	Pyrometallurgical
CHAO-SEA	Chao-Seader corresponding states model	Petroleum
GRAYSON	Grayson-Streed corresponding states model	Petroleum
STEAM-TA	ASME steam table correlations	Water/steam
STEAMNBS	NBS/NRC steam table equation of state	Water/steam

علاوه بر اطلاعات جداول بالا، می توان با مراجعه به اطلاعات جداول زیر در رابطه با نوع فرآیندی که با آن سر و کار داریم (ایده آل، غیر ایده آل، نوع فرآیند از نظر جامد، گاز یا الکترولیت بودن و...) معادله ترمودینامیکی مناسب را انتخاب کرد.

Oil and Gas Production

Application	Recommended Property Methods
Reservoir systems	PR-BM, RKS-BM
Platform separation	PR-BM, RKS-BM
Transportation of oil and gas by pipeline	PR-BM, RKS-BM

Refinery

Application	Recommended Property Methods
Low pressure applications (up to several atm) Vacuum tower, atmospheric crude tower	BK10, CHAO-SEA, GRAYSON
Medium pressure applications (up to several tens of atm) Coker main fractionator, FCC main fractionator	CHAO-SEA, GRAYSON, PENG-ROB, RK-SOAVE
Hydrogen-rich applications Reformer, Hydrofiner	GRAYSON, PENG-ROB, RK-SOAVE
Lube oil unit, De-asphalting unit	PENG-ROB, RK-SOAVE

Gas Processing

Application	Recommended Property Methods
Hydrocarbon separations Demethanizer C3-splitter	PR-BM, RKS-BM, PENG-ROB, RK-SOAVE
Cryogenic gas processing Air separation	PR-BM, RKS-BM, PENG-ROB, RK-SOAVE
Gas dehydration with glycols	PRWS, RKSWS, PRMHV2, RKSMHV2, PSRK, SR-POLAR
Acid gas absorption with Methanol (RECTISOL) NMP (PURISOL)	PRWS, RKSWS, PRMHV2, RKSMHV2, PSRK, SR-POLAR
Acid gas absorption with Water Ammonia Amines Amines + methanol (AMISOL) Caustic Lime Hot carbonate	ELECNRTL
Claus process	PRWS, RKSWS, PRMHV2, RKSMHV2, PSRK, SR-POLAR

Petrochemicals

Application	Recommended Property Methods
Ethylene plant Primary fractionator Light hydrocarbons Separation train Quench tower	CHAO-SEA, GRAYSON PENG-ROB, RK-SOAVE
Aromatics BTX extraction	WILSON, NRTL, UNIQUAC and their variances †
Substituted hydrocarbons VCM plant Acrylonitrile plant	PENG-ROB, RK-SOAVE
Ether production MTBE, ETBE, TAME	WILSON, NRTL, UNIQUAC and their variances †
Ethylbenzene and styrene plants	PENG-ROB, RK-SOAVE -or- WILSON, NRTL, UNIQUAC and their variances †
Terephthalic acid	WILSON, NRTL, UNIQUAC and their variances † (with dimerization in acetic acid section)

Chemicals

Application	Recommended Property Methods
Azeotropic separations Alcohol separation	WILSON, NRTL, UNIQUAC and their variances [†]
Carboxylic acids Acetic acid plant	WILS-HOC, NRTL-HOC, UNIQ-HOC
Phenol plant	WILSON, NRTL, UNIQUAC and their variances [†]
Liquid phase reactions Esterification	WILSON, NRTL, UNIQUAC and their variances [†]
Ammonia plant	PENG-ROB, RK-SOAVE
Fluorochemicals	WILS-HF
Inorganic Chemicals Caustic Acids Phosphoric acid Sulphuric acid Nitric acid Hydrochloric acid	ELECNRTL
Hydrofluoric acid	ENRTL-HF

Coal Processing

Application	Recommended Property Methods
Size reduction crushing, grinding	SOLIDS
Separation and cleaning sieving, cyclones, precipitation, washing	SOLIDS
Combustion	PR-BM, RKS-BM (combustion databank)
Acid gas absorption with Methanol (RECTISOL) NMP (PURISOL)	PRWS, RKSWS, PRMHV2, RKSMHV2, PSRK, SR-POLAR
Acid gas absorption with Water Ammonia Amines Amines + methanol (AMISOL) Caustic Lime Hot carbonate	ELECNRTL
Coal gasification and liquefaction	See Synthetic Fuel table

Water and Steam

Application	Recommended Property Methods
Steam systems Coolant	STEAMNBS, STEAM-TA

Power Generation

Application	Recommended Property Methods
Combustion Coal Oil	PR-BM, RKS-BM (combustion databank)
Steam cycles Compressors Turbines	STEAMNBS, STEAM-TA
Acid gas absorption	See gas processing.

Synthetic Fuel

Application	Recommended Property Methods
Synthesis gas	PR-BM, RKS-BM
Coal gasification	PR-BM, RKS-BM
Coal liquefaction	PR-BM, RKS-BM, BWR-LS

Environmental

Application	Recommended Property Methods
Solvent recovery	WILSON, NRTL, UNIQUAC and their variances †
(Substituted) hydrocarbon stripping	WILSON, NRTL, UNIQUAC and their variances †
Acid gas stripping from Methanol (RECTISOL) NMP (PURISOL)	PRWS, RKSWS, PRMHV2, RKS MHV2, PSRK, SR-POLAR
Acid gas stripping from: Water Ammonia Amines Amines + methanol (AMISOL) Caustic Lime Hot carbonate	ELECNRTL
Acids Stripping Neutralization	ELECNRTL

Mineral and Metallurgical Processes

Application	Recommended Property Methods
Mechanical processing: Crushing Grinding Sieving Washing	SOLIDS
Hydrometallurgy Mineral leaching	ELECNRTL
Pyrometallurgy Smelter Converter	SOLIDS

همچنین علاوه بر جداول بالا، می توان معادله ترمودینامیکی مناسب را برای حالت های مختلف محلول ها با کمک جداول زیر تعیین کرد.

مواد قطبی	الکترولیتی	Pitzer or ENRTL			
		P < 10 bar	داریم LL	پارامتر های zj موجودند	NRTL , UNIQUAC
				پارامتر های zj موجود نیستند	UNIFAC
			نداریم LL	پارامتر های zj موجودند	Wilson , NRTL , UNIQUAC
				پارامتر های zj موجود نیستند	UNIFAC
		P > 10 bar	پارامتر های zj موجودند		PR or Schwartentruber-Renon یا PR or PRS با قوانین اختلاط WS یا PRS با قوانین اختلاط MHV2
پارامتر های zj موجود نیستند			PR یا RKS , PSRK یا قوانین اختلاط MHV2		
مواد غیر قطبی (برای انجام محاسبات فاز بخار)	مواد واقعی	PR or RKS-Plocker-Kesler-Lee			
		مواد فرضی +	فشار خلأ	BraunK-10 or Ideal	
		مواد واقعی	فشار غیر خلأ	BraunK-10 or Chao-Seader & Grayson-Streed	

- عموماً در مورد سیستم های آلی، با پیچیدگی های زیاد، معادله Peng-Robinson اصلاح شده توسط ASPEN پاسخ های دقیق تر و پایدارتری نسبت به بقیه مدل ها در فاز گاز و تعادلات VLE می دهد.

- در مورد مواد الکترولیتی روش Electrolyte که ترکیبی از مدل های بروملی و ENRTL می باشد بهترین گزینه است. در این حالت جهت فاز گاز، استفاده از SRK ارجحیت دارد.

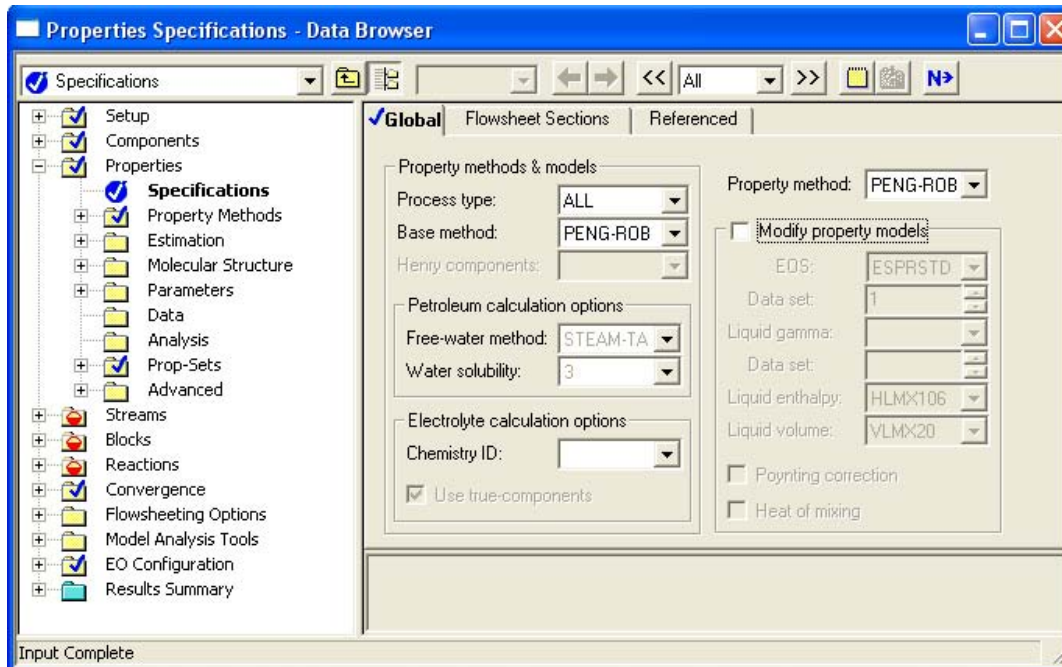
مدل های اکتیویته مناسب برای انجام محاسبات فاز بخار با مدل های ضریب اکتیویته

Vapor Phase ASSOCIATION	وجود دارد	دیمره شده	UNIFAC , Wilson , NRTL یا UNIFAC با معادلات حالت Hyden یا O'Cannel یا Nothnagel
		هگزامره شده	UNIFAC , Wilson , NRTL یا UNIFAC با معادلات حالت مخصوص هگزامرها
	وجود ندارد	UNIFAC , Wilson , NRTL یا UNIFAC با معادله حالت گاز ایده آل یا RK	

طریقه معرفی معادله ترمودینامیکی در نرم افزار ASPEN PLUS

برای انتخاب یک مدل ترمودینامیکی مراحل زیر را باید دنبال کرد:

۱. از منوی Data، Properties را انتخاب می کنیم.
۲. در صفحه Global مدل ترمودینامیکی مناسب را انتخاب می کنیم.



۳. با انتخاب نوع فرآیند در قسمت Process Type معادلات ترمودینامیکی مناسب در جعبه Base method قابل انتخاب خواهد بود.

۴. اگر مدل ترمودینامیکی از نوع ضریب فعالیت باشد، در صورتیکه بخواهیم برای ترکیبات فوق بحرانی از قانون هنری استفاده کنیم در قسمت Henry Component، ID مربوط به ترکیبات هنری را مشخص می کنیم. در این حالت برای تخمین خواص ترمودینامیکی اجزاء بحرانی، به جای معادله فعالیت از معادله حالت استفاده می شود. لازم به ذکر است که پارامترهای مربوط به قانون هنری (که مربوط به حلال و حل شونده در رقت بی نهایت می باشد) در مورد بسیاری از اجزاء وجود دارند که با تعیین ترکیبات هنری این پارامترها اعمال می شوند. اگر مدل ترمودینامیکی از نوع معادله حالت باشد در این صورت ترکیبات فوق بحرانی مشابه ترکیبات دیگر خواهند بود و نیازی به تعیین این قسمت نداریم.

۵. اگر فرآیندی با آب و هیدروکربن همراه باشد، در اینصورت ۲ فاز مایع همراه با فاز بخار وجود خواهند داشت. برای محاسبات تعادل بخار-مایع-دو روش در Aspen وجود دارد:

محاسبات با روش Free Water

(در این روش فرض می شود که فاز آب خالص است و در مواقعی استفاده می شود که حلالیت فاز گازی در آب کم باشد. در این صورت با انتخاب این گزینه حجم محاسبات کاهش خواهد یافت)
معادلات ترمودینامیکی قابل انتخاب برای این قسمت به شرح جدول ذیل می باشند:

Property Method	Description	Merits
STEAM-TA	1967 ASME steam table correlations (default)	—
STEAMNBS	NBS/NRC steam table correlations	More accurate than the ASME steam table
IDEAL or SYSOP0	For systems at low or moderate pressures	More efficient calculations than STEAM-TA or STEAMNBS

محاسبات سه فازی دقیق (Water Solubility)

در این روش $K-Value$ آب در فاز آلی به صورت زیر محاسبه می شود:

$$K_w = \frac{\gamma_w \phi_w^{*,l}}{\phi_w^v}$$

$\phi_w^{*,l}$: ضریب فوگاسیته آب خالص

ϕ_w^v : ضریب فوگاسیته آب در فاز بخار مخلوط

γ_w : ضریب فعالیت آب در فاز آلی

در این صورت چهار روش زیر برای محاسبات ϕ_w^v و γ_w قابل انتخاب خواهند بود:

Water Solubility Option	Calculates γ_w from ^{††}	Calculates ϕ_w^v from
0	$\gamma_w = \frac{1}{x_w^{sol}}$	Free-water property method
1	$\gamma_w = \frac{1}{x_w^{sol}}$	Primary property method
2	$\gamma_w = f(T, x_w)$ where $\gamma_w = \frac{1}{x_w^{sol}}$ when $x_w = x_w^{sol}$	Primary property method
3 [†]	The K-value of water is calculated by the primary property method	

Note X_w^{sol} is solubility of water in the organic phase, calculated using the water-solubility correlation. (WATSOL).

[†] Water solubility option 3 is not recommended unless binary interaction parameters regressed from liquid-liquid equilibrium data are available.

^{††} X_w^{sol} is solubility of water in the organic phase, calculated using the water-solubility correlation. (WATSOL).

۶. برای فرآیند های الکترولیت باید ID سیستم فرآیند الکترولیتی در قسمت Chemistry ID مشخص شود.

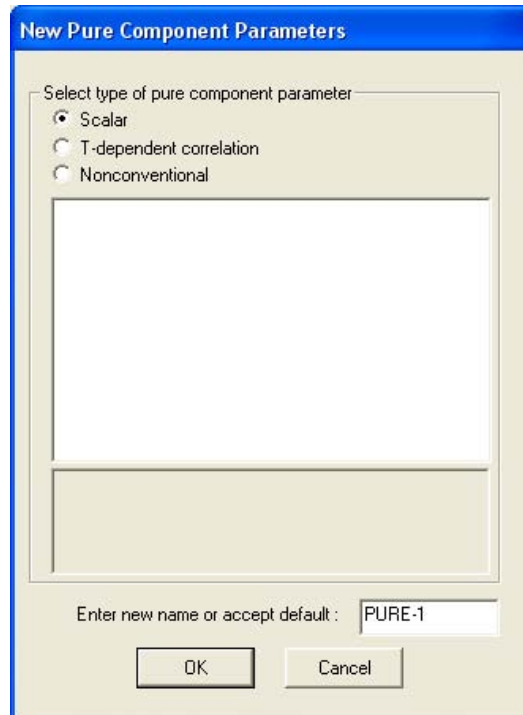
روش های محاسبه خواص ترکیبات خالص

در ASPEN PLUS کاربر می تواند مستقیماً پارامترهای مربوط به روش های محاسبه خواص ترکیبات خالص را از طریق

مسیر:

Data(Properties) Parameters \ Pure Components\new

در سه حالت اسکالر، تابعیت دمایی و حالت ترکیبات نامتناول مطابق شکل زیر وارد سیستم نماید.



تمرین ۱:

مطلوبست وارد کردن اطلاعات زیر برای ترکیبات متان و اتان :

ترکیبات	متان	اتان
Tc	۴۱۰/۷ K	-
pc	۴۰/۷ atm	۳۶/۲ atm

تمرین ۲:

ظرفیت گرمایی گاز ایده آل را برای متان مطابق با رابطه زیر (CPIG) وارد سیستم نمایید:

$$C_p^{IG} = -2001.2 + 358.9T - 0.515T^2 + 4.41 \times 10^{-4} T^3 - 1.58 \times 10^{-7} T^4$$

$$T:K \quad C_p^{IG} : \frac{J}{kmol.K}$$

ورود مقادیر پارامترهای دوجزئی

در ASPEN PLUS کاربر می تواند مستقیماً مقادیر مربوط به پارامترهای دوجزئی را از طریق مسیر زیر معرفی نماید :

Data\Properties\ Parameters \ Binary Interaction

تمرین ۳:

ضرایب ترمودینامیکی K_{ij} ($K_{ij} = K_{ji}$) را برای معادله ترمودینامیکی Redlich-Kwong-Soave (RKSKIJ) مطابق جدول زیر وارد نمایید:

C ₁ -C ₂	۰/۰۹۷
C ₁ -C ₃	۰
C ₂ -C ₃	-۰/۰۱۸

تمرین ۴:

ضرایب معادله NRTL را برای سیستم C₁-C₂ مطابق با اطلاعات زیر وارد نمایید:

$$a_{12} = 0 \quad a_{21} = 0 \quad b_{12} = -74.18 \quad b_{21} = 270.8 \quad c_{12} = 0.2982$$

بررسی خواص محاسبه شده توسط معادله ترمودینامیکی انتخاب شده

در نرم افزار Aspen Plus با استفاده از Property Analysis می توان جداول و منحنی های مربوط به خواص محاسبه شده توسط معادله ترمودینامیکی انتخاب شده را ترسیم کرد. بدین منظور در قسمت run type از صفحه Setup Specification Property Analysis, Global را انتخاب می کنیم. در این صفحه پس از حصول اطمینان از انتخاب ترکیبات و معادله ترمودینامیکی مناسب، یکی از سه مسیر زیر را انتخاب می نماییم:

❖ برای ترسیم خواص ترکیبات خالص بر حسب دما :

Tool \ Analysis \ Property \ pure

❖ برای ترسیم خواص محاسبه شده برای سیستم های دو جزئی (نمودار T-xy، نمودار P-xy، نمودار انرژی گیبس مخلوط) :

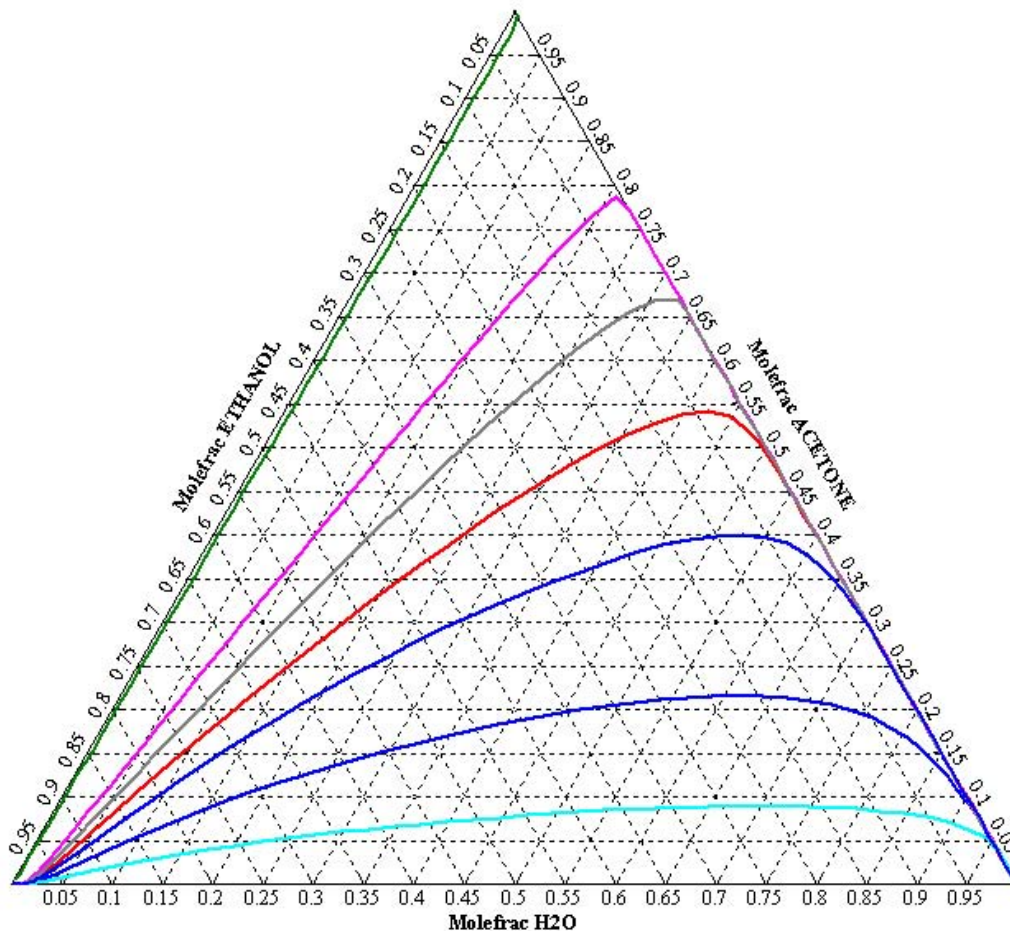
Tool \ Analysis \ Property \ Binary

❖ و برای بررسی نقطه آزنوتروپ برای سیستم های شیمیایی غیر ایده آل :

Tool \ Analysis \ Property \ Residue

منحنی های Residue مسیر تغییرات ترکیب درصد ترکیبات را در یک مخلوط سه تایی تحت عمل تقطیر با جریان برگشتی کامل نشان می دهد. از این منحنی برای تعیین نقاط آزنوتروپ و تأثیر آن در میزان جداسازی تقطیر استفاده می شود. این منحنی ها بیشتر برای سیستم های شیمیایی غیر ایده آل استفاده می شوند. معادلات ترمودینامیکی مورد استفاده در این منحنی ها معادلات ضریب فعالیت از قبیل UNIFAC, WILSON, UNIQUAC, NRTL هستند. در این سیستم ها نباید از معادلات الکترولیت ها استفاده کرد.

Residue curve for H2O/ETHANOL/ACETONE



تمرین ۵ :

- ❖ منحنی فشار بخار ترکیبات آب-اتانول-اتیل استات را در فاصله دمایی ۱۰ تا ۳۰۰ درجه فارنهایت با کمک معادله NRTL رسم نمایید.
- ❖ منحنی های P-xy و T-xy را در فشار ۱ اتمسفر برای مخلوط آب و اتانول با کمک معادله NRTL رسم نمایید.
- ❖ منحنی های Residue را برای سیستم سه تایی آب-اتانول-اتیل استات در فشار ۱ اتمسفر و با کمک معادله NRTL رسم نمایید.
- ❖ منحنی انرژی گیبس مخلوط آب و متانول را در دمای ۲۵ درجه سانتیگراد ترسیم نمایید.

ترسیم نمودارهای خواص جریان (Dew / Bubble , PT , TV , PV)

پس از تعیین مواد و انتخاب معادله ترمودینامیکی مناسب برای شاخه جریان ، از منوی مسیر زیر نوع محاسباتی را که قصد انجام آنرا داریم انتخاب می نماییم.

Tool \ Analysis \ Stream

تمرین ۶ :

- برای جریان مخلوط مساوی از اتان و هپتان:
- الف) نمودار PV را برای محدوده فشار ۱۴/۷ تا ۱۴۷ psi در دمای ۲۷۰ درجه فارنهایت رسم نمایید.
- ب) نمودار های PT را در کسر بخارهای ۱ ، ۰/۸ ، ۰/۶ ، ۰/۴ ، ۰/۲ و ۰ رسم نمایید.

Property Set

Property Set یک مجموعه از اطلاعات ترمودینامیکی می باشد که از آنها می توان در گزارش گیری ها استفاده کرد. برای هر کدام از Template ها یکسری Property Set پیش فرض انتخاب شده است که عبارتند از:

Property Set های موجود در General Template :

HXDESIGN : شامل خصوصیات گرمایی و انتقالی در مبدل های حرارتی می شود که عبارتند از:

- کسر جرمی بخار
- جریان جرمی فاز بخار، مایع و مجموع هر دو
- آنتالپی جرمی برای فاز های بخار، مایع و مجموع هر دو
- دانسیته جرمی برای فاز های بخار، مایع و مجموع هر دو
- ظرفیت گرمایی جرمی برای فاز های بخار، مایع و مجموع هر دو
- فشار بحرانی جرمی برای فاز های بخار، مایع و مجموع هر دو
- ویسکوزیته جرمی برای فاز های بخار، مایع و مجموع هر دو
- ضریب هدایت گرمایی جرمی برای فاز های بخار، مایع و مجموع هر دو وزن مولکولی متوسط برای فاز های بخار، مایع و مجموع هر دو

THERMAL : شامل خصوصیات گرمایی می شود که عبارتند از:

- آنتالپی فازهای بخار و مایع
- ظرفیت گرمایی فازهای بخار و مایع
- ضریب هدایت گرمایی فازهای بخار و مایع

TXPORT : شامل خصوصیات انتقالی می شود که عبارتند از:

- دانسیته جرمی فازهای بخار و مایع
- ویسکوزیته فازهای بخار و مایع
- کشش سطحی فازهای بخار و مایع

VLE: شامل اطلاعات تعادلی بخار مایع می شود که عبارتند از:

- ضریب فوگاسیته جزء در فازهای بخار و مایع
- ضریب فعالیت جزء در فاز مایع
- فشار بخار جزء خالص

V-L-L-E: شامل اطلاعات تعادلی بخار-مایع-مایع می شود که عبارتند از:

- ضریب فوگاسیته جزء در هر کدام از سه فاز
- ضریب فعالیت جزء در هر کدام از سه فاز
- فشار بخار جزء خالص

Property Set های موجود در Petroleum Template :

CUTS-E: شامل جریان حجمی مولی استاندارد برش های نفتی در فواصل دمایی ۱۰۰ F می شود.

CUTS-M: شامل جریان جرمی برش های نفتی در فواصل دمایی ۵۰ C می شود.

D86-5: شامل دمای مربوط به ASTM D86 در ۰.۵٪ مایع است.

D86-95: شامل دمای مربوط به ASTM D86 در ۰.۹۵٪ مایع است.

GASPROPS: شامل خصوصیات فاز بخار می شود که عبارتند از:

- ضریب تراکم پذیری مخلوط
- جریان حجمی واقعی
- جریان حجمی استاندارد بخار
- نسبت ظرفیت های گرمایی C_p / C_v

KINVIS: شامل ویسکوزیته سینماتیک در دماهای ۱۰۰ و ۲۱۲ درجه فارنهایت بر مبنای خشک است.

LIGHT: شامل خصوصیات محصولات مقطر سبک نفتی (بر مبنای خشک) می شود که عبارتند از:

- فشار بخار رایید
- نقطه اشتعال
- نقطه آنیلین

MIDDLE: شامل خصوصیات محصولات مقطر نفتی نه سبک و نه سنگین بر مبنای خشک می شود که عبارتند از:

- عدد ستان
- نقطه اشتعال
- نقطه ریزش
- نقطه آنیلین

PETRO: شامل خصوصیات عمومی بر مبنای خشک می شود که شامل موارد زیر می شوند:

- جریان حجمی استاندارد مایع بر حسب (bbl/day) یا (bbl/hr)
- Standard API Gravity
- Standard Specific Gravity
- Watson UOP k-factor
- منحنی True Boiling Point تقطیر
- منحنی ASTM D86 تقطیر
- منحنی ASTM D1160 تقطیر

TBP-5 : شامل دمای True Boiling Point در ۰.۵٪ مایع می شود.

TBP-95 : شامل دمای True Boiling Point در ۰.۹۵٪ مایع می شود.

Property Set های موجود در Gas Processing Template :

CRITICAL : شامل خصوصیات بحرانی فرضی زیر می شود:

- دمای بحرانی فرضی
- فشار بحرانی فرضی
- حجم بحرانی فرضی

GASPROPS : شامل خصوصیات عمومی گازها از قبیل موارد ذیل می شود:

- ضریب تراکم پذیری
- حجم واقعی جریان
- حجم استاندارد بخار بر حسب MMscfd یا MMscmh
- نسبت ظرفیت های گرمایی C_p / C_v برای مخلوط

TDEW : شامل دمای نقطه شبنم می شود.

Property Set های موجود در Air Separation Template :

CRITICAL : شامل خصوصیات بحرانی فرضی زیر می شود:

- دمای بحرانی فرضی
- فشار بحرانی فرضی
- حجم بحرانی فرضی

GASPROPS : شامل خصوصیات عمومی گازها از قبیل موارد ذیل می شود:

- ضریب تراکم پذیری
- حجم واقعی جریان
- حجم استاندارد بخار بر حسب MMscfd یا MMscmh
- نسبت ظرفیت های گرمایی C_p / C_v برای مخلوط

TBUBBLE : شامل دمای نقطه حباب می شود.

TDEW : شامل دمای نقطه شبنم می شود.

Property Set های موجود در Chemical Templates :

Property Set های موجود در این Template مشابه Property Set های موجود در General Templates است.

Property Set های موجود در Electrolyte Templates :

FAPP : شامل جریان مولی جزء ظاهری می شود.

FTRVE : شامل جریان مولی جزء واقعی می شود.

LVOLFLOW : شامل جریان حجمی مایع می شود.

MASSCONC : شامل غلظت جرمی می شود.

MOLLCONC : شامل غلظت مولی می شود.

PH : شامل PH در دمای فعلی می شود.

SOLINDEX : شامل ضریب حلالیت می شود.

TBUBBLE : شامل دمای نقطه حباب می شود.

VMOLFLOW : شامل جریان مولی در فاز بخار می شود.

VMOLFRAC : شامل کسر مولی جزء در فاز بخار می شود.

WXAPP : شامل کسر جرمی جزء ظاهری می شود.

WAPP : شامل جریان مولی جزء ظاهری می شود.

XTRUE : شامل کسر مولی جزء حقیقی می شود.

Property Set های موجود در Pharmaceuticals Templates :

LVOLFLOW : شامل جریان حجمی مایع می شود.

MASSCONC : شامل غلظت جرمی می شود.

MOLCONC : شامل غلظت مولی می شود.

VMOLFLOW : شامل جریان مولی جزء در فاز بخار می شود.

VMOLFRAC : شامل کسر مولی جزء در فاز بخار می شود.

Property Set موجود در Hydrometallurgy Template :

ALL_SUBS : شامل خصوصیات کل جریان از قبیل دما، فشار، جریان حجمی، کسر جرمی بخار، کسر جرمی جامدات، دانسیته جرمی و جریان جرمی می شود.

❖ از این Template برای فرآیندهایی که در آنها اجزاء الکترولیتی و جامدات حضور دارند (مانند فرآیند Leaching) استفاده می شود.

Property Set موجود در Pyrometallurgy Template :

ALL_SUBS : شامل خصوصیات کل جریان از قبیل دما، فشار، جریان حجمی، کسر جرمی بخار، کسر جرمی جامدات، دانسیته جرمی و جریان جرمی می شود.

VMOLFLOW : شامل جریان مولی جزء در فاز بخار می شود.

VMOLFRAC : شامل کسر مولی جزء در فاز بخار می شود.

❖ از این Template برای شبیه سازی فرآیندهایی که شامل فلزات در دماهای بسیار بالاست استفاده می شود.

Property Set موجود در Solids Template :

ALL_SUBS : شامل خصوصیات کل جریان از قبیل دما، فشار، جریان حجمی، کسر جرمی بخار، کسر جرمی جامدات، دانسیته جرمی و جریان جرمی می شود.

MOLCONC : شامل غلظت مولی می شود.

VMOLFLOW : شامل جریان مولی جزء در فاز بخار می شود.

VMOLFRAC : شامل کسر مولی جزء در فاز بخار می شود.



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

ASPEN PLUS

جلسه دوم

- اجرای برنامه شبیه سازی
- آشنایی با ابزار ها و محیط شبیه سازی ASPEN PLUS و کار در محیط PFD
- آشنایی با تجهیزات فرآیندی Mixers / Splitters / Separators
- طریقه محاسبه نقطه شبنم و نقطه حباب
- آشنایی با ابزار های مهم کار در محیط شبیه سازی فرآیندی ASPEN
- تمرین ها

اجرای برنامه شبیه سازی

جهت اجرای شبیه سازی می توان به دو صورت عمل کرد:

۱- استفاده از دکمه های مخصوص اجرای شبیه سازی



۲- استفاده از منوی Run



: دکمه راهنما که در نهایت موجب اجرای برنامه می شود.

: از این دکمه جهت ورود به صفحه Control Panel استفاده می شود. از این صفحه جهت مشاهده مراحل اجرای شبیه سازی و مشاهده پیغام های خطا و پیغام های هشدار استفاده می شود.

: از این دکمه برای اجرای شبیه سازی استفاده می شود. در این حالت مراحل اجرای شبیه سازی در صفحه Control Panel نشان داده خواهد شد. این دکمه معادل عملکرد گزینه Run از منوی Run است.

: از این دکمه برای اجرای شبیه سازی استفاده می شود. در این حالت مراحل اجرای شبیه سازی در صفحه Control Panel نشان داده نخواهد شد.

: از این دکمه برای پاک کردن نتایج شبیه سازی استفاده می شود. این دکمه معادل عملکرد گزینه Reinitialize از منوی Run است.

: از این دکمه برای توقف عملیات شبیه سازی در حین اجرا استفاده می شود. این دکمه معادل عملکرد گزینه Stop از منوی Run است.

: از این دکمه برای پاک کردن پیغام های Control Panel استفاده می شود.

: از این دکمه برای مشاهده نتایج شبیه سازی بعد از اجرای برنامه استفاده می شود.

تجهیزات فرآیندی

از این قسمت به بعد شبیه سازی انواع تجهیزات فرآیندی موجود در Aspen Plus مورد بررسی قرار می گیرد.

Mixers / Splitters - ۱)

Mixer -

برای مخلوط کردن ۲ یا چند جریان ماده یا گرما مورد استفاده قرار می گیرد.

FSplit -

برای تقسیم کردن جریانات ورودی (کار، ماده، انرژی) به چندین جریان (چندین جریان مساوی از نظر تعادلات فازی) در خروجی استفاده می شود. در این صورت مشخصات همه جریان های ایجاد شده از نظر Properties و Compositions یکسان هستند و فقط Flow rate ها فرق خواهند کرد. باید به تعداد خروجی های بلوک منهای یک، یکی از مشخصات دبی جرمی،

دبی مولی، دبی حجمی استاندارد مایع، دبی حجمی واقعی و Split Fraction را برای خروجی ها تعیین کرد. اگر Sub Stream ها در جریان های خروجی با یکدیگر فرق کنند در اینصورت باید از SSplit استفاده نمود. برای اختصاص مقدار به دبی جریان یک جزء و یا گروهی از اجزاء در یک جریان خروجی، پس از تعیین Key Comp.No در صفحه Specification می بایست در صفحه Key Component اجزاء کلیدی را تعیین کرده و سپس دبی جریان این گروه از اجزاء که برابر با جمع سرعت های اجزاء است وارد شوند. در اینصورت مقدار شدت جریانی که برای این گروه از اجزاء در شاخه جریان وارد می شود، کوچکتر از مقدار شدت جریان کل اجزاء آن شاخه جریان خواهد بود. لازم به ذکر است که همواره باید توجه داشت که مشخصات تمام جریان های خروجی برابر مشخصات جریان ترکیبی ورودی است.

SSplit –

برای تقسیم کردن جریانات ورودی به چند جریان خروجی مشابه در فرآیندهای حاوی جامد استفاده می شود.

تمرین ۱:

دو جریان Feed 1 و Feed 2 با مشخصات زیر در یک Mixer مخلوط می شوند. مشخصات جریان های خروجی از جداکننده را به صورت جدول نتایج در صفحه فلوشیت نمایش دهید؟

	FEED 1	FEED 2
دما ($^{\circ}C$)	۱۰	-۲۰
فشار (Kpa)	۴۱۰۰	۴۰۰۰
دبی مولی (Kmol / hr)	۳۵	۲
% mol C ₁	۰/۱۹	۰/۲۵
% mol C ₂	۰/۱۵	۰/۲۱
% mol C ₃	۰/۱	۰/۱۵
% mol i-C ₄	۰/۱	۰/۱۱
% mol n-C ₄	۰/۱۱	۰/۱۳
% mol i-C ₅	۰/۰۸	۰/۰۵
% mol n-C ₅	۰/۰۹	۰/۰۷
% mol n-C ₆	۰/۰۹	۰/۰۲
% mol n-C ₇	۰/۰۵	۰/۰۰۵
% mol n-C ₈	۰/۰۴	۰/۰۰۵

Separators – ۲

در این قسمت انواع جداکننده های دو فازی و سه فازی بررسی می شوند که انواع مدل های آن عبارتند از: Flash2، Flash3، Sep، Decantor و Sep2.

Flash2 –

این جداکننده قابلیت شبیه سازی انواع تبخیر کننده ها، فلاش درام های دو فازی (بخار- مایع)، (VLE) و جداکننده های سه فازی از نوع (مایع - آب - بخار)، (VLLE) را دارد.

Flash3 –

این مدل قابلیت استفاده در مدل کردن انواع دکانتور ها و جداکننده های تک مرحله ای با دو فاز مایع را دارد. مشخصات این جداکننده مانند Flash2 است. با این تفاوت که در قسمت input دارای یک صفحه اضافی تحت عنوان Key Components است که در آن ترکیب اصلی فاز مایع دوم انتخاب می شود.

تمرین ۲:

خوراکی با مشخصات زیر وارد یک جداکننده ۳ فازی می شود. خروجی ها در جریان بخار و هر دو فاز مایع را محاسبه کرده و به صورت جدول جریان ها در صفحه فلوشیت نمایش دهید. (ماده اصلی در فاز دوم آب است).

	FEED 1
دما ($^{\circ}C$)	۲۰
فشار (Kpa)	۲۰۰
دبی مولی ($Kmol / hr$)	۱۰۰
% mol C_1	۰/۱
% mol C_2	۰/۰۳
% mol C_3	۰/۰۴
% mol i- C_4	۰/۰۸
% mol n- C_4	۰/۱
% mol i- C_5	۰/۱۲
% mol n- C_5	۰/۱۳
% mol H_2O	۰/۴

Decantor -

برای شبیه سازی دکانتورها و جداکننده های تک مرحله ای بدون فاز بخار کاربرد دارد. دکانتور توانایی انجام محاسبات تعادلی مایع-مایع و مایع-آب را دارد. دکانتور ضرایب توزیع مواد بین دو فاز مایع را بر اساس یکی از روش های زیر محاسبه می کند:

- یک معادله حالت یا ضریب فعالیت که بتواند تشکیل دو فاز مایع را پیش بینی کند.
- یک رابطه موجود در بانک که ضرایب آنرا کاربر وارد می کند.
- یک برنامه به زبان فرترن که توسط کاربر نوشته شده است.

Sep -

در مواردی استفاده می شود که میزان جداسازی هر ترکیب در جریان های خروجی مشخص است اما جزئیات جداسازی معلوم نیست. این مدل دقیق نیست. پس از معرفی جریان های خروجی (بیشتر از دو جریان) در صفحه Specification مربوطه درصدی از هر ماده ورودی (Split fraction) که باید در آن جریان خروجی جدا شود تعیین می کنیم. منتها مشخصات یکی از

جریان های خروجی را وارد نمی کنیم تا نرم افزار خود محاسبه نماید. (عملکرد این مدل همانند عملکرد Splitter در HYSYS است).

Sep2 -

جریان های ورودی را به دو جریان در خروجی تقسیم می کند و توانایی گرفتن هر خلوصی را در خروجی دارد و می توان آنرا به جای برج های تقطیر و جذب و در مواردی که جزئیات جداسازی اهمیت چندانی ندارد بکار برد. باید توجه داشت که پس از معرفی دو جریان خروجی در صفحه Specification مربوطه درصدی از هر ماده ورودی (Split fraction) که باید در آن جریان خروجی جدا شود، یا شدت جریان آن، یا ترکیب درصد مولی و یا ترکیب درصد جرمی آنرا تعیین می کنیم. منتها مشخصات یکی از جریان های خروجی را وارد نمی کنیم تا نرم افزار خود محاسبه نماید.

تمرین ۳:

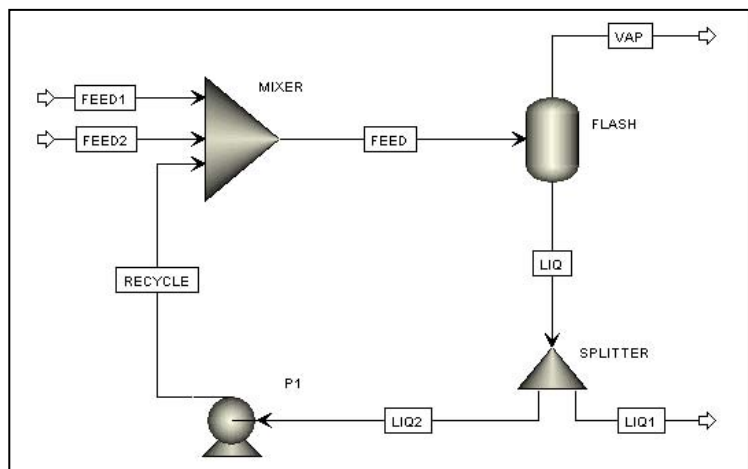
جریانی شامل آب ، فورفورال و اسید استیک است. این جریان وارد یک دکانتور می شود که در آن دو فاز آلی و آبی جدا می شوند. فاز آبی شامل ۹۰٪ از آب ورودی و ۳۰٪ از فورفورال ورودی و ۵۰٪ از اسید استیک ورودی است. معادله حالت را NRTL در نظر بگیرید. مطلوبست ترکیب درصد فاز آلی؟

	FEED
دما ($^{\circ}C$)	۲۵
فشار (Kpa)	۱۰۰
دبی مولی ($Kmol / hr$)	۵۰
% mol H2O	۰/۴
% mol Acid Acetic	۰/۲
% mol Furfural	۰/۴

تمرین ۴:

دو جریان Feed 1 و Feed 2 با مشخصات زیر در یک Mixer مخلوط شده و در فشار ۲۵ psia و دمای ۵ C وارد یک جداکننده می شوند. جریان مایع جدا شده وارد یک اسپلیتر شده و به ترتیب به نسبت های ۵۰٪، ۲۵٪ و ۰٪ تقسیم شده و از طریق یک پمپ در فشار جریان خوراک بازگردانی می شود. شدت جریان های خروجی از جداکننده را در سه حالت مقایسه نموده و نتیجه گیری کنید؟

	FEED 1	FEED 2
دما ($^{\circ}C$)	۸۵	۸۵
فشار ($psia$)	۱۰۰	۱۰۰
(lb / hr)		
C ₁	۵۰	
C ₂	۱۰۰	
C ₃	۷۰۰	
n-C ₄		۸۷۰
1-Buten		۱۱۷۶
1,3 Butadiene		۵۱۳۰



Recycle	(lb/hr) Liq1	(lb/hr) VAP
%۵۰		
%۲۵		
%۰		

طریقه محاسبه نقطه شبنم و نقطه حباب

نرم افزار ASPEN بر خلاف نرم افزار HYSYS یک شاخه جریان را به تنهایی نمی شناسد و باید آنرا به یک بلاک وصل کنیم تا آنرا بشناسد. لذا برای محاسبه نقطه شبنم و نقطه حباب یک شاخه جریان باید از یک جداکننده FLASH2 یا FLASH3 استفاده نماییم. جهت محاسبه نقطه شبنم و نقطه حباب در یک فشار معین، در صفحه مشخصات جداکننده، Vapor Fraction را انتخاب کرده و مقدار آنرا به ترتیب برابر ۱ و ۰ قرار می دهیم.

تمرین ۵:

برای شاخه جریان F با مشخصات زیر دمای نقطه شبنم در فشار ۱/۵ بار و فشار نقطه حباب در دمای ۴۵ درجه سانتیگراد را محاسبه نمایید.

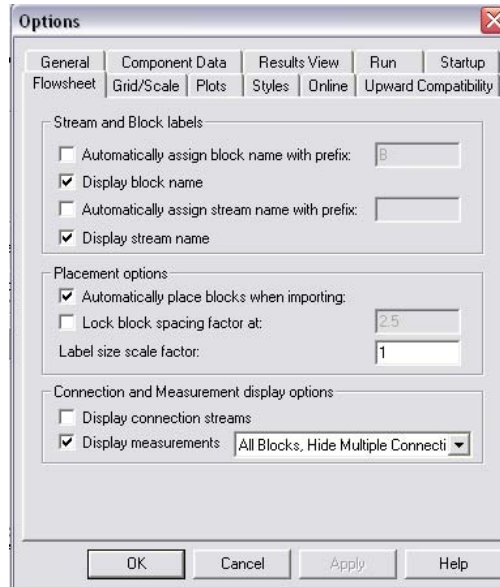
	F
دما ($^{\circ}C$)	۲۵
فشار (Kpa)	۵۰۰
دبی مولی ($Kmol/hr$)	۱۰۰
% mol C ₁	۰/۰۵
% mol C ₂	۰/۱
% mol C ₃	۰/۱۵
% mol i-C ₄	۰/۱
% mol n-C ₄	۰/۲
% mol i-C ₅	۰/۲
% mol n-C ₅	۰/۱۵
% mol H ₂ O	۰/۰۵

دمای نقطه شبنم	
فشار نقطه حباب	

نکته ۱

در صورتی که تمایل دارید از ابتدا ID مورد نظر برای جریان ها و تجهیزات فرآیندی را خود وارد سیستم نمایید از طریق مسیر زیر چک مارک مربوط به Automatically Assign Stream Name With Prefix را بردارید.

Tool \ Option \ Flow sheet

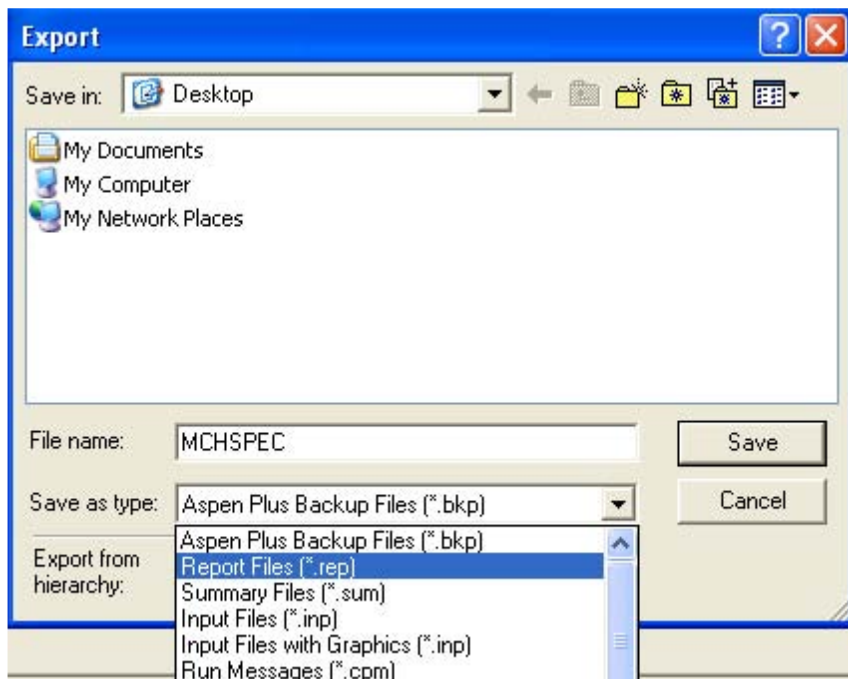


نکته ۲

دبی حجمی استاندارد مایع Stdvol-Flow متفاوت با دبی حجمی جریان است. Stdvol در فشار ۱ اتمسفر و دمای ۶۰ درجه فارنهایت تعریف می شود.

نکته ۳

جهت ایجاد یک گزارش از کار شبیه سازی از منوی File گزینه Export را انتخاب خواهیم کرد. سپس مطابق شکل زیر نوع فایل قابل ذخیره را از نوع Report Files انتخاب خواهیم کرد.



آشنایی با ابزار های مهم کار در محیط شبیه سازی فرآیندی ASPEN

۱- ایجاد PFD

نرم افزار ASPEN PLUS دارای دو حالت نمایش گرافیکی است :

- Simulation Mode
- PFD Mode

این دو حالت از خیلی جهات از قبیل اضافه کردن متن، نمایش نتایج کلی جریان ها و تجهیزات، نمایش نتایج به صورت جدول و... مشابه همنند ولی در حالت PDF می توان فلوشیت را برای تطبیق با فرآیند تغییر داد. مثلاً اگر دستگاهی را با چند بلوک در شبیه سازی مدل کرده باشیم می توان با یک بلوک همانند فرآیند اصلی نشان داد. البته تنها نتیجه این کار تغییر در تصویر دیده شده است و هیچ تأثیری در جواب های فرآیندی نخواهد داشت و خود به عنوان یک صفحه مستقل از فلوشیت شبیه سازی است. در نهایت بعد از اعمال تغییرات لازم صفحه PDF را می توان پرینت نمود.

پیش فرض نرم افزار ASPEN PLUS مود Simulation است. برای انتقال از مود Simulation به مود PFD از کلید F12 و یا منوی View / PFD Mode استفاده می شود. در این حالت یک نوار پر رنگی در اطراف فلوشیت پدیدار می شود. در صفحه PFD همچنین می توان متن اضافه کرد. برای این کار به منوی View رفته و Toolbar را انتخاب می کنیم. برای اضافه کردن متن Draw را انتخاب می کنیم. برای خروج از حالت PFD به منوی View رفته و PDF View را غیر فعال می کنیم و یا دوباره F12 را می زنیم.

۲- ابزار Place و Unplace

جهت تغییر Layout (موقعیت مکانی) بلوک یا بلوک هایی از فلوشیت از ابزار Place و Unplace استفاده می کنیم. به این منظور روی بلوک یا بلوک های انتخاب شده کلیک راست کرده و گزینه Unplace Blocks را انتخاب می کنیم. مطابق شکل زیر پنجره Unplace Blocks باز می شود:

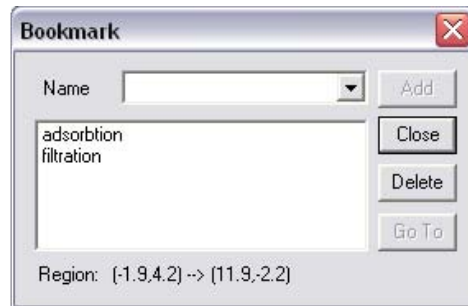


حال جهت تنظیم Layout از لیست پنجره باز شده بالا روی بلوک مورد نظر کلیک کرده و در حالی که کلیک ماوس پایین است آن را به محل مورد نظر از فلوشیت کشانده و سپس کلید ماوس را رها می کنیم. در صورت تمایل به انجام این کار توسط خود ASPEN PLUS، روی گزینه Place Next کلیک می کنیم. در این صورت بلوک های انتخاب شده به ترتیبی که خود نرم افزار ترجیح می دهد و منطقی تر است، در صفحه فلوشیت جانمایی می شوند. جهت ترسیم تمام بلوک ها به یکباره توسط خود ASPEN PLUS گزینه Place All را انتخاب می کنیم.

۳- ابزار Book marks

در هنگامی که نمودار جریان فرآیند بزرگ و پیچیده باشد جهت اینکه رجوع به قسمت های مختلف نمودار راحت باشد از ابزار Book marks استفاده می شود. جهت استفاده از این ابزار قسمتی از نمودار جریان که مد نظر می باشد با کشیدن موس انتخاب می شود. سپس در قسمت خالی پنجره نمودار کلیک راست کرده و گزینه Book marks را انتخاب می کنیم. پنجره جدیدی باز می شود که در آن اسم Book mark را، متناسب با نام آن قسمت فرآیند، در قسمت Name تایپ کرده و با

کلیک کردن روی گزینه Add آنرا به فهرست Book mark ها اضافه می کنیم. جهت استفاده از Book mark ها هم کافیسست Book mark مورد نظر را انتخاب کرده و روی دکمه Go to کلیک کنیم.



۴- ابزار Flow sheet Section



برای حالتیکه فلوشیت اصلی از قسمت های زیادی تشکیل شده باشد و کاربر روی قسمت خاصی از فلوشیت تمرکز داشته باشد، جهت ساده سازی یک فلوشیت شلوغ را می توان به چندین بخش فلوشیت (Flow sheet Section) تقسیم نموده و قسمت های مختلف واحد های عملیاتی را به همراه جریان های مربوطه در داخل هر کدام از این بخش ها قرار داد. اگر در فلوشیت بخش خاصی ایجاد نشود ASPEN PLUS به صورت پیش فرض تمام بلوک ها و جریان ها را در یک بخش پیش فرض به نام GLOBAL قرار می دهد. از مهمترین کاربرد های ایجاد بخش های مختلف برای یک فلوشیت این است که برای هر کدام از بخش ها می توان یک معادله حالت متناسب با آن بخش انتخاب کرد.

جهت ایجاد یک بخش جریان باید از منوی Flow sheet روی گزینه Flow sheet Sections کلیک کرده و با کلیک بر گزینه New در پنجره محاوره ای Flow sheet Sections بخش جدید را ایجاد کرد. از این به بعد هر بلوکی که به نمودار جریان اضافه شود جزء این بخش محسوب می شود.



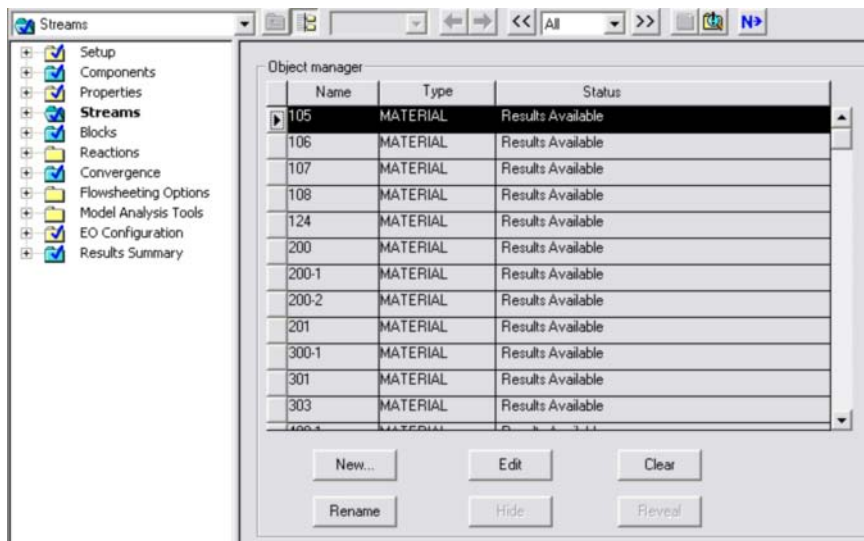
جهت فعال نمودن هر کدام از بخش ها کافی است روی بخش مورد نظر در این صفحه کلیک کرده و دکمه make current را فعال نماییم. از این به بعد هر بلوکی که به نمودار جریان اضافه شود جزء این بخش محسوب می شود. برای سریع تر انجام دادن کار فعال کردن یک بخش از جریان می توان از نوار ابزار لیست باز شونده Section این کار را انجام داد:



دکمه  برای دسترسی مستقیم و سریع به پنجره محاوره ای Flow sheet Sections است و از دکمه  یا Alt+F12 جهت نمایش مجزای هر بخش فعال استفاده می شود. جهت انتقال یک واحد عملیاتی از یک بخش به بخش دیگر هم کافی است روی آن کلیک راست کرده و از منوی ظاهر شده گزینه Change Section را انتخاب کرده و بخش مورد نظر را در این صفحه در قسمت Move to Section انتخاب نماییم. اگر بخواهیم بلوک مورد نظر در بخش جدیدی قرار گیرد گزینه Create New Section را انتخاب می نماییم.

استفاده از امکانات Object Manager

هنگامی که در نمودار درختی Data Browser یک پوشه که شامل چند جزء شرکت کننده در شبیه سازی است انتخاب می شود یک فرم Object Manager ظاهر می شود که این فرم در قسمت سمت راست Data Browser قرار دارد.



عملکرد دکمه های این قسمت به شرح ذیل است:

New: با انتخاب آن یک جزء جدید ایجاد می شود که در ابتدا نام آن باید وارد شود و سپس با استفاده از دکمه NEXT فرم مخصوص آن جهت تکمیل اطلاعات مربوطه ظاهر می گردد. این گزینه برای واحد های عملیاتی (Unit Operations) غیر فعال است.

Edit: با استفاده از این گزینه اطلاعات ورودی جزء انتخابی را می توان ویرایش کرد.

Delete: با استفاده از این دکمه جزء انتخاب شده حذف می شود.

Clear: با استفاده از این دکمه کلیه اطلاعات جزء مورد نظر پاک می شود ولی خود جزء باقی می ماند.

Rename: با استفاده از این گزینه می توان جزء مورد نظر را تغییر نام داد.

Hide: با انتخاب آن می توان جزء مورد نظر را از جریان فرآیند بدون از بین بردن آن حذف کرد.

Reveal: عمل عکس Hide را انجام می دهد و جزء مخفی و غیر فعال شده را دوباره به جریان فرآیند باز می گرداند.



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

ASPEN PLUS

جلسه سوم

- آشنایی با تجهیزات انتقال حرارت در ASPEN
- شبیه سازی هیترها
- مدل های شبیه سازی مبدل های حرارتی HeatX / MHeatX / Hetran / Aerotran / HTRIIST
- تمرین ها

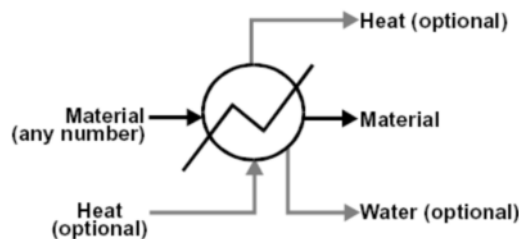
۳- مبدل های حرارتی

کلیه مدل های موجود در Aspen plus برای شبیه سازی مبدل های حرارتی مطابق جدول زیر می باشد:

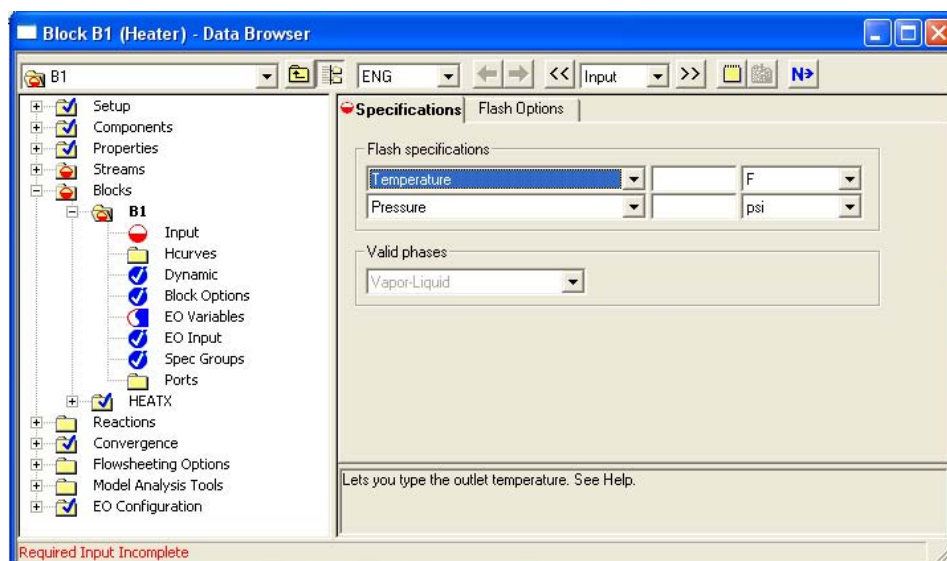
Model	Description	Purpose	Use For
Heater	Heater or cooler	Determines thermal and phase conditions of outlet stream	Heaters, coolers, condensers, and so on
HeatX	Two-stream heat exchanger	Exchanges heat between two streams	Two-stream heat exchangers. Rating shell and tube heat exchangers when geometry is known.
MHeatX	Multistream heat exchanger	Exchanges heat between any number of streams	Multiple hot and cold stream heat exchangers. Two-stream heat exchangers. LNG exchangers.
Hetran	Shell and tube heat exchanger	Provides interface to the B-JAC Hetran shell and tube heat exchanger program	Shell and tube heat exchangers, including kettle reboilers
Aerotran	Air-cooled heat exchanger	Provides interface to the B-JAC Aerotran air-cooled heat exchanger program	Crossflow heat exchangers, including air coolers

۳-۱: Heater

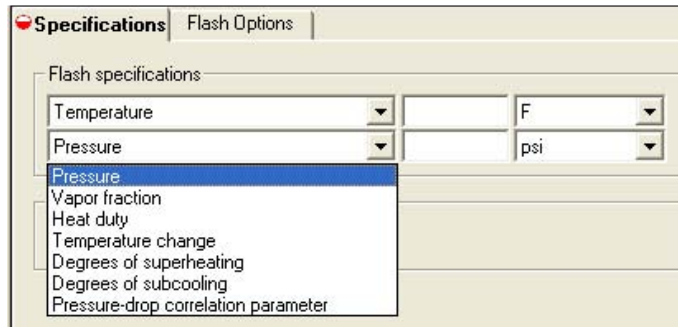
در شکل زیر نحوه اتصالات مربوط به Heater را ملاحظه می کنید:



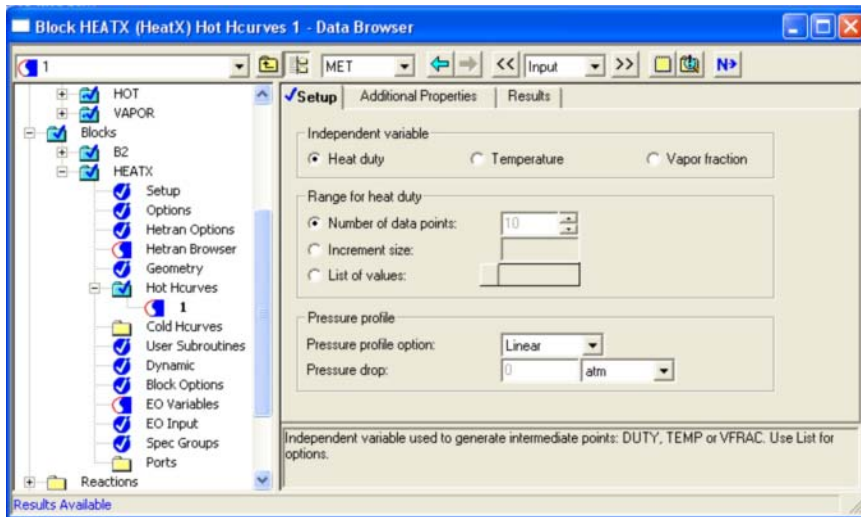
هیتر یک یا چند جریان را گرفته و به یک جریان با شرایط مشخص تبدیل می کند. مدل هیتر صرفاً در گرم کن ها و سرد کن ها استفاده نمی شود و در شبیه سازی شیرها، پمپ ها و کمپرسور ها نیز قابل استفاده است. پس از انتخاب هیتر در صفحه فلوشیت و انتخاب آن صفحه مشخصات به صورت زیر ظاهر خواهد شد:



در صفحه مشخصات هیتر دو مورد از ۸ مورد زیر بسته به هدف ما باید انتخاب شوند:



در پوشه مربوط به Heater ، پوشه Hcurves وجود دارد. در این پوشه می توان منحنی های ترکیبی از دما ، فشار ، انرژی و کسر بخار جریان خروجی یا هر خاصیت دیگری که به صورت Prop-Set ایجاد شده باشد را بررسی نمود. در این صفحه در ابتدا باید یکی از متغیرهای دما ، کسر بخار یا گرما به عنوان متغیر مستقل انتخاب شود.



تمرین ۱:

برای تبدیل جریان خوراک Freon-12 (CCl_2F_2) با دبی $90 \frac{kmol}{hr}$ و دمای ۲۷۰ k و فشار ۳ at به بخار اشباع ، دمای جریان خروجی و حرارت مورد نیاز را محاسبه نمایید. افت فشار هیتر را برابر ۰/۰۵ at در نظر بگیرید. نمودار تغییر روند فاز نسبت به دما را رسم کنید.

۲-۳: HeatX

مدل HeatX قادر به شبیه سازی دامنه وسیعی از مبدل های حرارتی پوسته و لوله (Shell & Tube) می باشد:

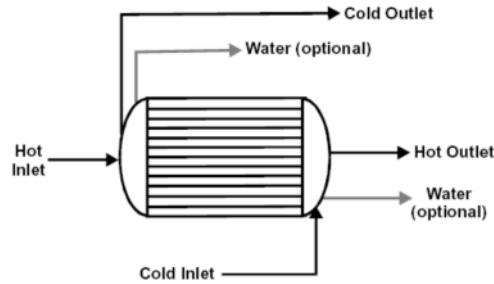
- مبدل های با جریان های موازی و متقابل
- مبدل های بافل دار چند بخشی کلاس X,J,H,G,F,E
- مبدل های بافل دار میله ای کلاس E,F
- مبدل با لوله های معمولی و فین دار

مدل HeatX قادر است تحلیل انتقال حرارت و افت فشار را برای سیال تک فازی و یا دو فازی به صورت Segment انجام داده و در صورت تعریف هندسه مبدل روابط انتقال حرارت و افت فشار را مبتنی بر آن انجام دهد. این مدل دارای معادلات مخصوص برای تخمین Sensible Heat ، Nucleat Boiling ، Condensation film Coefficient می باشد.

از این مدل می توان برای موارد زیر استفاده کرد:

- محاسبات طراحی
- تحلیل لرزش مکانیکی مبدل
- تخمین ضریب Fouling

در شکل زیر نحوه اتصالات مربوط به HeatX را ملاحظه می کنید:



به طور کلی شار حرارتی مبدل ها به شکل زیر محاسبه می شود:

$$Q = UA\Delta T_{LMTD} F_t$$

U : ضریب انتقال حرارت کلی

A : سطح متوسط کل برای انتقال حرارت

ΔT_{LMTD} : میانگین لگاریتمی اختلاف دما

F_t : ضریب اصلاح LMTD که به هندسه مبدل بستگی دارد.

HeatX محاسبات مربوط به مبدل ها را به سه صورت زیر انجام می دهد:

Short Cut ❖

- Design
- Simulation

Detailed ❖

- Rating
- Simulation

Hetran-Riorous ❖

- Design
- Rating
- Simulation

انتخاب هر کدام از این روش ها به میزان اطلاعات در دسترس ما بستگی دارد. تفاوت دو روش Short Cut و Detailed مربوط به تفاوت در نوع روش های محاسبه ضریب کلی انتقال حرارت است. در روش Short Cut معمولاً ضریب کلی انتقال حرارت توسط خود کاربر وارد می شود و در غیر اینصورت از مقدار پیش فرض خود نرم افزار استفاده می شود. ولی در روش Detailed از روابط دقیق انتقال حرارت برای محاسبات مربوط به ضرایب فیلمی انتقال حرارت استفاده می شود و از ترکیب مقاومت های انتقال حرارت فیلم های پوسته و لوله با مقاومت دیواره ، ضریب کلی انتقال حرارت محاسبه می شود.

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_c} + \frac{1}{h_h}$$

به طور کلی زمانی که با مدل HeatX کار می کنیم می بایست به این سوالات جواب بدهیم:

۱- محاسبات را باید به چه روشی انجام دهیم؟

۲- چه داده هایی را باید داشته باشیم؟

۳- ضریب تصحیح دمای LMTD را چگونه باید محاسبه کنیم؟

۴- ضرایب انتقال حرارت را چگونه باید محاسبه نماییم؟

۵- افت فشارهای جریان در لوله و پوسته چگونه باید محاسبه گردند؟

یادآوری

• **Design** : به طراحی یک مبدل حرارتی جدید که شامل طراحی مکانیکی و طراحی حرارتی می شود Design اطلاق می شود.

• **Rating** : به بررسی اینکه یک مبدل از پیش ساخته شده برای یک کاربرد جدید مناسب است یا نه Rating اطلاق می شود.

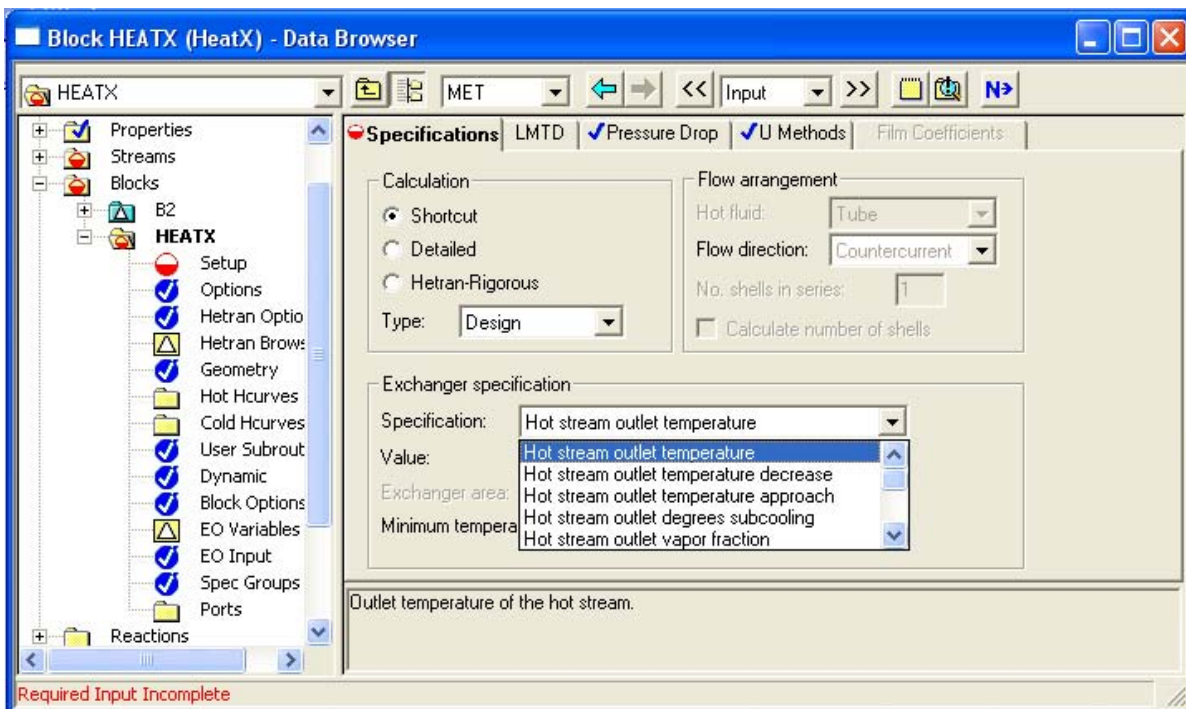
• **Simulation** : به محاسبه نتایج خروجی جریان ها از روی اطلاعات جریان ورودی و سطح انتقال حرارت معلوم Simulation اطلاق می شود.

محاسبات Short Cut

روش Short Cut ساده ترین روش طراحی مبدل می باشد و زمانی از این روش استفاده می شود که هندسه مبدل برای ما معلوم یا مهم نباشد.

۱- روش Short Cut / Design

در این حالت هدف محاسبه سطح انتقال حرارت مبدل می باشد. در این حالت لازم است یکی از اطلاعات زیر وارد سیستم شود:



این اطلاعات عبارتند از:

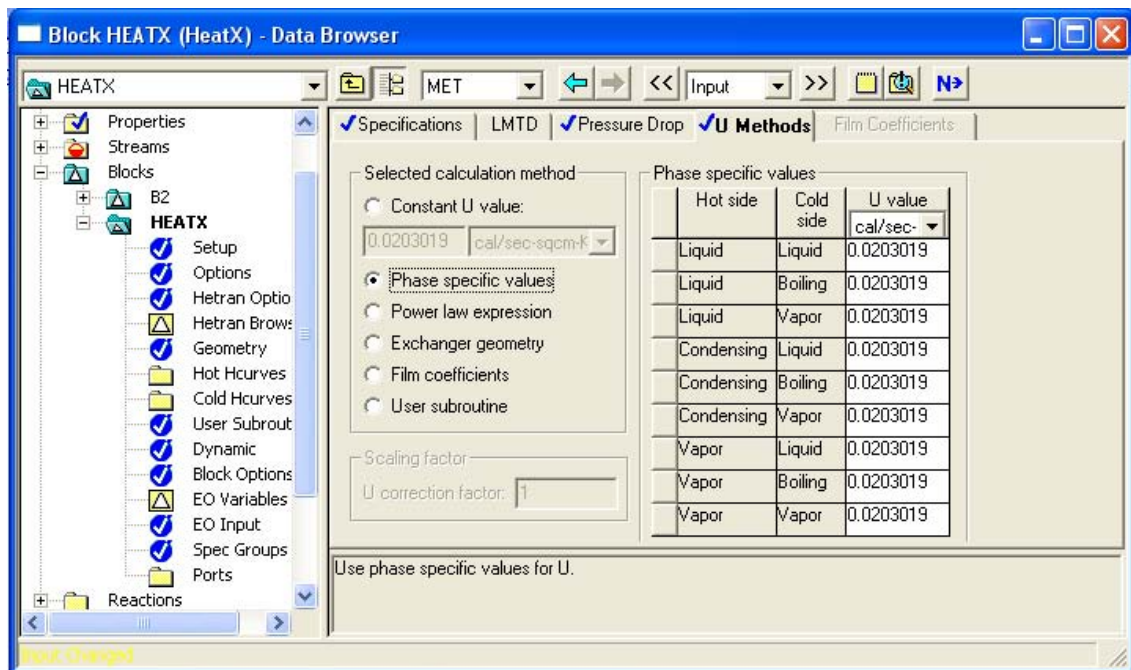
- دمای جریان گرم خروجی
- کاهش دمای جریان گرم
- گرمای مبادله شده
- کسر بخار جریان سرد خروجی
- درجه فوق گرم شدن جریان سرد
- Approach دمای جریان خروجی سرد
- Approach دمای جریان خروجی گرم
- دمای جریان سرد خروجی
- کسر بخار جریان گرم خروجی
- درجه فوق سرد شدن جریان گرم خروجی
- افزایش دمای جریان سرد

❖ با انتخاب یکی از موارد بالا و معلوم شدن دمای خروجی یکی از جریان های سرد یا گرم ، از روی موازنه انرژی جریان های گرم و سرد ، مقدار فلاکس حرارتی Q و دمای جریان خروجی دیگر محاسبه می شود. نهایتاً با معلوم بودن ضریب کلی انتقال حرارت مقدار سطح انتقال حرارت محاسبه خواهد شد.

❖ در پنجره بعدی (LMTD) بایستی یکی از دو گزینه LMTD Correlation factor method و یا Use interval analysis for LMTD Calculation انتخاب و تکمیل شوند. با انتخاب گزینه دوم محاسبات برای المان های تقسیم شده مبدل (هم لوله و هم پوسته) انجام می گردد که این روش از روش LMTD دقیق تر است.

❖ برای محاسبه مشخصه فشار جریان های سرد و گرم خروجی مبدل نیاز است که فشار جریان های خروجی یا افت فشار مبدل مشخص شود. جهت ورود این داده ها وارد صفحه Pressure Drop خواهیم شد. در این قسمت به دلیل اینکه روش محاسباتی Short Cut است نمی توان افت فشار را با استفاده از ساختمان مبدل حساب کرد.

❖ جهت ورود اطلاعات مربوط به ضریب انتقال حرارت وارد صفحه U Methods خواهیم شد.



در روش Short Cut سه روش برای محاسبه ضریب انتقال حرارت وجود دارد.

- ۱- U به صورت یک مقدار ثابت وارد می شود.
- ۲- U به صورت یک جدول ، بسته به نوع فاز جریان سرد و گرم وارد می شود.
- ۳- U از طریق تابع توانی زیر محاسبه می شود.

$$U = U_{ref} \left(\frac{Flow}{Flow_{Ref}} \right)^{exponent}$$

• **Approach** : به اختلاف دمای جریان گرم و سرد در هر نقطه مبدل اطلاق می شود.

۲- روش Short Cut / Simulation

در این حالت با معلوم بودن جریان های ورودی و سطح انتقال حرارت مشخصات مربوط به جریان های خروجی محاسبه خواهند شد. تکمیل اطلاعات مربوط به صفحات Pressure Drop و U Methods مطابق حالت قبل خواهند بود.

- محاسبات Detailed

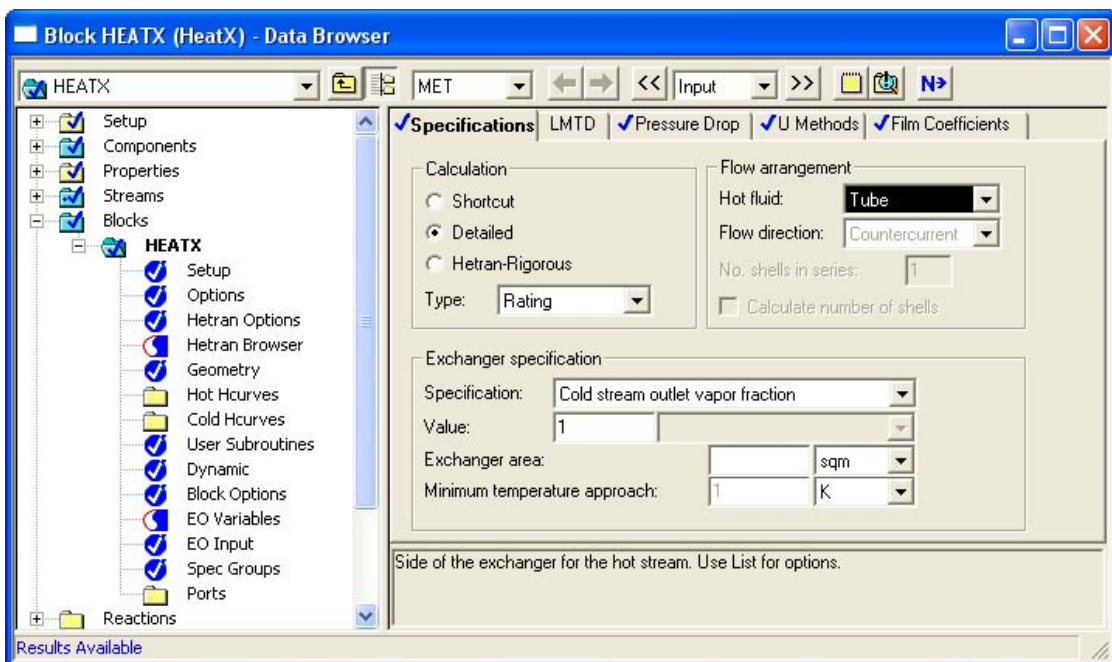
• در روش Detailed نمی توان کار Design انجام داد. برای کار Design باید از ماژول های Hetran یا Aerotran استفاده کرد.

۱- روش Detailed / Rating

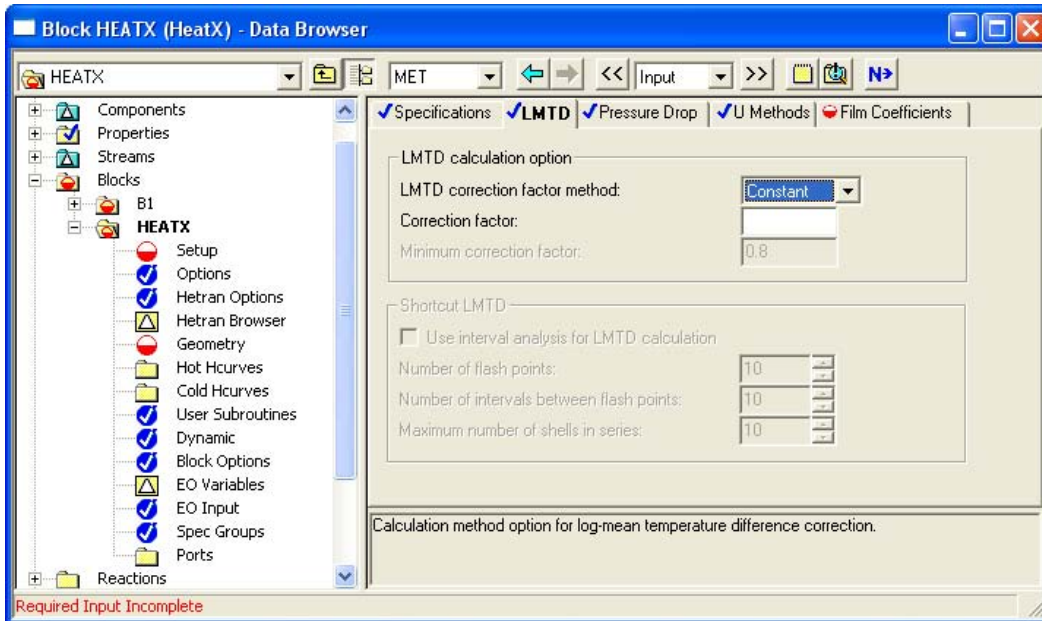
به طور کلی در این روش با مشخص کردن هندسه مبدل متغیر های زیر را می توان تخمین زد:

- ضرایب فیلمی انتقال حرارت
- افت فشارها
- فاکتور تصحیح اختلاف دمای متوسط لگاریتمی ΔT_{LMTD}

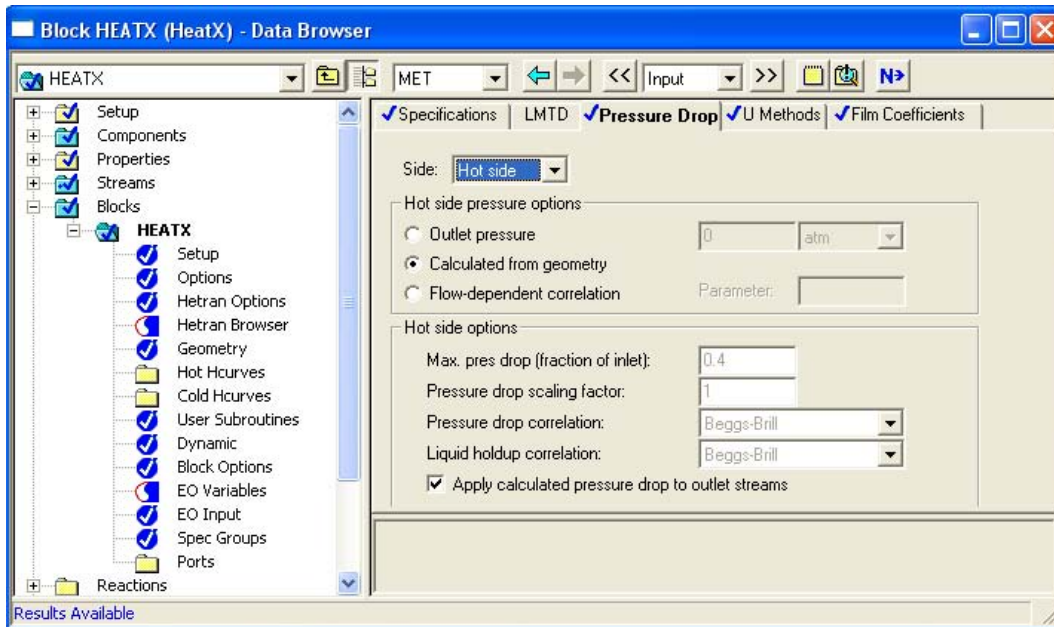
نخست صفحه Setup را می بایست تکمیل نماییم.



در پنجره بعدی (LMTD) بایستی گزینه LMTD Correlation factor method در یکی از دو حالت Constant یا Geometry انتخاب شوند. در حالت Constant مقدار F باید وارد شود. برای حالتیکه جریان سیال ها داخل مبدل ناهمسو باشد $F=1$ و در غیر این صورت مقدار آن می بایست توسط کاربر وارد شود وگرنه نرم افزار مقدار پیش فرض خود را $F=0.8$ انتخاب می کند.

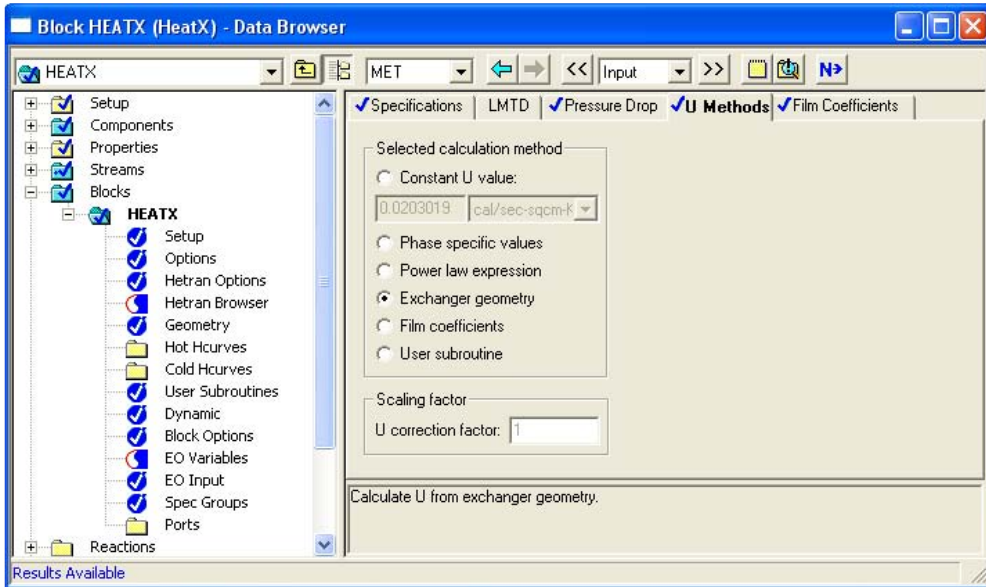


در صفحه Pressure Drop می توان افت فشار را با توجه به ساختمان مبدل و یکی از روابط موجود برای محاسبه افت فشار بدست آوریم.

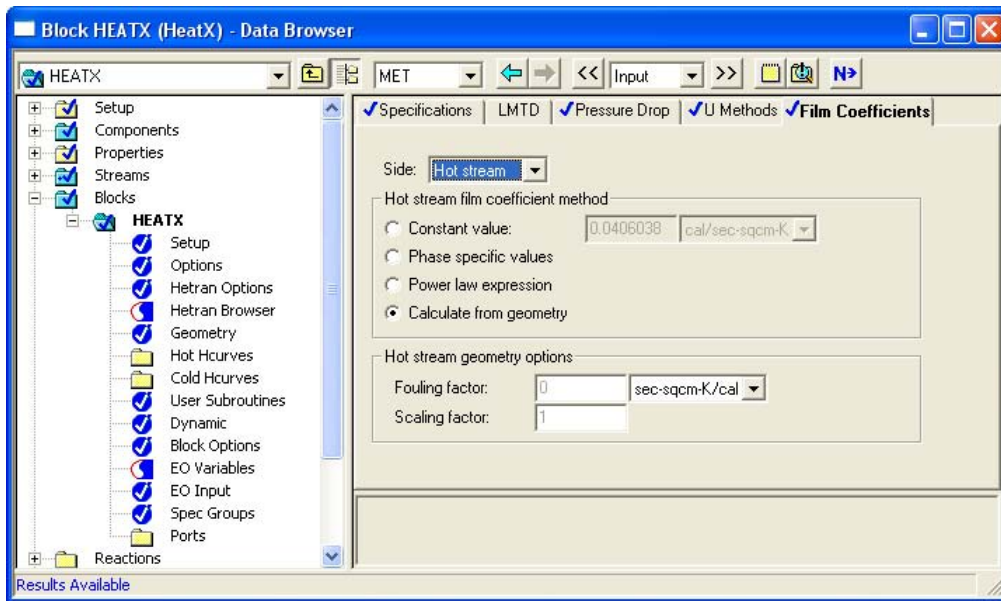


در صفحه U Method دو گزینه دیگر بیشتر از روش Short Cut برای محاسبه U وجود دارد:

- محاسبه U از هندسه و ساختمان مبدل
- محاسبه U از ضرایب فیلمی دو طرفه



در صورتیکه برای محاسبه U از ضرایب فیلمی دو طرفه استفاده کنیم در اینصورت می بایست صفحه مشخصات مربوط به Film Coefficient را نیز تکمیل نماییم.



که چهار روش برای محاسبه ضرایب فیلمی وجود دارد:

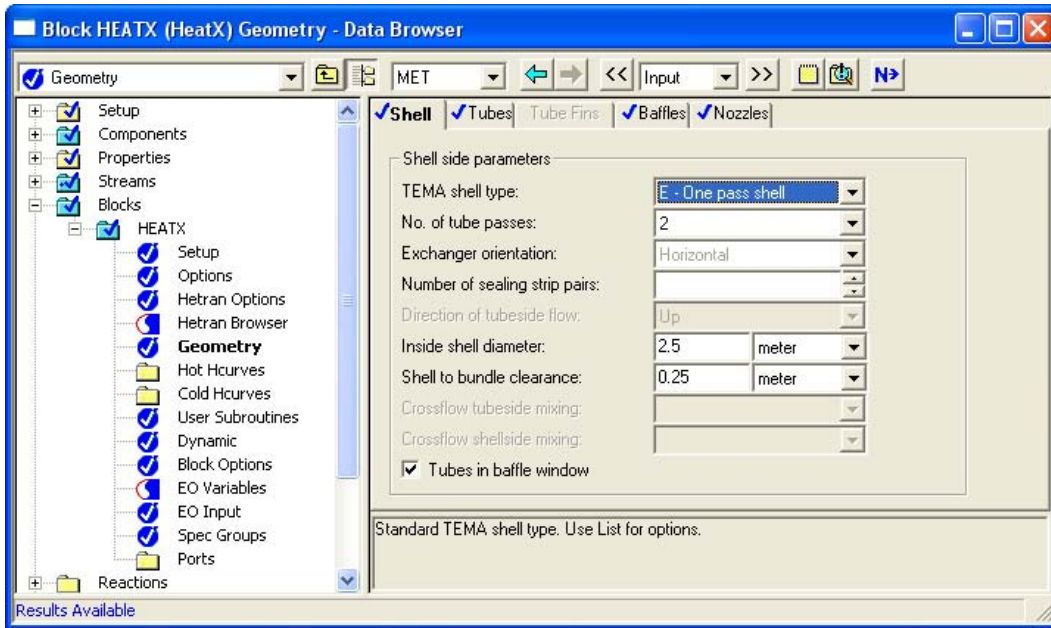
- ۱- به صورت یک مقدار ثابت وارد می شود.
- ۲- داده های تجربی ضرایب فیلمی، در طول مبدل، در سه فاز مایع ، کندانس و بخار وارد می شود.
- ۳- از طریق تابع توانی زیر محاسبه می شود.

$$h = h_{ref} \left(\frac{Flow}{Flow_{Ref}} \right)^{exponent}$$

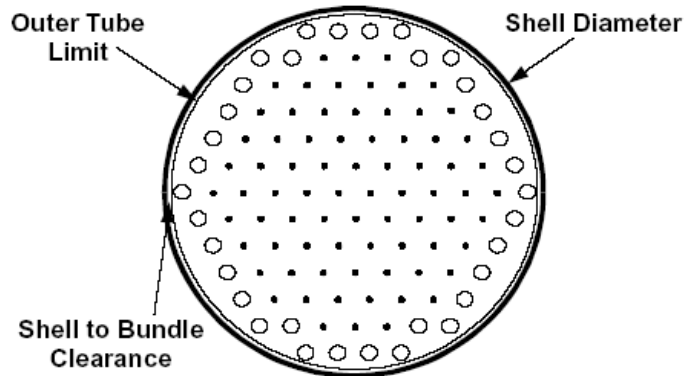
۴- با توجه به هندسه مبدل محاسبه می شود.

بعد از کامل کردن قسمت Setup و انتخاب روش Detailed / Rating قسمت Geometry را می بایست تکمیل نماییم. قسمت Geometry شامل صفحات Shell ، Tube ، Tube Fins ، Baffle و Nozzle است.

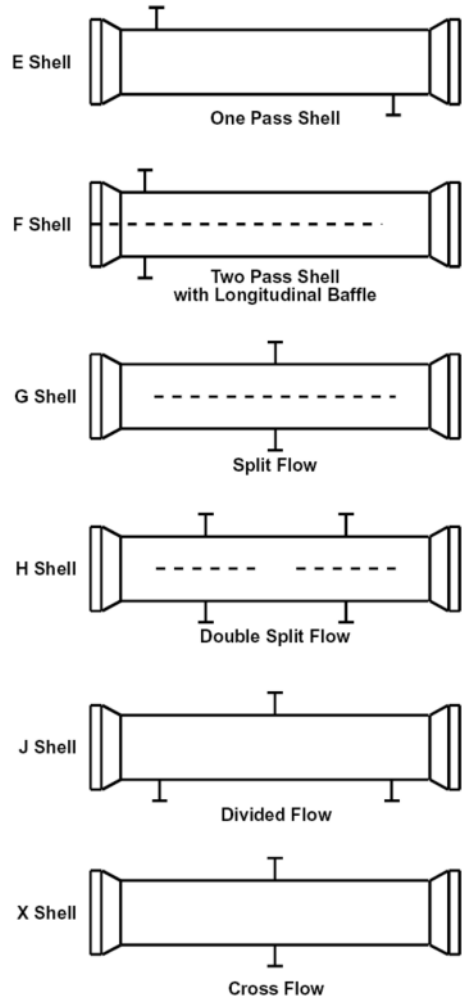
Geometry / Shell •



در صفحه Shell نوع شل با توجه به استاندارد TEMA ، شماره گذر لوله ، جهت قرار گرفتن مبدل ، تعداد عایق بندی های بین شل و لوله (Sealing Strips) ، قطر داخلی شل و فاصله بین قطر داخلی شل تا دایره محاط بر روی لوله ها وارد می شود.

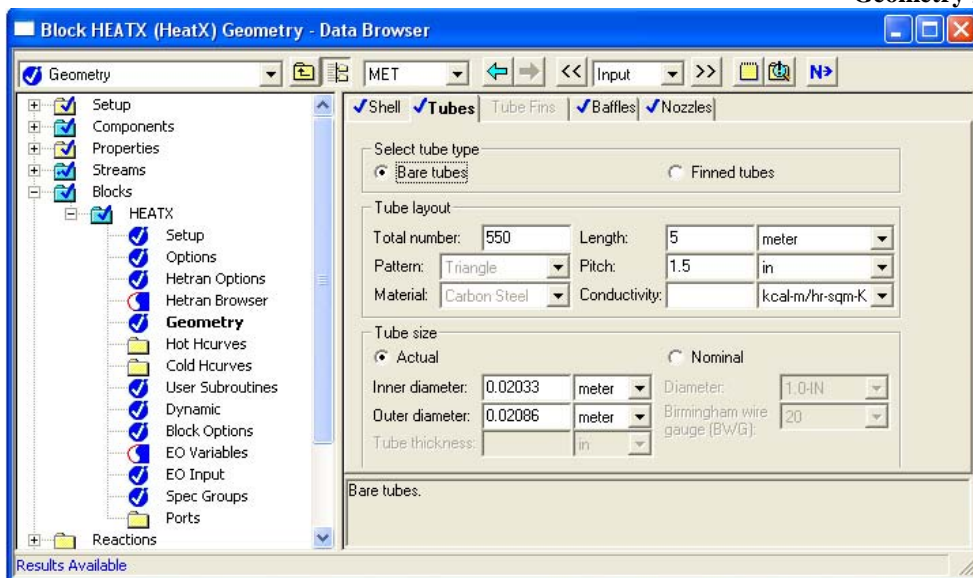


بر اساس استاندارد TEMA تقسیم بندی شل مبدل ها به صورت زیر می باشد:

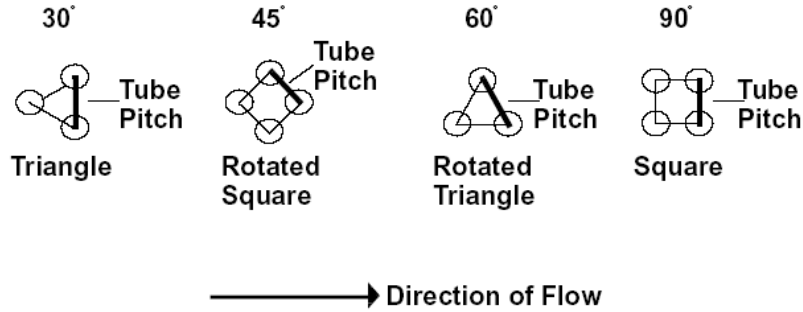


TEMA Shell Types

Geometry / Tube •

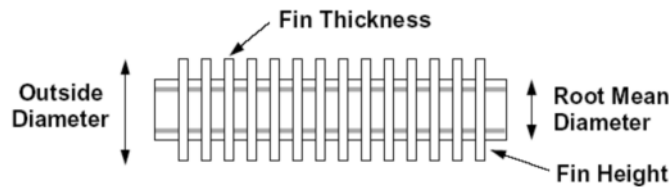


در صفحه Tube نوع لوله از لحاظ فین دار یا معمولی ، تعداد و طول لوله ها ، طرز قرار گرفتن لوله ها نسبت به یکدیگر (Pattern) ، جنس و فاصله مرکز تا مرکز دو لوله مجاور (Pitch) مشخص می شود. در قسمت Tube Sizing هم قطر لوله و ضخامت آن تعیین می شود. در صورت داشتن قطر اسمی و BWG مربوط به لوله ، می توان آنها را وارد نمود.



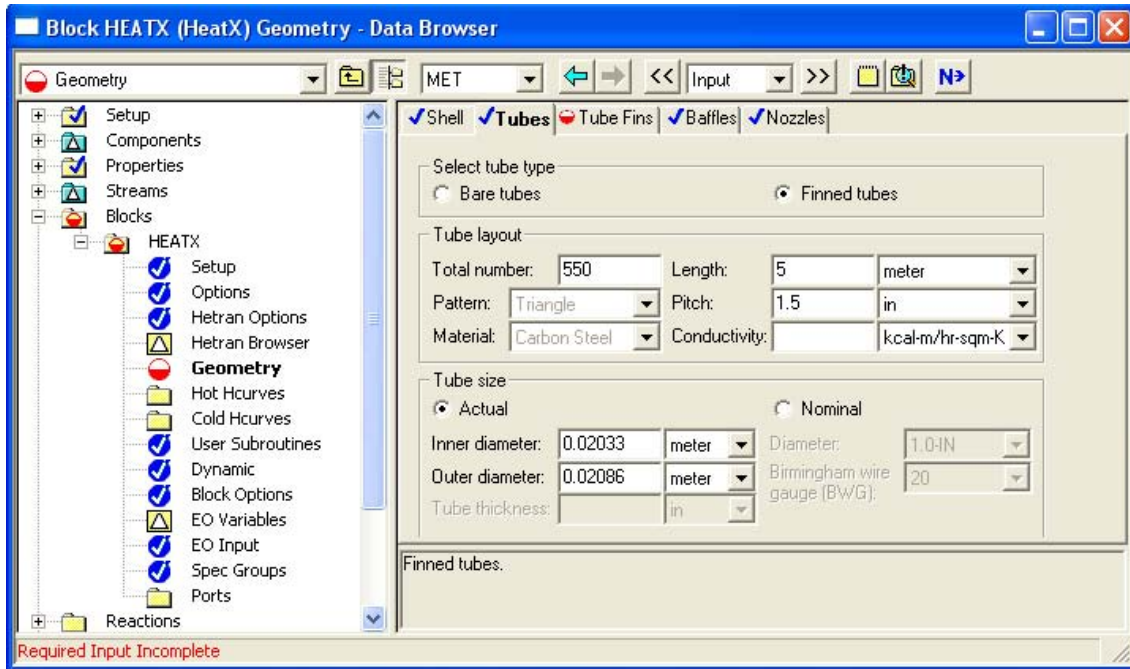
Tube Layout Patterns

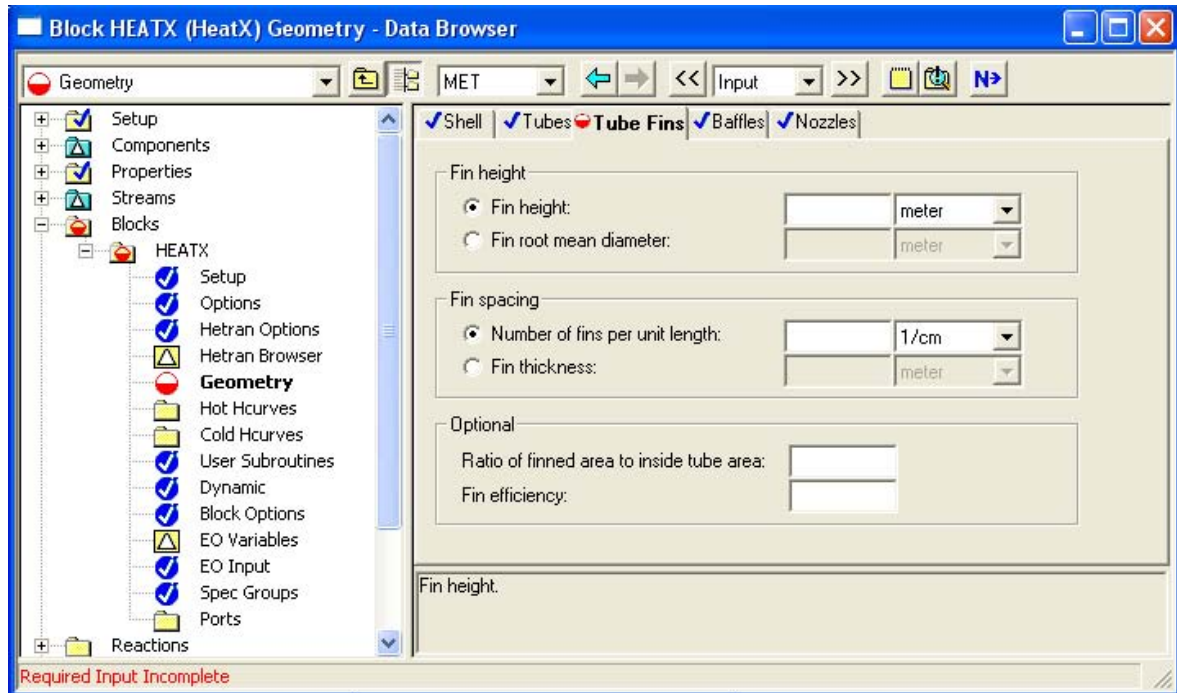
در صورتیکه نوع لوله را فین دار انتخاب کنیم اطلاعات مربوط به فین را در قسمت Tube Fines وارد می کنیم. جهت فعال شدن این پنجره ، می بایست نوع لوله در پنجره Tube فین دار انتخاب شود.



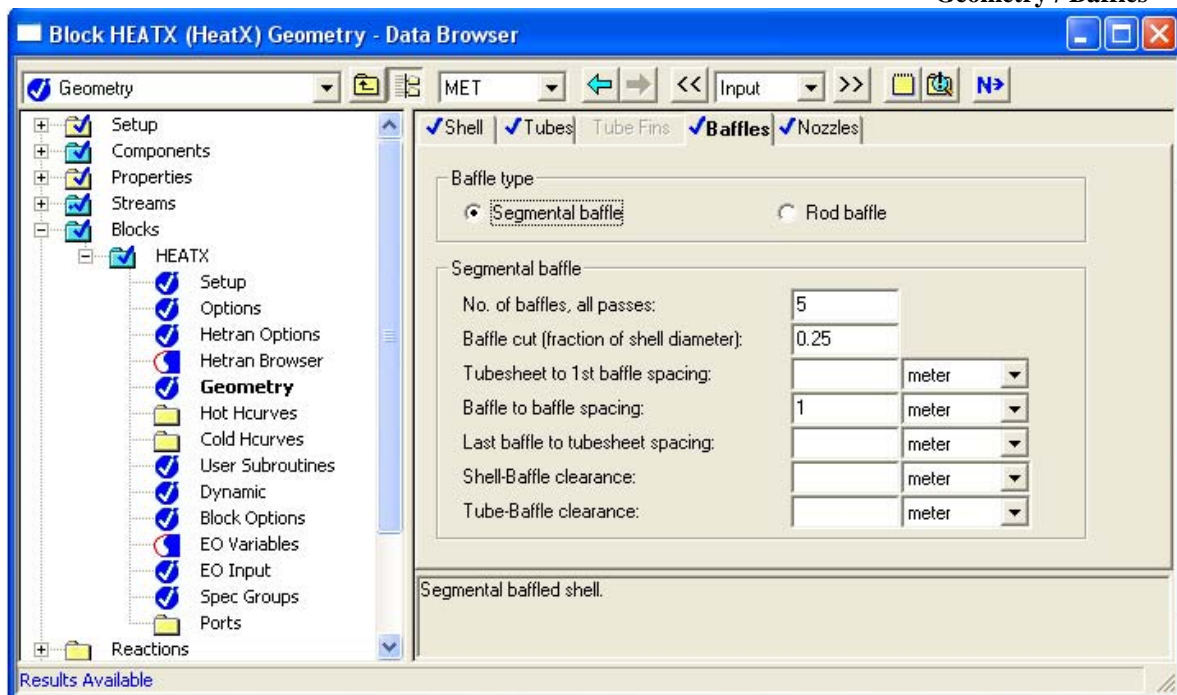
Fin Dimensions

Geometry / Tube fins •

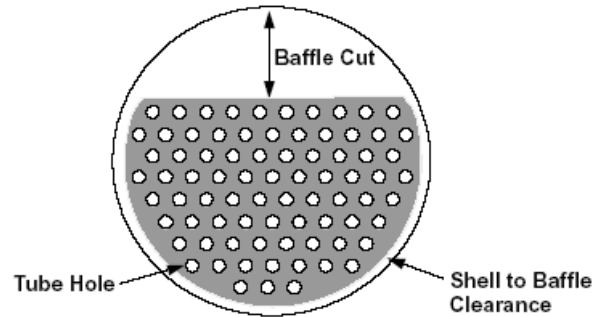




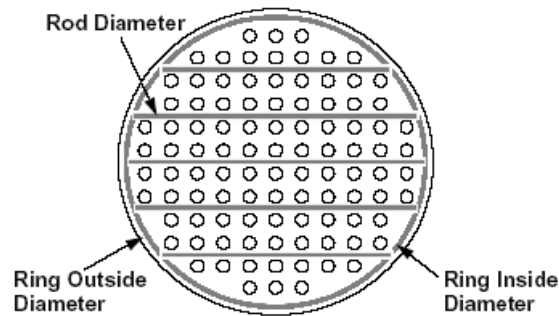
Geometry / Baffles •



برای افزایش ضریب انتقال حرارت در مبدل ها ، جهت حرکت سیال شل بر روی لوله ها را به وسیله قرار دادن بافل ها تغییر می دهند. اطلاعات مربوط به بافل ها از قبیل : تعداد بافل ها ، فاصله قطر سوراخ بافل با قطر خارجی لوله ، فاصله بافل تا بافل ، فاصله اولین بافل تا Tube Sheet و فاصله آخرین بافل تا Tube Sheet است. در شکل های دو صفحه بعدی ابعاد بافل ها به همراه آرایش جریان ها روی بافل ها در مبدل های مختلف نمایش داده شده است.

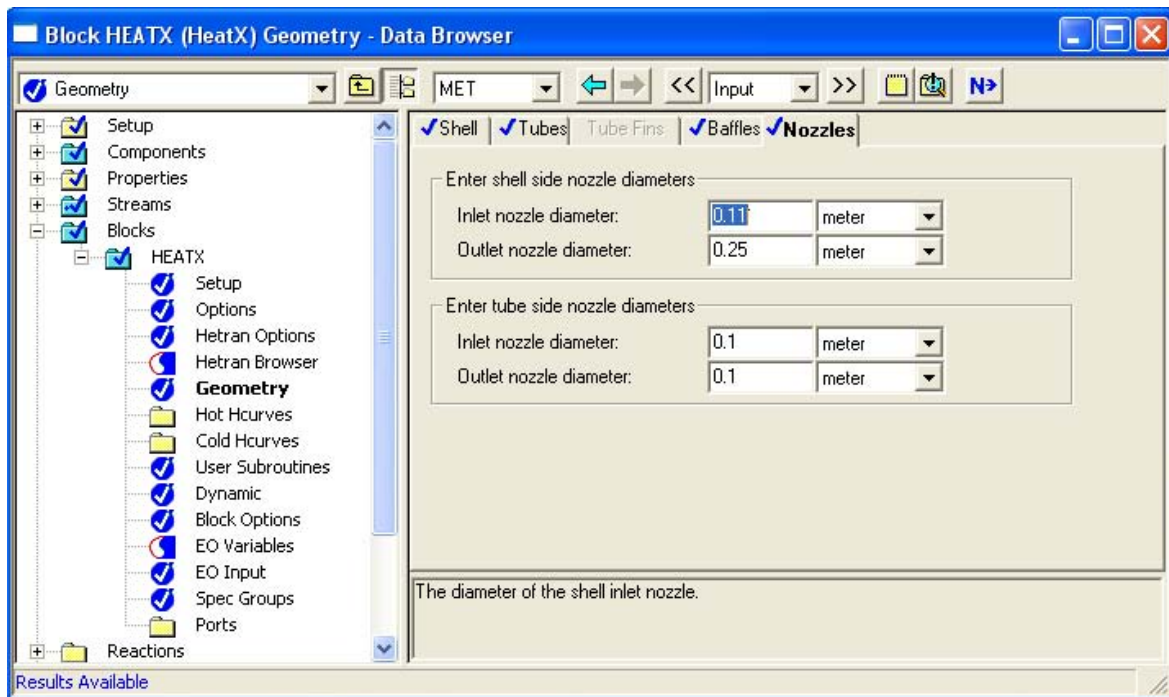


Dimensions for Segmental Baffles



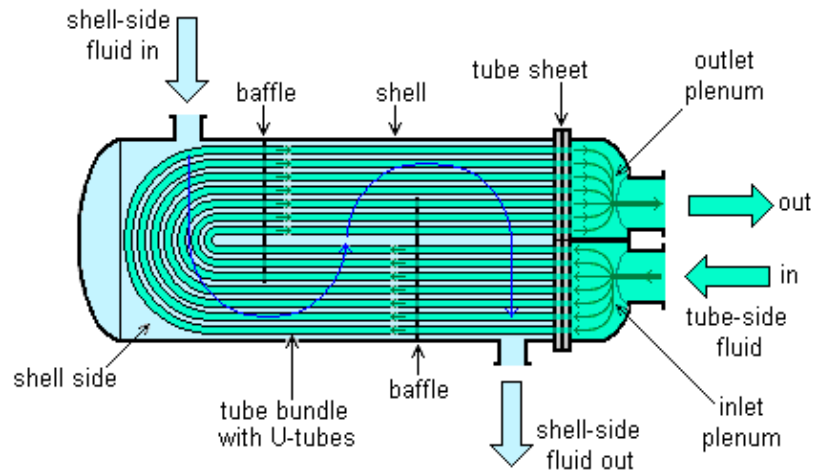
Dimensions for Rod Baffles

Geometry / Nozzle •

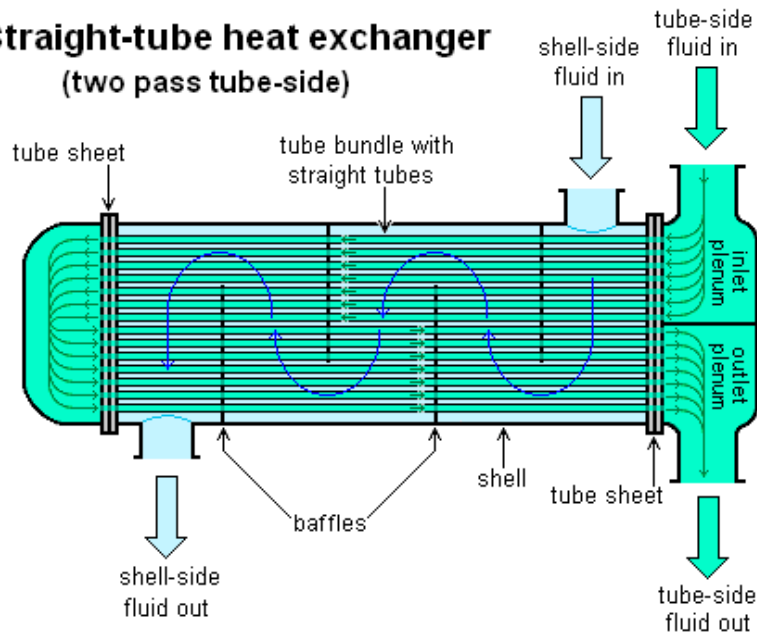


در این پنجره ابعاد مربوط به نازل های ورودی و خروجی پوسته و لوله در مبدل وارد می شود.

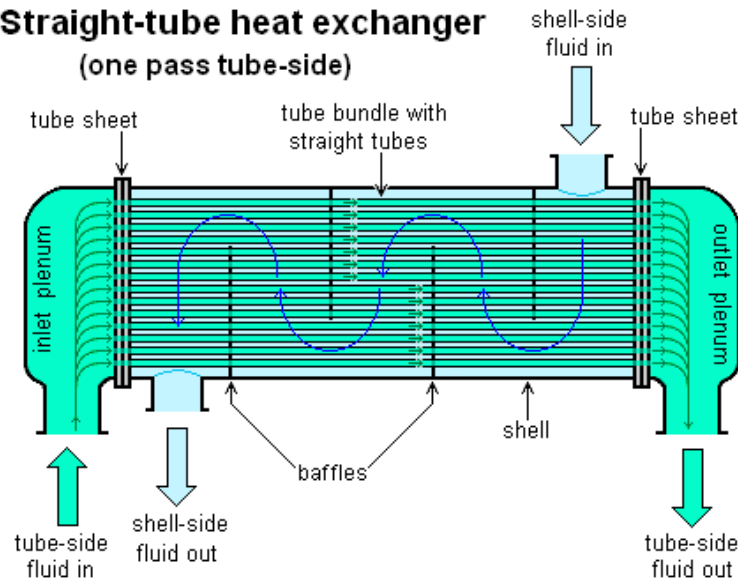
U-tube heat exchanger



Straight-tube heat exchanger (two pass tube-side)



Straight-tube heat exchanger (one pass tube-side)



۲- روش Detailed / Simulation

در این حالت با معلوم بودن جریان های ورودی و سطح انتقال حرارت مشخصات مربوط به جریان های خروجی محاسبه خواهند شد. تکمیل اطلاعات مربوط به صفحات ... Pressure Drop, و U Methods مطابق حالت قبل خواهند بود.

- محاسبات Hetran-Riorous

در صورت انتخاب این روش اجازه طراحی دستگاه جدید در Aspen Hetran و عملیات Rating ، Design و Simulation آن به کاربر داده می شود.

تمرین ۲:

برای تبدیل جریان خوراک Freon-12 با دبی $90 \frac{kmol}{hr}$ و دمای ۲۷۰ k و فشار ۳ at به بخار اشباع ، اتیلن گلایکل با دمای ۳۴۰ k ، دبی $282/3 \frac{kmol}{hr}$ و فشار ۲ atm در دسترس می باشد. دمای جریان خروجی Freon-12 ، حرارت مورد نیاز ، ضریب کلی انتقال حرارت و سطح انتقال حرارت را در دو حالت Short Cut و Detailed مقایسه نمایید.

- معادله ترمودینامیکی را NRTL-RK انتخاب کنید.
- در حالت Short Cut کلیه افت فشارها را برابر صفر در نظر بگیرید.
- برای حالت Detailed جریان گرم را به داخل لوله ها و جریان سرد را به داخل پوسته هدایت کنید.
- برای حالت Detailed ضریب تصحیح LMTD و افت فشارها با توجه به هندسه مبدل محاسبه شوند.
- برای محاسبه ضریب کلی انتقال حرارت از روش Film Coefficient استفاده کنید.
- ضرایب فیلمی انتقال حرارت جریان گرم که به صورت تک فاز است با توجه به هندسه مبدل محاسبه شود و برای جریان سرد که با تغییر فاز همراه است ، مقادیر فازی زیر وارد شوند:

Cold stream phase specific values		
Liquid:	100	Watt/sqm-K
Boiling:	2200	Watt/sqm-K

- مشخصات زیر که مربوط به هندسه مبدل می شوند را وارد سیستم کنید.

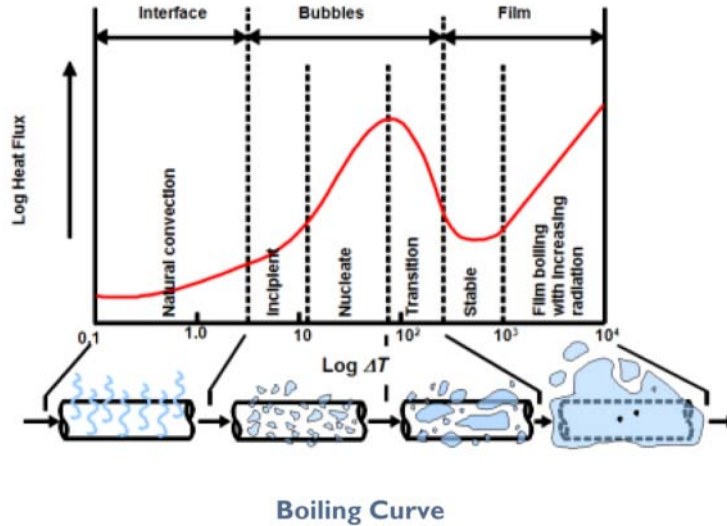
Shell		Tube	
Tema Shell Type	1 pass shell	Total Number	550
No. of tube pass	2	Pattern	Triangle
Exchanger Orientation	Horizontal	Material	Carbon Steel
Inside Shell Diameter	2.5 meter	Length	5 meter
Shell to bundle Clearance	0.25 meter	Pitch	1.5 in
Inlet Nozzle Diameter	0.11 meter	Inner Diameter	0.02033 meter
Outlet Nozzle Diameter	0.25 meter	Outer Diameter	0.02086 meter
Baffles		Inlet Nozzle Diameter	0.1 meter
		Outlet Nozzle Diameter	0.1 meter
No. of Baffles	5		
Baffle Cut	0.25		
Baffle to Baffle Spacing	1 meter		

نکته ۱:

Aspen Plus برای محاسبه ضریب انتقال حرارت جوششی و میعان زیاد دقیق نیست و برای طراحی مناسب بایستی ضریب کلی انتقال حرارت توسط کاربر وارد شود.

یاد آوری:

انواع مختلف جوشش در شکل زیر برای سیال پیرامون لوله محتوی سیال داغ نشان داده شده است.



در قسمت Natural Convection مایع نزدیک سطح گرم، در حین پیشروی از روی سطح گرم تبخیر می شود. سپس در ناحیه nuclear boiling شکل گیری حباب ها در روی سطح گرم شروع شده و پس از جدا شدن از روی سطح درون مایع متلاشی می شوند. این ناحیه نمایانگر آغاز جوش هسته ایست. در حین بالا رفتن درجه حرارت اضافی حباب ها سریعتر شکل گرفته و به طرف سطح مایع بالا می روند و در آنجا متلاشی می شوند. نهایتاً با بالا رفتن درجه حرارت اضافی حباب ها سریعتر شکل گرفته و به نحوی که سطح گرم را پوشانیده و از رسیدن و جایگزینی مایع تازه جلوگیری به عمل می آورند. در این نقطه حباب ها متلاشی شده و لایه ای از بخار شکل می گیرد و سطح را می پوشاند. به خاطر مقاومت حرارتی بالای لایه بخار، شار حرارتی کاهش می یابد و به عبارت دیگر ضریب انتقال حرارت کاهش می یابد. این ناحیه بیانگر گذر از جوش هسته ای به جوش لایه ایست که ناپایدار می باشد. سرانجام پس از این مرحله نوبت جوشش لایه ای پایدار فرا می رسد. برای تثبیت جوشش لایه ای پایدار درجه حرارت سطح باید زیاد باشد و در این صورت بخش مهمی از حرارت سطح ناشی از تشعشع حرارتی است.

با توجه به سطح انتقال حرارت بدست آمده در حالت Detailed/Rating، خروجی ها را یکبار دیگر در حالت Detailed/Simulation مقایسه نمایید.

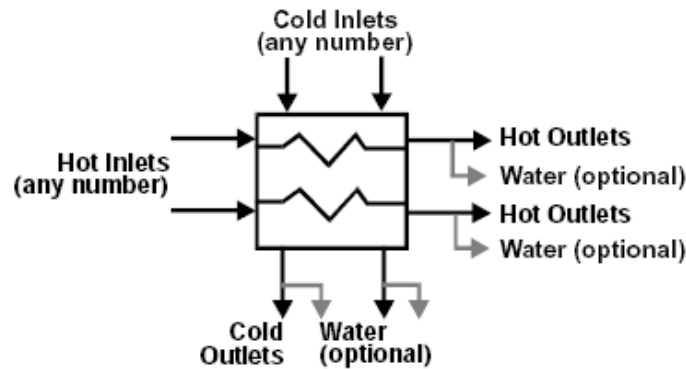
	Short Cut	Detailed/Rating	Detailed/Simulation
سطح انتقال حرارت			
دمای جریان سرد خروجی			
ضریب کلی انتقال حرارت			
بار حرارتی مبدل			

نکته ۲:

همواره Actual Design Area به خاطر Over Design ۲۰-۱۰٪ بزرگتر از Required Area است.

MHeatX

از این نوع مبدل های حرارتی برای انتقال گرما بین چندین جریان گرم و سرد استفاده می شود که شکل آن ملاحظه می شود:

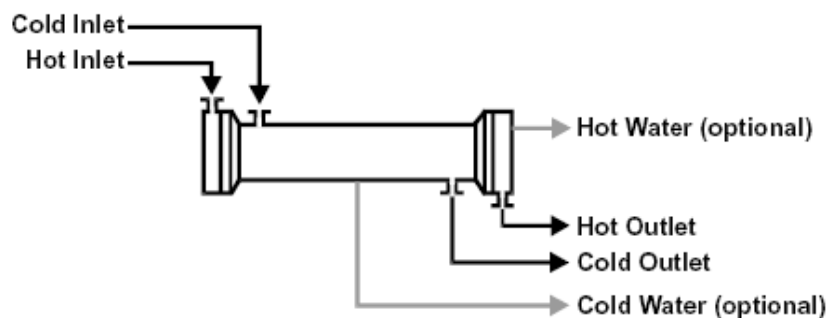


عمده کاربرد این مدل برای شبیه سازی Cold Box و چیلرهای چند منظوره است. برای محاسبات MHeatX باید تمام جریان های یک طرف (گرم یا سرد) از لحاظ دما و فشار ورودی و خروجی معلوم باشند و در طرف دیگر فقط یک جریان خروجی نامشخص باشد. مدل MHeatX از طریق محاسبات آنتالپی شرایط جریان خروجی نامشخص را محاسبه می کند.

تمرین ۳:

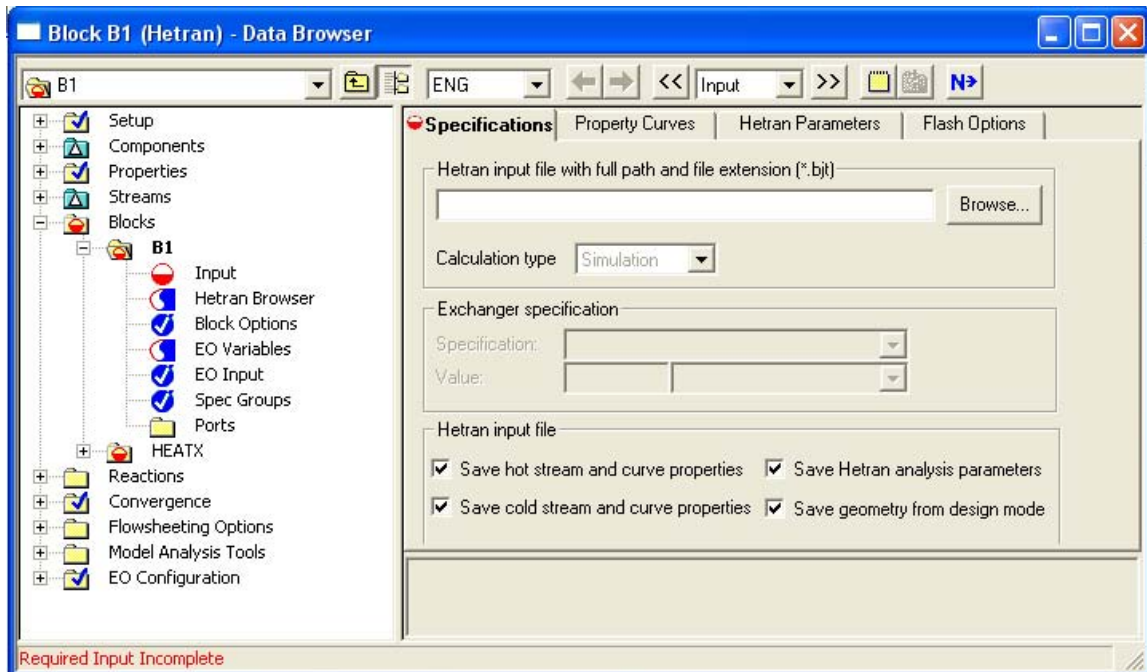
دو جریان گرم H_1 و H_2 توسط دو جریان سرد C_1 و C_2 خنک می شوند. دمای جریان خروجی C_2 را بدست آورید.

نام جریان	H_1	H_2	C_1	C_2
In/Out (C) دما	۲۰ / -۷۲	۳۰ / ۲۷	-۸۷/۲ / ۱۹/۹	-۷۹/۱۳ / ?
فشار (kpa)	۵۰۰۰ / ۴۹۰۰	۵۰۰۰ / ۴۹۹۰	۲۰۰۰ / ۱۹۵۰	۲۵۰ / ۲۴۵
دبی مولی (kmol/hr)	۱۰۰	۵۰	۷۵	۴۹/۲
C_1 (% mole)	۰/۵۳۶۸	۰/۹۵	۰/۹۵	۰/۰۲
C_2 (% mole)	۰/۱۵۳۸	۰/۰۵	۰/۰۵	۰/۹۸
C_3 (% mole)	۰/۰۷۷	۰	۰	۰
i- C_4 (% mole)	۰/۰۶۹۲	۰	۰	۰
C_4 (% mole)	۰/۰۶۱۵	۰	۰	۰
i- C_5 (% mole)	۰/۰۵۳۸	۰	۰	۰
C_5 (% mole)	۰/۰۴۷۹	۰	۰	۰

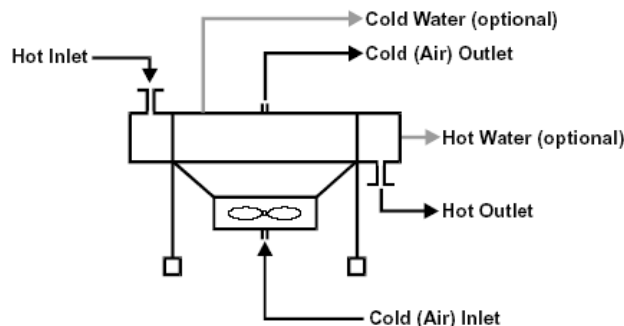
Hetran

Hetran یکی از برنامه های کاربردی Aspen B-jac است. این برنامه برای طراحی حرارتی مبدل ها استفاده می شود و خروجی آن TEMA Sheet مربوط به مبدل است. Aspen B-jac قابلیت لینک شدن به این برنامه را دارد و لذا کاربران Aspen

Plus قادر خواهند بود مبدل های موجود در محیط شبیه سازی خود را در Aspen B-jac طراحی حرارتی دقیق کنند. فقط می بایست توجه داشت که Aspen Plus فقط توانایی لینک شدن به برنامه های Aspen B-jac هم نسخه خود را دارد. جهت اتصال Aspen Plus به Hetran، بلوک Hetran را انتخاب کرده و در محیط فلوشیت قرار می دهیم. سپس وارد محیط Hetran شده و در قسمت Specification مسیر و نام فایل B-jac ورودی را وارد می کنیم.



Aerotran



Aerotran یکی از برنامه های کاربردی Aspen B-jac است که برای طراحی کولرهای هوایی استفاده می شود. Aspen B-jac قابلیت لینک شدن به این برنامه را دارد و لذا کاربران Aspen Plus قادر خواهند بود کولرهای هوایی موجود در محیط شبیه سازی خود را در Aspen B-jac طراحی کنند. جهت اتصال Aspen Plus به Aerotran، بلوک Aerotran را انتخاب کرده و در محیط فلوشیت قرار می دهیم. سپس وارد محیط Aerotran شده و در قسمت Specification مسیر و نام فایل B-jac ورودی را وارد می کنیم.

HTRIIST

HTRI یک برنامه کاربردی برای طراحی مبدل های حرارتی پوسته و لوله می باشد که Aspen Plus می تواند با آن لینک شود. برای اتصال به این برنامه در صورتیکه نرم افزار HTRI بر روی کامپیوتر نصب باشد مشابه دو حالت قبلی عمل می کنیم.



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

ASPEN PLUS

جلسه چهارم

- مدل های شبیه سازی برج های تقطیر: DSTWU / Distl / SCFrac / RadFrac
- آشنایی با مفهوم و کاربرد Design Spec در برج ها
- تمرین ها

۴- برج های تقطیر

کلیه مدل های موجود در ASPEN برای مدل کردن برج های تقطیر و استخراج به شرح جدول زیر هستند:

Model	Description	Purpose	Use For
DSTWU	Shortcut distillation design using the Winn-Underwood-Gilliland method	Determines minimum reflux ratio, minimum number of stages, and either actual reflux ratio or actual number of stages	Columns with one feed and two product streams
Distl	Shortcut distillation rating using the Edmister method	Determines separation based on reflux ratio, number of stages, and distillate-to-feed ratio	Columns with one feed and two product streams
SCFrac	Shortcut distillation for complex petroleum fractionation units	Determines product composition and flow, number of stages per section, and heat duty using fractionation indices	Complex columns, such as crude units and vacuum towers
RadFrac	Rigorous fractionation	Performs rigorous rating and design calculations for single columns	Ordinary distillation, absorbers, strippers, extractive and azeotropic distillation, three-phase distillation, reactive distillation
MultiFrac	Rigorous fractionation for complex columns	Performs rigorous rating and design calculations for multiple columns of any complexity	Heat integrated columns, air separation columns, absorber/stripper combinations ethylene plant primary fractionator quench tower combinations, petroleum refining applications
PetroFrac	Petroleum refining fractionation	Performs rigorous rating and design calculations for complex columns in petroleum refining applications	Preflash tower, atmospheric crude unit, vacuum unit, catalytic cracker main fractionator, delayed coker main fractionator, vacuum lube fractionator, ethylene plant primary fractionator and quench tower combinations
RateFrac [†]	Rate-based distillation	Performs rigorous rating and design for single and multiple columns. Based on nonequilibrium calculations. Does not require efficiencies and HETPs.	Distillation columns, absorbers, strippers, reactive systems, heat integrated units, petroleum applications, such as crude and vacuum units, absorber-stripper combination
Extract	Rigorous liquid-liquid extraction	Models countercurrent extraction of a liquid stream using a solvent	Liquid-liquid extractors

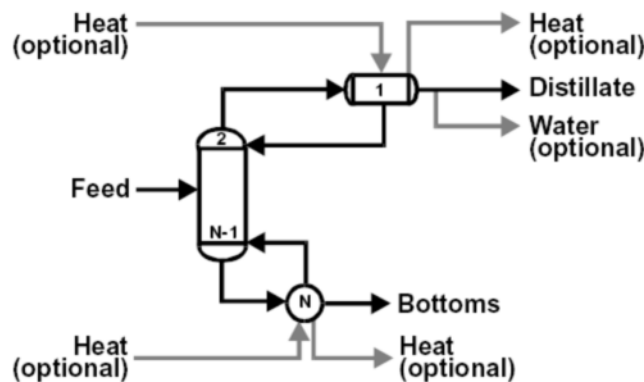
محاسبات Short Cut برای طراحی برج های تقطیر

طراحی برج های تقطیر کار دشواری است. بدست آوردن تعداد سینی های مورد نیاز و میزان جریان برگشتی از پارامترهای مهم طراحی برج هاست. در روش های Short Cut هدف بدست آوردن هندسه برج (تعداد سینی ها) با استفاده از روابط ریاضی ساده می باشد. از مدل های زیر ، برای طراحی اولیه (Short Cut) برج های تقطیر در Aspen استفاده می شود.

Section	Models
Shortcut Distillation	DSTWU, Distl, SCFrac

۴-۱: DSTWU

مدل DSTWU برای محاسبات سریع و ساده (Short Cut) برج های تقطیر با یک خوراک ورودی و دو محصول خروجی با کندانسورهای جزئی و کامل کاربرد دارد.



لازم به ذکر است که روش های Short Cut برای تقطیر ترکیبات ایده آل کاربرد دارند و برای حالت غیر ایده آل از Aspen Split استفاده می کنیم. در DSTWU محاسباتش فراریت نسبی و دبی مولی بخار و مایع را در طول برج ثابت در نظر می گیرد و از روش های زیر در محاسباتش استفاده می کند.

- روش **Underwood** : برای تخمین Minimum Reflux Ratio کاربرد دارد.
- روش **Winn** : برای تخمین مینیمم تعداد سینی های برج کاربرد دارد.
- روش **Gilliland** : برای تخمین Reflux Ratio لازم برای تعداد سینی های معلوم و تخمین تعداد سینی های لازم برای Reflux Ratio معلوم کاربرد دارد.

یادآوری

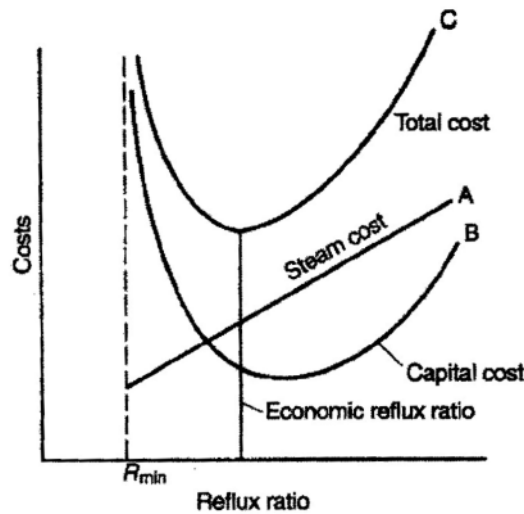
یکی از پارامترهای مهم در برج های تقطیر میزان جریان برگشتی $\left(R = \frac{L}{D}\right)$ می باشد. در روش Short Cut برای محاسبه مینیمم جریان برگشتی برای مخلوط های ایده آل که ضریب فراریت نسبی در آن تقریباً ثابت بماند ، از رابطه Underwood استفاده می شود. در حالتیکه مینیمم جریان برگشتی وجود داشته باشد تعداد سینی ها به سمت بی نهایت میل خواهد کرد. رابطه Underwood به صورت زیر می باشد:

$$R_m = \frac{x_d - \left(\frac{\alpha x_f}{1 + (\alpha - 1)x_f}\right)}{\left(\frac{\alpha x_f}{1 + (\alpha - 1)x_f}\right)}$$

برای حالت رفلکس کامل یعنی حالتیکه که محصولی از بالای برج نداشته باشیم ، با ثابت در نظر گرفتن ضریب فراریت نسبی ، تعداد کل سینی های برج از رابطه Fenske قابل محاسبه است :

$$n + 1 = \frac{\log\left(\left(\frac{x_A}{x_B}\right)_d \left(\frac{x_B}{x_A}\right)_w\right)}{\log(\alpha_{av})}$$

جریان برگشتی واقعی معمولاً ۱/۱۱ تا ۱/۵ برابر مقدار جریان برگشتی مینیمم پیشنهاد می شود. البته برای برج های تقطیر در خلأ بیشتر از این مقدار هم استفاده می شود. مقدار اپتیمم جریان برگشتی از طریق برآورد اقتصادی تعیین می شود که دیاگرام آن در شکل زیر مشاهده می شود.



باید توجه داشت که در حالت کلی با افزایش جریان برگشتی تعداد سینی ها کاهش می یابد اما از طرفی دیگر میزان بخار مصرفی ریپویلر و آب سرد کننده کندانسور افزایش می یابد و از طرفی برج با سینی با قطر بالا نیاز است تا جریان بخار سرعت قابل قبولی را داشته باشد.

با دو بار کلیک روی آیکن DSTWU وارد صفحه Input Specification خواهیم شد:

Specifications
Calculation Options
Convergence

Column specifications

Number of stages:

Reflux ratio:

Key component recoveries

Light key:

Comp:

Recov:

Heavy key:

Comp:

Recov:

Pressure

Condenser: psi

Reboiler: psi

Condenser specifications

Total condenser

Partial condenser with all vapor distillate

Partial condenser with vapor and liquid distillate

Distillate vapor fraction:

- در قسمت Column Specification بین Reflux Ratio و تعداد سینی ها یکی را انتخاب می کنیم.
- در قسمت Key Component Recoveries ترکیب سبک (Light Key) و ترکیب سنگین (Heavy Key) را وارد می کنیم.

❖ **Heavy Key**: سنگین ترین ماده ای که در بالای برج وجود دارد.

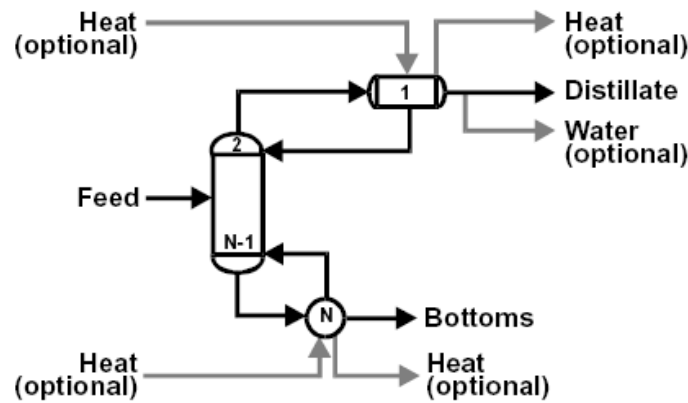
❖ **Light Key**: سبک ترین ماده ای که در بالای برج وجود دارد.

منظور از میزان Recovery اینست که چند درصد از این ماده سبک یا سنگین در بالای برج حضور دارد؟

- در قسمت Pressure فشار کندانسور و ریپویلر را وارد می کنیم.
- در قسمت Condenser Specification نوع کندانسور را مشخص می کنیم.

۴-۲: Distl

مدل Distl برای محاسبات سریع و ساده (Short Cut) برج های تقطیر با یک خوراک ورودی و دو محصول خروجی با کندانسورهای جزئی و کامل کاربرد دارد. این مدل قوی تر از مدل DSTWU است. به خاطر اینکه برج را به ۵ قسمت (کندانسور، قسمت بالای سینی خوراک، سینی خوراک، قسمت پایین سینی خوراک و ریپویلر) تقسیم می کند و برای هر قسمت α جداگانه محاسبه می کند. در صورتیکه در مدل DSTWU، α در طول کل برج ثابت در نظر گرفته می شد.



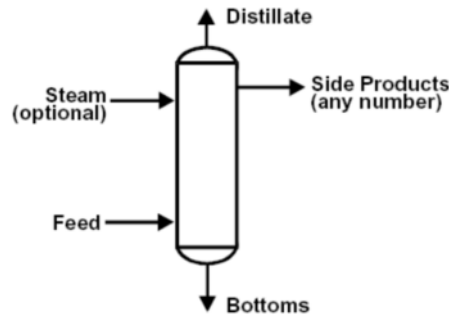
مدل Distl از روش Edmister در محاسباتش استفاده می کند. با دو بار کلیک روی آیکن DSTWU وارد صفحه Input Specification خواهیم شد:

- در قسمت Column Specification تعداد سینی ها، سینی خوراک، Reflux Ratio، نسبت مولی محصول بالای برج به خوراک و نوع کندانسور را انتخاب می کنیم.
- در قسمت Pressure فشار کندانسور و ریپویلر را مشخص می کنیم.

۳-۴: SCFrac

SCFrac برای شبیه سازی برج های تقطیر پیچیده (واحد های پالایشی نفت خام از قبیل برج تقطیر اتمسفریک و برج تقطیر در خلأ) با یک خوراک ورودی و یک جریان بخار ورودی (اختیاری) و هر تعداد محصول خروجی استفاده می شود. بر اساس نوع و مشخصات محصول، مدل SCFrac نتایج زیر را تخمین می زند:

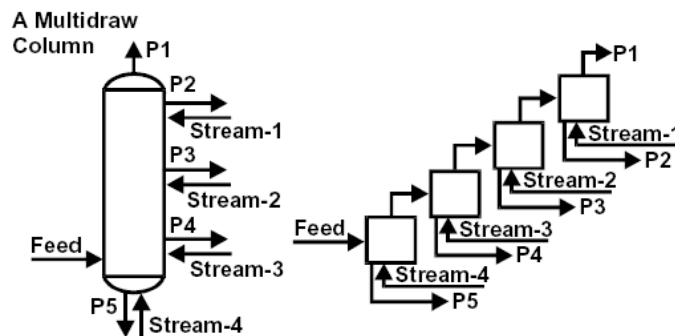
- ❖ ترکیبات و شدت جریان های محصولات
- ❖ تعداد مراحل هر قسمت
- ❖ بار حرارتی سرمایشی یا گرمایشی هر قسمت



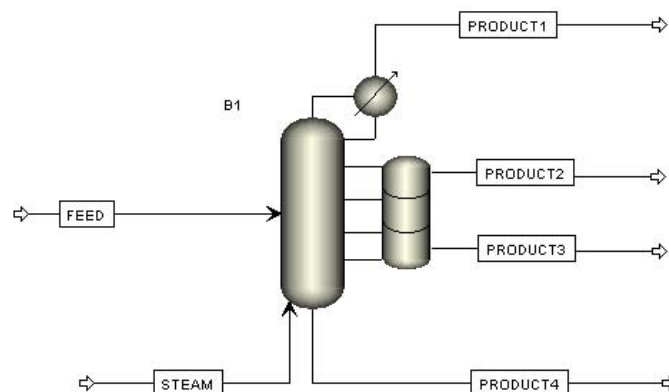
SCFrac در محاسباتش دبی مولی مایع را در طول برج و فراریت نسبی را برای هر قسمت ثابت در نظر گرفته و یک برج شامل n محصول را به n-1 قسمت تقسیم کرده و از بالا به پایین آنرا شماره گذاری می کند. در هر قسمت کاربر می بایست مقادیر:

- ❖ فشار جریان محصول
- ❖ تخمین دبی محصول یا نسبت محصول به خوراک

را مشخص کند.



همچنین کاربر باید نسبت شدت بخار به شدت جریان محصول را برای تمامی جریان های محصول به غیر از محصول بالای برج (Distillate) وارد نماید. برای مثال:



با دو بار کلیک روی آیکن SCFrac وارد صفحه Connect خواهیم شد:

Connect Steam Specs **Frac Index** Condenser Converge

Product stream connectivity, pressure and flow/fraction estimates

Name	Section	Type	Pressure	Basis	Flow	Units	Basis	Feed fraction
			psi					
PRODUCT4	3			Mole		lbmol/hr	Mole	
▶ PRODUCT2	1	Bottoms		Mole		lbmol/hr	Mole	
PRODUCT1	1	Overhead		Mole		lbmol/hr	Mole	
PRODUCT3	2			Mole		lbmol/hr	Mole	

Connect **Steam** Specs **Frac Index** Condenser Converge

Steam:Product ratio

Product	Steam:Prod Mass per bbl	Units	Temperature	Units
▶ PRODUCT2	5	lb		F
PRODUCT3	5	lb		F
PRODUCT4	5	lb		F
*		lb		F

کاربر برای برج SCFrac می بایست $2(n-1)$ مشخصه (Specification) وارد نماید که عبارتند از:

- ❖ شاخص جداسازی (Fractionation Index) برای هر قسمت (تعداد مراحل تعادلی در رفلکس کامل برای هر قسمت)
- ❖ بازیافت مواد در جریان محصول نسبت به ورودی آن در خوراک
- ❖ مقدار یک خاصیت که توسط Property Set برای یک جریان محصول تعریف شده است.
- ❖ تفاوت در خواص جریانات محصول
- ❖ نسبت خواص یکسان برای جریان های محصول متفاوت

Connect **Steam** **Specs** **Frac Index** Condenser Converge

Specifications

Spec ID: 1

Type:

Target:

Stream name:

Property set:

Base stream name:

Base property set:

Components

Connect | Steam | Specs | **Frac Index** | Condenser | Converge

Fractionation indices

	Section	Frac index	Frac index heavies	Frac index ratio	Frac index estimate
	1				2
	2				2
	3				2
▶					

- **Frac Index** : تعداد مراحل تعادلی در رفلکس کامل برای هر قسمت است. اگر مقادیر **Frac Index heavies** یا **Frac Index ratio** وارد نشوند ، مقدار **Frac Index** برای تمامی ترکیبات و الا فقط برای ترکیبات سبک در نظر گرفته می شود.
- **Frac Index heavies** : **Frac Index** برای ترکیبات سنگین است.
- **Frac Index ratio** : نسبت **Frac Index** ترکیبات سنگین به سبک است.

Connect | Steam | Specs | **Frac Index** | **Condenser** | Converge

Condenser specifications

Pressure: psi

Temperature: F

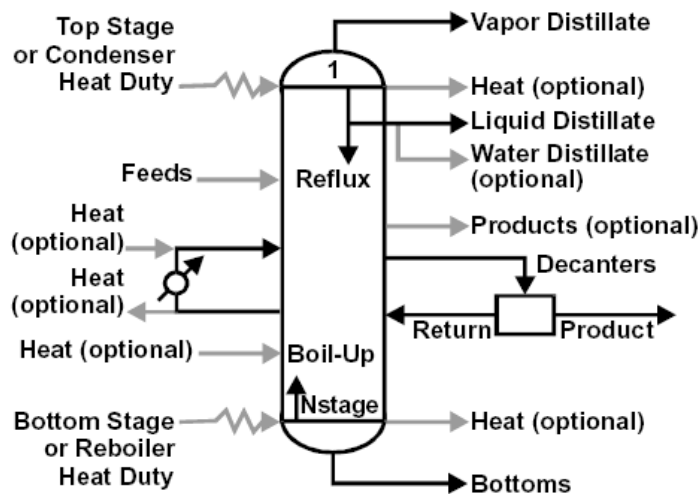
Distillate vapor fraction:

Degrees subcooled: F

به خاطر اینکه مدل SCFrac محاسبات بخار را انجام می دهد ، بنابراین همیشه آب باید حضور داشته باشد. تمامی آب از طریق شاخه جریان محصول بالایی برج دفع می شود. در ستون SCFrac حضور مواد جامد تعریف نشده است.

۴-۴ RadFrac :

- RadFrac یک مدل دقیق برای شبیه سازی انواع جداکننده های چند مرحله ای بخار مایع است.



این مدل قادر است تا موارد زیر را شبیه سازی نماید:

- برج تقطیر
- برج جذب
- برج جذب ریبولر دار
- برج عریان سازی
- برج عریان ساز ریبولر دار
- برج تقطیر آزنوتروپی و استخراجی
- برج های تقطیر همراه با واکنش شیمیایی
- مدلسازی و sizing برج های تقطیر پر شونده با random packing یا Structure packing

RadFrac در شرایط زیر می تواند کار کند:

- سیستم های دو فازی
- سیستم های سه فازی
- سیستم های با اختلاف دمای جوش زیاد و کم بین مواد
- سیستم هایی با فاز مایع غیر ایده آل

در برج های RadFrac کندانسور و ریبولر به عنوان سینی در نظر گرفته می شوند. یعنی سینی یک کندانسور و سینی آخر ریبولر است.

نکته

در اتصالات برج های RadFrac دو نوع جریان جانبی وجود دارد.

Side Stream: به عنوان جریان جانبی خروجی در برج در نظر گرفته می شود و در موازنه جرمی برج تأثیر می گذارد.

Soedo Stream: به عنوان جریان جانبی برج در نظر گرفته می شود ولی در موازنه جرمی برج تأثیر نمی گذارد. تنها

برای فهمیدن مشخصات جریان های سینی مربوطه از قبیل دما، فشار و ترکیبات و... است.

با دو بار کلیک کردن روی آیکن برج RadFrac صفحه Setup Configuration مربوط به برج ظاهر خواهد شد:

در این صفحه در قسمت Setup Options برای شبیه سازی یک برج نیاز به وارد کردن اطلاعات زیر خواهیم داشت:

- تعداد سینی ها
- انتخاب نوع کندانسور
- انتخاب نوع ریویولر
- نوع فازهای شرکت کننده در محاسبات تعادلی
- انتخاب نوع معادله همگرایی برج

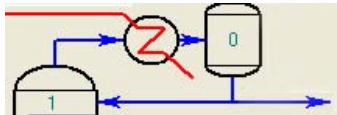
و در قسمت Operating Specification دو مشخصه از مشخصه های زیر را می بایست وارد کرد:

- دبی جریان بالای برج
- دبی جریان پایین برج
- نسبت شدت جریان برگشتی
- شدت جریان برگشتی
- گرمای کندانسور
- گرمای ریویولر
- نرخ Boilup
- نسبت Boilup
- نسبت جریان محصول بالای برج به خوراک
- نسبت جریان محصول پایین برج به خوراک

انواع کندانسور ها

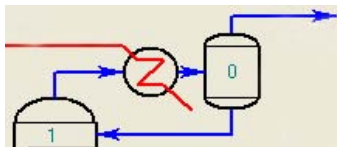
در حالت کلی سه نوع کندانسور در محیط شبیه سازی Aspen Plus موجود است که عبارتند از:

۱. کندانسور کامل



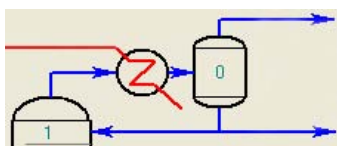
در این حالت کل جریان در داخل کندانسور به محصول مایع تبدیل می شود و لازم است تا یک مشخصه از مشخصه های حل برج در صفحه Setup Configuration در قسمت Operating Specification وارد کرد.

۲. کندانسور جزئی (شامل فقط جریان بخار)



در این حالت لازم است تا یک مشخصه از مشخصه های حل برج در صفحه Setup Configuration در قسمت Operating Specification وارد کرد.

۳. کندانسور جزئی (شامل جریان بخار و مایع)

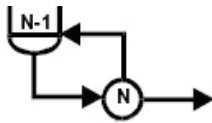


با انتخاب این حالت به تعداد درجه های آزادی سیستم یک درجه اضافه خواهد شد. و لذا بر خلاف دو حالت قبل می بایست دو مشخصه برای این برج تعریف شود. مشخصه اول در صفحه Setup Configuration و مشخصه دیگر در صفحه Condenser Specification در قسمت Condenser Specification وارد می شود که می تواند یکی از دو مورد زیر باشند:

۱. دمای کندانسور
۲. کسر بخار درون کندانسور

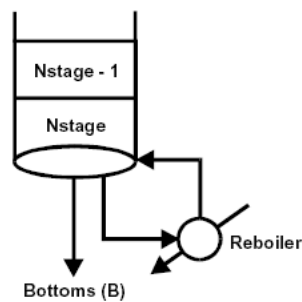
انواع ریبویلرها

۱. ریبویلر Kettle



در این حالت لازم است تا یک مشخصه از مشخصه های حل برج در صفحه Setup Configuration در قسمت Operating Specification وارد کرد.

۲. ریبویلر ترموسیفون

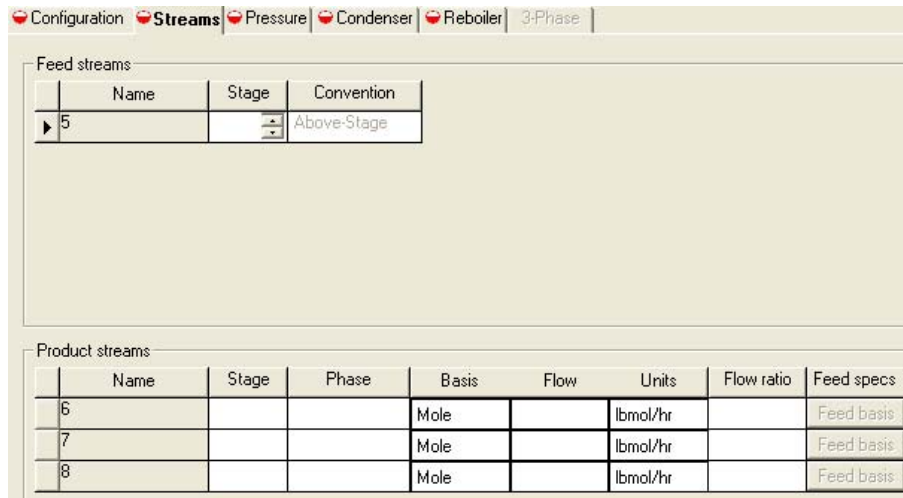


Thermosyphon Reboiler

با انتخاب این حالت به تعداد درجه های آزادی سیستم یک درجه اضافه خواهد شد. و لذا بر خلاف دو حالت قبل می بایست دو مشخصه برای این برج تعریف شود. مشخصه اول در صفحه Setup Configuration و مشخصه دیگر در صفحه Reboiler در قسمت Thermosyphon Reboiler Option وارد می شود که می تواند یکی از سه مورد زیر باشند:

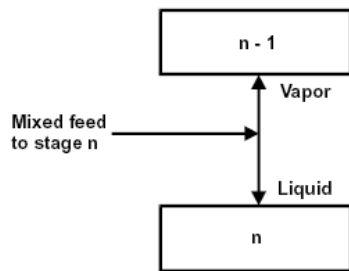
۱. دمای ریبویلر
۲. دما و دبی بخار ریبویلر
۳. دبی بخار ریبویلر

پنجره بعدی صفحه Setup Streams می باشد که در این صفحه سینی ورود خوراک و نوع ورود خوراک به سینی معلوم می شود:



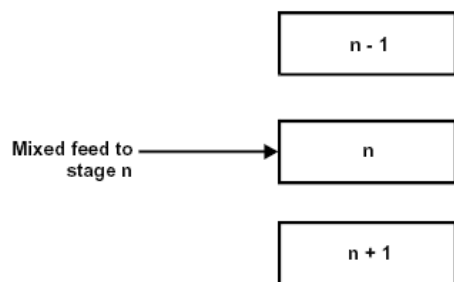
خوراک ورودی به برج به دو شکل زیر می تواند وارد برج شود:

Above Stage ■



RadFrac Feed Convention Above-Stage

On Stage ■



RadFrac Feed Convention On-Stage

نکته:

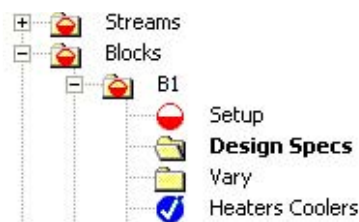
برای سیستم جذب یا حالتی که جریان گاز از پایین وارد برج می شود می بایستی گزینه OnStage را انتخاب کرد. پنجره بعدی صفحه Pressure می باشد که در این صفحه فشار کندانسور و افت فشار برج وارد می شود:

اگر فقط فشار قسمت اول (کندانسور) را وارد نماییم در اینصورت این فشار ، فشار کل برج خواهد شد.

Design Spec

معادلات پیچیده برج های تقطیر نیاز به یکسری مشخصه ها برای حل شدن دارند که می بایست توسط کاربر وارد شوند. تعداد و نوع و محل وارد کردن این مشخصه ها بستگی به نوع برج ، نوع کندانسور و ریویولر و تعداد جریان های جانبی محصول دارد. روش های حل برج با کمک این مشخصه ها شروع به حل برج می کنند و همگرایی یا عدم همگرایی حل برج های تقطیر تا حدود زیادی به مقدار این مشخصه ها بستگی دارد. زمانی که کاربر این مشخصه ها را در دسترس ندارد می تواند از حدس های هوشمندانه خود استفاده کرده و مقادیری برای این اطلاعات تعیین کنند. وارد کردن این دسته از مشخصه ها در قسمت Design Spec صورت می گیرد. از آنجاییکه وارد کردن یک مشخصه دلخواه ، یک معادله به حل برج اضافه می کند برای آنکه درجه آزادی صفر شود یک متغیر باید در قسمت Vary تعریف گردد. این متغیر معمولاً از بین Operating Specification ها انتخاب می گردد.

جهت ورود اطلاعات مربوط به این بخش می بایست از Data Browser ، پوشه Block و سپس برج را باز کرده و سپس پوشه های Design Spec و Vary را جهت ورود اطلاعات باز کرد:



دو نوع بازدهی برای برج های RadFrac قابل تعریف است:

۱. بازده تبخیر

۲. بازده مورفری

که بازده تبخیر به صورت $Eff_{ij}^V = \frac{y_{i,j}}{k_{ij}x_{ij}}$ و بازده مورفری به صورت $Eff_{ij}^M = \frac{y_{i,j} - y_{i,j+1}}{k_{i,j}x_{i,j} - y_{i,j+1}}$ تعریف می شوند.

انتخاب هر کدام از این روش ها بستگی به خود کاربر دارد. بازده به صورت مرحله ای ، برای هر ماده ای و برای هر قسمت برج قابل تعریف است.

Options Vapor-Liquid Vapor-1st Liquid Vapor-2nd Liquid

Efficiency type

Vaporization efficiencies

Murphree efficiencies

Method

Specify stage efficiencies

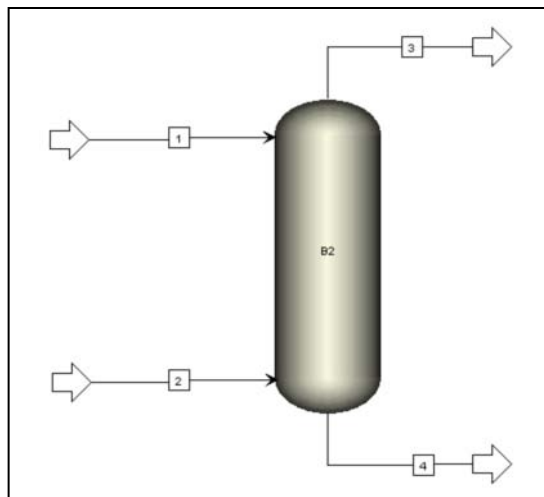
Specify efficiencies for individual components

Specify efficiencies for column sections

تمرین ۱:

هدف این مسئله حذف پروپان از مخلوط گازی به روش جذب با مواد سنگین تر می باشد. مشخصات جریان های ورودی به شرح جدول زیر می باشند:

مشخصات	جریان ۱	جریان ۲
دما (F)	۱۰۰	۱۰۰
فشار (at)	۵	۵
دبی مولی کل $\left(\frac{lbmole}{hr}\right)$	۱۰۰۰۰	۵۵۰۰
Methane (%mol)	۰	۰/۸۸
Ethane (%mol)	۰	۰/۰۴
Propane (%mol)	۰	۰/۰۵
N-Butane (%mol)	۰/۰۰۵	۰/۰۳
N-Decane (%mol)	۰/۹۹۵	۰



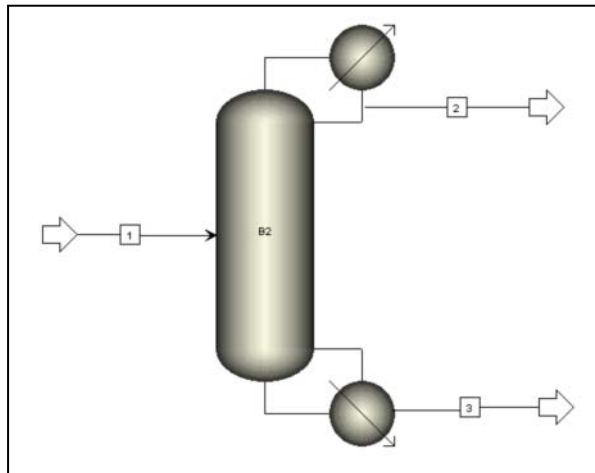
- معادله NRTL-RK را به عنوان معادله ترمودینامیکی انتخاب نمایید.
- تعداد مراحل تعادلی را برابر ۵ در نظر بگیرید.
- فشار بالای برج را برابر ۵ atm در نظر بگیرید.
- از الگوریتم های جذب و دفع در محاسبات استفاده کنید.

الف (مطلوبست ترکیب درصد مولی پروپان خروجی از بالای برج
 ب (مطلوبست دبی جریان ۱ ، اگر ترکیب درصد مولی پروپان خروجی از بالای برج به ۰/۰۱ برسد به شرطی که دامنه تغییرات دبی مولی خوراک مایع بین $\frac{lbmole}{hr}$ ۲۰۰۰۰-۵۰۰۰۰ (step size : ۱۰۰۰) باشد ، دبی مولی جریان ۱ را در دو حالت الف و ب مقایسه نمایید.

تمرین ۲:

هدف طراحی یک برج تقطیر ساده برای جداسازی اتیلن از مخلوط گازی با مشخصات ارائه شده در جدول زیر است :

مشخصات جریان ۱	
VF	۰
فشار (bar)	۱۸
دبی مولی کل $\left(\frac{\text{lbmole}}{\text{hr}}\right)$	۱۰۰
Hydrogen	۰/۰۰۰۱۴
Methane (%mol)	۰/۰۰۱۶۲
Ethane (%mol)	۰/۷۵۷۴۷
Ethylene (%mol)	۰/۲۴۰۰۳
Propylene (%mol)	۰/۰۰۰۷۵



الف: اگر هدف بازیافت ۹۵٪ اتیلن خوراک در محصول بالای برج باشد و درصد اتیلن در محصول بالایی برج ۹۹٪ مولی باشد ؛ میزان اتان بازیافت شده از خوراک را در محصول بالای برج محاسبه نمایید.

ب: به منظور نیل به هدف الف ؛ با استفاده از مدل DSTWU ، RR اپتیمم را محاسبه نمایید. فشار کندانسور و ریپویلر را به ترتیب برابر ۱۷/۸ و ۱۸/۲ بار در نظر بگیرید.

نکته: (به مجموع قدر مطلق بار های حرارتی کندانسور و ریپویلر Utility اطلاق می شود).

پ: ابعاد برج را با توجه به RR اپتیمم بدست آمده با استفاده از مدل DSTWU تخمین بزنید.

Utility	بار حرارتی ریپویلر	بار حرارتی کندانسور	دبی مولی محصول بالای برج	سینی خوراک	تعداد سینی های برج

ج: با توجه به اطلاعات بدست آمده از مدل DSTWU برج را با مدل های DISTIL و RadFrac حل نموده و نتایج را در جدول زیر وارد کرده و با همدیگر مقایسه نمایید.

مدل	درصد مولی اتیلن در محصول بالای برج	درصد مولی اتان در محصول بالای برج	بار حرارتی کندانسور	بار حرارتی ریپویلر
DISTIL				
RadFrac				

د: در مدل RadFrac با اصلاح میزان RR خلوص ۹۹٪ اتیلن در محصول بالای برج را برآورد نمایید.

ه: مطلوبست رسم نمودارهای تغییرات دما ، دبی بخار ، دبی مایع ، و کسر مولی ترکیبات بر حسب سینی ها.

(راهنمایی: زمانی که برج فعال باشد از طریق فشردن همزمان دکمه های Ctrl+Alt+w می توان به Plot Wizard دسترسی پیدا کرد.)



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

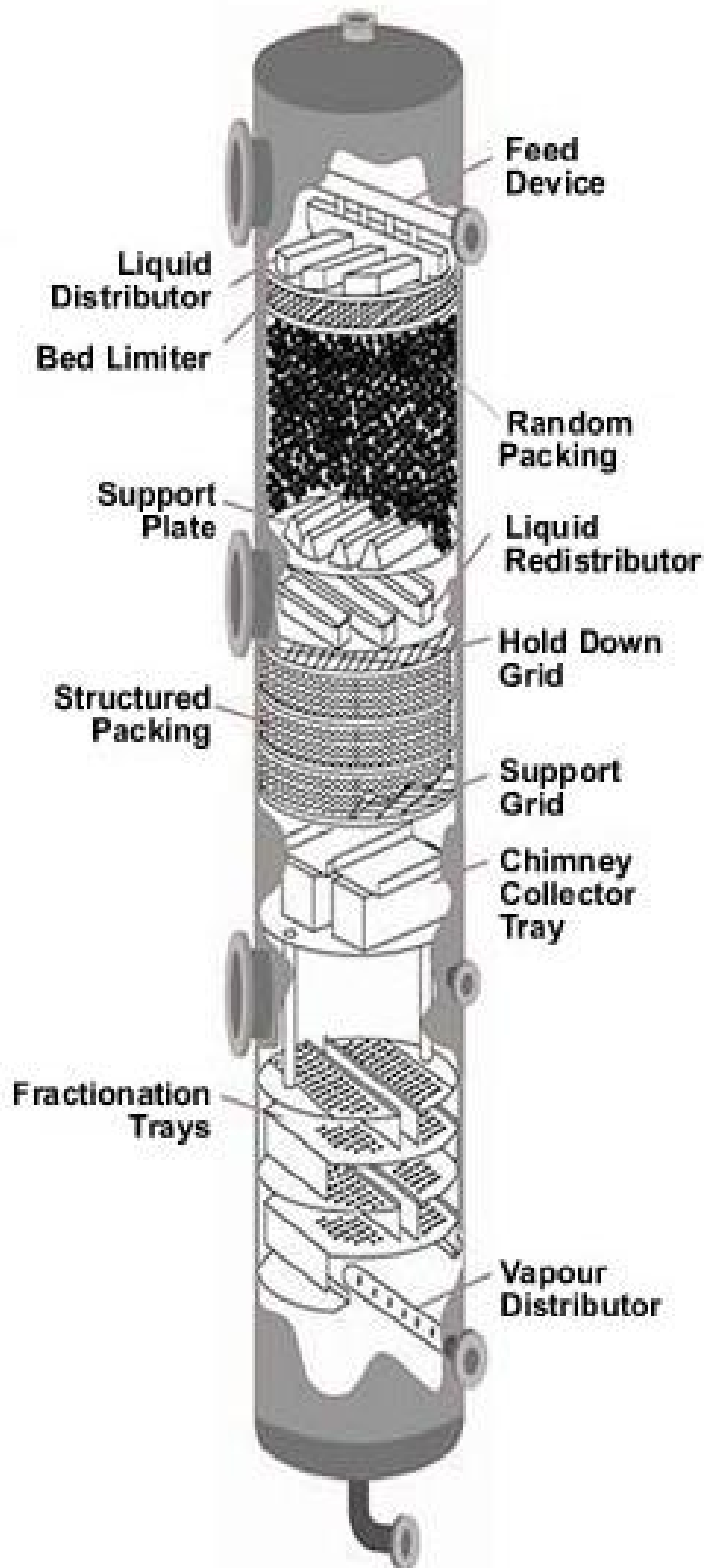
ASPEN PLUS

جلسه پنجم

- آشنایی با مفهوم Tray Sizing و Tray Rating
- مدل های شبیه سازی برج های تقطیر: MultiFrac / PetroFrac / RateFrac / Extract
- شبیه سازی برج های تقطیر واکنشی
- شبیه سازی برج های تقطیر پر شونده

Tray Sizing

در این قسمت هدف محاسبه قطر برج با توجه به مشخصات برج و سینی ها می باشد. برای Tray Sizing در زیر شاخه بلوک RadFrac ، MultiFrac و PetroFrac به زیر شاخه Tray Sizing رفته و صفحه جدیدی ایجاد می نمایم.



حالت های مختلف Tray Section در داخل برج تقطیر

الف (صفحه Specification :

در این صفحه از کاربر شماره سینی ها ، نوع سینی ها: Sieve Tray , Bubble Cap , Valve Tray(Nutter Float-Valve , Koch Flexitray , Glitsch Ballast) ، تعداد مسیره‌های سینی و هندسه سینی (فاصله سینی ها از هم ، مینیمم قطر سینی و ...) از کاربر خواسته می شود.

The screenshot shows the 'Specifications' window with the following settings:

- Trayed section:
 - Starting stage: 1
 - Ending stage: 1
 - Tray type: (dropdown menu)
 - Number of passes: 1
- Tray geometry:
 - Tray spacing: 2 ft
 - Minimum column diameter: 1 ft
 - Cap slot area to active area ratio: 0.12
 - Sieve hole area to active area ratio: 0.12

برای تعیین فاصله بین سینی ها می توان از الگوی جدول زیر استفاده کرد :

قطر برج	فاصله بین سینی ها
> ۱۲۰۰ mm	۴۵۰ mm
۷۲۰۰ mm-۱۲۰۰ mm	۶۰۰ mm-۹۰۰ mm

ب (صفحه Design :

در این صفحه ضریب طغیان ، مینیمم نسبت مساحت Downcomer به کل مساحت سینی ، ضریب Over design ، Foaming Factor و طریقه محاسبه طغیان از کاربر خواسته می شود.

The screenshot shows the 'Design' window with the following settings:

- Sizing criteria:
 - Fractional approach to flooding: 0.8
 - Minimum downcomer area (fraction of total tray area): 0.1
- Design parameters:
 - System foaming factor: 1
 - Over-design factor: 1
 - Flooding calculation method: (dropdown menu)

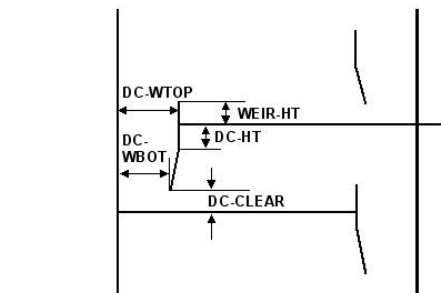
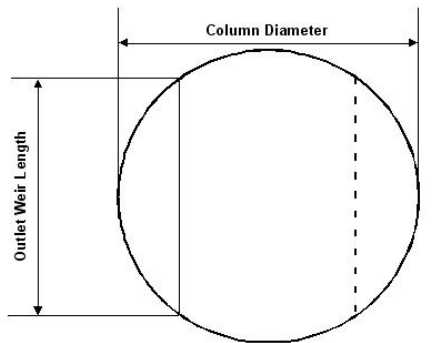
برای برآورد ضریب Foaming در داخل برج می توان از مقادیر پیشنهادی جدول زیر استفاده نمود:

Glitsch Ballast Trays	
None Foaming Systems	1
Fluorine Systems	0.9
Moderate Foamers , such as oil absorbers , amine, and glycol regenerators	0.85
Heavy foamers , such as amine and glycol absorbers	0.73
Severe foamers , such as MEK units	0.6
Foam stable systems , such as caustic regenerators	0.3
Koch Flexitrays	
Depropanizers	0.85-0.95
Absorbers	0.85
Vacuum towers	0.85
Amine regenerators	0.85
Amine Contactors	0.7-0.8
High pressure deethanizers	0.75-0.8
Glycol Contactors	0.7-0.75
Nutter Float-Valve Trays	
None Foaming	1
Low Foaming	0.9
Moderate Foaming	0.75
High Foaming	0.6

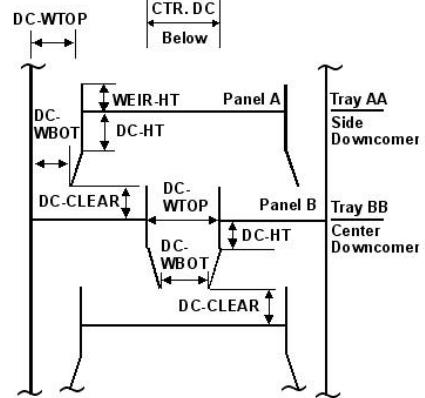
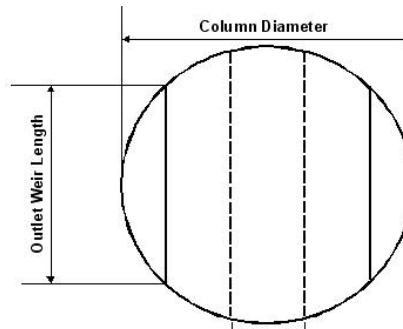
ج (صفحات Results و Profiles :

در این صفحات نتایج طراحی شامل قطر برج ، مساحت کل و فعال و مساحت Downcomer در طول سینی ها در صفحه Profiles و قطر ماکزیمم برج ، طول Downcomer و نسبت این طول به قطر برج و شماره آن در صفحه Result نشان داده می شوند.

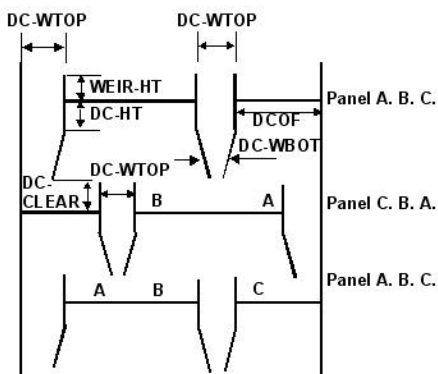
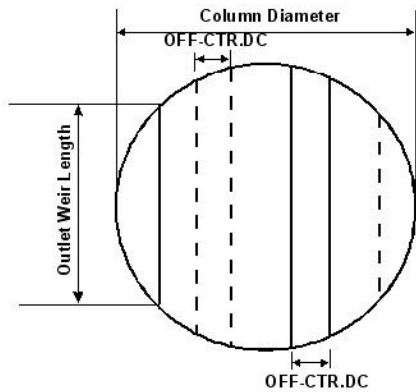
در شکل های زیر انواع سینی ها با پاس های مختلف نمایش داده شده اند:



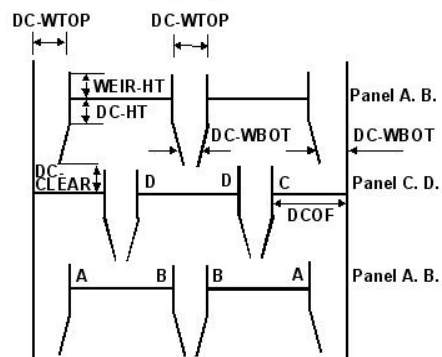
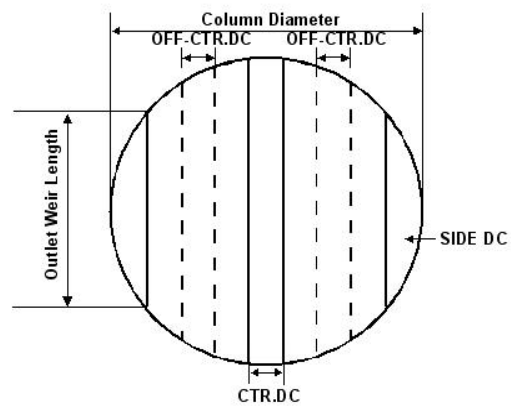
A One-Pass Tray



A Two-Pass Tray



A Three-Pass Tray



A Four-Pass Tray

معمولاً تا زمانی که قطر برج کوچکتر از ۱۵۰۰ mm است ، معمولاً از ۱ pass استفاده می شود. برای قطر های بالاتر می توان از الگوی جدول زیر بهره برد:

قطر برج	pass
۱۵۰۰ mm-۲۴۰۰mm	۲
۲۴۰۰ mm-۳۰۰۰mm	۳
۳۰۰۰ mm-۴۰۰۰mm	۴
>۴۰۰۰mm	۵

Tray Rating

در این قسمت با وارد کردن مشخصات سینی با جزئیات کامل آن ، عملکرد هیدرولیکی در هر مرحله از قبیل ضریب طغیان ، حجم مایع در ناودان به صورت درصد اشغال شده (Downcomer Backup) و افت فشار محاسبه می گردد. برای Tray Rating در زیر شاخه بلوک RadFrac ، MultiFrac و PetroFrac به زیر شاخه Tray Rating رفته و صفحه جدیدی ایجاد می نماییم.

الف) صفحه Specs

در این صفحه باید مشخصات سینی از قبیل (نوع سینی ، هندسه سینی از نظر تعداد پاس ها ، فاصله سینی و ...) به صورت کامل وارد سیستم شود.

مقدار قابل قبول ارتفاع سر ریز (Weir) برای سینی های Sieve و یا انواع Valve Tray ها مابین ۱۰ تا ۱۵۲/۴ میلیمتر و مقدار پیش فرض نیز ۲ اینچ می باشد.

برای سینی های از نوع کلاهکی (Bubble Cap) این ارتفاع تابع قطر کلاهک بوده و مقادیر مورد استفاده را می توان از جدول زیر بدست آورد :

ارتفاع سر ریز	قطر کلاهک
۲/۷۵	۳
۳	۴
۳/۲۵	۶

زمانی که سینی از نوع Sieve انتخاب شود ، در صفحه Layout اندازه سوراخ ها و نسبت مساحت سوراخ ها به مساحت فعال از کاربر خواسته می شود. مقادیر پیش فرض برای قطر مابین $\frac{1}{8}$ تا $\frac{1}{2}$ اینچ می باشد و مقادیر پیش فرض برای نسبت مساحت ها مطابق جدول زیر است:

قطر برج	Holes area/Active Tray area
۳	۰/۶۵
۴	۰/۷
۶	۰/۷۴
۸	۰/۷۶
۱۰	۰/۷۸

ب) صفحه Design / Pdrop

در این صفحه ضریب Foaming میزان Over design ، بازده کلی سینی ها و نوع محاسبه ضریب طغیان از کاربر خواسته می شود. همچنین می توان افت فشار محاسبه شده را بر مبنای اینکه فشار بالا را ثابت فرض کرده باشیم و یا پایین برج بوسیله گزینه Update Section Pressure Profile به برج شبیه سازی شده اعمال خواهد شد. نتایج به صورت مختصر برای سینی با شرایط خاص (حالت بحرانی) و همچنین برای تمام سینی ها بصورت پروفایل محاسبه می شود که در آن عملکرد هیدرولیکی در هر مرحله مثل ضریب طغیان ، Downcomer Backup و افت فشار محاسبه می گردد.

ج) صفحات Layout و Downcomers

در این صفحات مشخصات دقیق سینی ها و Downcomer ها بایستی وارد شوند که اختیاری است.

Specs Design / Pdrop Layout **Downcomers** Results Profiles

Downcomer geometry

Number of passes:

	Side	
Clearance:	<input type="text"/>	ft
Width at top:	<input type="text"/>	ft
Width at bottom:	<input type="text"/>	ft
Straight height:	<input type="text" value="0"/>	ft
Distance to wall:	<input type="text"/>	
Edge type:	<input type="text"/>	

Optional

Residence time: hr Flooding limit:

د) صفحات Results و Profiles :

کلیه نتایج محاسبه شده در این صفحه نشان داده می شوند.

تمرین ۱:

برج تقطیر با مشخصات جداول زیر را شبیه سازی نمایید:

مشخصات برج	
تعداد مراحل برج	۴۰
سینی خوراک	۲۴
نوع کندانسور	Total
فشار کندانسور (psia)	۱۶/۱
افت فشار هر مرحله (psi)	۰/۱
دبی مولی Distillate $\left(\frac{lbmole}{hr}\right)$	۱۲۴۵
نسبت جریان برگشتی مولی	۱/۳

مشخصات جریان خوراک	
VF	۰
فشار (Psia)	۱۸/۳
دبی جرمی کل $\left(\frac{lb}{hr}\right)$	۱۲۰۰۰۰
Water (% mass)	۰/۶۳۲
Methanol (% mass)	۰/۳۶۸

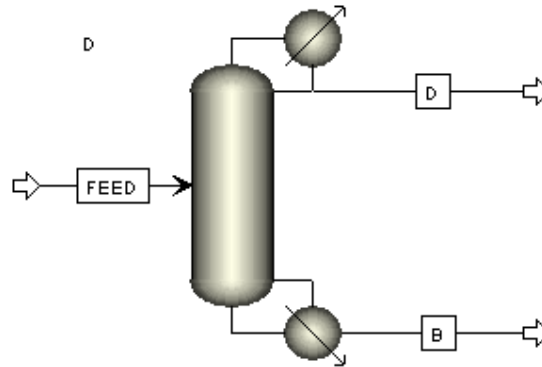
معادله حالت: NRTL-RK

الف) بازدهی مورفری را برای تمام مراحل به جز ریویولر و کندانسور برابر ۰/۶۵ و برای ریویولر و کندانسور برابر ۰/۹۰ در نظر بگیرید. شرایط طراحی را به گونه ای تغییر دهید که ۰/۹۹/۹۵ جرمی متانول در Distillate داشته باشیم و ۰/۹۹/۹ جرمی آب در پایین برج داشته باشیم. شما مجازید شدت جریان Distillate را بین $\left(\frac{lbmole}{hr}\right)$ ۱۷۰۰-۸۰۰ و نسبت شدت جریان برگشتی را بین ۰/۸-۲ تغییر دهید.

ب) اگر سینی های برج از نوع کلاهکی باشند قطر برج را محاسبه نمایید.

تمرین ۲:

متیل استات از مهمترین رزین های نفتی است که برای تولید چرم مصنوعی کاربرد دارد. فرآیند زیر جهت سنتز متیل استات از متانول و اسید استیک در یک ستون تقطیر کاتالیستی است. مطلوبست شبیه سازی فرآیند زیر با اطلاعات داده شده در مسئله:

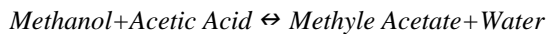


مشخصات برج	
تعداد مراحل برج	۱۵
سینی خوراک	۱۰
نوع کندانسور	Total
فشار کندانسور (Kpa)	۹۰
فشار ریبولر (Kpa)	۹۷
دبی مولی Distillate $\left(\frac{kgmole}{hr}\right)$	۲۰
نسبت جریان برگشتی مولی	۵

مشخصات جریان خوراک	
دما (C)	۷۵
فشار (Kpa)	۱۰۱/۳
دبی مولی کل $\left(\frac{kgmole}{hr}\right)$	۴۵
Methanol (% mole)	۰/۴
Acetic Acid (% mole)	۰/۴
Methyle Acetate (% mole)	۰/۱
Water (% mole)	۰/۱

معادله حالت: wilson

الف) برنامه را اجرا کرده و ترکیب درصد اجزاء خوراک را در محصولات بالا و پایین برج بررسی نمایید.
ب) واکنش زیر را که در فاز مایع انجام می شود، به مراحل ۵ تا ۱۰ برج اعمال کرده و سپس پس از اجرای برنامه ترکیب درصد اجزاء خوراک را در محصولات بالا و پایین برج بررسی نمایید.

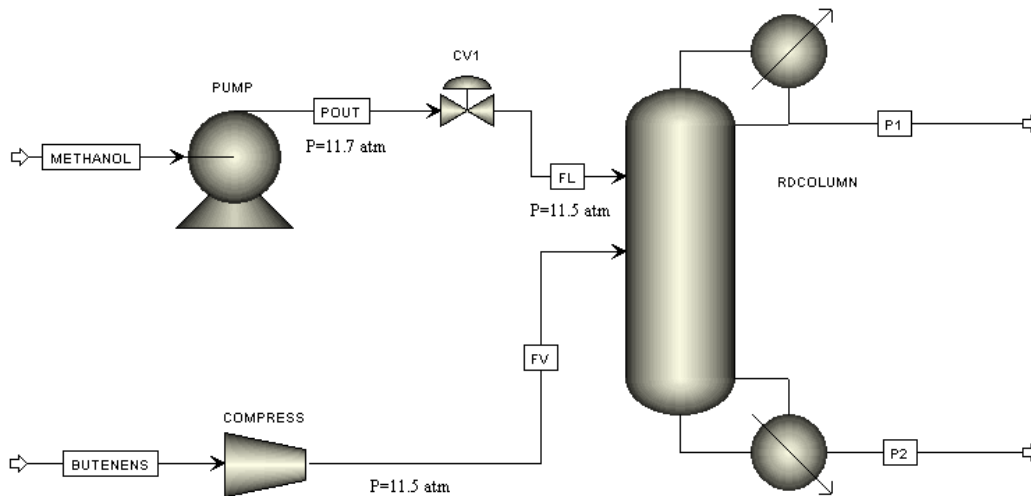


$$-r_A = 1.0e5 e^{(-2.3e4(KJ/kgmole)/RT)} C_{Meth} \cdot C_{Acetic Acid}$$

ج) برنامه را برای حالتیکه واکنش تعادلی باشد اجرا نمایید.

تمرین ۳:

فرایند تولید و خالص سازی متیل ترسیو بوتیل اتر (MTBE) را با اطلاعات داده شده در مسئله شبیه سازی نمایید:



مشخصات برج	
تعداد مراحل برج	۱۷
سینی خوراک FL	۱۰
سینی خوراک FV	۱۱
نوع کندانسور	Total
فشار کندانسور (atm)	۱۱
فشار ریبولر (atm)	۱۱/۵
دبی مولی Distillate $\left(\frac{kgmole}{hr}\right)$	۶۴۰/۸
نسبت جریان برگشتی مولی	۷

معادله ترمودینامیکی: UNIFAC

مشخصات جریان های خوراک	
Butenes	
دما (K)	۳۵۰
فشار (atm)	۱
دبی مولی کل $\left(\frac{kgmole}{hr}\right)$	۱۹۶۵/۱۸
Iso Butylene (% mole)	۰/۳۶
1-Butene (% mole)	۰/۶۴
Methanol	
دما (K)	۳۲۰
فشار (atm)	۱
دبی مولی متانول $\left(\frac{kgmole}{hr}\right)$	۷۱۱/۳

واکنش زیر را که در فاز مایع انجام می شود، به مراحل ۴ تا ۱۱ برج اعمال کرده و پس از اجرای برنامه ترکیب درصد اجزاء خوراک را در محصولات بالا و پایین برج بررسی نمایید.



$$-r_{\text{Forward}} = 3.67 \cdot 10^{12} e^{(-92440(\text{KJ/kgmole})/RT)} C_{\text{Meth}}^{-1} \cdot C_{\text{IB}}$$

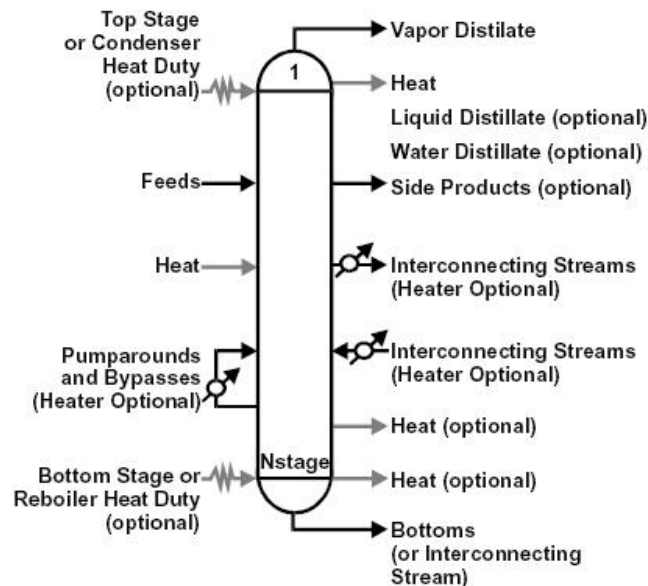
$$-r_{\text{Backward}} = 2.67 \cdot 10^{17} e^{(-134454(\text{KJ/kgmole})/RT)} C_{\text{Meth}}^{-2} \cdot C_{\text{MTBE}}$$

MultiFrac –

MultiFrac یک مدل دقیق برای شبیه سازی برج های جداسازی چندین مرحله ایست و برای مدلسازی سیستم های پیچیده شامل موارد زیر بکار می رود:

۱. هر تعداد برج با هر تعداد مرحله
۲. هر تعداد اتصال جریان بین برج ها یا برای هر برج
۳. جداکردن هر جریان دلخواه و ترکیب با جریان های اتصال یافته

طرح اتصالات این برج به صورت زیر است:



با استفاده از مدل MultiFrac کاربر قادر خواهد بود هر تعداد برج را به هر تعداد جریان متصل کند. در این مدل برای هر برج باید یک جریان محصول مایع یا یک جریان اتصالی از پایین برج وجود داشته باشد. مرحله بالایی از برج اصلی (برج ۱) باید یک جریان خروجی محصول داشته باشد و این جریان نمی تواند یک جریان اتصالی باشد. مرحله بالایی برج های دیگر به غیر از برج اول باید یک محصول بخار یا یک جریان اتصالی بخار داشته باشند.

مدل MultiFrac قادر است تا عملیات های زیر را انجام دهد:

۱. استریپر های جانبی Side Strippers
۲. پمپ های جانبی Pumparounds
۳. مبدل های حرارتی خارجی External Heat Exchangers
۴. فلش های تک مرحله ای Single Stage Flashes
۵. خوراک کوره Feed Furnace

کاربرد های عمده این مدل عبارتند از:

۱. برج های Heat-inter Stage مانند برج های Petlyuk
۲. برج های جداسازی هوا
۳. ترکیب برج های جذب و دفع
۴. برج های واحد اتیلن

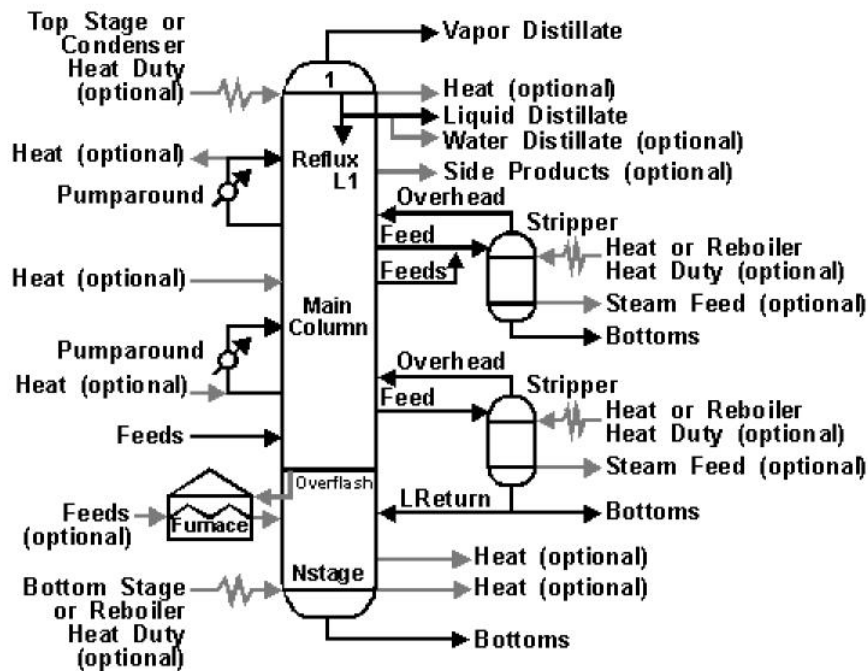
این مدل هر برج می تواند :

- ترکیبی از قسمت های سینی دار و آکنه باشد.
- شامل هر تعداد جریان های اتصالی باشد.
- شامل هر تعداد جریان محصولات جانبی باشد.

از این مدل می توان برای شبیه سازی برج های تقطیر اتمسفریک و تقطیر در خلأ نفت خام نیز استفاده کرد. اما برای چنین کاربردهایی بهتر است از مدل PetroFrac استفاده شود. مدل MultiFrac می تواند محاسبات مربوط به free water را برای هر مرحله برج مجزا انجام داده و قابلیت جداسازی آب خالص را از هر مرحله دارد. در این مدل هر دو نوع بازدهی مورفوری و بخارسازی را می توان به مراحل برج اعمال کرد. همچنین عملیات Tray Sizing و Tray Rating را می توان در این مدل به کار برد. این مدل توانایی شبیه سازی برج های پر شونده را هم از نوع Random Packing و هم از نوع Structure Packing داراست. همچنین از این مدل می توان برای طراحی برج ها و یا عملیات Rating برج های موجود استفاده نمود.

PetroFrac –

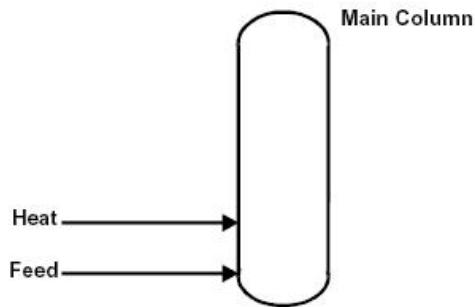
برج های PetroFrac مخصوص شبیه سازی برج های نفتی اند. همانطور که در شکل زیر ملاحظه می شود از یک کوره ، چندین Pumparound و چند Side stripper تشکیل شده اند.



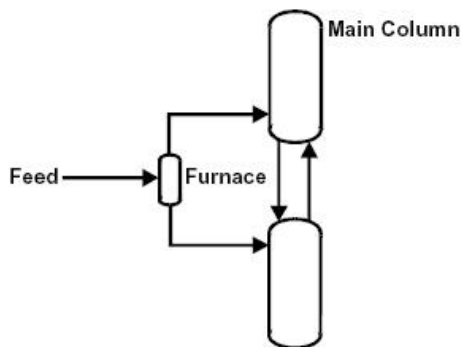
عمده موارد استفاده این مدل در عملیات های زیر است:

- Preflash tower
- Atmospheric crude unit
- Vacuum unit
- Catalytic cracker main fractionator
- Delayed coker main fractionator
- Vacuum lube fractionator

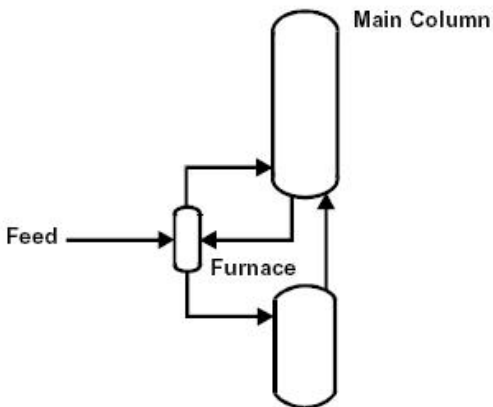
در مدل PetroFrac می توان از کوره در مسیر جریان خوراک استفاده نمود. انواع کوره های استفاده شده در برج های PetroFrac عبارتند از:



Furnace Modeled as a Stage Heat Duty



Furnace Modeled as a Single Stage Flash



Furnace Modeled as a Single Stage Flash with Overflash Bypass

مدل PetroFrac می تواند محاسبات مربوط به free water را برای هر مرحله برج مجزا انجام داده و قابلیت جداسازی آب خالص را در کندانسور یا در هر مرحله از برج را دارد. در این مدل هر دو نوع بازدهی مورفوری و بخارسازی را می توان به مراحل برج اعمال کرد. همچنین عملیات Tray Sizing و Tray Rating را می توان در این مدل به کار برد. این مدل توانایی شبیه سازی برج های پر شونده را هم از نوع Random Packing و هم از نوع Structure Packing داراست. در فصل های آینده توضیحات کامل همراه با مثال ارائه خواهند شد.

RateFrac –

برج های RateFrac برای شبیه سازی و طراحی انواع برج های سینی دار و پر شده قابل استفاده اند. روش حل برج های RateFrac تفاوت اصلی با برج های RadFrac و PetroFrac و MultiFrac دارد. در برج های RadFrac و PetroFrac

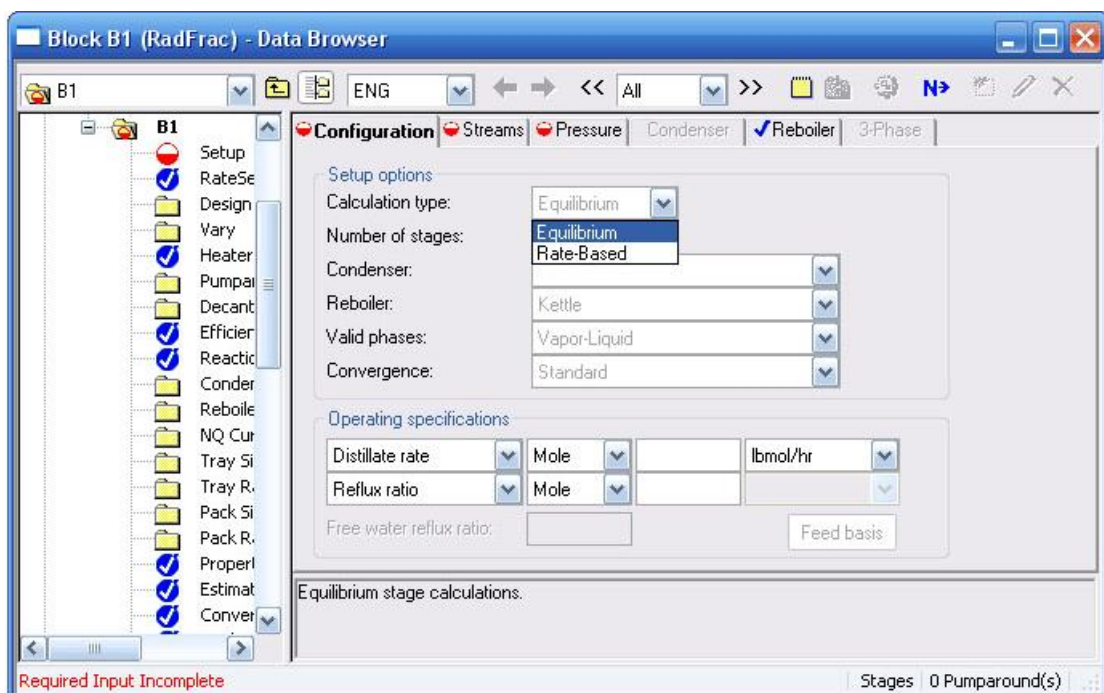
MultiFrac بازده سینی یا ارتفاع معادل آکنه ، HETP ، توسط کاربر وارد می شود و در معادلات موازنه جرم و انرژی اطراف سینی یا آکنه ها استفاده می شوند. از آنجاییکه این بازده عمدتاً تخمینی می باشد لذا نتایج به دست آمده از این برج ها خطا خواهند داشت که مقدار این خطا بستگی به ساختار برج ، میزان غیر ایده آل بودن فاز مایع ، شرایط ترمودینامیکی برج و هیدرولیک برج دارد. در مواردی که بازده برای این برج ها تعریف نشود شرایط تعادلی فرض خواهد شد یعنی مقدار بازده برابر یک فرض می شود که مسلماً اکثریت برج ها دورتر از شرایط تعادلی کار می کنند. همانطور که می دانیم در عمل مقدار بازده برای سینی های برج از یک مرحله به مرحله بعدی و از یک ترکیب به ترکیب بعدی تغییر می کند. همچنین معادلاتی که برای محاسبه بازدهی ترکیبات استفاده می شوند اثرات انحراف از تعادل دمایی را در نظر نمی گیرند. و یا در ستون های آکنه ، HETP بسته به اندازه آکنه ها ، هیدرولیک برج و خصوصیات سیال سیستم در قسمت های مختلف ستون برج تغییر می کند. اما در مورد برج های RateFrac ، بازده توسط روش های حل برج محاسبه می شود. برج های RateFrac در هنگام شبیه سازی از اطلاعات سینی یا آکنه و سیال داخل برج در جهت محاسبه ضرایب انتقال جرم و انتقال حرارت استفاده می کنند و از این ضرایب در حل معادلات موازنه جرم و انرژی استفاده می کنند. بنابراین نیازی به وارد کردن بازده یا HETP توسط کاربر ندارند. برج های RateFrac پس از حل برج ، بازده را محاسبه کرده و می توانند گزارش دهند. مدل RateFrac می تواند برای کاربرد های زیر استفاده شود:

- Ordinary distillation
- Absorption
- Reboiled absorption
- Stripping
- Reboiled stripping
- Extractive and azeotropic distillation
- Reactive Distillation

همچنین این مدل قادر است تا در سیستم های پیچیده شامل موارد زیر بکار رود:

۱. هر تعداد برج با هر تعداد مرحله
۲. هر تعداد اتصال جریان بین برج ها یا برای هر برج
۳. جداکردن هر جریان دلخواه و ترکیب با جریان های اتصال یافته

لازم به ذکر است که در ورژن های بالاتر نرم افزار این نوع روش حل برج های تقطیر (Rate Base method) در مدل Radfrac در صفحه configuration، در قسمت Calculation type به دو صورت Equilibrium و Rate based قابل انتخاب است:



جهت استفاده از حالت حل Rate based ، به شرط اینکه لیسانس Rate Sep تحت لیسانس Aspen plus موجود باشد، باید در مسیر:

Tools-Options-Start up-Enable forms for layered products

Rate Sep انتخاب شود. راه های مختلفی برای استفاده از این مدل وجود دارد:

۱. در مدل Radfrac در قسمت Calculation Type گزینه Rate Based را انتخاب می کنیم.
۲. اگر از ورژن قبلی نرم افزار مدل Ratefrac را کار کرده باشیم، پس از load کردن فایل شبیه سازی، روی مدل Ratefrac کلیک راست کرده و گزینه Convert to ratesep را انتخاب می کنیم. در اینصورت برنامه مدل Ratefrac را به مدل Radfrac در حالت حل Rate Based تبدیل می کند. ولی امکان عکس آن وجود ندارد.

لازم به یاد آوری است که در حالت Rate Based ما قادر نیستیم تا عملیات Tray Sizing و Pack Sizing را انجام دهیم. همچنین باید توجه داشت که در صورت انتخاب این متد حل بازدهی برای سینی ها قابل تعریف نیست. به خاطر اینکه بازدهی در روش Rate Based بر مبنای جرم محاسبه شده در اثر انتقال جرم به جرمی که در اثر تعادل می بایست روی سینی وجود داشته باشد، محاسبه می شود.

همچنین در روش Rate Based، بر خلاف روش Equilibrium که در روش Nested اجازه می دهد تعداد Design Spec ها بیشتر از تعداد Vary ها باشد، به ازاء هر Design spec یک Vary باید وجود داشته باشد. روش Rate Based قادر به انجام محاسبات زیر نیست:

- Three Phase Calculations
- Free water
- Dirty water
- Solids
- Water decant
- Conversion Reactions
- Salt Dissociation

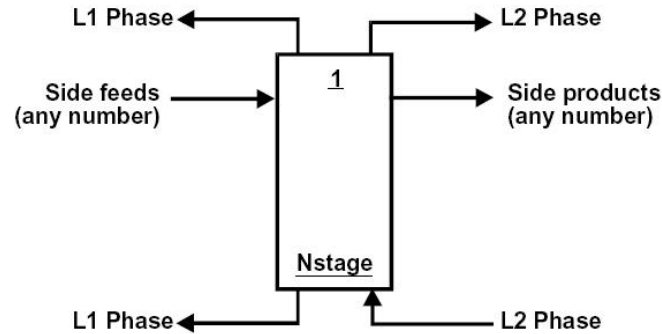
نتایج محاسباتی مود Rate Based در صفحات interface profiles ، Efficiencies and HETP ، Transfer Coefficients و ... گزارش می شود.

تمرین ۴:

استون توسط حلال آب در یک برج جذب با قطر 0.4866 m و دمای 293 K و فشار 1 atm جذب می شود. هوای ورودی شامل $2/6\%$ مولی استون و دبی مولی برابر با $14/0148 \frac{\text{kmole}}{\text{hr}}$ است. دبی مولی آب خالص به عنوان حلال برابر $\frac{\text{kmole}}{\text{hr}}$ می باشد. مطلوبست محاسبه ارتفاع آکنه لازم برای این برج به شرطی که خروجی شامل $0/5\%$ مولی استون باشد. پرکن ها از نوع راشیتنگ رینگ سرامیکی $1/5$ اینچی است. حدس اولیه برای ارتفاع برج آکنه را برابر 1 متر در نظر بگیرید. معادله ترمودینامیکی را معادله NRTL در نظر بگیرید.

Extract –

مدل Extract برای فرآیندهای استخراج مایع-مایع استفاده می شود. در این مدل برای توزیع مواد بین دو فاز مایع از یک مدل ضریب اکتیویته و یا یک رابطه توزیع وابسته به دما (KLL) که توسط کاربر تعریف شده است، استفاده می شود. صفحه اتصالات این مدل در شکل زیر نشان داده شده است:



این مدل در سه حالت آدیاباتیک، پروفایل مشخص دمایی در طول برج و یک پروفایل مشخص حرارتی در طول مراحل می تواند کار کند.



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

ASPEN PLUS

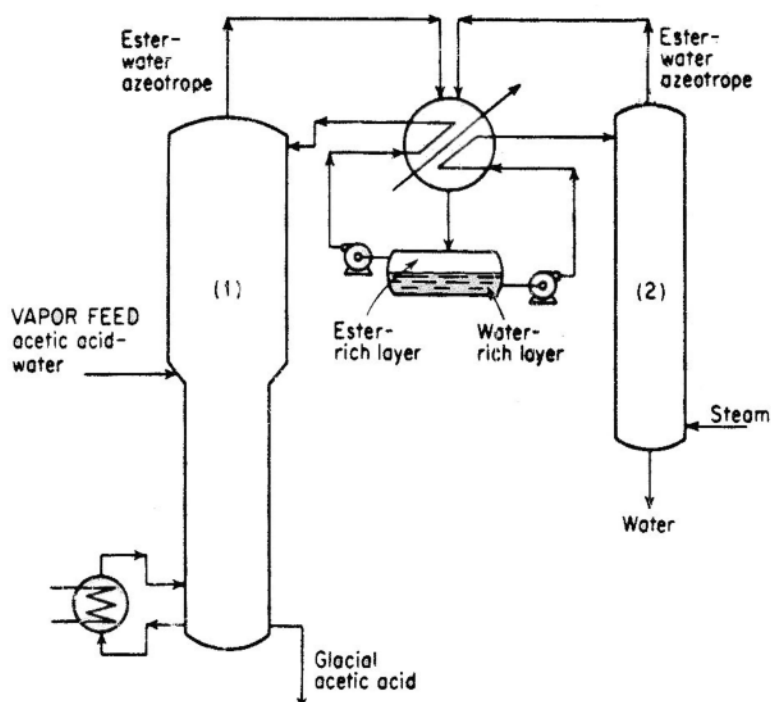
جلسه ششم

- شبیه سازی برج های تقطیر غیر ایدآل شامل:
- برج های تقطیر آزئوتروپی
- برج های تقطیر استخراجی
- آشنایی با روش طراحی برج های تقطیر غیر ایده آل

تقطیر آزنوتروپی

این تقطیر نوع ویژه ای از تقطیر جند جزئی است که برای مخلوط های دو جزئی که نقطه جوششان بهم نزدیک بوده و جداسازی آنها به روش تقطیر معمولی امکان پذیر نبوده و یا مشکل می باشد به کار می رود. اگر فراریت نسبی یک مخلوط دو جزئی خیلی کم باشد برای تفکیک مخلوط به محصولات نسبتاً خالص، نسبت های جریان برگشتی و حرارت زیاد و همچنین برجی با سطح مقطع بزرگ و تعداد زیادی سینی لازم می باشد. در موارد دیگر تشکیل آزنوتروپ در یک مخلوط دو جزئی، ایجاد محصولات خالص را به وسیله روش های تقطیر معمولی غیر ممکن می سازد. در چنین شرایطی جزء سومی را به عنوان شکننده نقطه آزنوتروپ به مخلوط دو جزئی اضافه می کنند تا با یکی از اجزاء اولیه نقطه آزنوتروپی را که دمای جوش پایینی دارد تشکیل دهد و فراریت آن طوری باشد که به راحتی از جزء دیگر جدا شود. انتخاب شکننده مسئله مهمی است و باید قادر باشد تا با جزئی از یک مخلوط دو جزئی که می خواهیم جدا کنیم آزنوتروپی با دمای جوش پایین تشکیل دهد و از طرف دیگر مقدار آن کم باشد تا حرارت لازم برای فرآیند را کاهش دهد. فراریت نسبی آزنوتروپ جدید باید آنقدر باشد که به راحتی از جزء باقیمانده جدا شود و در نتیجه مقدار کمی شکننده در محصول باقیمانده وجود داشته باشد. بنابراین در مخلوط هایی که نقطه آزنوتروپ وجود دارد جداسازی کامل اجزاء به روش تقطیر در مرز های تقطیر امکان پذیر نیست. به همین دلیل برای طراحی سیستم های تقطیر در مخلوط های غیر ایده آل در گام اول شناسایی مرزهای تقطیر امری لازم و ضروری است. جداسازی اجزاء در این سیستم ها بستگی به ترکیب درصد اجزاء در خوراک دارد.

مثالی از تقطیر آزنوتروپی مطابق شکل مربوط به جداسازی آزنوتروپی محلول اسید استیک-آب می باشد که در آن از بوتیل استات به عنوان شکننده آزنوتروپ استفاده می شود. علی رغم اختلاف نقطه جوش بالای آب و اسید استیک، به علت فراریت نسبی کم اجزاء جداسازی آنها به روش تقطیر معمولی هزینه زیادی در بر دارد. در نتیجه اگر مقدار کافی بوتیل استات برای تشکیل آزنوتروپ با تمام آب موجود در خوراک به بالای ستون تقطیر اضافه شود، محلول آزنوتروپ به راحتی از اسید استیک که نقطه جوش بالایی دارد جدا می گردد. محلول آزنوتروپ پس از سرد شدن وارد دکانتور می شود تا دو فاز مایع غیر قابل انحلال از هم جدا شوند. فاز دوم (سنگین تر) به عنوان جریان برگشتی و منبع شکننده به بالای برج باز گردانده می شود و فاز اول هم که حاوی یک مقدار شکننده می باشد جهت جداسازی وارد ستون جداکننده کوچک دوم می شود.



در برخی موارد آزنوتروپ جدیدی که تشکیل می شود دارای هر سه جزء می باشد. آب گیری از مخلوط آب-اتانول توسط بنزن مثالی از این نوع می باشد. در این حالت هم محصول آزنوتروپ بالای برج به دو لایه مایع تفکیک می شود که یکی غنی از بنزن بوده و به عنوان جریان برگشتی به بالای ستون بازگردانده می شود و دیگری غنی از آب بوده و از ستون خارج می گردد. چون این لایه دوم دارای مقدار زیادی بنزن و اتانول می باشد لذا باید جداگانه تفکیک شود.

تقطیر استخراجی

برای مخلوط های دو جزئی با نقطه جوش تقریباً یکسان که جداسازی آنها با روش های تقطیر معمولی مشکل و یا غیر ممکن است، در چنین سیستم هایی با افزایش یک جزء سوم به مخلوط که به آن حلال گفته می شود، فراریت نسبی ترکیبات اولیه تغییر یافته و جداسازی ممکن می شود. جزء افزوده شده باید مایعی با نقطه جوش بالا باشد، قابلیت حل شدن در جزء کلیدی را داشته باشد، از لحاظ شیمیایی به آن شبیه باشد، به تنهایی در برج تبخیر نشود، همراه با محصول بالای برج خارج نشود، غلظت آن در فاز مایع بالا باشد، حلال به راحتی از مخلوطی که به آن اضافه شده جدا شود و به ویژه نباید با مواد اصلی آزنوتروپ تشکیل دهد. در نتیجه جزء کلیدی که به حلال بیشتر شبیه است ضریب فعالیت پایین تری از جزء دیگر محلول دارد، و جداسازی بهبود می یابد. این فرآیند، تقطیر استخراجی نام دارد.

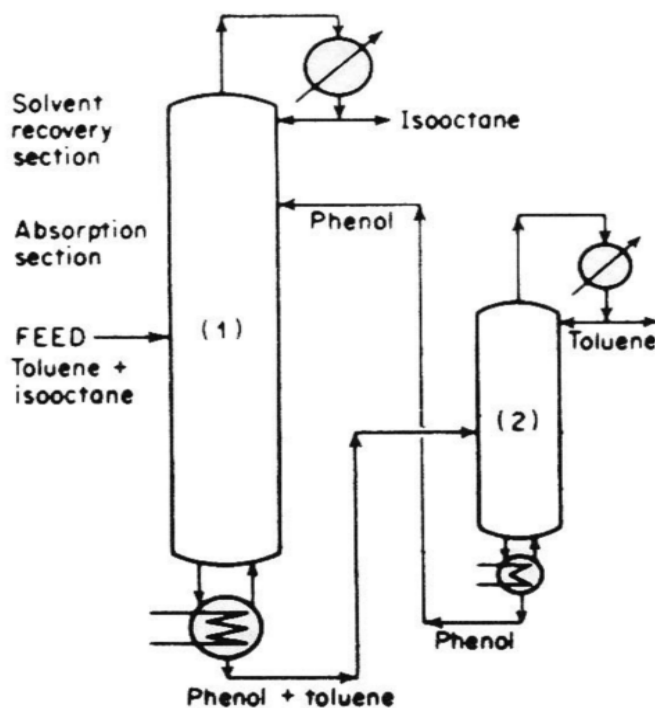
مثالی از تقطیر استخراجی، استفاده از حلال فنل در جداسازی تولوئن و ایزو اکتان است. جداسازی تولوئن از هیدروکربن های پارافینی به علت فراریت نسبی کم یا وجود آزنوتروپ خیلی مشکل و یا غیر ممکن است. اگر ایزواکتان را به عنوان حلال پارافینی در نظر بگیریم، در حضور فنل فراریت نسبی ایزو اکتان بالا می رود و مطابق شکل ایزواکتان به صورت محصول مقطر از بالای برج گرفته می شود و تولوئن و فنل از پایین برج خارج شده و در برج دیگری تقطیر می شود. این جداسازی به راحتی انجام می شود و فنل دوباره به برج باز می گردد.

مقایسه تقطیر آزنوتروپی و تقطیر استخراجی

معمولاً افزودن یک ماده خارجی مانند شکننده یا حلال به یک فرآیند نامطلوب است. چرا که هیچوقت کاملاً از سیستم خارج نمی شود و ایجاد ناخالصی در محصول می کند. مقداری اتلاف هم (حدود ۱٪) شدت جریان حلال) وجود دارد که اجتناب ناپذیر است. از طرفی هم هزینه بازیابی حلال می تواند زیاد باشد. بنابراین از این فرآیندها زمانی استفاده می شود که هزینه های آن در مقایسه با تقطیر معمولی کمتر باشد. از نظر مقایسه ای به دو دلیل معمولاً تقطیر استخراجی مناسبتر از تقطیر آزنوتروپی است:

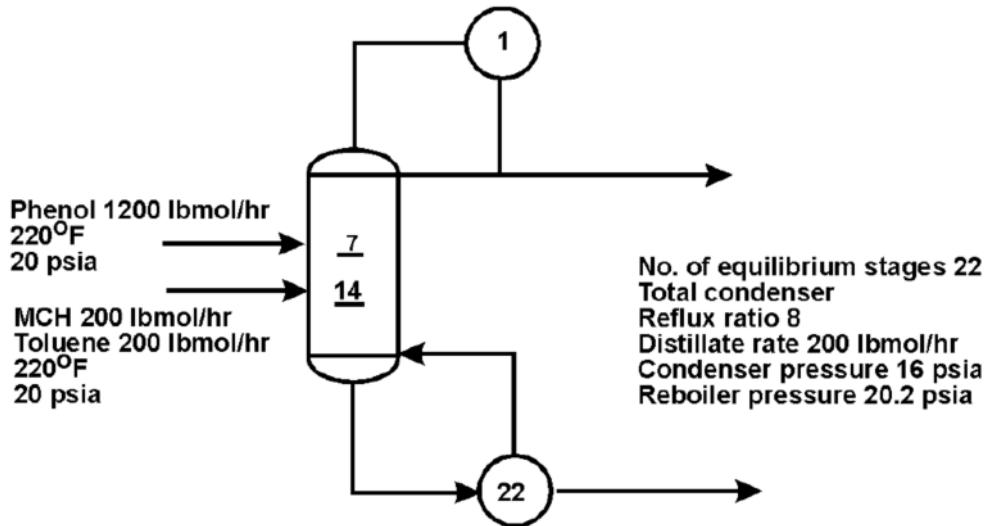
اولاً قدرت انتخاب حلال برای تقطیر استخراجی بیشتر از قدرت انتخاب شکننده در تقطیر آزنوتروپی است. به دلیل اینکه در تقطیر استخراجی انتخاب حلال به تشکیل آزنوتروپ بستگی ندارد.

ثانیاً میزان تبخیر و فراریت حلال در تقطیر استخراجی بسیار کمتر از تقطیر آزنوتروپی است.



تمرین ۱:

جداسازی متیل سیکلو هگزان و تولئن از یکدیگر توسط فرآیند تقطیر دو جزئی ساده کار بسیار دشواری است. همانطور که در شکل زیر ملاحظه می شود جهت جداسازی متیل سیکلو هگزان و تولئن از یکدیگر از فرآیند تقطیر استخراجی توسط حلال فنل استفاده می شود که در اثر این فرآیند متیل سیکلو هگزان تقریباً خالص از بالای برج بازیافت می شود که خلوص آن ارتباط مستقیمی با میزان دبی حلال فنل ورودی به برج دارد. فرآیند فوق را با توجه به اطلاعات داده شده ذیل شبیه سازی نمایید.



- معادله UNIFAC را به عنوان معادله ترمودینامیکی انتخاب نمایید.
 - از Property Set های موجود TXPORT را که شامل خصوصیات انتقالی دانسیته، ویسکوزیته و کشش سطحی می شود انتخاب نماید.
- الف) منحنی تعادلی سه تایی فنل، تولئن و متیل سیکلو هگزان را در فشار ۲۰ psia رسم نمایید.
- ب) مطلوبست ترکیب درصد مولی متیل سیکلو هگزان خروجی از بالای برج
- ج) مطلوبست رسم نمودار تغییرات غلظت متیل سیکلو هگزان خروجی از بالای برج در اثر افزایش دبی فنل ورودی به برج. نمودار بار حرارتی کندانسور و ریویولر را هم در برابر تغییرات دبی فنل ورودی به برج رسم نمایید. دامنه تغییرات دبی مولی فنل ورودی به برج را بین $1200-2000 \frac{\text{lbmole}}{\text{hr}}$ در نظر بگیرید.
- د) به ازاء چه مقدار دبی فنل، خلوص متیل سیکلو هگزان در بالای برج برابر ۹۸٪ خواهد بود.

تمرین ۲:

جریان خوراکی شامل وینیل استات، اسید استیک و آب است. این جریان به داخل یک برج RadFrac فرستاده می شود. محصول پایین برج عمدتاً شامل اسید استیک است. محصول خروجی از کندانسور بالای برج به داخل یک دکانتور می رود که در آن به دو فاز مایع سبک و سنگین جدا می شود. کسر برگشتی مایع سبک به داخل برج ۰/۷ است. فاز مایع سنگین عمدتاً شامل وینیل استات است. مطلوبست شبیه سازی برج تقطیر بالا با مشخصات جداول زیر:

مشخصات برج	
تعداد مراحل برج	۶۰
سینی خوراک	۱۶
نوع کندانسور	Total
فشار کندانسور (psi)	۶۵
افت فشار کل برج (psi)	۱۰
دبی مولی محصول پایین برج $\left(\frac{\text{lbmole}}{\text{hr}}\right)$	۲۶۸۳
نسبت جریان برگشتی	۴

مشخصات جریان خوراک	
دما (F)	۳۳۰
فشار (Psi)	۹۰
وینیل استات (mole flow) $\left(\frac{\text{lbmole}}{\text{hr}}\right)$	۴۵۵
اسید استیک (mole flow) $\left(\frac{\text{lbmole}}{\text{hr}}\right)$	۲۶۸۳
آب (mole flow) $\left(\frac{\text{lbmole}}{\text{hr}}\right)$	۵۰۷

معادله حالت را NRTL-RK در نظر بگیرید.

تمرین ۳:

منحنی سه تایی متیل استات، متانول و آب را در فشار ۱/۱ اتمسفر رسم نموده و نقاط آزنوتروپ در مخلوط را تعیین کنید. سپس برج تقطیر با مشخصات زیر را شبیه سازی نمایید. (راهنمایی: شدت جریان محصول بالای برج را با فرض اینکه تمام متیل استات از بالای برج خارج شود، $F_{z_{MeAc}} = D_{XD, MeAc}$ محاسبه نمایید.) آیا برنامه با روش حل استاندارد به همگرایی می رسد؟ و اگر نه چه روش حلی را پیشنهاد می کنید؟

مشخصات خوراک	
دما (C)	۲۵
فشار (atm)	۱/۱
دبی خوراک (kmol/s)	۰/۱
متیل استات (Mol%)	٪۳۰
متانول (Mol%)	٪۵۰
آب (Mol%)	٪۲۰

مشخصات برج	
تعداد سینی های برج	۳۲
سینی خوراک	۱۶
نسبت جریان برگشتی مولی	۲
فشار برج (atm)	۱/۱

الف) غلظت آب در محصول بالای برج و غلظت متیل استات در محصول پایین برج را گزارش نمایید.

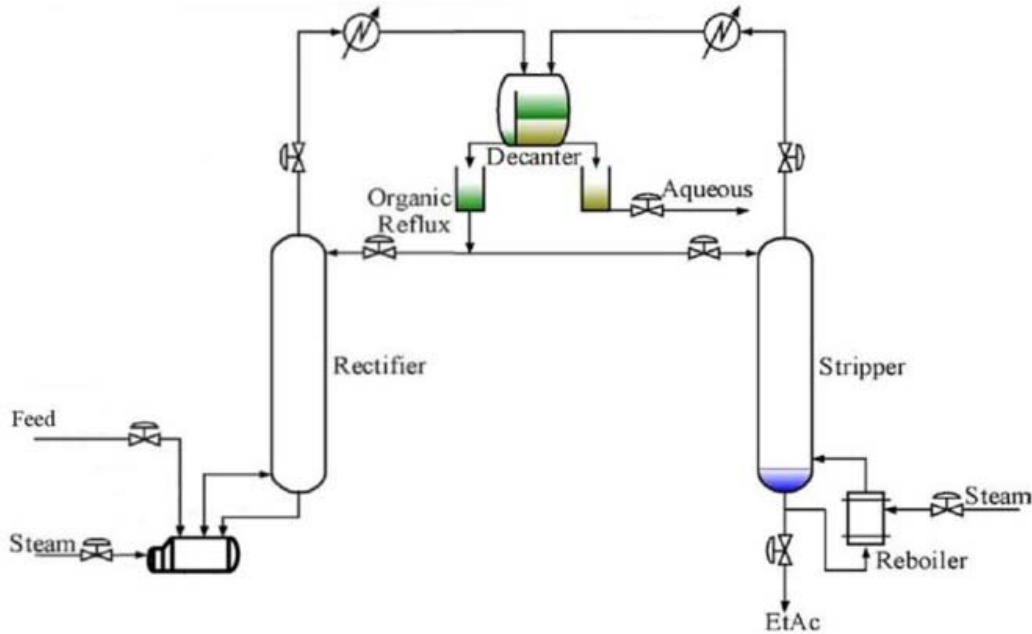
با تغییر میزان جریان برگشتی و دبی محصول تقطیر یافته، غلظت آب در محصول بالای برج و غلظت اتیل استات در محصول پایین برج را برابر ۰/۱ مولی تنظیم نمایید.

سپس نمودار تغییرات Reboiler duty، RR، D و $X_{D, MeAc}$ را با تغییر در سینی خوراک بررسی و نتیجه گیری نمایید. سینی بهینه برای خوراک برج کدام سینی است؟

برای تعداد کل سینی های برج برابر ۱۷، ۲۲، ۲۷ و ۴۲ هم این مراحل را تکرار کرده و مقدار بهینه تعداد کل سینی ها را معلوم نمایید.

تمرین ۴:

جریان خوراکی شامل اسیداستیک، اتانول و اتیل استات و آب با دمای ۷۵ °C وارد راکتور ریویولر از نوع کتل می شود. دمای راکتور ریویولر ۱۰۳ °C و فشار آن اتمسفریک است. واکنش استری در راکتور ریویولر به صورت زیر است:

$$\text{CH}_3\text{COOH} + \text{C}_2\text{H}_5\text{OH} \longrightarrow \text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$$


بخارات حاصل از انجام واکنش وارد برج اول می شود. محصول بالای برج وارد کندانسور شده و سپس به دکانتور (با دمای ۳۰ °C) فرستاده شده و دو فاز آبی و استری تشکیل می گردد. قسمتی از فاز آلی به عنوان رفلکس وارد برج می شود و بخشی دیگر به عنوان محصول وارد مخزن می شود. فرآیند تحت فشار اتمسفریک می باشد.

الف) دیگرام RCM را برای مخلوط سه تایی اتانول، اتیل استات و آب رسم نموده و نقاط آزنوتروپ و مرز های تقطیر را مشخص نمایید. فرآیند فوق را با مشخصات داده شده شبیه سازی و نتایج جریانها را گزارش نمایید.

مشخصات برج اول	
تعداد سینی های برج	۲۸
سینی خوراک	ریویولر
نوع کندانسور	کامل
شدت جریان برگشتی	۱۳۶۳۰
جرمی $\left(\frac{kg}{hr}\right)$	
مشخصات برج دوم	
تعداد سینی های برج	۳۵

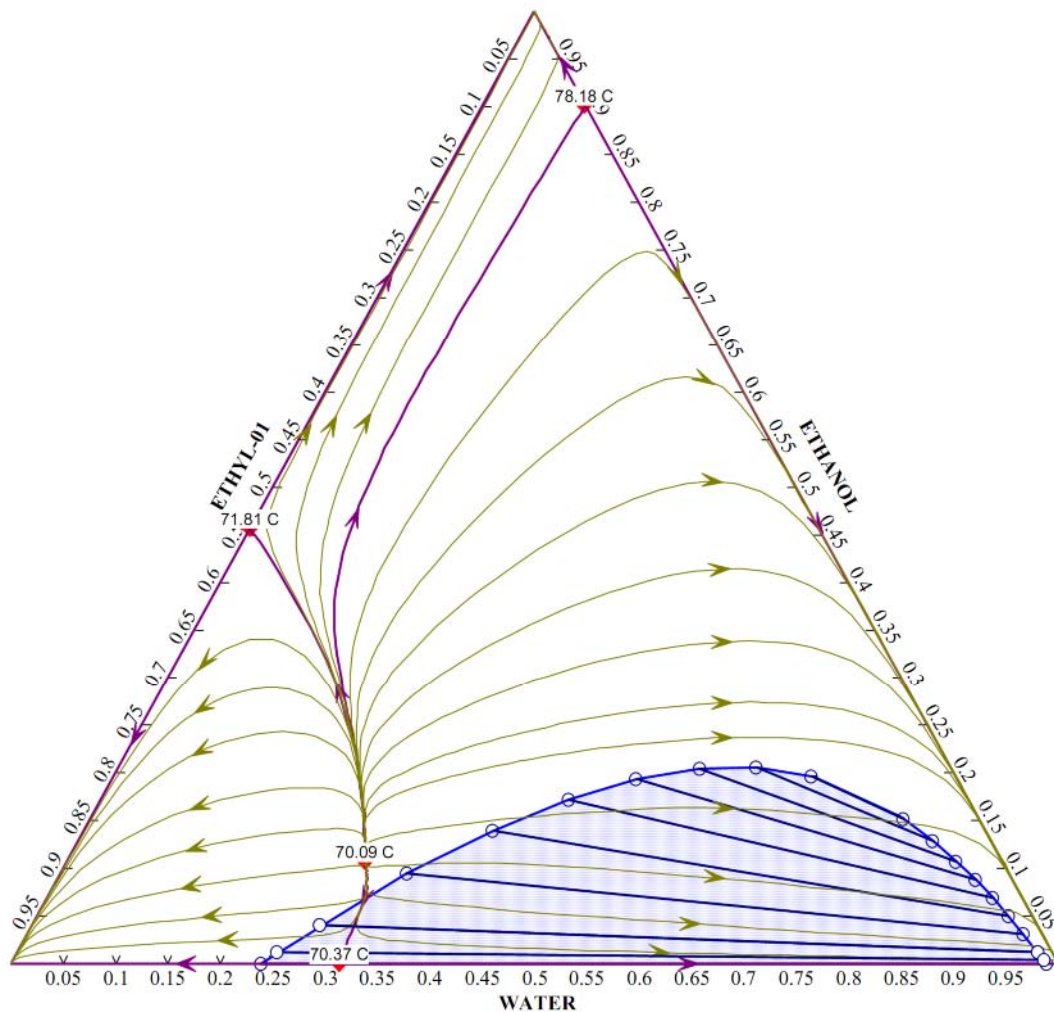
مشخصات جریان خوراک	
دما (C)	۷۵
فشار (atm)	۱
دبی جرمی کل $\left(\frac{kg}{hr}\right)$	۳۰۸۴/۵
Ethanol (% mass)	۰/۳۳
Acetic Acid (% mass)	۰/۴۳
Ethyle Acetate (% mass)	۰/۱۸
Water (% mass)	۰/۰۴

معادله ترمودینامیکی: NRTL-HOC (ضرایب اکتیویته را از جدول زیر وارد نمایید).

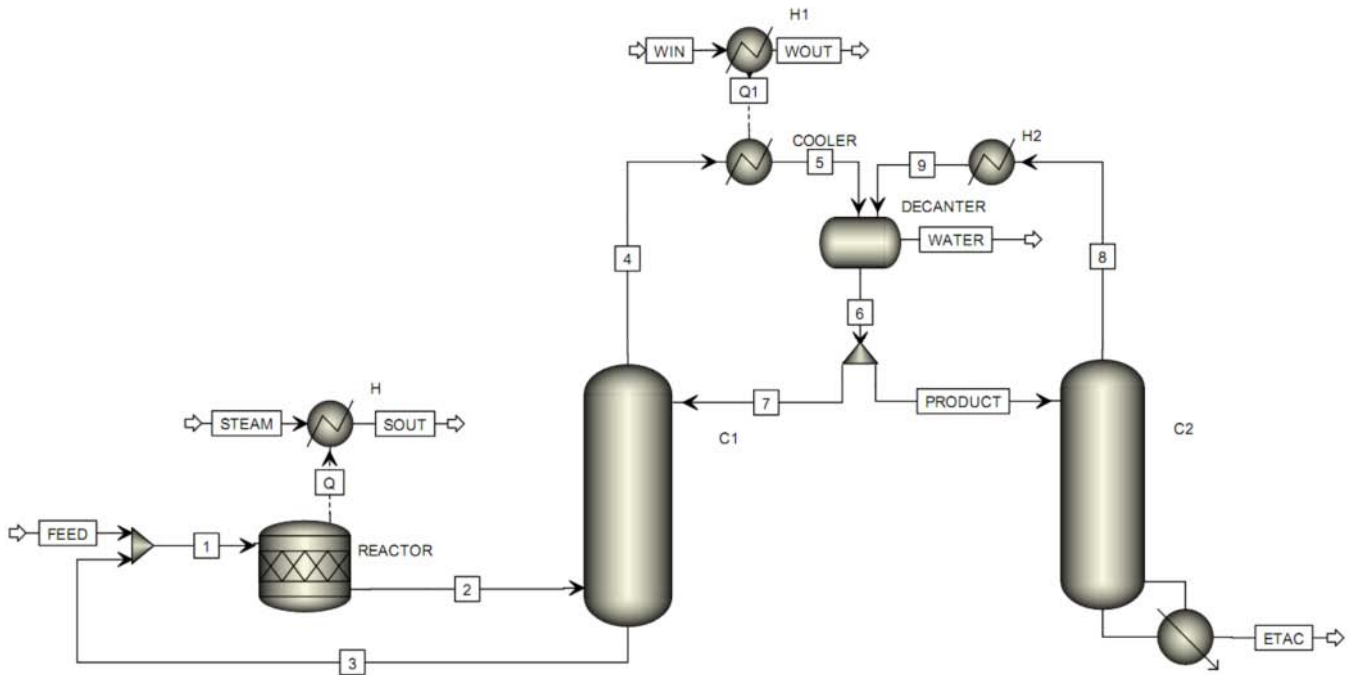
Comp. <i>i</i> Comp. <i>j</i>	HAc (1) EtOH (2)	HAc (1) EtAc (3)	HAc (1) H ₂ O (4)	EtOH (2) EtAc (3)	EtOH (2) H ₂ O (4)	EtAc (3) H ₂ O (4)
a_{ij}	0	0	-1.9763	1.817306	0.806535	-2.34561
a_{ji}	0	0	3.3293	-4.41293	0.514285	3.853826
b_{ij} (K)	-252.482	-235.279	609.8886	-421.289	-266.533	1290.464
b_{ji} (K)	225.4756	515.8212	-723.888	1614.287	444.8857	-4.42868
c_{ij}	0.3000	0.3000	0.3000	0.1000	0.4000	0.3643

REF.: Y. T. Tang, H. P. Huang, and I. L. Chien, Design of a complete ethyl acetate reactive distillation system, *J. Chem. Eng. Jpn.* **36**, 1352–1363 (2003).

Aspen Split Distillation Analysis - Ternary Map



Ternary Map computed at the following conditions:
 Pressure: 1 ATM
 Envelope Type: Vapor-Liquid-Liquid
 VLE/VLLE Model: NRTL-HOC
 LLE Model: NRTL-HOC
 Valid Phases: Vapor-Liquid-Liquid
 Basis: Mole fraction



FLWSHEET IN ASPEN PLUS



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

ASPEN PLUS

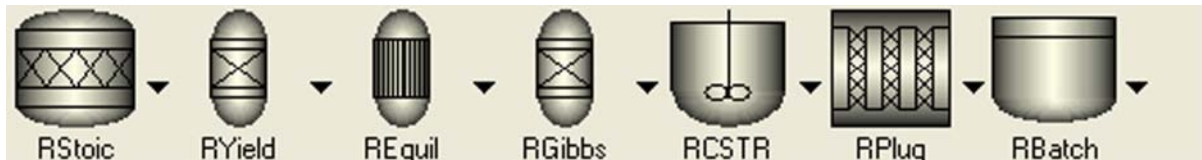
جلسه هفتم

- آشنایی با انواع مختلف واکنش ها و مدل های راکتورهای شیمیایی موجود در ASPEN
- شبیه سازی راکتور های شیمیایی / REquil / RYield / RStoic / RCSTR/ RPlug / RBatch / RGibbs
- آشنایی با مفهوم Sensibility Analysis همراه با حل یک مثال نمونه برای راکتور ها
- تمرین ها

شبیه سازی راکتورها در ASPEN PLUS

مقدمه

فرآیندهایی که دارای واکنش های شیمیایی هستند دارای سینتیک معینی می باشند. لازمه یک شبیه سازی موفق اطلاع دقیق از سینتیک واکنش ها در آن فرآیند می باشد. گاهی در برخی فرآیند ها هم اطلاعی از سینتیک واکنش ها در دسترس نیست. بسته به نوع اطلاعاتی که از سینتیک واکنش ها در اختیار ما قرار دارد، در ASPEN PLUS امکان مدل کردن انواع مختلف واکنش ها از قبیل واکنش های استوکیومتری، تعادلی، تبدیلی و کاتالیستی وجود دارد که می توان از آنها استفاده کرد. در ASPEN PLUS ۷ مدل برای راکتورها وجود دارد که عبارتند از:



اختصاراً توضیحات مربوط به هر کدام از این راکتورها در جدول زیر ملاحظه می شوند:

Model	Description	Purpose	Use For
RStoic	Stoichiometric reactor	Models stoichiometric reactor with specified reaction extent or conversion	Reactors where reaction kinetics are unknown or unimportant but stoichiometry and extent of reaction are known
RYield	Yield reactor	Models reactor with specified yield	Reactors where stoichiometry and kinetics are unknown or unimportant but a yield distribution is known
REquil	Equilibrium reactor	Performs chemical and phase equilibrium by stoichiometric calculations	Reactors with simultaneous chemical equilibrium and phase equilibrium
RGibbs	Equilibrium reactor with Gibbs energy minimization	Performs chemical and phase equilibrium by Gibbs energy minimization	Reactors with phase equilibrium or simultaneous phase and chemical equilibrium. Calculating phase equilibrium for solid solutions and vapor-liquid-solid systems.
RCSTR	Continuous stirred tank reactor	Models continuous stirred tank reactor	One-, two-, or three-phase stirred tank reactors with rate-controlled and equilibrium reactions in any phase based on known stoichiometry and kinetics
RPlug	Plug flow reactor	Models plug flow reactor	One-, two-, or three-phase plug flow reactors with rate-controlled reactions in any phase based on known stoichiometry and kinetics
RBatch	Batch reactor	Models batch or semi-batch reactor	One-, two-, or three-phase batch and semi-batch reactors with rate-controlled reactions in any phase based on known stoichiometry and kinetics

طریقه معرفی واکنش ها برای راکتورهای (RStoic , REquil) متفاوت با سه راکتور (RBatch , RPlug , RCSTR) است. برای راکتورهای (RStoic , REquil) واکنش ها در محیط خود راکتورها معرفی می شوند ولی برای سه راکتور آخری واکنش ها در پوشه Reaction در Data Browser تعریف می شوند.

مدل های موجود در نرم افزار برای شبیه سازی راکتورها به سه دسته کلی تقسیم بندی می شوند:

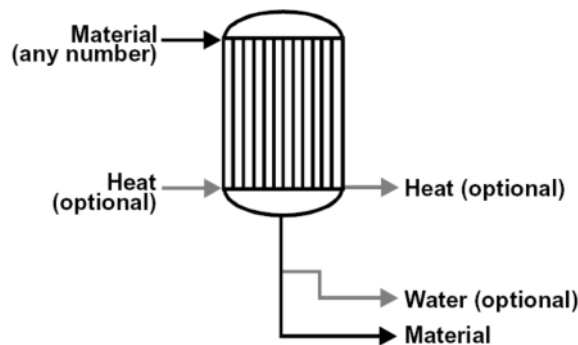
۱- راکتورهای بر مبنای موازنه جرمی

این دسته از مدل ها شامل دو مدل Rstoic و Ryield می شوند که در ادامه به شرح آنها پرداخته می شود.

- راکتور RStoic

از این راکتور زمانی استفاده می شود که :

- سینتیک واکنش (سرعت واکنش ها) نامعین باشد و یا اهمیتی نداشته باشد.
- استوکیومتری واکنش معلوم باشد.
- درصد تبدیل یکی از مواد اولیه یا Molar Extent محصول مشخص باشد. (Molar Extent به میزان مول بر ساعت تولید شده برای هر محصول تقسیم بر ضریب استوکیومتری آن محصول گویند).



از این راکتور می توان برای شبیه سازی واکنش های همزمان و سری استفاده کرد. همچنین در صورت تمایل از این مدل می توان برای محاسبات مربوط به گرمای واکنش و گزینش پذیری محصولات (Selectivity) استفاده کرد که در این صورت می بایست در پنجره های مربوطه (Heat of Reaction , Selectivity) اطلاعات درخواستی را وارد نمود. در این مدل گرمای واکنش از طریق گرمای تشکیل مواد که در بانک اطلاعاتی ASPEN موجود است محاسبه می شود.

❖ صفحه Combustion

با فعال کردن این صفحه به طور اتوماتیک واکنش های احتراق در داخل راکتور در نظر گرفته می شوند. در این صورت تمام کربن ها به CO_2 ، تمام هیدروژن به آب و تمامی نیتروژن به NO_2 یا NO تبدیل می شوند. به غیر از این ترکیبات ، ترکیبات دیگر در فرآیند احتراق شرکت نمی کنند. همچنین ترکیبات مشخص شده در واکنش ها به عنوان واکنشگر در واکنش های احتراق شرکت نمی کنند. برای استفاده از این صفحه می بایست اکسیژن و محصولات حاصل از واکنش احتراق در صفحه ترکیبات مشخص شده باشند.

❖ صفحه Heat Of Reaction

Specifications	Reactions	Combustion	Heat of Reaction	Selectivity	PSD	Component Attr.
Calculation type						
<input checked="" type="radio"/> Do not calculate heat of reaction <input type="radio"/> Calculate heat of reaction <input type="radio"/> Specify heat of reaction						
Reference condition						
Rxn No.	Reference component	Heat of reaction	Reference Temperature	Reference Pressure	Reference Phase	
		Btu/lbmol	F	psi		
*						

در این صفحه امکان انتخاب سه گزینه وجود دارد:

۱. **Do not calculate heat of reaction**

در اینصورت نرم افزار گرمای واکنش را محاسبه نمی کند.

۲. **Calculate Heat of Reaction**

نرم افزار گرمای واکنش را بر اساس گرمای تشکیل مواد در بانک نرم افزار محاسبه می کند.

۳. **Specify Heat of Reaction**

گرمای واکنش توسط کاربر وارد می شود که اگر مقدار آن با مقدار محاسبه شده توسط نرم افزار متفاوت باشد، تفاوت این دو به صورت جریان گرمای خروجی از راکتور خواهد شد.

نکته:

شرایط استاندارد در دما و فشار مرجع که به صورت پیش فرض در محاسبات استفاده می شود عبارتست از:

Specification	Default
Reference temperature	25 °C
Reference pressure	1 atm
Reference fluid phase	Vapor phase

❖ **صفحه Selectivity**

در این صفحه کاربر قادر است تا انتخاب پذیری محصول اصلی را نسبت به هر کدام از مواد اولیه از نرم افزار بخواهد.

مثلاً برای واکنش $aA + \dots \rightarrow pP + \dots$ انتخاب پذیری محصول P نسبت به واکنشگر A عبارتست از:

$$S_{P,A} = \frac{\left[\frac{\Delta P}{\Delta A} \right]_{Real}}{\left[\frac{\Delta P}{\Delta A} \right]_{Ideal}}, \quad \left[\frac{\Delta P}{\Delta A} \right]_{Ideal} = \frac{v_P}{v_A}$$

شرایط ایده آل شرایطی است که در آن در داخل راکتور هیچ واکنشی غیر از واکنش تبدیل A به P صورت نگیرد و همه A به P تبدیل شود. مثلاً برای دسته واکنش های زیر انتخاب پذیری محصول P نسبت به واکنشگر A عبارتست از:

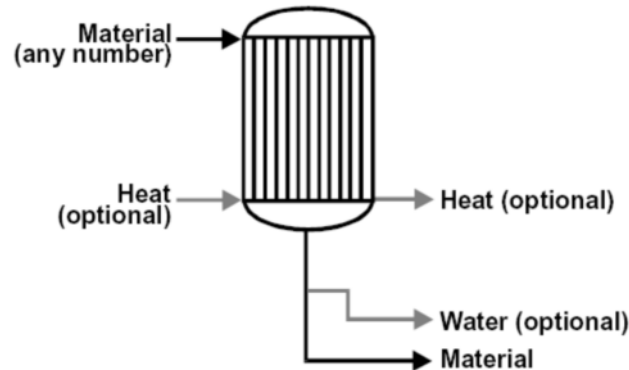
$$\begin{cases} a_1A + b_1B \rightarrow c_1C + d_1D \\ c_2C + e_2E \rightarrow p_2P \\ a_3A + f_3F \rightarrow q_3Q \end{cases} \Rightarrow S_{P,A} = \frac{\left[\frac{\Delta P}{\Delta A} \right]_{Real}}{\left[\frac{\Delta P}{\Delta A} \right]_{Ideal}} = \frac{\left[\frac{\text{moles Of P product}}{\text{moles Of A consumed}} \right]}{\left[\frac{c_1 \times p_2}{a_1 \times c_2} \right]}$$

اگر در اثر واکنش ذرات جامد تولید شوند و یا ذرات جامد موجود در جریان خوراک تغییر آرایش دهند، در اینصورت جهت تعیین خواص و توزیع اندازه ذرات جامد وارد صفحات Component Attr. و Setup PSD خواهیم شد.

- راکتور RYield

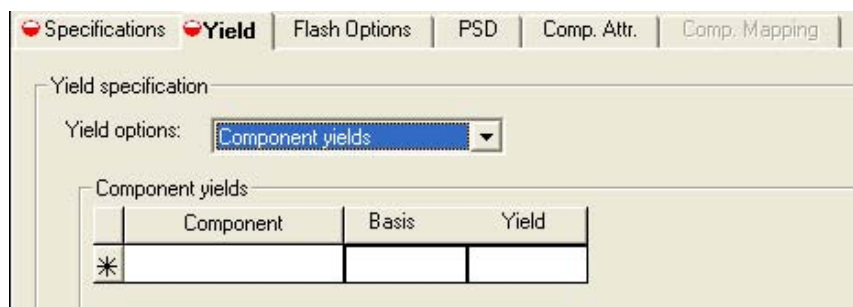
از این راکتور زمانی استفاده می شود که :

- سینتیک واکنش (سرعت واکنش ها) نامعین باشد و یا اهمیتی نداشته باشد.
- استوکیومتری واکنش نامعین باشد و یا اهمیتی نداشته باشد.
- توزیع بازده تبدیل (Yield) برای محصولات مشخص باشد.



Yield : مول یا وزن محصول به ازاء واحد وزن خوراک عاری از ماده خنثی

در صفحه Yield می بایست میزان بازده را برای هر محصول مشخص کرد.



در این مدل موازنه اتمی برقرار نیست، به خاطر اینکه توزیع درصد بازدهی های محصولات توسط کاربر وارد سیستم می شوند ولی موازنه جرمی کلی برقرار است. این مدل بیشتر برای شبیه سازی راکتورهای استفاده می شود که جریان ورودی راکتور کاملاً معلوم نباشد اما خروجی ها کاملاً معلوم باشند (برای مثال شبیه سازی کوره ها). از این مدل می توان برای شبیه سازی سیستم های تک، دو و سه فازی استفاده کرد. اگر در اثر واکنش ذرات جامد تولید شوند و یا ذرات جامد موجود در جریان خوراک تغییر آرایش دهند، در اینصورت جهت تعیین خواص و توزیع اندازه ذرات جامد وارد صفحات Component Attr. و Setup PSD خواهیم شد.

-۲ راکتورهای تعادلی

واکنش های تعادلی را می توان به صورت معادله عمومی $rR + sS + \dots \Leftrightarrow aA + bB + \dots$ در نظر گرفت. واکنش ها با دو کمیت ترمودینامیکی مهم گرمای واکنش و انرژی آزاد گیبس واکنش مشخص می شوند که هر دو تابع دما و فشار می باشند. داده های ترمودینامیکی برای محاسبه این دو کمیت تحت شرایط استاندارد (برای مثال در ۲۵ درجه سانتیگراد و یک بار) به طور گسترده ای در شبیه سازها برای بیش از ۱۰۰۰ ترکیب وجود دارند. تأثیر دما روی

گرمای واکنش بستگی به ظرفیت حرارتی واکنشگرها و محصولات واکنش و تأثیر متقابل دما روی گرمای واکنش آنها دارد. برای بسیاری از واکنش ها تأثیر دما روی گرمای واکنش ها نسبتاً کم است. برای یک خوراک با ترکیب درصد مشخص و دما و فشار معین ترکیب درصد محصولات به دو روش زیر قابل محاسبه است:

۱- از طریق ثوابت تعادل شیمیایی (K)

این روش زمانی استفاده می شود که واکنشها و استوکیومتری واکنش ها معلوم باشند. (راکتور REQUIL)

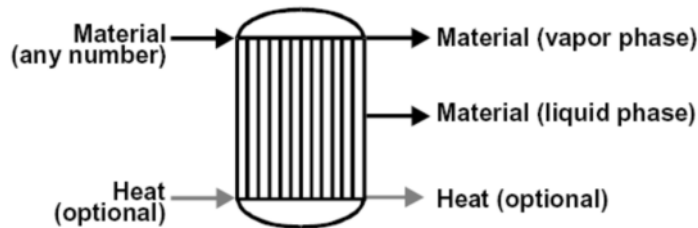
۲- از طریق مینیمم کردن انرژی گیبس سیستم واکنشی

این روش زمانی استفاده می شود که واکنش ها و استوکیومتری واکنش ها معلوم نباشند و فقط لیست محصولات معلوم باشند. (راکتور RGIBBS)

راکتور Requil -

از این راکتور زمانی استفاده می شود که :

- استوکیومتری واکنش معلوم باشد.
- بعضی یا همه واکنش ها به تعادل شیمیایی برسند.



از این مدل می توان برای شبیه سازی سیستم های تک فازی و دو فازی استفاده کرد ولی برای محاسبات سیستم های سه فازی VLL نمی توان استفاده کرد. این مدل زمانی مؤثر است که ترکیبات خوراک خیلی زیاد باشند، واکنش های کمی اتفاق بیافتند و ترکیبات نسبتاً کمی در واکنش ها شرکت کنند. این مدل ثابت تعادل را از تفاوت انرژی آزاد گیبس محصولات و مواد اولیه محاسبه می کند.

$$K = \frac{a_R^r a_S^s \dots}{a_A^a a_B^b \dots} = \exp\left(-\frac{\Delta G_{rxn}^o}{RT}\right)$$

که در آن a_i اکتیویته ترکیبات می باشد و در محلول های گازی از رابطه زیر محاسبه می شود:

$$a_i = \bar{\phi}_i y_i P = \bar{\phi}_i P_i$$

در این رابطه $\bar{\phi}_i$ ضریب فوگاسیته جزء i در مخلوط گازی است و تابع دما، فشار و ترکیب درصد اجزاء است. با جایگزینی اکتیویته ترکیبات در رابطه ، ثابت تعادلی واکنش از رابطه زیر قابل محاسبه خواهد بود:

$$K = \frac{y_R^r y_S^s \dots}{y_A^a y_B^b \dots} \left(\frac{\bar{\phi}_R^r \bar{\phi}_S^s \dots}{\bar{\phi}_A^a \bar{\phi}_B^b \dots} \right) P^{r+s+\dots-a-b-\dots} = \frac{y_R^r y_S^s \dots}{y_A^a y_B^b \dots} K_{\bar{\phi}} P^{r+s+\dots-a-b-\dots} = \frac{P^r P_S^s \dots}{P_A^a P_B^b \dots} K_{\bar{\phi}}$$

در فشارهای پایین تا متوسط $\bar{\phi}_i = 1$ است. در اینصورت اکتیویته ترکیبات برابر فشار جزئی ترکیبات خواهد بود:

$$K = \frac{P^r P_S^s \dots}{P_A^a P_B^b \dots}$$

در محلول های مایع اکتیویته ترکیبات از رابطه زیر محاسبه می شود:

$$a_i = x_i \gamma_i \exp \left[\frac{\bar{V}_i}{RT} (P - P_i^s) \right]$$

که در آن γ_i ضریب اکتیویته جزء i در مخلوط مایع است و تابع دما، فشار و ترکیب درصد اجزاء است. \bar{V}_i حجم مولی جزء i و P_i^s فشار بخار جزء i است. با جایگزینی اکتیویته ترکیبات در رابطه، ثابت تعادلی واکنش از رابطه زیر قابل محاسبه خواهد بود:

$$K = \frac{x_R^r x_S^s \dots}{x_A^a x_B^b \dots} \left(\frac{\gamma_R^r \gamma_S^s \dots}{\gamma_A^a \gamma_B^b \dots} \right) = \frac{x_R^r x_S^s \dots}{x_A^a x_B^b \dots} K_\gamma$$

در محلول های ایده آل در فشارهای پایین تا متوسط $\gamma_i = 1$ است. در اینصورت اکتیویته ترکیبات برابر ترکیب درصد مولی ترکیبات خواهد بود:

$$K = \frac{x_R^r x_S^s \dots}{x_A^a x_B^b \dots}$$

در بسیاری از کتب مرجع ترمودینامیکی نمودار $\log_{10} K$ در تابعیت از دما برای بسیاری از واکنش های شیمیایی آمده است. تابعیت K با دما توسط معادله وان هوف بیان می شود:

$$\left(\frac{d \ln K}{dT} \right)_P = \frac{\Delta H_{rxn}^o}{RT^2}$$

اگر در یک محدوده دما و فشار معین فرض کنیم که گرمای واکنش مستقل از دما باشد انتگرالگیری از معادله بالا و تبدیل به فرم \log_{10} منتج به رابطه زیر می شود:

$$\log_{10} K = A + B/T$$

در این رابطه T دمای مطلق می باشد. این رابطه دقت قابل قبولی در مطابقت با بسیاری از منحنی های تعادل شیمیایی دارد. برای مثال در واکنش تعادلی $CO + 2H_2 \Leftrightarrow CH_3OH$ در محدوده دمایی ۲۷۳ تا ۷۷۳ کلوین:

$$\log_{10} K = -12.275 + 4938 / T$$

معمولاً واکنش سنتز متانول در حضور کاتالیست اکسید مس-روی در فشار ۱۰۰ بار و دمای ۳۰۰ درجه سانتیگراد در حضور هیدروژن اضافی صورت می پذیرد. در این شرایط $K = 0.0002202$ و $K_\phi = 0.0002202$ است. بنابراین:

$$\frac{(y_{CH_3OH})}{(y_{CO})(y_{H_2})^2} = \frac{K}{K_\phi} P^{(1+2-1)} = \frac{0.0002202}{0.61} (100)^2 = 3.61$$

از طرف دیگر اگر X درصد تبدیل واکنشگر CO باشد با فرض اینکه مشخصات خوراک به صورت زیر باشد:

خوراک		
CO	$kmol / hr$	۱۰۰
H_2	$kmol / hr$	۶۰۰

ترکیب درصد مولی تعادلی ترکیبات برابر خواهند بود با:

$$y_{CH_3OH} = \frac{100 X}{700 - 200 X}$$

$$y_{CO} = \frac{100 - 100 X}{700 - 200 X}$$

$$y_{H_2} = \frac{600 - 200 X}{700 - 200 X}$$

از ترکیب این معادلات با معادله بالا مقدار درصد تبدیل تعادلی برابر ۰/۷۰۸۷ می شود. در نتیجه:

$$y_{CH_3OH} = 0.127$$

$$y_{CO} = 0.052$$

$$y_{H_2} = 0.821$$

رسیدن به تعادل کامل ترمودینامیکی برای واکنش ها عملاً غیر ممکن است. مثلاً ممکن است در عمل بتوان به ۹۰٪ تبدیل تعادلی رسید. برای لحاظ کردن این مورد در محاسبات با مشخص کردن یکی از دو مورد زیر می توان میزان ثابت تعادل را کنترل کرد:

۱- Temperature Approach

۲- Molar Extent برای محصول هر واکنش

در حالت Temperature Approach ثابت تعادل واکنش (بسته به گرمازا و گرماگیر بودن واکنش) در دمایی کمتر و یا بالاتر از دمای واکنش محاسبه می شود که به صورت اختلاف دما ΔT وارد سیستم می شود.

نکته

- در مدل REquil جامدات در واکنش ها به صورت جامد خالص در کلاس جریان CISOLID شناخته می شوند.
- فاز جامد خالص در تعادل فازی شرکت نمی کند.
- هر محصول جامد باید دارای انرژی آزاد تشکیل (Free Energy of Formation) و گرمای تشکیل (Heat of Formation) باشند.
- جامداتی که در واکنش ها شرکت نمی کنند به عنوان ترکیبات بی اثر (Inert) شناخته می شوند.

ماندگی مایع یا جامد در فاز گاز

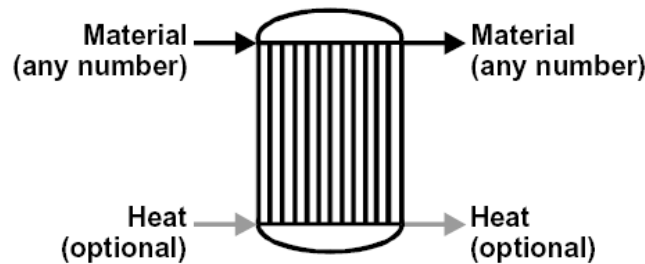
برای تعیین درصدی از ماندگی فاز مایع یا فاز جامد در فاز گاز وارد صفحه Entrainment می شویم:

Substream	Fraction

- راکتور RGibbs

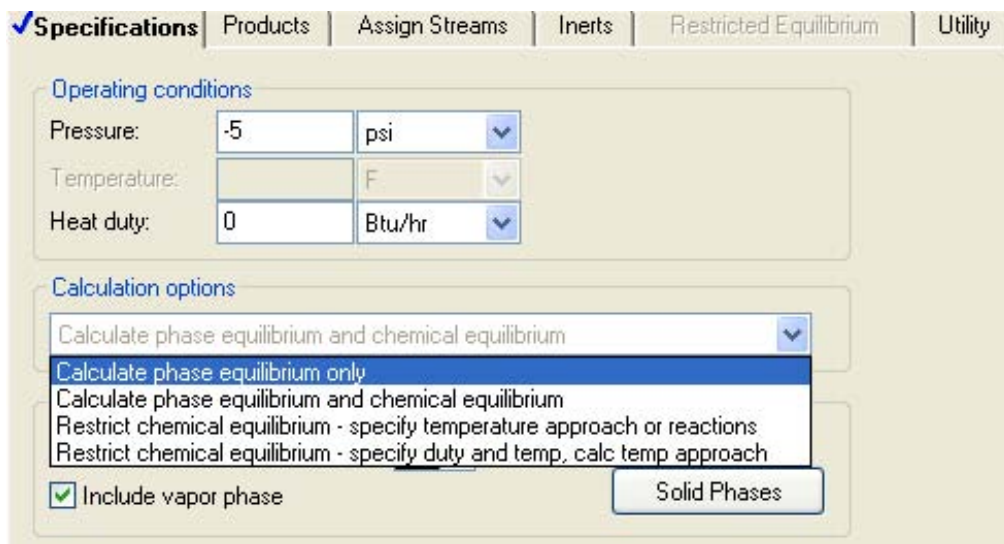
در این مدل تنها چیزی که نیاز داریم اینست که محصولات ممکن که احتمال تولید آنها وجود دارد را معرفی نماییم و نیازی به معرفی واکنش ها و استوکیومتری واکنش ها نیست. زمانی از این مدل استفاده می کنیم که هیچ اطلاعاتی از واکنش هایی

که داخل راکتور اتفاق می افتند نداریم یا تعداد واکنش ها به خاطر تعداد بالای ترکیبات شرکت کننده در واکنش ها زیاد باشند. این مدل برای محاسبه ثابت تعادل از مینیمم کردن انرژی آزاد گیبس کل محصولات استفاده می کند. به طور پیش فرض این مدل همه ترکیبات انتخاب شده برای شبیه سازی را به عنوان محصول (Product) فرض می کند مگر اینکه کاربر خود محصولات مورد نظر را مشخص کند. راکتور Gibbs تنها مدل موجود در Aspen است که در آن تعادل گاز-مایع-جامد وجود دارد.

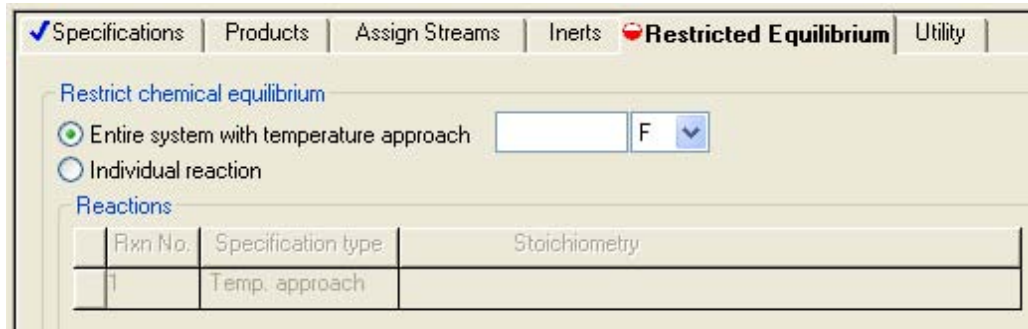


در راکتور گیبس محاسبات تعادلی به دو صورت زیر قابل انجام است:

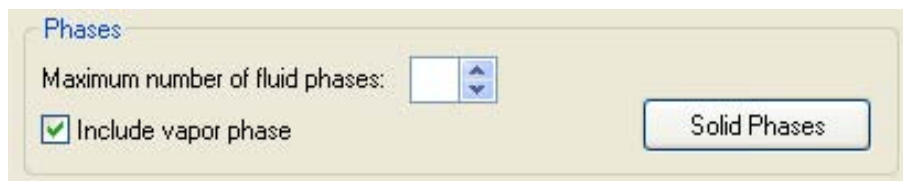
- فقط محاسبات تعادل فازي
 - در این حالت فقط محاسبات مربوط به تعادل چند فازي که در آن یک فاز بخار و چندین فاز مایع و یا فاز جامد وجود دارد (بدون واکنش شیمیایی) انجام خواهد شد.
 - محاسبات تعادل فازي و شیمیایی
- با انتخاب این روش محاسبات تعادل فازي و تعادل شیمیایی به طور همزمان انجام می شوند و قادر خواهیم بود تا محصولات مورد نظر خود را در صفحه Products انتخاب نماییم.



در صفحه Specification اگر گزینه سوم Calculation Option انتخاب شود، برگه Restricted Equilibrium فعال خواهد شد. در این برگه می توان با وارد کردن مقدار دمای نزدیکی به تعادل (Temperature approach) برای همه واکنش ها (entire System) یا واکنش های مورد نظر (Individual Reaction) تعادل شیمیایی را محدود کرد.

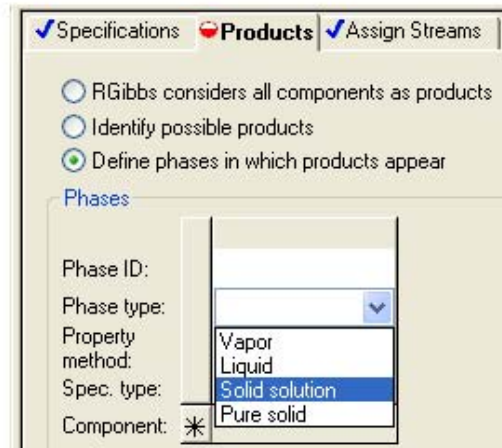
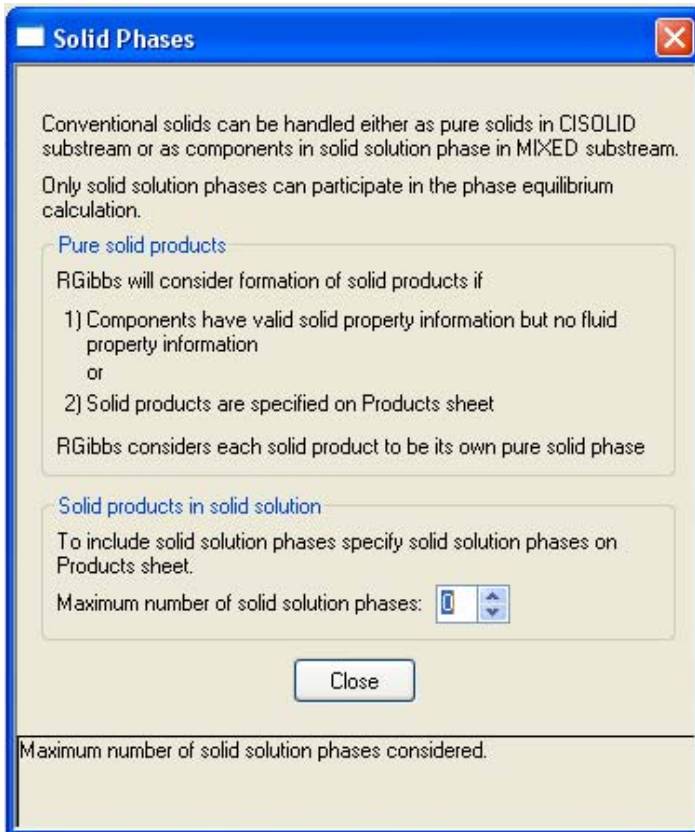


در صفحه Specification اگر گزینه چهارم Calculation Option انتخاب شود، با وارد کردن دمای جریان خروجی از راکتور، مدل دمای نزدیکی به تعادل را برای کل سیستم محاسبه خواهد کرد. در صفحه Specification در قسمت مربوط به تعیین فازهای واکنش اگر Include Vapor Phase انتخاب شده باشد در اینصورت فاز بخار یکی از فازهای واکنش خواهد بود. و در قسمت Maximum number of fluid phases اگر عدد یک وارد شود یک فاز مایع و اگر عدد دو وارد شود دو فاز مایع در داخل راکتور در نظر گرفته می شود.

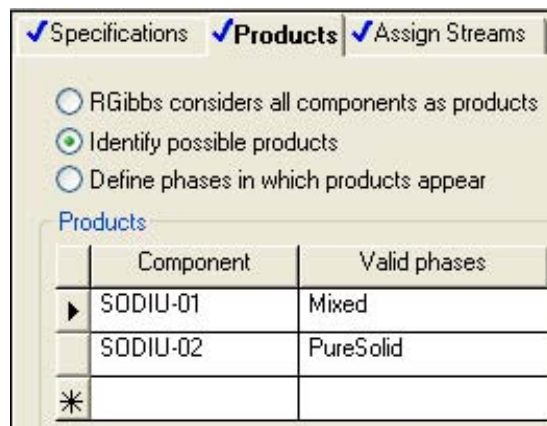


نکته:

- در مدل RGibbs جامدات به دو صورت فاز محلول جامد در کلاس جریان MIXED و فازهای جامد خالص در کلاس جریان CISOLID شناخته می شوند.
- فاز جامد خالص در تعادل فازی شرکت نمی کند. فقط فاز محلول جامد در کلاس جریان MIXED در محاسبات تعادل فازی شرکت می کند.
- هر محصول جامد باید دارای انرژی آزاد تشکیل (Free Energy of Formation) و گرمای تشکیل (Heat of Formation) باشند.
- ترکیبات NC به عنوان ترکیبات بی اثر (Inert) شناخته می شوند.
- در صورت وجود محصولات جامد در فاز محلول جامد اولاً باید در صفحه Solid Phases ماکزیمم مقدار فازهای محلول جامد را در قسمت Maximum number of solid solution phases وارد برنامه کرد و ثانیاً در صفحه Product در قسمت Define Phase s in which products appear فازهای محلول جامد را تعیین نمود.



- تمام محصولات جامد خالص از جریان خروجی راکتور خارج می شود. مگر اینکه در صفحه Assign Stream مقدار درصد خروجی آن از راکتور تعیین شده باشد.



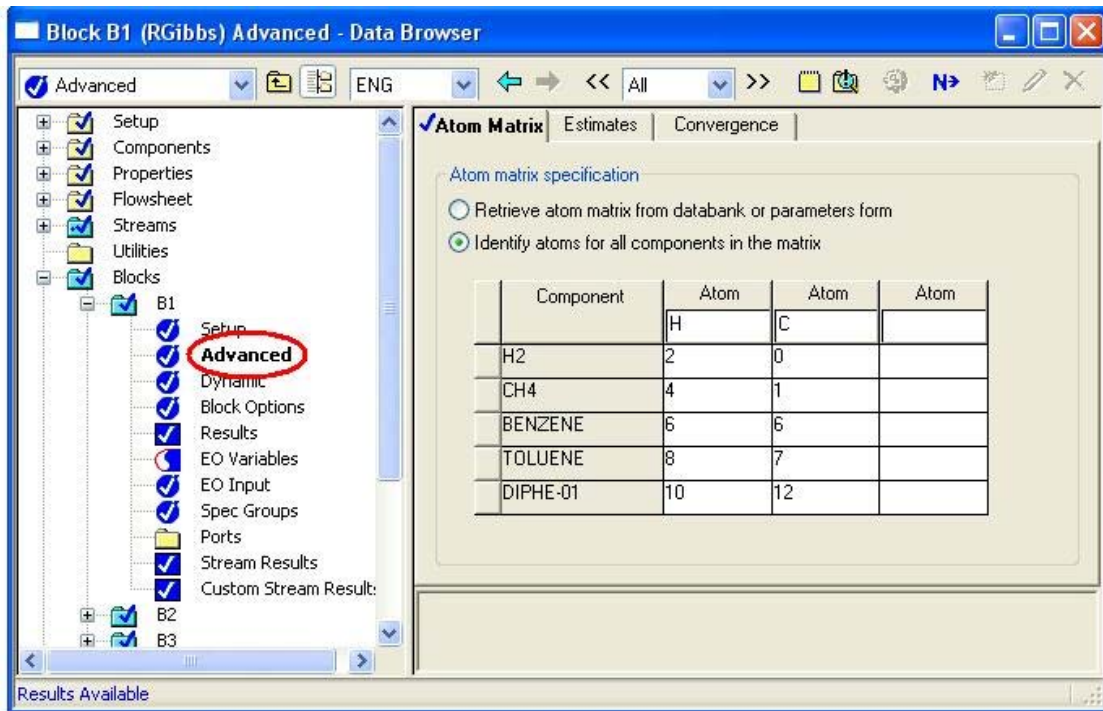
- در این مدل برنامه قادر نیست تا تعادل فازی بین فازهای جامد و سیال (برای مثال تعادل آب-یخ) را مستقیماً محاسبه نماید. جهت اینکار می بایست در صفحه انتخاب مواد دو بار ماده جامد مورد نظر را انتخاب کرده و سپس در صفحه Setup Products مدل RGibbs یکی از آنها را در فاز Pure Solid و دیگری را در فاز Fluid Phase انتخاب کنیم.

مدل RGibbs نیاز به فرمول شیمیایی واکنشگرها و محصولات دارد. در این مدل دسترسی به فرمول ها از سه مسیر زیر امکان پذیر است:

۱- بانک اطلاعاتی ترکیبات

۲- صفحه Properties Molec-Struct Formula Sheet

۳- تعیین ماتریس اتمیک در صفحه Advanced Atom Matrix Sheet مدل RGibbs.



در مدل RGibbs تعداد واکنش های شیمیایی مستقل (R) از رابطه زیر محاسبه می شود:

$$R=C-\rho$$

در این رابطه C تعداد ترکیبات شیمیایی و ρ مرتبه ماتریس اتمیک ترکیبات شیمیایی است. مرتبه (Rank) یک ماتریس حداکثر تعداد سطرها یا ستونهای مستقل خطی آن است. برای محاسبه مرتبه ماتریس $n \times n$ ابتدا باید دترمینان ماتریس را بدست آورد، اگر مقدار آن مخالف صفر بود مرتبه آن برابر n است در غیر این صورت تعداد سطرها یا ستونهای وابسته را از n کم کرده عدد بدست آمده Rank ماتریس خواهد بود. مرتبه ماتریس $m \times n$ هم اغلب کمترین مقدار (m,n) است. در صورت وجود سطرها یا ستونهای وابسته، تعداد آنها را از کمترین مقدار (m,n) کم کرده عدد بدست آمده Rank ماتریس خواهد بود. بنابراین:

$$\text{Rank}(A_{n \times n}) \leq n$$

$$\text{Rank}(A_{m \times n}) \leq \min(m, n)$$

نکته

در بسیاری از موارد تخمین واکنش های در نظر گرفته شده در مدل RGibbs کار ساده ای نیست. بنابراین برای حالتیکه واکنش های تعادلی معلوم باشند و تعداد آنها از R کمتر باشد بهترین انتخاب راکتور REquil خواهد بود. در صورتیکه تعداد واکنش ها در هر دو راکتور RGibbs و REquil برابر باشند نتایج خروجی از هر دو راکتور یکی خواهند بود.

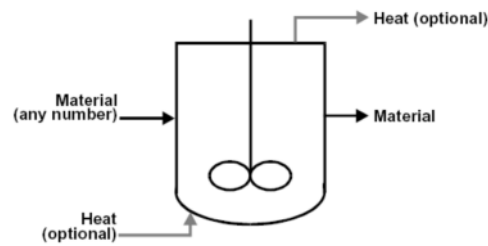
۳- راکتورهای سینتیکی

این دسته از مدل ها شامل سه مدل RCSTR، RPlug و RBatch می شوند که در ادامه به شرح آنها پرداخته می شود.

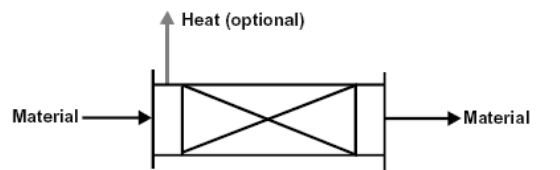
- راکتورهای RCSTR و RPLUG

این مدل ها مدل های رایج در طراحی راکتور ها می باشند. باید توجه داشت که در راکتور های PFR و CSTR بر خلاف راکتور های دیگر که محاسبات ترمودینامیکی است، محاسبات از نوع سینتیکی است. هرگاه برای ما Sizing مهم باشد بایست از این دو نوع راکتور استفاده نماییم. تفاوت راکتور های PFR و CSTR تفاوت در نوع رژیم جریان آنها می باشد. مدل

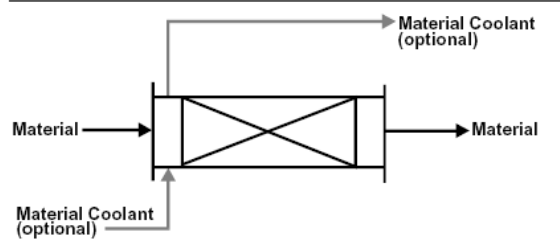
RCSTR برای واکنش های سینتیکی و تعادلی و مدل RPlug برای واکنش های سینتیکی مناسب هستند. در مدل RCSTR مخلوط شدن به صورت کامل فرض می شود. در نتیجه ترکیب درصد مواد درون راکتور با خروجی از راکتور برابر است.



انواع حالت های مختلف راکتور RPlug مطابق شکل زیر است:



Flowsheet Reactor without Coolant Stream

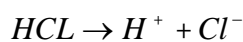
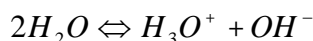


Flowsheet Reactor with Coolant Stream

همانطور که قبلاً هم اشاره شد برای این راکتورها واکنش ها در پوشه Reaction در Data Browser تعریف می شوند. این پوشه شامل دو زیر پوشه Chemistry و Reaction است:

پوشه Chemistry :

این پوشه جهت تعریف واکنش های شامل محلول های الکترولیتی استفاده می شود. معمولاً در تعریف این واکنش ها کاربر نقشی ندارد. این واکنش ها با استفاده از دکمه Elec Wizard در صفحه Component Selection تعریف می شوند. مراحل تعریف واکنش های محلول های الکترولیت در فصل الکترولیت ها توضیح داده خواهد شد. عمده واکنش های الکترولیتی مربوط به تعادل یون ها ، تجزیه اسیدها و بازهای قوی و رسوب نمک ها است. به عنوان مثال:



پوشه Reaction :

از این پوشه برای تعریف واکنش های غیر الکترولیتی استفاده می شود که در راکتور های سینتیکی (RBatch, RCSTR) ، تقطیر واکنشی (reactive distillation) در سیستم های (RadFrac, RateFrac, BatchFrac) و محاسبات مربوط به شیرهای اطمینان (Pressure Relief) در سیستم های واکنشی کاربرد دارند. انواع واکنش های سینتیکی شدتی (rate-based reactions) که می توان تعریف کرد عبارتند از:

- **Power Law** kinetic model
- **Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW)** kinetic model (not applicable to reactive distillation systems)
- **User-defined** kinetic model

سایر مدل هایی از قبیل :

(Emulsion, Free-rad , Ionic , segment-Bas , Step-growth , Ziegler-Nat)

که در این قسمت قابل انتخابند مربوط به مدل های مختلف سینتیک های واکنش های پلیمریزاسیون می باشند که قابل استفاده در محیط Polymer Plus می باشند.

- واکنش های Power Law

این دسته از واکنش ها به دلیل اینکه در معادله سرعت آنها غلظت ، مولاریته ، ضریب فعالیت و ... به صورت توانی ظاهر می شوند ، به واکنش های توانی معروفند و به دو دسته زیر تقسیم می شوند:

❖ واکنش های تعادلی

که شکل کلی این واکنش ها به صورت $\ln K_{eq} = A + \frac{B}{T} + C \ln T + DT$ است.

❖ واکنش های سینتیکی

که شکل کلی این واکنش ها به صورت $k = k_0 \times e^{-\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)} \times \left(\frac{T}{T_0}\right)^n$ است.

- واکنش های Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW)

واکنش های Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW) برای سیستم های واکنشی کاتالیستی نا همگن تعریف می شوند. این واکنش ها دارای سه مرحله اند:

۱. جذب واکنش دهنده ها بر روی سطح فعال کاتالیست
۲. تبدیل واکنشگرها در سطح کاتالیست به محصول
۳. جدا شدن محصولات از سطح کاتالیست

واکنش های لانگمایر به دو دسته تقسیم می شوند:

❖ واکنش های تعادلی

شکل کلی این واکنش ها مشابه واکنش های تعادلی توانی است و فقط در راکتور RCSTR استفاده می شود.

❖ واکنش های سینتیکی

از این نوع واکنش ها بیشتر در راکتور های Plug و CSTR استفاده می شود. این واکنش ها دارای سینتیکی مشابه با واکنش های کاتالیستی (بستر ثابت و یا سیال) هستند. این واکنش ها معمولاً دارای سه ترم سینتیک (ترم سرعتی) ، پتانسیل (ترم نیروی محرکه) و جذب (ترم مقاومتی) می باشند. دلیل وجود این ترم ها وجود مکانیزم جذب و واکنش در روی کاتالیست می باشد. معادله کلی واکنش که در بر دارنده ترم های بالا باشد به صورت زیر است که در ASPEN هم این معادله استفاده می شود:

$$\gamma = \frac{(\text{kinetic factor})(\text{driving force expression})}{(\text{adsorption expression})}$$

Where:

$$\text{Kinetic factor (if } T_0 \text{ is specified)} = k \left(\frac{T}{T_0} \right)^n e^{(-E_a/R)[1/T-1/T_0]}$$

$$\text{Kinetic factor (if } T_0 \text{ is not specified)} = kT^n e^{-E_a/RT}$$

$$\text{Driving force expression} = K_1 \left(\prod C_i^{\nu_i} \right) - K_2 \left(\prod C_j^{\nu_j} \right)$$

$$\text{Adsorption expression} = \left[\sum K_i \left(\prod C_j^{\nu_j} \right) \right]^m$$

Where:

r	= Rate of reaction	[Ci] basis
k	= Pre-exponential factor	Molarity
T	= Temperature in Kelvin	Molality
T_0	= Reference temperature in Kelvin	Mole fraction
n	= Temperature exponent	Mass fraction
E_a	= Activation energy	Partial pressure
R	= Universal gas law constant	Mass concentration
C	= Component concentration	
m	= Adsorption expression exponent	
K_1, K_2, K_i	= Equilibrium constants	
ν	= Concentration exponent	
i, j	= Component index	

از آنجاییکه K_1, K_2, K_3 ثوابت تعادلی هستند لذا باید بتوان آنها را به صورت معادله $\ln K = A + \frac{B}{T} + C \ln T + DT$ وارد سیستم کرد.

- واکنش های React-Dist

این دسته از واکنش ها در برج های تقطیر (RadFrac, RateFrac, BatchFrac) زمانی که تقطیر واکنشی (reactive distillation) رخ می دهد استفاده می شوند و به دو دسته تقسیم می شوند :

❖ واکنش های تعادلی

شکل کلی این واکنش ها مشابه واکنش های تعادلی توانی است.

❖ واکنش های سینتیکی

شکل کلی این واکنش ها مشابه واکنش های سینتیکی توانی است.

❖ واکنش های تبدیلی

فقط در برج های Rad-Frac قابل تعریف است و شکل کلی این واکنش ها به صورت

$$\text{Conv} = A + \frac{B}{T} + C \ln T + DT \text{ است.}$$

❖ واکنش های تشکیل رسوب

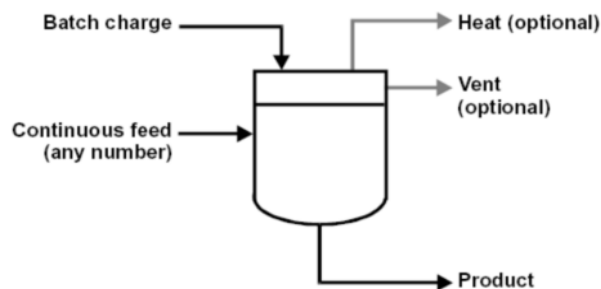
فقط در برج های Rad-Frac قابل تعریف است و شکل کلی این واکنش ها به صورت

$$\ln K_{eq} = A + \frac{B}{T} + C \ln T + DT$$

تفاوت انرژی گیبس محصولات و مواد اولیه محاسبه می شوند.

- راکتور RBatch

مدل RBatch یک مدل خیلی دقیق برای راکتور های Batch و Semi-Batch می باشد. از این راکتور برای واکنش های ناپیوسته و یا نیمه پیوسته Semi-Batch از قبیل واکنش های پلیمریزاسیون استفاده می شود. این راکتور فقط برای واکنش های سینتیکی کاربرد دارد.

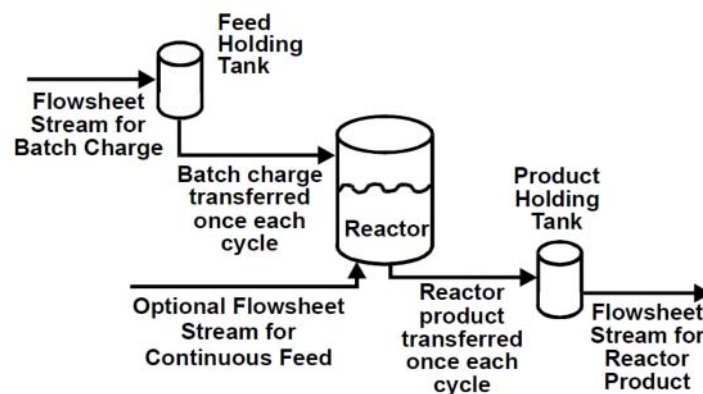


در این مدل از زمان سیکل و تانک های Holding برای ایجاد ارتباط بین عملیات ناپیوسته راکتور RBatch و جریان های پیوسته ورودی به راکتور از مدل های پیوسته و خروجی از راکتور به مدل های پیوسته استفاده می شود. مدل RBatch می تواند راکتورهای یک، دو و سه فازی را شبیه سازی نماید. با استفاده از این مدل از روی داده های تجربی (C, T) می توان بهترین ضرایب سینتیکی k را بدست آورد.

همانطور که در شکل زیر ملاحظه می شود چهار نوع جریان می تواند به راکتور RBatch وصل شود:

• جریان Batch Charge:

این جریان برای انتقال مواد به راکتور در ابتدای شروع سیکل کاربرد دارد. جرم بار¹ در هر بچ راکتور برابر با حاصلضرب شدت جریان Batch Charge در زمان سیکل جریان خوراک یا زمان سیکل فرآیند است. همچنین جرم بار در هر بچ برابر با میزان تجمع جریان Batch Charge در تانک Holding طی هر سیکل راکتور است. محتویات تانک Holding در شروع هر سیکل به داخل راکتور منتقل می شود. اگر زمان خوراک بچ با زمان واقعی محاسبه شده برای سیکل متفاوت باشد، جریان های ورودی و خروجی راکتور RBatch از نظر جرمی موازنه نخواهند بود. اگر چه تمام محاسبات داخلی مدل RBatch و نتایج آن برای بار بچ محاسبه شده صحیح خواهد بود.



• جریان Continuous Feed :

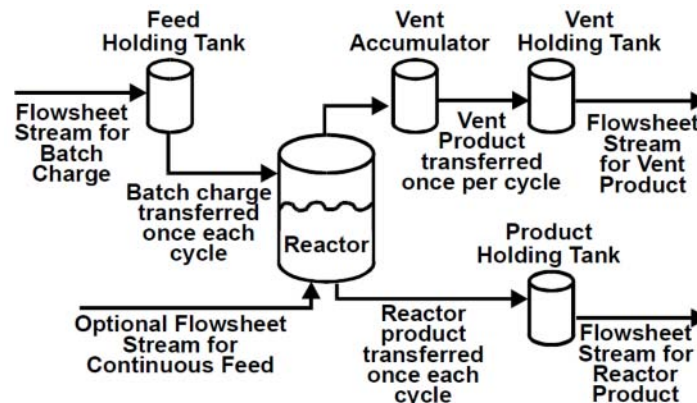
در صورت وصل کردن این جریان به راکتور، جریان خوراک به صورت پیوسته طی واکنش وارد راکتور می شود. شدت جریان این خوراک می تواند به صورت ثابت و یا متغیر با زمان وارد راکتور شود. به هر تعداد از این نوع جریان را می توان در ورودی راکتور وصل کرد. این جریان فقط برای راکتورهای Semi Batch کاربرد دارد.

• جریان Reactor Product:

از این جریان برای خروج محصولات راکتور در انتهای سیکل استفاده می شود و شدت جریان آن برابر با جرم کل داخل راکتور تقسیم بر زمان سیکل راکتور است. در مدل RBatch فرض می شود محصول راکتور به یک تانک ذخیره محصول منتقل شده و طی عملیات سیکل بعدی راکتور از آن برای خوراک دهی پیوسته در تجهیزات پایین سری راکتور استفاده می شود.

• جریان Vent Product:

از این جریان برای تخلیه گازهای تولید شده طی واکنش در انتهای سیکل راکتور استفاده می شود. در مدل RBatch فرض می شود طی زمان واکنش جریان متغیر با زمان Vent در داخل Vent Accumulator جمع شده و سپس در انتهای سیکل فقط یکبار به داخل یک تانک ذخیره Vent منتقل می شود تا طی عملیات سیکل بعدی راکتور از آن برای خوراک دهی پیوسته در تجهیزات پایین سری جریان Vent استفاده شود. شدت جریان آن برابر با جرم کل داخل ظرف Vent Accumulator تقسیم بر زمان سیکل راکتور است. اتصال این جریان به راکتور اختیاری است و فقط برای راکتورهای Semi Batch کاربرد دارد.



جریان های Continuous Feed و Vent در راکتورهای Semi Batch کاربرد دارند. مدل RBatch همانطور که در شکل نشان داده شده است دارای صفحات متعددی است:

در صفحه Specification کاربر می بایست شرایط حرارتی راکتور (دما ثابت، پروفایل دمایی، بار حرارتی ثابت، پروفایل بار حرارتی، دمای ثابت سرد کننده) و شرایط فشار راکتور را وارد برنامه نماید. در صورتیکه کاربر یکی از دو گزینه Constant Temperature و یا Temperature Profile را انتخاب نماید، مدل RBatch کنترل راکتور را به یکی از دو صورت کنترلر کامل (Perfect Controller) و یا کنترلر PID انجام می دهد. وقتی شرایط زیر حاکم باشد مدل کنترلر کامل را اعمال می کند:

- در این صفحه در قسمت Pressure Specification حجم راکتور انتخاب شده باشد و فشار راکتور با توجه به این حجم محاسبه شود.
- از یک راکتور بچ تک فازی بدون جریان های Continuous Feed استفاده شود.

و زمانی که شرایط زیر حاکم باشد مدل برای کنترل دمای راکتور از کنترلر PID استفاده می کند و دماهای داده شده را به عنوان Set Point در نظر می گیرد:

- راکتور دو فازی باشد.
- زمانی که فشار و یا پروفایل فشار وارد برنامه شده باشد و مدل فشار راکتور را محاسبه نکند.
- زمانی که از جریان های Continuous Feed در فرآیند Semi-Batch استفاده شود.

در این حالت صفحه Controller فرم Setup برای وارد کردن پارامترهای کنترلر PID فعال خواهد شد.

معادله کنترلر عبارتست از:

$$Q = M_c \left[K(T - T^s) + (K/I) \int_0^t (T - T^s) dt + KD \frac{d(T - T^s)}{dt} \right]$$

که در آن:

Q: بار حرارتی راکتور

M_c: بار راکتور (kg)

K: بهره تناسبی (J/kg/K)

T: دمای راکتور (K)

T^s: دمای مقرر (K)

I: زمان انتگرال (sec)

D: زمان مشتقی (sec)

T: زمان (sec)

در قسمت Pressure Specification سه گزینه زیر قابل انتخاب است:

۱. Specify Reactor Pressure

۲. Specify Reactor Pressure Profile

۳. Calculate Reactor Pressure (در این حالت می بایست حجم راکتور همراه با فاز واکنش به عنوان ورودی وارد

برنامه شوند.)

در صفحه Reaction واکنش های سینتیکی تعریف شده در شاخه Reaction به راکتور اضافه می شود. لازم به ذکر است که راکتور RBatch فقط می تواند از واکنش های سینتیکی استفاده نماید.

در صفحه Stop Criteria هم یک یا چند عامل توقف واکنش برای خاتمه واکنش در راکتور تعریف می شوند و به محض اینکه یکی از این عوامل فرا رسید، واکنش ها خاتمه می یابند. هر کدام از معیارهای توقف می تواند مطابق شکل روی متغیرهای راکتور، شاخه Vent خروجی یا Vent Accumulator تعریف شود.

Criterion no.	1
Location	Reactor
Variable type	Reactor
Stop value	Vent accumulator Vent
Component	
Substream	
Property set ID	
Approach from	

عوامل توقف واکنش مطابق شکل زیر می توانند یکی از موارد زیر باشند:

Criterion no.	1
Location	Reactor
Variable type	Time
Stop value	Time Mole fraction Mass fraction Conversion Total moles Total mass Total volume Temperature Pressure Vapor fraction Vent mole flowrate Vent mass flowrate Prop-set property
Component	
Substream	
Property set ID	
Approach from	

(زمان واکنش، ترکیب درصد مواد داخل راکتور، ترکیب درصد مواد در شاخه Vent، میزان تبدیل ترکیبات، مقدار دبی مواد در داخل راکتور یا Vent Accumulator، دبی جریان Vent، دمای راکتور، درصد بخار داخل راکتور، یا هر خاصیت تعریف شده در قسمت Pro-Sets)

در صفحه Operation Times کاربر قادر است تا کل زمان سیکل و یا زمان شروع خوراکدهی و زمان پایان سیکل (زمان پایان تخلیه، تمییز کردن و بارگذاری راکتور) را وارد برنامه نماید:

Specifications
 Reactions
 Stop Criteria
 Operation Times
 Continuous Feeds
 Cor ◀ ▶

Batch cycle time

Total cycle time: 1900 sec
 Batch feed time: sec
 Down time: 0 sec

Profile result time

Maximum calculation time: 3600 sec
 Time interval between profile points: 90 sec
 Maximum number of profile points: 42

نکته: اگر جریان Charge یک جریان برگشتی باشد زمان سیکل راکتور حتماً باید وارد شود. همچنین در قسمت Profile result time کاربر قادر است تا ماکزیمم زمان محاسبات و بازه های زمانی بین نقاط پروفایل را وارد برنامه نماید.

در صفحه Continuous Feeds برای وارد کردن دبی های جرمی جریان های ورودی پیوسته در هر نقطه زمانی استفاده می شود. بنابراین در این صفحه می توان تغییرات مرحله ای در خوراک های ورودی به راکتور را اعمال کرد. این صفحه زمانی فعال می شود که جریان Continuous Feed به راکتور وصل شده باشد:

Specifications
 Reactions
 Stop Criteria
 Operation Times
 Continuous Feeds
 Cor ◀ ▶

Continuous feed mass flow

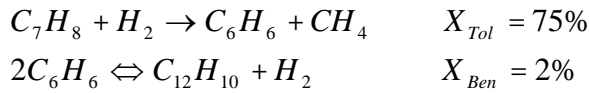
Stream: 1

Flow is constant at inlet value
 Specify flow vs time profile

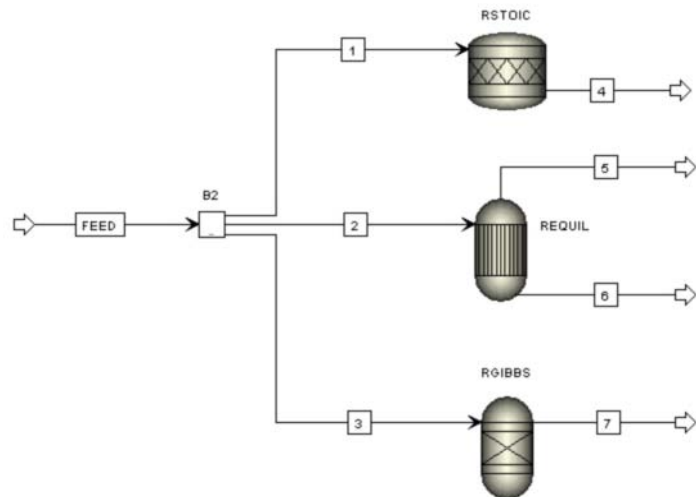
	Time	Flow
*		

تمرین ۱:

وقوع واکنش های زیر را در راکتور های آدیباتیک RStoic ، REquil ، RGibbs و جریان خوراک با مشخصات داده شده بررسی نموده و دمای خروجی و تبدیل محصولات را در هر سه راکتور بررسی و نتیجه گیری نمایید. افت فشار را در هر سه راکتور برابر ۵ Psi در نظر بگیرید.



مشخصات جریان خوراک	
دما (F)	۱۲۰۰
فشار (Psia)	۴۹۴
هیدروژن (mole flow) $\left(\frac{lbmole}{hr}\right)$	۲۰۴۵/۹
متان (mole flow) $\left(\frac{lbmole}{hr}\right)$	۳۰۲۰/۸
بنزن (mole flow) $\left(\frac{lbmole}{hr}\right)$	۴۶/۲
تولوئن (mole flow) $\left(\frac{lbmole}{hr}\right)$	۳۶۲
دی فنیل (mole flow) $\left(\frac{lbmole}{hr}\right)$	۱

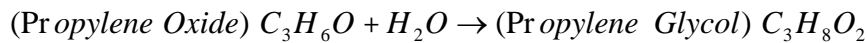


PP: Peng-Robinson

- نتایج خروجی دو مدل راکتور REquil و RGibbs را مقایسه نمایید. آیا نتایج یکی است؟
- تعداد واکنش های مستقل در راکتور RGibbs را محاسبه نمایید. آیا علاوه بر دو واکنش بالا واکنش دیگری برای مدل RGibbs متصور است؟
- واکنش $Toluene + 10 H_2 \rightarrow 7 CH_4$ را به مدل REquil اضافه نموده و سپس نتایج خروجی دو مدل راکتور REquil و RGibbs را مقایسه و نتیجه گیری نمایید.

تمرین ۲:

واکنش تولید پروپیلن گلیکل (۱) و پروپان دی ال) از پروپیلن اکسید و آب در یک راکتور CSTR با مشخصات داده شده ، در هر دو فاز مایع سبک و سنگین اتفاق می افتد:



$$-r_{(C_3H_8O_2)} = 9.15 \times 10^{22} \exp(-155600(kJ / kmol) / RT) \times C_{(C_3H_6O)}^2$$

PP: Wilson

مشخصات جریان خوراک	
دما (C)	۲۳/۹
فشار (bar)	۳
پروپیلن اکسید (mole flow) $\left(\frac{kgmole}{hr}\right)$	۱۸/۷۱۲
آب (mole flow) $\left(\frac{kgmole}{hr}\right)$	۱۶۰

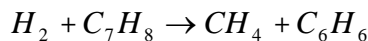
مشخصات راکتور	
دما (C)	۸۰
فشار (bar)	۳
حجم راکتور m^3	۱/۱۳۵۶

مطلوبست نمایش درصد تبدیل اکسید پروپیلن و نمودار تغییرات اکسید پروپیلن تبدیل نشده با افزایش آب خوراک ورودی؟ چرا با افزایش آب ورودی میزان تبدیل کاهش می یابد؟

بازه تغییرات دبی آب را بین $\left(\frac{kgmole}{hr}\right)$ ۵۰۰-۱۶۰ با طول گام ۱۰ در نظر بگیرید.

تمرین ۳:

واکنش تولید بنزن از تولوئن در یک راکتور آدیاباتیک PFR با مشخصات داده شده زیر ، در فاز گازی انجام می شود:



$$-r_{(C_7H_8)} = 6.3 \times 10^{10} \exp(-52000(col / mol) / RT) \times C_{(H_2)}^{0.5} \times C_{(Tol)}^1$$

PP: PR

مشخصات جریان خوراک	
دما (F)	۱۲۰۰
فشار (Psi)	۴۹۴
هیدروژن (mole flow) $\left(\frac{lbmole}{hr}\right)$	۲۰۴۹/۰۷۷
متان (mole flow) $\left(\frac{lbmole}{hr}\right)$	۳۰۲۰/۸۰۱
بنزن (mole flow) $\left(\frac{lbmole}{hr}\right)$	۳۹/۸۴۶
تولوئن (mole flow) $\left(\frac{lbmole}{hr}\right)$	۳۶۲

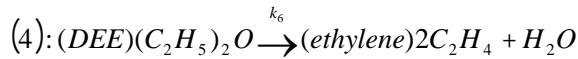
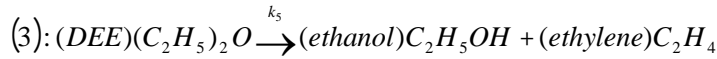
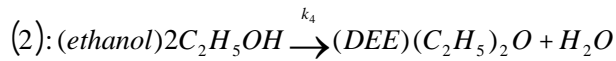
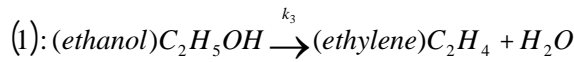
مشخصات راکتور	
افت فشار (psi)	۵
قطر راکتور ft	۱۰

مطلوبست تعیین طول مناسب راکتور به طوری که میزان تبدیل تولوئن ۷۵٪ باشد.

راهنمایی: بازه تغییرات طول راکتور را بین ۱۰۰۰-۲۰ فوت در نظر بگیرید. حدس اولیه برای طول راکتور را ۱۰۰ فوت در نظر بگیرید.

تمرین ۴:

سنتز دی اتیل اتر از اتانول روش غیر مستقیم تولید این ماده نامیده می شود. راکتور از نوع آدیاباتیک پلاگ است و واکنش های زیر در فاز گاز در آن انجام می شود:



$$r_1 = \frac{834.5e^{(-1770/RT)} \cdot P_{ETOH}}{1 + 1.2185 \times 10^{-6} e^{(41060/RT)} \cdot P_{ETOH} + 5.295 \times 10^{-6} e^{(33010/RT)} \cdot P_{DEE} + 3.573 \times 10^{-5} e^{(26200/RT)} \cdot P_{H_2O}}$$

$$r_2 = \frac{58.1e^{(-23090/RT)} \cdot P_{ETOH}^2}{1 + 1.2185 \times 10^{-6} e^{(41060/RT)} \cdot P_{ETOH} + 5.295 \times 10^{-6} e^{(33010/RT)} \cdot P_{DEE} + 3.573 \times 10^{-5} e^{(26200/RT)} \cdot P_{H_2O}}$$

$$r_3 = \frac{1.7876 \times 10^5 e^{(-31763/RT)} \cdot P_{DEE}}{1 + 1.2185 \times 10^{-6} e^{(41060/RT)} \cdot P_{ETOH} + 5.295 \times 10^{-6} e^{(33010/RT)} \cdot P_{DEE} + 3.573 \times 10^{-5} e^{(26200/RT)} \cdot P_{H_2O}}$$

$$r_4 = \frac{31.44e^{(-31763/RT)} \cdot P_{DEE}}{1 + 1.2185 \times 10^{-6} e^{(41060/RT)} \cdot P_{ETOH} + 5.295 \times 10^{-6} e^{(33010/RT)} \cdot P_{DEE} + 3.573 \times 10^{-5} e^{(26200/RT)} \cdot P_{H_2O}}$$

PP:UNIQUAC

مشخصات خوراک:

1	
Temperature	176.7 C
Pressure	2000 kPa
Molar Flow	600.0 kgmole/h
Comp Mole Frac (Ethanol)	0.9083
Comp Mole Frac (Ethylene)	0.0367
Comp Mole Frac (diE-Ether)	0.0091
Comp Mole Frac (H2O)	0.0459

- احاد انرژی اکتیواسیون $\frac{kJ}{kmol}$ است.

- افت فشار راکتور را برابر ۰/۷۵ بار در نظر بگیرید.

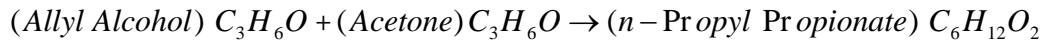
- راکتور از نوع multi tube و با تعداد ۱۰۰۰ لوله هر کدام با قطر ۷/۳۸ cm و طول ۳ m در نظر بگیرید.

مطلوبست رسم منحنی تغییرات دما در طول راکتور

مطلوبست رسم تغییرات غلظت واکنشگرها و محصولات در طول راکتور

تمرین ۵:

واکنش تولید نرمال پروپیل پروپیونات از آلیل الکل (۱ پروپن تری ال) و استن در یک راکتور RBatch با مشخصات داده شده ، در فاز مایع اتفاق می افتد:



$$-r_{(C_3H_8O_2)} = 25 \times 10^6 \exp(-60000(kJ / kgmol) / RT) \times C_{(Allyl-Alcohol)}^1 \cdot C_{(Acetone)}^{0.5}$$

PP: NRTL

مشخصات جریان خوراک Batch Charge	
دما (C)	۲۵
فشار (bar)	۱
آلیل الکل (mass flow) $\left(\frac{kg}{sec}\right)$	۰/۰۵
استن (mass flow) $\left(\frac{kg}{sec}\right)$	۰/۰۷

مشخصات راکتور	
دما (C)	۳۰
فشار (bar)	۰
زمان پایان واکنش (sec)	۱۹۰۰

فاصله بازه های زمانی بین نقاط پروفایل را برابر ۹۰ ثانیه در نظر بگیرید.

الف) مطلوبست درصد تبدیل آلیل الکل و استن و نمودار تغییرات دما در طول زمان در راکتور؟
 ب) داده های تجربی از غلظت های آلیل الکل و نرمال پروپیل پروپیونات در داخل راکتور بر حسب زمان مطابق جدول زیر در دسترس است:

زمان (sec)	آلیل الکل (mole %)	پروپیل پروپیونات (mole %)
۶۰۰	۰/۳۰۱۴۹	۰/۱۹۷۴۵
۹۰۰	۰/۲۵۶۱۳	
۱۹۰۰	۰/۱۴۹۳۸	۰/۴۵۸۲

با استفاده از این اطلاعات و استفاده از امکانات Data Fit نرم افزار ثابت سینتیکی واکنش را اصلاح نموده و مقدار جدید آنرا گزارش نمایید. محدوده تغییرات ثابت سینتیکی را بین $10^6 - 10^8$ در نظر بگیرید.



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

ASPEN PLUS

جلسه هشتم

- آشنایی با ابزارهای Model Analysis Tools
- Sensibility Analysis
- Optimization
- Data Fit
- Case Study
- آشنایی با جریان های برگشتی (Recycle)
- تمرین ها

Model Analysis Tools**Sensitivity Analysis –**

زمانیکه پس از اتمام کار شبیه سازی یک واحد نیاز به بررسی تأثیر یک یا چند پارامتر بر روی کل سیستم باشد به این کار تحلیل حساسیت گفته می شود. معمولاً تحلیل حساسیت را بعد از بهینه سازی انجام می دهند تا پایداری این نقطه را بررسی کنند. مثلاً برخی مواقع نقطه بهینه دارای ثبات کمی می باشد و کوچکترین انحراف در پارامترها و یا متغیرهای سیستم باعث ناپایدار شدن و انحراف از آن می گردد. برای رفتن به محیط Sensitivity Analysis از مسیر زیر استفاده می کنیم:

Data menu \ Model Analysis Tools \ Sensitivity Analysis

Optimization –

زمانیکه پس از اتمام کار شبیه سازی یک واحد نیاز به بهینه سازی (کمینه یا بیشینه سازی) فرآیند باشد، در اینصورت کاربرد قادر خواهد بود تا با تعریف تابع هدف، تعیین قیود و تعیین متغیرهای آزاد بهینه سازی به راحتی بهینه سازی را انجام دهد. برای رفتن به محیط Optimization از مسیر زیر استفاده می کنیم:

Data menu \ Model Analysis Tools \ Optimization

Data Fit –

گاهی اوقات مدل دقیقی از یک فرآیند در دسترس نیست و از ما خواسته می شود تا با استفاده از داده های تجربی موجود عملکرد مدل را به واقعیت نزدیکتر سازیم. در اینصورت می توان از امکانات Data Fit نرم افزار Aspen استفاده نماییم. مثلاً برای راکتوری که سینتیک واکنش های آن ناشناخته است، می توان با استفاده از یکسری داده های تجربی و صنعتی موجود و اعمال آن بر روی راکتور، پارامترهای سینتیکی را اصلاح کرده و از بروز خطا در حل مدل جلوگیری نماییم. برای رفتن به محیط Data Fit از مسیر زیر استفاده می کنیم:

Data menu \ Model Analysis Tools \ Data Fit

Case Study –

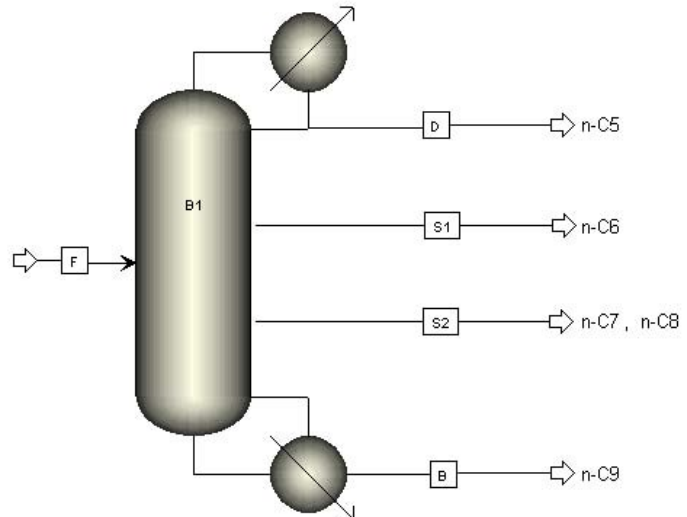
زمانیکه پس از اتمام کار شبیه سازی یک واحد لازم باشد تا حالت های مختلف فلوشیت را با تغییر پارامترهای مختلف بررسی نماییم از این ابزار استفاده می کنیم. پس از اجرا ASPEN PLUS گزارش نتیجه هر کدام از این حالت ها را جداگانه تولید می کند. Case Study (مطالعه موردی) فقط در حالت شبیه سازی SM قابل اجراست و در حالت EO قابل اجرا نیست. برای رفتن به محیط Case Study از مسیر زیر استفاده می کنیم:

Data menu \ Model Analysis Tools \ Case Study

تمرین ۱:

برج تقطیر با ۲۳ مرحله تعادلی برای جداسازی ترکیبات خوراک F با مشخصات جدول زیر را شبیه سازی نمایید. خوراک در سینی ۱۱ وارد برج می شود. فشار کندانسور را برابر ۲۰ پوند، فشار ریویولر را برابر ۲۶ پوند و افت فشار کندانسور را برابر صفر پوند در نظر بگیرید. شدت جریان مایع خروجی از کندانسور را برابر $200 \frac{lb}{hr}$ و نسبت شدت جریان برگشتی جرمی را برابر ۵ در نظر بگیرید. جریان های جانبی S_1 (سینی ۶) و S_2 (سینی ۱۶) هر دو در فاز مایع و دارای دبی جریان های $2 \frac{lbmole}{hr}$ می باشند.

مشخصات جریان خوراک	
دما (F)	۱۲۰
فشار (Psia)	۲۵
نرمال پنتان (mass flow) $\left(\frac{lb}{hr}\right)$	۲۲۰
نرمال هگزان (mass flow) $\left(\frac{lb}{hr}\right)$	۱۱۰
نرمال هپتان (mass flow) $\left(\frac{lb}{hr}\right)$	۱۶۰
نرمال اکتان (mass flow) $\left(\frac{lb}{hr}\right)$	۵۰
نرمال نونان (mass flow) $\left(\frac{lb}{hr}\right)$	۴۰۰



PP : Chao-Seader

- نمودار توزیع غلظت را در طول برج رسم نمایید.
 - نمودار تغییرات تابع هدف زیر را بر اساس تغییرات جریان برگشتی در محدوده ذکر شده رسم نمایید.
- $$D_{C5} + S1_{C6} + S2_{C7} + S2_{C8} + B_{C9} \quad 5 \langle RR \langle 10$$
- برای تابع هدف بالا با شرایط داده شده زیر، حد مجاز افزایش میزان نسبت جریان برگشتی را برای جداسازی بهتر بدست آورید. برای بهینه سازی تابع هدف از روش SQP استفاده نمایید. نمودار توزیع غلظت را در این حالت با حالت قبلی مقایسه و نتیجه گیری نمایید.

$$\text{Maximize } D_{C5} + S1_{C6} + S2_{C7} + S2_{C8} + B_{C9}$$

$$\text{Subject to: } 5 \langle RR \langle 10$$

Constraints:

$$0.1 \langle \frac{D}{F} \langle 0.7$$

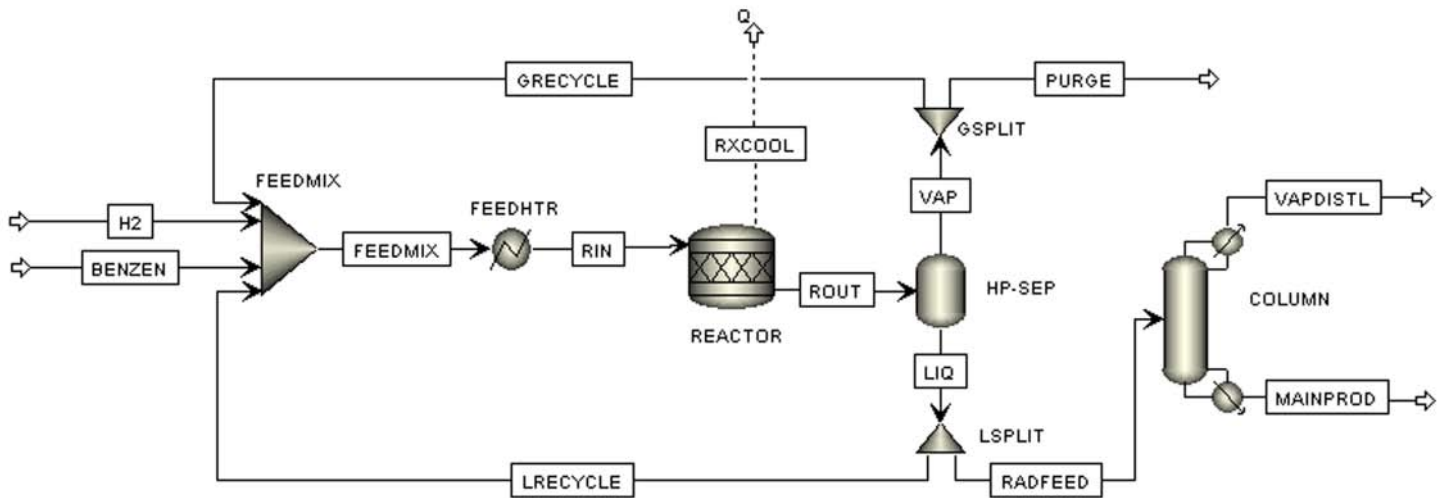
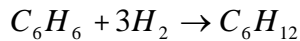
$$0.1 \langle \frac{S2}{F} \langle 0.7$$

$$0.1 \langle \frac{S1}{F} \langle 0.7$$

$$0.05 \langle \frac{B}{F}$$

تمرین ۲:

در شکل زیر فرآیند تولید سیکلو هگزان از هیدروژناسیون بنزن را ملاحظه می کنید.



شرح فرآیند:

در این فرآیند خوراک هیدروژن با خوراک بنزن به همراه جریان های برگشتی از جداکننده فشار بالا با یکدیگر مخلوط شده و پس از پیشگرم شدن وارد راکتور ایزوترم می شوند. سپس جریان محصول خروجی از راکتور جهت جداسازی گازهای سبک وارد یک جداکننده فشار بالا می شود. مقداری از جریان های خروجی از جداکننده به ورودی راکتور برگردانده می شوند. جریان بالایی از فرآیند دفع شده و جریان پایینی جهت جداسازی نهایی ترکیبات سبک از محصول اصلی سیکلو هگزان وارد یک برج تقطیر می شود.

❖ فرآیند بالا را با توجه به مشخصات داده شده زیر برای جریان های خوراک و تجهیزات فرآیندی فوق شبیه سازی نمایید.

PP: RK-SOAVE

مشخصات جریان خوراک	H2	BENZENE
دما (F)	۱۲۰	۱۰۰
فشار (Psi)	۳۲۵	۱۵
شدت جریان کلی (lb mole / hr)	۳۴۰	۱۰۰
هیدروژن (mole fraction)	۰/۹۷۵	۰
نیتروژن (mole fraction)	۰/۰۰۵	۰
متان (mole fraction)	۰/۰۲	۰
بنزن (mole fraction)	۰	۱
سیکلو هگزان (mole fraction)	۰	۰
آب (mole fraction)	۰	۰

مشخصات FEEDMIX	
فشار (psi)	۳۰۰
مشخصات FEEDHTR	
دما (F)	۳۰۰
فشار (Psi)	۳۰۰
مشخصات REACTOR	
دما (F)	۴۰۰
فشار (Psi)	۳۰۰
درصد تبدیل بنزن	۰/۹۹۸
مشخصات HP-SEP	
دما (F)	۱۲۰
فشار (Psi)	-۵

- میزان Split Fraction را برای جریان GRECYCLE برابر ۰/۳ و برای جریان LRECYCLE برابر ۰/۰۸ در نظر بگیرید.
- مشخصات برج تقطیر به شرح جدول زیر است:

مشخصات COLUMN	
تعداد سینی های برج	۱۵
سینی خوراک	۸
نوع کندانسور	جزئی
شدت جریان محصول پایین برج ($lb\ mole / hr$)	۹۹
نسبت مولی جریان برگشتی	۱/۲
فشار بالای برج (psi)	۲۰۰

- ❖ برنامه را ذخیره کرده و اجرا نمایید.
- ❖ نسبت شدت جریان مولی هیدروژن به بنزن در شاخه RIN چقدر است؟
- ❖ مطلوبست تنظیم مقدار هیدروژن ورودی فرآیند ($@ in H_2\ Stream$) به شرطی که رابطه زیر در ورودی راکتور برقرار باشد:

$$F_{H_2} (@ in RIN\ Stream) = 3.3 F_{Benzene} (@ in RIN\ Stream)$$

(بازه تغییرات دبی مولی شاخه جریان H_2 را بین ۲۵۰-۳۵۰ در نظر بگیرید.)

- ❖ نتایج حاصله را با نتایج قبلی مقایسه نمایید.



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

ASPEN PLUS

جلسه نهم

- آشنایی با انواع تجهیزات تغییر دهنده فشار در ASPEN
- آشنایی با مدل های شبیه سازی تجهیزات تغییر دهنده فشار / Pump / Compr / MCompr / Valve / Pipe / Pipe Line
- تمرین ها

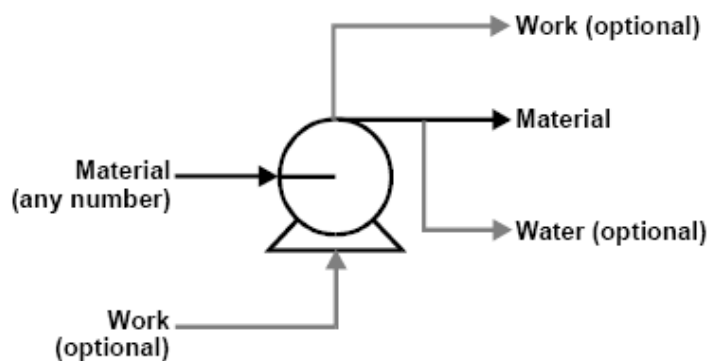
تجهیزات تغییردهنده فشار

در این فصل هدف آشنایی با مدل های شبیه سازی پمپ و کمپرسور و مدل های محاسبه افت فشار در شیرها و لوله ها می باشد. مدل های موجود در ASPEN بدین منظور مطابق جدول ذیل است:

Model	Description	Purpose	Use For
Pump	Pump or hydraulic turbine	Changes stream pressure when the power requirement is needed or known	Pumps and hydraulic turbines
Compr	Compressor or turbine	Changes stream pressure when power requirement is needed or known	Polytropic compressors, polytropic positive displacement compressors, isentropic compressors, isentropic turbines
MCompr	Multistage compressor or turbine	Changes stream pressure across multiple stages with intercoolers. Allows for liquid knockout streams from intercoolers	Multistage polytropic compressors, polytropic positive displacement compressors, isentropic compressors, isentropic turbines
Valve	Valve pressure drop	Models pressure drop through a valve	Control valves and pressure changers
Pipe	Single segment pipe	Models pressure drop through a single segment of pipe	Pipe with constant diameter (may include fittings)
Pipeline	Multiple segment pipeline	Models pressure drop through a pipe or annular space	Pipeline with multiple lengths of different diameter or elevation

PUMP –

پمپ ها برای انتقال سیالات غیر تراکم پذیر و افزایش فشار آنها بکار برده می شوند. مدل PUMP در ASPEN قادر به مدل کردن پمپ ها و نیز توربین های هیدرولیکی است. از این مدل زمانی به منظور یک تجهیز تغییر دهنده فشار استفاده می شود که میزان نیرو و توان مورد نیاز پمپ معلوم باشد در غیر این صورت از مدل هیتر هم می توان به جای مدل پمپ استفاده کرد.



با دو بار کلیک کردن بر روی بلاک پمپ صفحه Specification ظاهر خواهد شد:

The screenshot shows the 'Specifications' tab in the ASPEN PLUS software. Under the 'Model' section, the 'Pump' radio button is selected. The 'Pump outlet specification' section contains five radio button options: 'Discharge pressure', 'Pressure increase', 'Pressure ratio', 'Power required', and 'Use performance curve to determine discharge conditions'. Each option has a corresponding input field and a unit dropdown menu (psi or hp). The 'Efficiencies' section at the bottom has two input fields labeled 'Pump' and 'Driver'.

همانطور که در شکل بالا هم ملاحظه می شود جهت حل پمپ ، وارد کردن یکی از اطلاعات زیر برای شبیه سازی پمپ ها الزامی است :

- فشار خروجی
- میزان افزایش فشار پمپ
- نسبت فشار خروجی به فشار ورودی
- توان پمپ
- استفاده از منحنی مشخصه (Performance) پمپ

برای بازدهی پمپ هم دو نوع بازدهی قابل تعریف است که در قسمت efficiencies وارد می شود. گزینه اول (Pump) مربوط به بازدهی پمپ و گزینه دوم (Driver) مربوط به بازدهی مکانیکی پمپ می شود. طبق تعریف بازدهی پمپ عبارت است از:

$$\eta = \frac{\text{fluid HP}}{\text{break HP}} = \frac{\gamma \cdot Q \cdot H}{\text{break HP}}$$

$$\eta = \frac{\gamma \cdot Q \cdot H}{33000 \times \text{break HP}} \quad (H : \text{feet} , Q : \frac{\text{gal}}{\text{min}}) , \quad (1 \text{ HP} = 550 \frac{\text{ft} \cdot \text{lb}}{\text{s}})$$

break HP : به مقدار واقعی HP ای گفته می شود که به پمپ می رود نه به مقدار مصرف شده آن در موتور .
 HP به motor load و driver load هم نامیده می شود.

نکته: بازدهی توربین عکس بازدهی پمپ است.

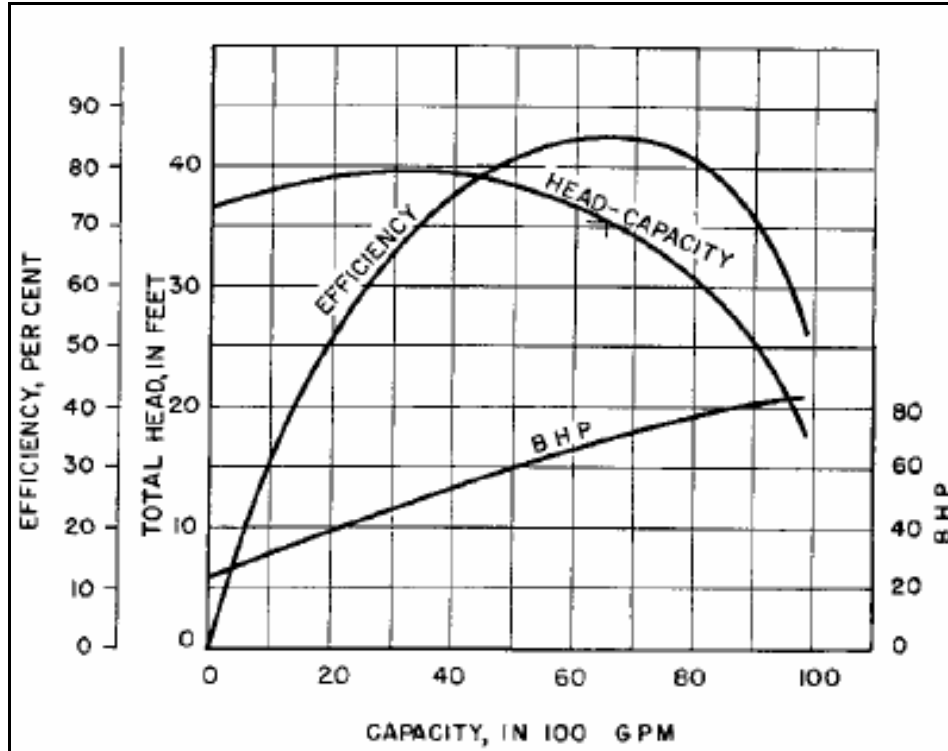
و بازدهی مکانیکی پمپ عبارت است از:

$$\eta_m = \frac{P - P_f}{P}$$

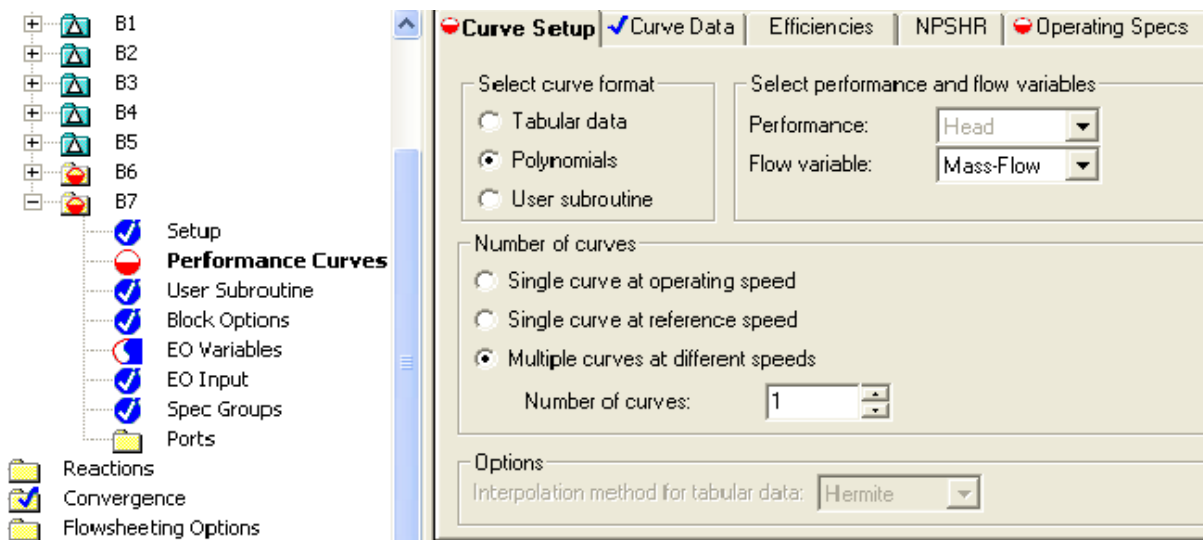
P : توان انتقال یافته از موتور به شفت (Power transferred from motor to the shaft)

P_f : اتلاف توان (Power lost)

در صورتیکه در صفحه specification از گزینه آخری (منحنی مشخصه پمپ) استفاده نماییم می بایست اطلاعات مربوط به منحنی مشخصه پمپ را نیز وارد نماییم. از مهمترین نمودارهای پمپ ها، منحنی مشخصه یک پمپ است. در این منحنی هد پمپ بر حسب دبی در سرعت پروانه های مختلف پمپ رسم شده است. اغلب همراه با منحنی مشخصه، منحنی بازده وجود دارد که کاربر را در انتخاب بهترین پمپ برای آن محدوده دبی و هد، هدایت می کند.



نرم افزار ASPEN برای تعیین منحنی مشخصه پمپ قادر است با گرفتن داده های جدولی و یا رابطه ریاضی (معادله چند جمله ای درجه سوم)، این منحنی را تولید کرده و در محاسبات از آن استفاده نماید. معمولاً در پمپ ها ضرایب یک معادله درجه چهارم برای منحنی مشخصه آن پمپ ارائه می شود. جهت ورود اطلاعات مربوط به منحنی مشخصه پمپ از زیر شاخه بلاک پمپ وارد پنجره Performance Curves خواهیم شد. در این صورت صفحه Curve Setup ظاهر خواهد شد:



در صورتیکه در صفحه Setup گزینه آخر را انتخاب کرده باشیم (استفاده از منحنی های مشخصه پمپ برای محاسبه فشار خروجی پمپ) ، در اینصورت در صفحه بعدی (Calculation Option) قسمت مربوط به سرعت ویژه پمپ (Specific Speed) فعال خواهد شد.

این قسمت برای محاسبه NPSHR (Net Positive Suction Head Required) مورد استفاده واقع می شود.

$$NPSHR = \left(\frac{NQ^{0.5}}{N_{SS}} \right)^{\frac{4}{3}}$$

می باشند که در ادامه به تعریف آنها اشاره خواهد شد. N_{SS} (سرعت ویژه در ورودی پمپ) و N_S (سرعت ویژه) دو پارامتر بسیار مهم طراحی پمپ ها برای هدف های مورد نظر

کاربرد $NPSHR$ و $NPSHA$

$NPSH$ برابر مقدار هد لازم در ورودی پمپ است که باید وجود داشته باشد تا بتواند بر تمام افت فشار های ناشی از تلفات مکانیکی حاصل از سرعت سیال و افت فشار های ناشی از لوله کشی و اتصالات مسیر غلبه نماید تا مایع در ورودی پمپ تبخیر نشود. پدیده کاویتاسیون یکی از مشکلات عمده پمپ ها می باشد. زمانیکه فشار پمپ برابر با فشار بخار سیال شود مایع شروع به جوشیدن کرده و حباب تولید می شود. در نتیجه حباب های تولید شده به پروانه پمپ برخورد کرده و باعث ایجاد سرو صدا و خرابی پروانه ها می شود.

برای تحلیل شرایط بروز پدیده کاویتاسیون در پمپهای گریز از مرکز لازم است که هم شرایط قسمت مکش پمپ از نظر فشار (ارتفاع) و هم مشخصه های پمپ مورد استفاده از نظر وجود حداقل شرایط مورد نیاز جهت ممانعت از بروز این پدیده مورد بررسی قرار گیرد. جهت سهولت در تحلیل فوق $NPSH$ به دو دسته تقسیم می شود:

الف: ارتفاع مثبت خالص قابل دسترس در قسمت مکش پمپ ($NPSHA$)

ب: ارتفاع مثبت خالص مورد نیاز در قسمت مکش پمپ ($NPSHR$)

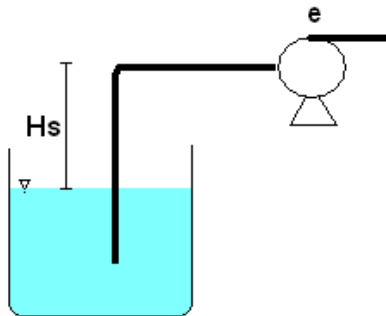
جهت جلوگیری از وقوع پدیده کاویتاسیون می بایست رابطه زیر همواره در پمپ برقرار باشد:

$$NPSHR < NPSHA \quad \text{or} \quad H_S < H_{S_{\max}}$$

تعریف

$NPSH_{min}$:

اگر برای سیستم نشان داده شده در شکل زیر بین نقطه e (نقطه حداقل فشار در داخل پمپ) و سطح مخزن معادله برنولی را برقرار سازیم خواهیم داشت:



$$\frac{P_e}{\gamma} + \frac{V_e^2}{2g} + H_S = \frac{P_{at}}{\gamma} + 0 + 0 + h_L$$

برای اینکه کاویتاسیون رخ دهد باید $P_e = P_V$ طبق تعریف:

$$NPSH_{min} = \frac{V_e^2}{2g} = \frac{P_{at} - P_V}{\gamma} - H_{Smax} \pm h_L$$

در این معادله H_{Smax} حداکثر H_S برای حالت کارکرد بدون کاویتاسیون پمپ می باشد که آنرا از طریق آزمایش های تجربی محاسبه کرده و از روی آن از معادله بالا $NPSH_{min}$ را محاسبه می کنند.

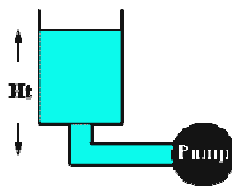
 $NPSH_R$:

$NPSH_R$ به $NPSH$ ای اطلاق می شود که در H_S کوچکتر از H_{Smax} محاسبه شود که مقدار آن بسته به نوع سیال و دمای آن تغییر می کند. در صورتیکه منحنی $NPSH_R$ را نداشته باشیم از رابطه زیر می توان $NPSH_R$ را محاسبه کرد:

$$NPSH_R = \left(\frac{P_{S(min)} - P_V}{\gamma} \right) + \left(\frac{V_S^2}{2g} \right)$$

(Net Positive Suction Head Available): $NPSH_A$

$NPSH_A$ جزء مشخصه های سیستم پمپاژ بوده و به عوامل متعددی نظیر فشار جو، خواص فیزیکی مایع مورد پمپاژ (درجه حرارت، وزن مخصوص، فشار بخار در دمای پمپاژ، ویسکوزیته و ...)، اختلاف سطح انرژی پتانسیل (فشار یا ارتفاع) در منبع مکش تا دهانه چشمه پروانه، تعداد و نوع اتصالات مورد استفاده در قسمت مکش، طول و قطر لوله مکش، دبی جریان و ... بستگی دارد. بنابراین تعیین آن بعهده مهندس طراح فرایند سیستم پمپاژ می باشد. $NPSH_A$ دارای منحنی های سهمی شکل نزولی است که نمودار آنها بر حسب تغییرات دبی رسم می شود. علت نزولی بودن منحنی، افزایش اصطکاک توأم با افزایش دبی می باشد. طبق تعریف $NPSH_A$ برای سیستم زیر عبارتست از:



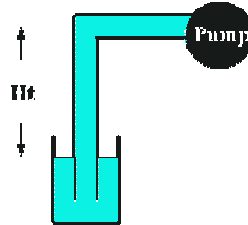
$$NPSH_A = \left(\frac{P_S - P_V}{\gamma} \right) + \left(\frac{V_S^2}{2g} \right) + H_S - h_{FS}$$

P_S : فشار ورودی پمپ (در قسمت مکش)

P_V : فشار بخار سیال در ورودی پمپ (فشار بخار بصورت Raid vapor pressure است).

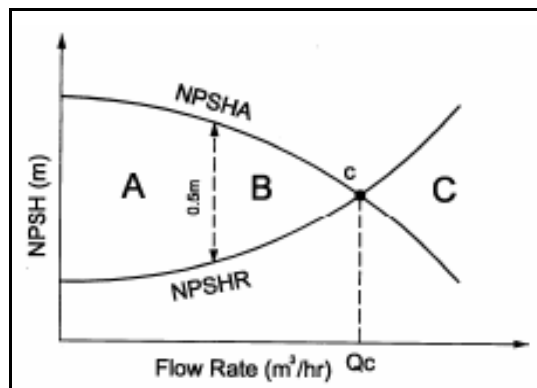
H_S : ارتفاع ستون مایع است. در محاسبات، حداقل ارتفاع ستون مایع (LLL) را باید بکار ببریم.

و برای سیستم زیر عبارتست از:



$$NPSH_A = \left(\frac{P_S - P_V}{\gamma} \right) + \left(\frac{V_S^2}{2g} \right) - H_S - h_{FS}$$

وجه مشترک $NPSH_R$ با $NPSH_A$ وابستگی هر دو آنها به دبی جریان مایع است. با این تفاوت که اگر $NPSH_R$ با افزایش دبی افزایش می یابد، $NPSH_A$ با افزایش دبی کاهش می یابد. به دلیل همین تفاوت رفتاری است که می توان گفت یکی از عوامل اصلی بروز کاویتاسیون در پمپ های گریز از مرکز بالا بودن دبی جریان است.



مناطق بهره برداری از پمپ در شکل فوق به سه ناحیه تقسیم شده است. در ناحیه A چون $NPSH_A$ به اندازه کافی از $NPSH_R$ بزرگتر است، امکان استفاده از پمپ به خوبی میسر است. ناحیه B ناحیه احتیاط است و ممکن است با بروز کوچکترین مشکل (نظیر گرفتگی در مسیر مکش) پمپ در شرایط کاویتاسیون قرار گیرد. در ناحیه C هم چون $NPSH_A$ از $NPSH_R$ کمتر است کاویتاسیون حتمی است. نقطه تلاقی دو منحنی هم به نام نقطه کار^۱ می نامند.

سرعت ویژه در پمپ ها :

با توجه به سرعت مخصوص پمپها، در مورد تعداد پمپ های لازم تصمیم گیری می شود. سرعت مخصوص ارتباطی به اندازه پمپ ندارد و در مقایسه کردن طراحی های مختلف پمپ می تواند مفید واقع شود. سرعت مخصوص تشابه هندسی پمپ ها را نشان می دهد و ملاکی برای دسته بندی رفتاری پمپهای سانتریفیوژ است. سرعت ویژه پمپ در خروجی پمپ (Specific Speed) برابر است با:

$$N_s = \frac{NQ^{0.5}}{\left(\frac{\text{Head}}{m} \right)^{0.75}}$$

که در آن:

Q : دبی حجمی در ورودی پمپ ($\frac{m^3}{hr}$ یا $\frac{Gal}{min}$)

N : سرعت شفت پمپ (rpm)

$Head$: هد ایجاد شده در طول پمپ (متر یا فوت)

m : تعداد پمپ های سری

و در توربین ها :

$$N_s = \frac{N BHP^{0.5}}{Head^{1.25}}$$

BHP : اسب بخار تولید شده توسط توربین

$Head$: کل هد دینامیکی در طول توربین

و سرعت ویژه در ورودی پمپ برابر است با:

$$N_{SS} = \frac{NQ^{0.5}}{NPSHR^{0.75}}$$

N_{SS} (Suction Specific Speed) معیاری برای عملکرد مناسب پمپ های سانتریفیوژی به منظور جلوگیری از پدیده کاویتاسیون است و مقدار طراحی آن چیزی بین ۶۰۰۰-۱۲۰۰۰ در واحد انگلیسی است. مقدار معمول آن برای طراحی ها ۸۵۰۰ است.

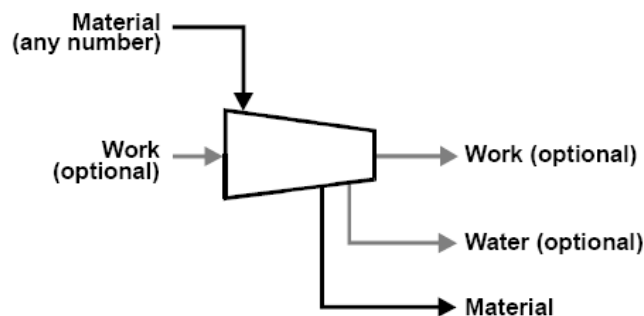
در صفحه Efficiencies، می توان رابطه بازده با جریان را به صورت یک معادله سه جمله ای یا جدول وارد سیستم کرد. در اینصورت نیازی به وارد کردن مقدار بازدهی در صفحه Specification نیست. همچنین در صفحه NPSHR، می توان رابطه NPSHR را با جریان به صورت یک معادله سه جمله ای یا جدول وارد سیستم کرد. در اینصورت نیازی به وارد کردن مقدار NPSHR از رابطه ذکر شده بالایی محاسبه نخواهد شد.

Compr -

این مدل برای شبیه سازی موارد زیر به کار برده می شود:

- کمپرسور پلی تروپیک از نوع سانتریفیوژ
- کمپرسور پلی تروپیک از نوع جابجایی مثبت
- کمپرسور آیزنتروپیک
- توربین آیزنتروپیک

کمپرسور برای افزایش فشار جریان تراکم پذیر استفاده می شود و در آن کار محوری به انرژی درونی گاز تبدیل میشود و توربین گازی برای کاهش فشار جریان تراکم پذیر استفاده می شود و در آن انرژی درونی گاز به کار محوری تبدیل میشود.



با دو بار کلیک بر روی آیکن Compr صفحه Setup Specification ظاهر خواهد شد.

در قسمت Type نوع کمپرسور مورد نظر را می توان انتخاب نمود که شامل موارد زیر می شوند:

این مدل برای شبیه سازی کمپرسورهای تک مرحله ای کاربرد دارد. شما می توانید کمپرسورهای سانتریفیوژ پلی تروپیک را با استفاده از روش های ASME یا GPSA مدل کنید اما برای کمپرسورهای سانتریفیوژ آیزنتروپیک می توانید از هر کدام از روش های ASME ، GPSA و MOLLIER استفاده کنید. از دوگزینه آخر نیز برای مدلسازی کمپرسورهای جابجایی مثبت استفاده می شود. برای مدل کردن توربین های گازی با استفاده از مدل Compr فقط روش آیزنتروپیک قابل استفاده است. از نظر دقت محاسباتی روش ASME پیچیده تر از روش GPSA است و روش MOLLIER پیچیده تر از هر دوی آنهاست. در روش GPSA محاسبات با دو فرض زیر قابل انجام است:

- شرایط ورودی کمپرسور
- متوسط شرایط ورودی و خروجی کمپرسور

وارد کردن یکی از اطلاعات زیر برای شبیه سازی کمپرسورها الزامی است :

- فشار خروجی
- میزان افزایش فشار کمپرسور
- نسبت فشار خروجی به فشار ورودی
- توان کمپرسور
- استفاده از منحنی مشخصه (Performance) کمپرسور

در صورتیکه از گزینه آخری استفاده نماییم می بایست اطلاعات مربوط به منحنی مشخصه کمپرسور را نیز وارد نماییم. این منحنی ها در مدل Compr به دو صورت ابعادی و بدون بعد وارد سیستم می شوند. فرم ابعادی آن به صورت هد در برابر شدت جریان یا توان و فرم بی بعد آن به صورت ضریب هد در برابر ضریب جریان رسم می شود.

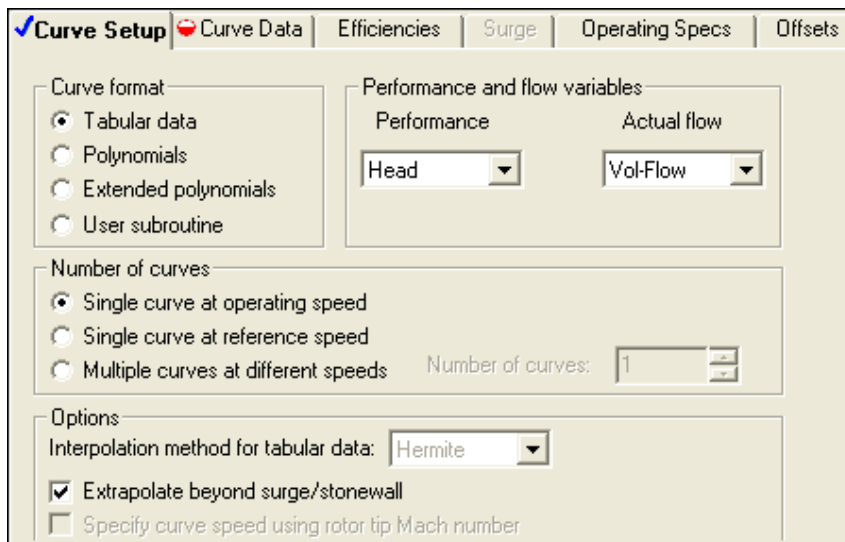
- طبق تعریف ضریب هد برابر است با :

$$H_c = \frac{Head \times g}{(\pi \times Shaft\ Speed \times Im\ peller\ Diameter)^2}$$

- طبق تعریف ضریب جریان برابر است با :

$$F_c = \frac{Volumetric\ Flow\ Rate\ at\ Suction\ Condition}{Shaft\ Speed \times (Im\ peller\ Diameter)^3}$$

مدل Compr قادر به اعمال منحنی مشخصه برای کاربرد توربین نمی باشد. هنگامی که برای سرعت های مختلف گردش کمپرسور ، منحنی های متفاوتی را ارائه می دهیم ، سرعت نیز به عنوان یک متغیر وابسته در مسئله ما وارد می شود. با تعیین سرعت متناظر هر منحنی ، ASPEN متناسب با سرعت داده شده منحنی مناسب را درون یابی کرده و مسئله را حل می کند.



در صفحه Specification میزان بازدهی کمپرسور نیز باید وارد شود. از دو بازدهی آدیاباتیک و پلی تروپیک تنها یکی باید وارد شود. ASPEN دیگری را خود محاسبه می کند. بازدهی پلی تروپیک برابر است با :

$$\eta_p = \frac{\left(\frac{K-1}{K}\right)}{\left(\frac{n-1}{n}\right)}, \quad K = \frac{C_p}{C_v}$$

که در آن n ضریب پلی تروپیک است. اختلاف آنتالپی ورودی و خروجی کمپرسور در این حالت از رابطه زیر محاسبه خواهد شد :

$$\Delta h = \frac{P_{in} V_{in}}{\eta_p \left(\frac{n-1}{n}\right)} \left(\left(\frac{P_{out}}{P_{in}}\right)^{\frac{n-1}{n}} - 1 \right)$$

و بازده آیزنتروپیک برابر خواهد بود با :

$$\eta_s = \frac{h_{out}^s - h_{in}}{h_{out} - h_{in}}$$

که در آن h_{out}^s آنتالپی مولی جریان خروجی با فرض فشرده‌گی آیزنتروپیک است. و بازدهی مکانیکی عبارت خواهد بود با:

$$\eta_m = \frac{IHP}{BHP}$$

$IHP = F\Delta h$ Indicated horse power

$BHP = \text{Brake horse power}$

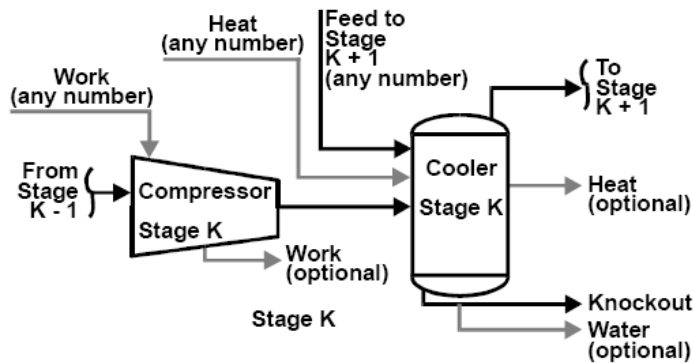
$F = \text{Molar flow}$

MCompr –

این مدل برای شبیه سازی کمپرسورها و توربین های چند مرحله ای استفاده می شود.

این مدل برای شبیه سازی موارد زیر به کار برده می شود:

- کمپرسور چند مرحله ای پلی تروپیک از نوع سانتریفیوژ
- کمپرسور چند مرحله ای پلی تروپیک از نوع جابجایی مثبت
- کمپرسور چند مرحله ای آیزنتروپیک
- توربین چند مرحله ای آیزنتروپیک



اگر جریان کار و انرژی ورودی و خروجی به مراحل مختلف کمپرسور اعمال شود ، مقدار جریان کار و انرژی خروجی برابر با تفاضل کار و انرژی ورودی با کار و انرژی مصرفی آن مرحله از کمپرسور خواهد بود. به هر تعداد ورودی و خروجی جریان کار و انرژی می توان به مراحل مختلف کمپرسور اعمال کرد ولی برای خروجی کمپرسور به صورت Global می توان یک جریان کار یا انرژی اعمال کرد.

در این مدل بین تمامی مراحل کمپرسور یا توربین سرد کن های میانی وجود دارد. در هر کدام از این سردکن های میانی محاسبات تعادل یک ، دو و سه فازی را می توان انجام داد. به غیر از کولر مرحله آخر ، برای هر کدام از کولرهای میانی یک جریان خروجی مایع وجود دارد.

همانند مدل Compr در این مدل نیز شما می توانید کمپرسورهای سانتریفیوژ پلی تروپیک را با استفاده از روش های ASME یا GPSA و برای کمپرسورهای سانتریفیوژ آیزنتروپیک از هر کدام از روش های ASME ، GPSA و MOLLIER استفاده کنید.

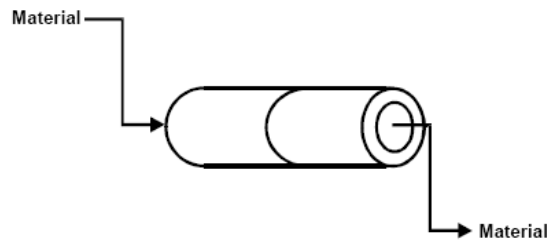
وارد کردن یکی از اطلاعات زیر برای شبیه سازی کمپرسورهای چند مرحله ای الزامی است :

- فشار خروجی از مرحله آخر
- شرایط خروجی برای هر مرحله کمپرسور
- استفاده از منحنی های مشخصه (Performance) کمپرسور برای تعیین شرایط خروجی

در صورتیکه از گزینه آخری استفاده نماییم می بایست اطلاعات مربوط به منحنی مشخصه کمپرسور را نیز وارد نماییم. این منحنی ها در مدل MCompr به دو صورت ابعادی و بدون بعد وارد سیستم می شوند. فرم ابعادی آن به صورت هد در برابر شدت جریان یا توان و فرم بی بعد آن به صورت ضریب هد در برابر ضریب جریان رسم می شود. مدل MCompr قادر به اعمال منحنی مشخصه برای کاربرد توربین نمی باشد. هنگامی که برای سرعت های مختلف گردش کمپرسور ، منحنی های متفاوتی را ارائه می دهیم ، سرعت نیز به عنوان یک متغیر وابسته در مسئله ما وارد می شود. با تعیین سرعت متناظر هر منحنی ، ASPEN متناسب با سرعت داده شده منحنی مناسب را درون یابی کرده و مسئله را حل می کند. تعریف بازدهی ها در این مدل عیناً همانند مدل Compr است.

Pipe –

از بلوک Pipe برای شبیه سازی (محاسبه افت فشار و انتقال حرارت) یک لوله به همراه اتصالات آن استفاده می شود. جریان داخل لوله فرض می شود که جریان یک بعدی ، پایدار و توسعه یافته باشد و از اثرات جریان در ورودی لوله صرف نظر خواهد شد.



برای شبیه سازی بیش از یک لوله از بلوک Pipeline استفاده می شود. از مدل Pipe برای شبیه سازی موارد زیر استفاده می شود:

- محاسبه شرایط ورودی (با معلوم بودن شرایط خروجی) و محاسبه شرایط خروجی (با معلوم بودن شرایط ورودی)
- محاسبه افت فشار برای جریان های یک ، دو و سه فازی (بخار-مایع-مایع)

با دو بار کلیک روی آیکن Pipe صفحه Pipe Parameters ظاهر خواهد شد:

اطلاعات لازم در این صفحه از قبیل طول لوله ، قطر داخلی یا Schedule لوله ، موقعیت لوله (افقی ، عمودی یا زاویه دار بودن) ، زبری لوله و ضریب سائیدگی سرعت باید وارد شوند.

تعریف:

سرعت سائیدگی سرعتی است که اگر سرعت سیال به آن برسد لوله شروع به سائیدگی می کند. صفحه بعدی صفحه Thermal Specification جهت ورود مشخصات حرارتی لوله می باشد. انواع حالت های ممکن به شرح ذیل می باشند:

• دمای ثابت (در طول لوله)

• پروفایل خطی دما:
$$T_2 = \frac{T_2 - T_1}{L} x + T_1$$

• آدیاباتیک : $\Delta H = 0$

• محاسبات موازنه انرژی که به دو صورت زیر قابل انجام است:

- محاسبه تغییرات دمایی در طول لوله با معلوم بودن فلاکس حرارتی کل عبوری از لوله
- محاسبه تغییرات دمایی در طول لوله با معلوم بودن دمای محیط و ضریب انتقال حرارت

The screenshot shows the 'Thermal Specification' dialog box. Under 'Thermal specification type', 'Perform energy balance' is selected. Under 'Energy balance parameters', 'Inlet ambient temperature', 'Outlet ambient temperature', and 'Heat transfer coefficient' are set to 'F', 'F', and 'Btu/hr-sqft-R' respectively. The 'Heat flux' field is set to 'Btu/hr-ft'.

صفحه بعدی صفحه Fitting است که در آن تعداد اتصالات و نحوه اتصال آنها به لوله مشخص می شود.

The screenshot shows the 'Fittings' dialog box. Under 'Connection type', 'Flanged welded' is selected. Under 'Number of fittings', all five categories (Gate valves, Butterfly valves, Large 90 degrees elbows, Straight tees, Branched tees) are set to 0. The 'Miscellaneous L/D' field is also set to 0.

کلاً دو نوع اتصالات در لوله ها وجود دارد:

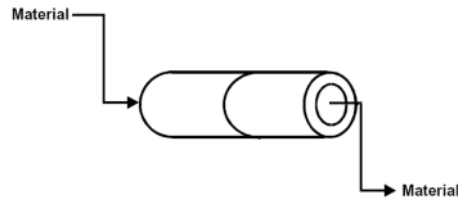
- اتصالات فلنجی
- اتصالات جوشی

که با انتخاب یکی از این دو گزینه نوع و تعداد اتصالات را در قسمت مربوطه وارد می کنیم. جهت تعیین نوع و روش انجام محاسبات از قسمت Data Browser , در زیر شاخه بلاک Pipe گزینه ADVANCE را انتخاب می کنیم. صفحه Calculation Option ظاهر خواهد شد. در این صفحه با وارد کردن دمای ورودی فشار خروجی لوله محاسبه می شود و با وارد کردن مشخصات دما و فشار خروجی فشار ورودی لوله محاسبه خواهد شد:

و صفحه بعدی پنجره انتخاب روش های محاسبه افت فشار و میزان انباشتگی مایع در لوله می باشد:

Pipeline –

از بلوک Pipeline برای شبیه سازی (محاسبه افت فشار و انتقال حرارت) یک یا چندین لوله (شبکه لوله ها) به همراه اتصالات آن استفاده می شود. جریان داخل لوله فرض می شود که جریان یک بعدی ، پایدار و توسعه یافته باشد و از اثرات جریان در ورودی لوله صرف نظر خواهد شد.



با دو بار کلیک روی آیکن Pipeline صفحه Setup Configuration ظاهر خواهد شد:

محاسبات مدل Pipeline به دو صورت زیر انجام می شود:

- محاسبه فشار خروجی با معلوم بودن فشار ورودی و رابطه محاسبه افت فشار
- محاسبه فشار ورودی با معلوم بودن فشار خروجی و رابطه محاسبه افت فشار

جهت محاسبات انتقال حرارتی لوله در قسمت Thermal Option سه حالت زیر وجود دارد:

- محاسبات موازنه انرژی با محیط (در این صورت باید دمای محیط و ضریب انتقال حرارت هر قسمت لوله مشخص باشد)
- دمای ثابت (در طول لوله)

• پروفایل خطی دما:
$$T_2 = \frac{T_2 - T_1}{L} x + T_1$$

در قسمت Segment Geometry مشخصات قسمت های مختلف خط لوله به دو صورت زیر وارد می شوند:

- **Enter node coordinates** : در این حالت مشخصات ابتدا و انتهای هر کدام از لوله ها در صفحه Connectivity وارد می شود.
- **Enter Segment length and angle** : در این حالت طول و زاویه هر کدام از لوله ها نسبت به افق در صفحه Connectivity وارد می شود.

در حالت Enter node coordinates

Segment Data

Segment No. 1 Inlet node: Outlet node:

Node parameters

	Inlet node		Outlet node	
X coordinate:		ft		ft
Y coordinate:		ft		ft
Elevation:		ft		ft
Ambient temp:		F		F
C-Erosion:	100		100	

Segment parameters

Diameter:		ft	Annular OD:		ft
U-Value:		Btu/hr-sc	Heat flux:		Btu/hr-ft
Roughness:	0.00015	ft	Efficiency:	1	

Next Close

Lets you type the segment Outlet Node name.

و در حالت Enter Segment length and angle

Segment Data

Segment No. 2 Inlet node: Outlet node:

Node parameters

	Inlet node		Outlet node	
Ambient temp:		F		F
C-Erosion:	100		100	

Segment parameters

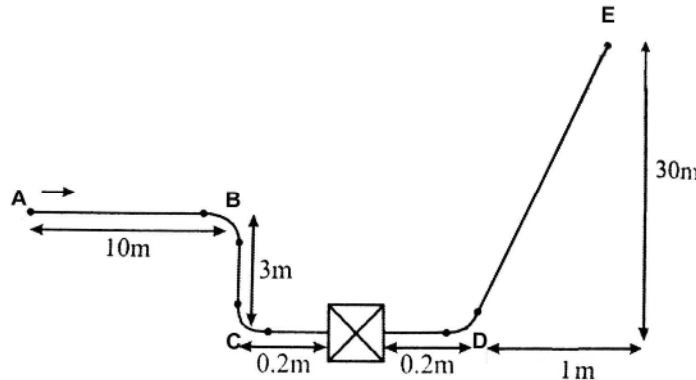
Length:		ft	Angle:	0	deg
Diameter:		ft	Annular OD:		ft
U-Value:		Btu/hr-sc	Heat flux:		Btu/hr-ft
Roughness:	0.00015	ft	Efficiency:	1	

Next Close

Segment number.

تمرین ۱

بخار آب با فشار 500 kpa و دمای 180°C و دبی جرمی $140 \frac{\text{kg}}{\text{hr}}$ از نقطه A وارد سیستم می شود و پس از عبور از یک مبدل حرارتی از نقطه E خارج می گردد. قطر لوله در تمام مسیر ۲ اینچ (Schedule=160) است. با توجه به مسیر موجود، فشار و دما در نقطه تحویل E چقدر است؟ جنس لوله و اتصالات در تمام مسیر S.S است. زبری مطلق لوله را برابر 0.04572 میلی متر در نظر بگیرید. دمای محیط 30°C است. افت دما در مبدل 30°C و افت فشار آن در حدود 100 kpa است. ضریب کلی انتقال حرارت را برابر $2 \frac{\text{Btu}}{\text{ft}^2 \cdot \text{hr} \cdot ^\circ \text{F}}$ در نظر بگیرید.

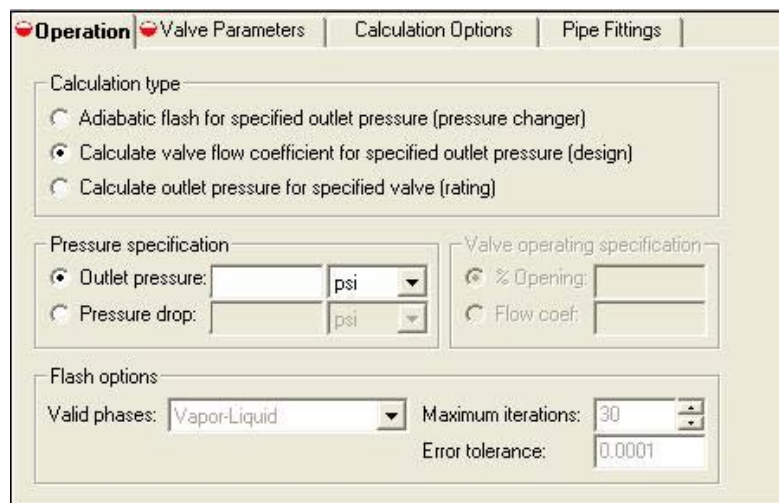


Valve -

از این بلوک برای مدل کردن انواع شیرها استفاده می شود.



نرم افزار ASPEN برای محاسبات مربوط به شیرها مطابق با روش (Instrument Society Of America, 1985) عمل می کند که توضیحات مربوط به آن مفصلاً در ادامه شرح داده خواهد شد. جهت ورود به صفحه اصلی شیرها دو بار روی آن کلیک می نمایم. اولین صفحه، صفحه Operation ظاهر خواهد شد:



همانطور که در این صفحه هم ملاحظه می شود، بلوک شیر در ASPEN توانایی انجام سه نوع محاسبه را دارد:

۱. Adiabatic flash for specified outlet pressure

با انتخاب این گزینه کافیست که در قسمت Pressure Specification, فشار خروجی یا افت فشار کل را مشخص کنیم. در این حالت شیر محاسبات را با فرض آدیاباتیک انجام می دهد و شرایط جریان خروجی را مشخص می کند.

۲. Calculate valve flow coefficient for specified outlet pressure (design)

با انتخاب این گزینه لازمست که در قسمت Pressure Specification, فشار خروجی یا افت فشار کل را مشخص کنیم. در این حالت صفحه valve parameter فعال می شود. در این صفحه می توان از قسمت library valve یک شیر را انتخاب کرد. این library بر اساس شیرهای ساخت شرکت Neles-Jamesbury گرد آوری شده است.

با تعیین نوع و سایز شیر انتخابی پارامترهای طراحی شیر از قبیل C_V , X_L , F_I فراخوانی می شوند. در غیر اینصورت می توان داده های C_V , X_L , F_I مربوط به درصدهای مختلف باز بودن شیر را (حداقل چهار سری) بر اساس اطلاعات در دسترس شیر مورد نظر وارد جدول نمود. برای حالتیکه داده های در دسترس ما فقط شامل اطلاعات مربوط به شرایط عملیاتی شیر باشند و یا مقادیر داده های C_V , X_L , F_I در مقابل میزان تغییرات باز شدن شیر ثابت باشند, در اینصورت در قسمت Valve Characteristics, فاکتور نسبت افت فشار (X_L), فاکتور بازیافت فشار (F_I), مشخصه شیر (خطی, سهموی و ...) و میزان ضریب جریان (C_V) را برای حالت ۱۰۰٪ بازی شیر مشخص می نماییم. مشخصه های شیر در ASPEN بر مبنای انتخاب یکی از گزینه های شش گانه جدول زیر است:

Type	Equation [†]
Linear	$V = P$
Parabolic	$V = 0.01P^2$
Square Root	$V = 10.0\sqrt{P}$
Quick Opening	$V = \frac{10.0P}{\sqrt{(1.0 + 9.9 \times 10^{-3} P^2)}}$
Equal Percentage	$V = \frac{0.01P^2}{\sqrt{2.0 - 1.0 \times 10^{-8} P^4}}$
Hyperbolic	$V = \frac{0.1P}{\sqrt{(1.0 - 9.9 \times 10^{-5} P^2)}}$

[†] Where:
 P = Valve opening as a percentage of maximum opening
 V = Flow coefficient as a percentage of flow coefficient at maximum opening

در این جدول معادلات تابعیت فشار و سرعت بر مبنای نوع شیر انتخابی ملاحظه می شود. صفحه بعدی صفحه Calculation Option می باشد:

The screenshot shows the 'Calculation Options' dialog box. The 'Calculation Options' tab is selected. The 'Calculation options' section has 'Check for choked flow' checked and 'Calculate cavitation index' unchecked. The 'Minimum outlet pressure' section has 'Use lower limit for simulation' selected. The 'Valve convergence parameters' section has 'Maximum iterations' set to 50 and 'Error tolerance' set to 0.0001.

در این صفحه به کاربر اجازه داده می شود تا با انتخاب گزینه های مربوطه شرایط ایجاد پدیده های شوک و کاویتاسیون را در شیر کنترل بررسی نماید. صفحه آخری صفحه Pipe Fitting است که در مواقعی که قطر لوله با قطر شیر متفاوت است استفاده می شود. در این حالت ضریب جریان شیر متأثر از این تغییر قطر می شود که لازم است این صفحه تکمیل شود.

The screenshot shows the 'Pipe Fittings' dialog box. The 'Pipe Fittings' tab is selected. The checkbox 'Include effect of pipe fittings head loss on valve flow capacity' is checked. Under 'Valve and pipe diameters', there are three rows for 'Valve inlet diameter', 'Inlet pipe diameter', and 'Outlet pipe diameter', each with a text input field and a unit dropdown menu set to 'ft'.

۳. Calculate outlet pressure for Specified Valve (Rating)

برای حالتیکه هدف محاسبه میزان افت فشار ایجاد شده برای یک شیر مشخص باشد، از این گزینه استفاده می کنیم. در این حالت در قسمت Valve Operating Specification درصد باز بودن شیر یا مقدار ضریب جریان شیر را وارد می کنیم:

<input checked="" type="checkbox"/> Operation	<input checked="" type="checkbox"/> Valve Parameters	<input checked="" type="checkbox"/> Calculation Options	<input type="checkbox"/> Pipe Fittings
<p>Calculation type</p> <p><input type="radio"/> Adiabatic flash for specified outlet pressure (pressure changer)</p> <p><input type="radio"/> Calculate valve flow coefficient for specified outlet pressure (design)</p> <p><input checked="" type="radio"/> Calculate outlet pressure for specified valve (rating)</p>			
<p>Pressure specification</p> <p><input checked="" type="radio"/> Outlet pressure: <input type="text" value="10"/> <input type="text" value="psi"/></p> <p><input type="radio"/> Pressure drop: <input type="text" value=""/> <input type="text" value="psi"/></p>		<p>Valve operating specification</p> <p><input checked="" type="radio"/> % Opening: <input type="text" value="10"/></p> <p><input type="radio"/> Flow coef: <input type="text" value=""/></p>	
<p>Flash options</p> <p>Valid phases: <input type="text" value="Vapor-Liquid"/></p> <p>Maximum iterations: <input type="text" value="30"/></p> <p>Error tolerance: <input type="text" value="0.0001"/></p>			

صفحات بعدی را هم بر اساس اطلاعات موجود مطابق آنچه که قبلاً توضیح داده شد پر می کنیم.

تمرین

جریانی از آب در فشار 50 psig و دمای 290°F ، با دبی 6000 lb/hr از یک لوله ۴ اینچی عبور می کند. یک شیر ۳ اینچی در مسیر این جریان قرار دارد. جریان خروجی از این شیر با فشار 41 psig وارد لوله ۴ اینچی می شود. در چه فشاری از جریان خروجی پدیده شوک اتفاق می افتد؟



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

ASPEN PLUS

جلسه دهم

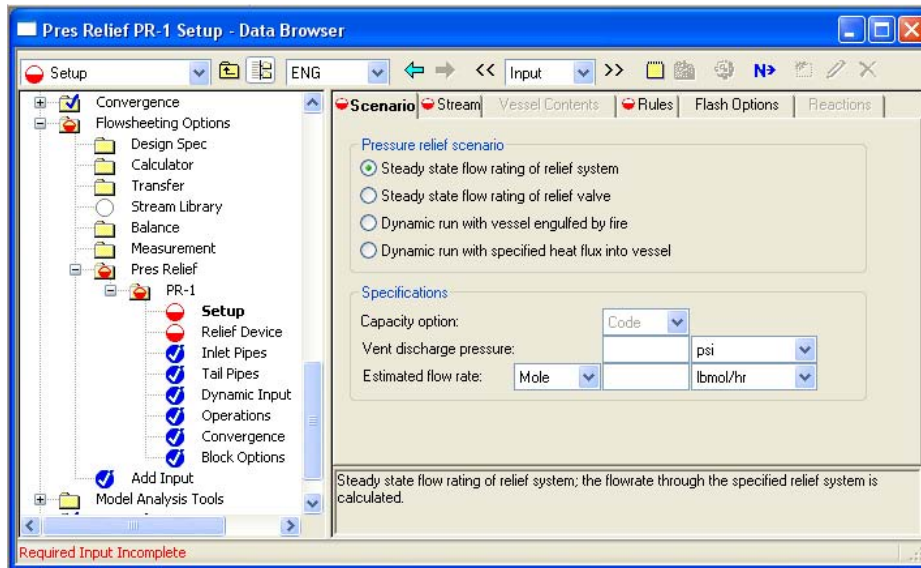
- آشنایی با روش شبیه سازی شیرهای اطمینان و فشار شکن در نرم افزار Aspen Plus
- تمرین

شبیه سازی شیرهای اطمینان در نرم افزار Aspen Plus

در نرم افزار Aspen Plus به دو منظور از شیرهای اطمینان استفاده می شود:

- ۱- تعیین شدت جریان پایا در سیستم های فشار شکن
- ۲- مدل کردن دینامیکی طرف هایی که فشار آنها در اثر پدیده هایی مانند آتش سوزی یا فلاکس حرارتی ورودی به ظرف یا وقوع واکنش بالا می روند.

جهت کار با سیستم های فشار شکن در نرم افزار Aspen Plus مطابق شکل زیر باید از مسیر Flowsheeting Option\Pres Relief یک صفحه جدید باز کرد:



با استفاده از فرم Setup در صفحه Scenario می توان پارامترهای زیر را انتخاب کرد:

- ۱- نوع سناریو (سناریو به وضعیت عمل کردن سیستم فشار شکن اطلاق می شود).
- ۲- برای تعیین ظرفیت تجهیز فشار شکن دو روش قابل انتخاب است:
 - Code: با انتخاب این حالت ظرفیت تجهیز طبق استاندارد ASME Code مجدداً محاسبه و چک می شود.
 - Actual: با انتخاب این حالت ظرفیت تجهیز انتخاب شده از روی استاندارد چک نمی شود و بهترین تخمین برای جریان واقعی از سیستم از روی ظرفیت شیر محاسبه می شود.
- ۳- فشار تخلیه خروجی^۱
- ۴- شدت جریان تخمینی^۲

در صفحه Scenario در قسمت Pressure relief scenario چهار سناریو به شرح ذیل قابل انتخاب است:

۱. Steady state flow rating of relief system

با انتخاب این سناریو می توان دبی جریان را با توجه به ترکیبات و سیستم ایمنی انتخاب شده محاسبه کرد. در صورت انتخاب این سناریو باید شدت جریان تخمینی تخلیه، مشخصات لوله کشی، ترکیب درصد و شرایط جریان خوراک وارد برنامه شوند.

۲. Steady state flow rating of relief valve

با انتخاب این سناریو می توان دبی جریان عبوری از شیر را با توجه به ترکیبات و شرایط داده شده در ورودی شیر محاسبه کرد. این سناریو ساده ترین سناریو است و مشابه سناریوی قبلیست با این تفاوت که هیچ گونه لوله کشی در آن منظور نمی شود.

1 - Discharge pressure
2 - Estimated flow rate

۳. Dynamic run with vessel engulfed by fire

از این سناریو برای مدل کردن یک ظرف که دچار آتش سوزی شده است استفاده می‌شود. در این مدل باید اطلاعات زیر وارد برنامه شوند:

- هندسه ظرف
- ترکیبات داخل ظرف

در این حالت نرم افزار انرژی ورودی به ظرف را بر طبق استانداردهای زیر محاسبه می‌کند:

- NFPA-30
- API-520
- API-2000

روابط محاسبه کل حرارت جذب شده حریق طبق استانداردهای مختلف

API-2000 و NFPA-30	
محدوده سطح (ft^2)	حرارت جذب شده $\left(\frac{Btu}{hr}\right)$
$20 < A_{Wet} < 200$	$Q = F \times 20,000 \times A_{Wet}$
$200 < A_{Wet} < 1000$	$Q = F \times 199,300 \times A_{Wet}^{0.566}$
$1000 < A_{Wet} < 2800$	$Q = F \times 963,400 \times A_{Wet}^{0.338}$
$2800 < A_{Wet}$	$Q = F \times 21,000 \times A_{Wet}^{0.82}$
For NFPA-30 , $Q_{max}=14,090,000$ at 2800 square feet if operating pressure < 1 PSIG	
API-520	
$Q = F \times 34,500 \times A_{Wet}^{0.82}$ (the default credit factor being 1)	

نرم افزار فرض می‌کند انرژی محاسبه شده ورودی طی زمان تخلیه ظرف ثابت است. در این حالت مطابق جدول زیر نرم افزار از فاکتورهای اعتبار^۱ برای تخلیه ظرف^۲، پاشیدن آب^۳، تجهیزات اطفاء حریق^۴ و عایق^۵ برای کاهش انرژی ورودی، اگر طبق استاندارد انتخاب شده عملی باشد، استفاده می‌کند.

محاسبه فاکتور اعتبار در استانداردهای API-52, API-2000, NFPA-300

Type	NFPA-30	API-2000	API-520
Insulation only	0.3	$F=K(1660-TF)/21,000t$ You must specify F	Same as API-2000
Drainage only	0.5 (Area > 200 sq. ft.)	1	Not defined
Water and drainage	0.3	1	Not defined
Water, insulation, and drainage	0.15 (Area > 200 sq. ft.)	INSUL	Not defined
Insulation and drainage	0.15 (Area > 200 sq. ft.)	Not defined	Not defined
Drainage and prompt firefighting effort	No credit	Not defined	0.6*INSUL
Portable	No credit factors allowed	Not defined	Not defined

- 1 - Credit factors
- 2 - Drainage
- 3 - Water-spray
- 4 - Fire-fighting equipment
- 5 - Insulation

مطابق جدول بالا وقتی از استانداردهای API-520 و API-2000 استفاده شود فاکتور اعتبار عایق از فرمول زیر محاسبه می شود:

$$F = \frac{k(1660 - T_f)}{21000t}$$

Where:

- k = Thermal conductivity of insulation, in British thermal units per hour per square foot per degree Fahrenheit per inch at mean temperature.
- T_f = Temperature of vessel contents at relieving conditions, in degrees Fahrenheit.
- t = Thickness of insulation, in inches.

Assuming a k value of 4.0, and T_f of 0.0, the following table, which was taken from API-2000, gives values of F for various values of insulation thickness:

Insulation thickness (t)	F Factor
6 inches (152 millimeters)	0.05
8 inches (203 millimeters)	0.037
10 inches (254 millimeters)	0.03
12 inches (305 millimeters) or more	0.025

کاربر می تواند به جای فاکتورهای اعتبار جداگانه، فاکتور اعتبار کلی را وارد برنامه نماید. زمان آتش سوزی نیز باید وارد برنامه شود. در سناریوی دینامیکی محتویات ظرف و شدت تخلیه تابعی از زمان است. نرم افزار سطح خیس، انرژی ورودی و فاکتورهای اعتبار را جداگانه بر اساس سه استاندارد مختلف محاسبه می کند و پروفایل های سیستم تخلیه را در تابعیت از زمان برای یک آتش سوزی تعیین شده تولید می کند. همچنین در این سناریو سطح خیس، بر اساس یکی از استانداردهای انتخاب شده، مطابق جدول زیر محاسبه می شود:

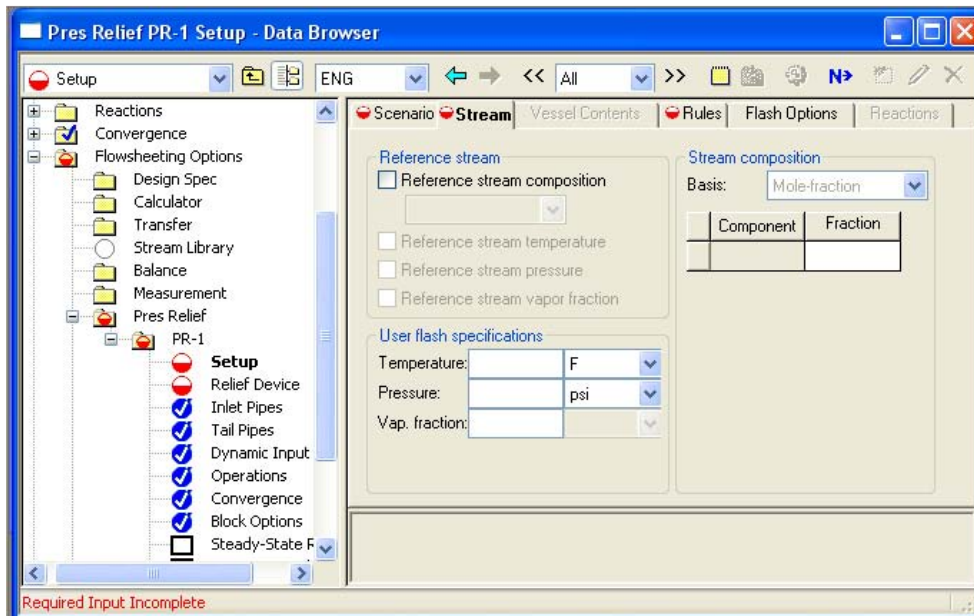
نحوه محاسبه سطح خیس در استانداردهای API-52, API-2000, NFPA-300

Vessel type	NFPA-30	API-2000	API-520
Horizontal	75% of total exposed area	75 % of total area or area to a height of 30 ft. above grade, whichever is greater	Wetted area up to 25 ft. above grade (based on specified liquid level)
Vertical	Area up to 30 ft. above grade. Bottom plate is included if exposed	Area up to 30 ft. above grade. If on ground, bottom plate is not included.	Wetted area up to 25 ft above grade (based on specified liquid level). Bottom plate is included if exposed.
Sphere	55 % of total exposed area	55% of surface area, or surface area to a height 30 ft. above grade, whichever is greater	Up to a maximum horizontal diameter or up to height of 25 ft. above grade, whichever is greater

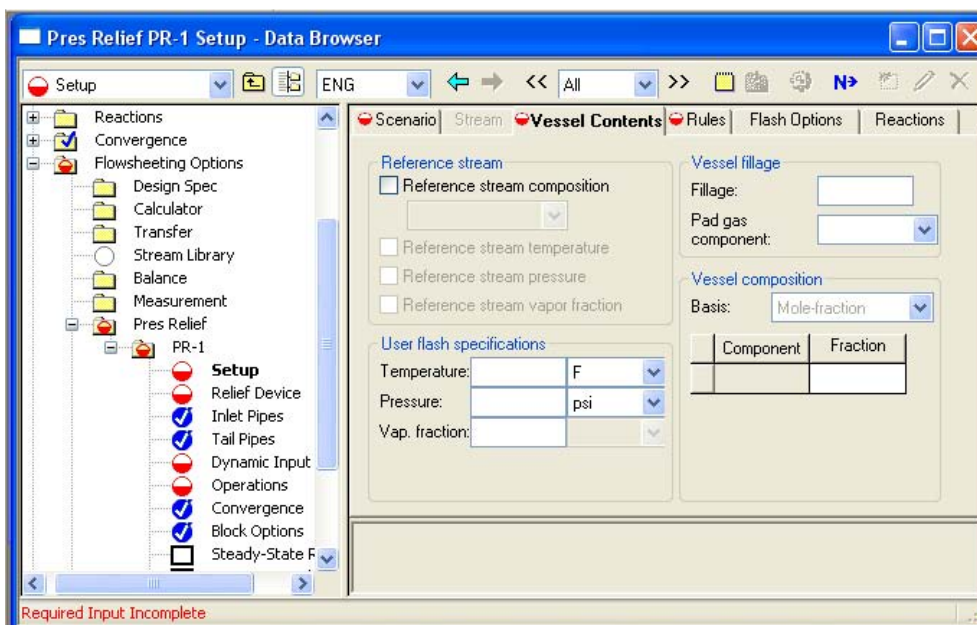
کل حرارت جذب شده طبق استانداردهای مختلف از روابط جدول (۱۰-۸) محاسبه می شود.

۴. Dynamic run with specified heat flux into vessel

در این سناریو نرم افزار پروفایل های سیستم تخلیه را در تابعیت از زمان برای یک انرژی ورودی معین تولید می کند. با استفاده از فرم Setup در صفحه Stream می توان شرایط جریان ورودی را وارد برنامه کرد. لازم به ذکر است که این صفحه زمانی فعال است که یکی از دو سناریوی اول یا دوم انتخاب شده باشد.



با استفاده از فرم Setup در صفحه Vessel Contents می‌توان شرایط ترکیبات داخل ظرف را وارد برنامه کرد. لازم به ذکر است که این صفحه زمانی فعال است که یکی از دو سناریوی سوم یا چهارم انتخاب شده باشد. در قسمت Fillage درصد حجمی مایع داخل ظرف^۱ وارد می‌شود. در قسمت Pad Gas Component هم از لیست ترکیبات می‌توان ترکیب گازی را به منظور رساندن فشار ظرف به فشار مورد نظر اضافه کرد.



با استفاده از فرم Setup در صفحه Rules می‌توان پارامترهای مربوط به افت فشار دستگاه فشار شکن را از جمله موارد زیر وارد برنامه کرد:

۱- در قسمت Maximum Vessel Pressure حداکثر فشار ظرف می‌تواند به صورت درصدی از MAWP وارد برنامه شود یا مقدار آن مستقیماً توسط کاربر وارد برنامه شود.

1 -Liquid Holdup Fraction

- ۲- در قسمت Inlet Pipe Pressure Loss حداکثر افت فشار لوله کشی ورودی تجهیز فشار شکن به صورت درصدی از اختلاف فشار مقرر^۱ وارد برنامه می شود. در صورتی که افت فشار کل در قسمت لوله کشی ورودی بزرگتر یا مساوی درصد اختلاف فشار مقرر باشد برنامه خطا می دهد. اغلب مقدار آن برابر ۳٪ است.
- ۳- در قسمت Tail Pipe Pressure Loss روش محاسبه افت فشار لوله خروجی از تجهیز فشار شکن انتخاب می شود که یکی از سه روش زیر است:

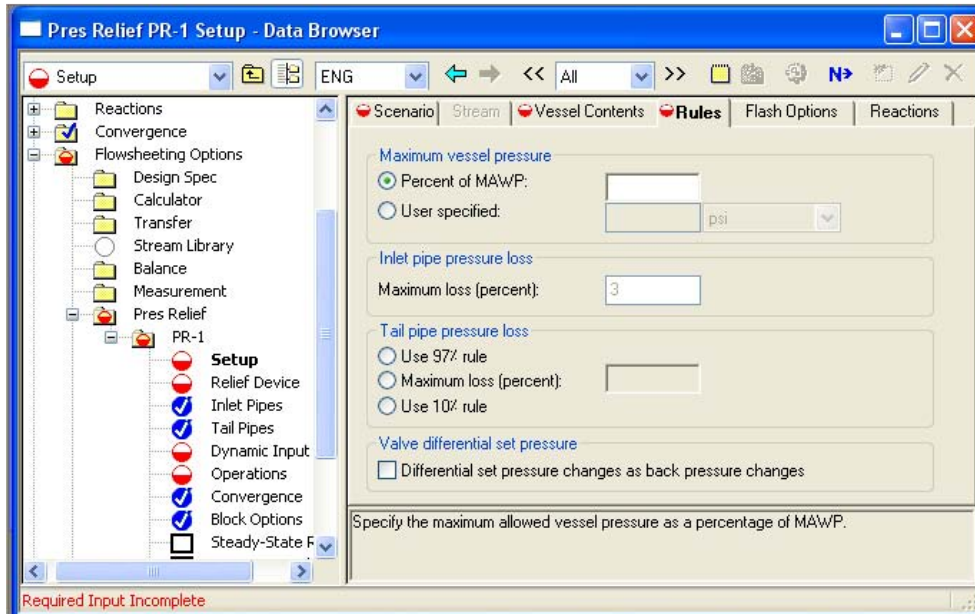
- 97% Rule: بر اساس این قانون برای شیریه که افزایش فشار آن ۱۰٪ بالاتر از فشار مقرر یا برابر آن باشد، می بایست ۹۷٪ اختلاف فشار مقرر هر لحظه در طول شیر برقرار باشد. اگر افت فشار شیر در هر لحظه کمتر از ۹۷٪ اختلاف فشار مقرر باشد برنامه خطا می دهد.
 - X% Rule: بر اساس این قانون ماکزیمم تلفات به صورت درصدی از اختلاف فشار مقرر وارد برنامه می شود و اگر افت فشار محاسبه شده توسط برنامه بیشتر از X% شود برنامه خطا می دهد.
 - 10% Rule: این قانون همان قانون X% است که در آن $X=10$ است.
- بر اساس راهنمای خود نرم افزار مطابق جدول زیر مقادیر X برای برخی از مهمترین انواع شیرهای ایمنی ذکر شده است:

Valve Type	Suggested Tail Piping Rule
Standard spring loaded	97% Rule or X% with X=10
Pop action pilot with unbalanced pilot vented to discharge	97% Rule or X% with X=10
Balanced bellows spring loaded	X% with X=30
Modulating pilot with balanced pilots or pilots vented to atmosphere	X% with X=40

در قسمت Valve Differential Set Pressure اگر چک مارک مربوطه انتخاب شود در اینصورت با تغییرات فشار در قسمت هدر خروجی شیر اختلاف فشار مقرر هم تغییر خواهد کرد. بر اساس راهنمای خود نرم افزار مطابق جدول زیر راهنمای انتخاب این گزینه برای برخی از مهمترین انواع شیرهای ایمنی ذکر شده است:

Valve Type	Does DSP change?
Standard spring loaded	Yes
Pop action pilot with unbalanced pilot vented to discharge	Yes
Balanced bellows spring loaded	No
Modulating pilot with balanced pilots or pilots vented to atmosphere	No

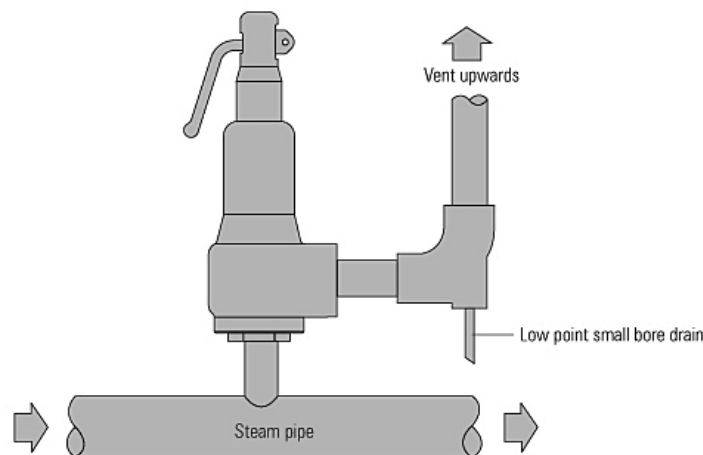
1 -Differential Set Pressure (The pressure differential between the set pressure and the constant superimposed back pressure)



با استفاده از فرم Setup در صفحه Reactions می‌توان هرگونه وقوع واکنشی را در داخل ظرف تعریف کرد. البته این حالت فقط در سناریوی دینامیکی رخ می‌دهد. یک سیستم تخلیه شامل قسمت‌های زیر می‌شود:

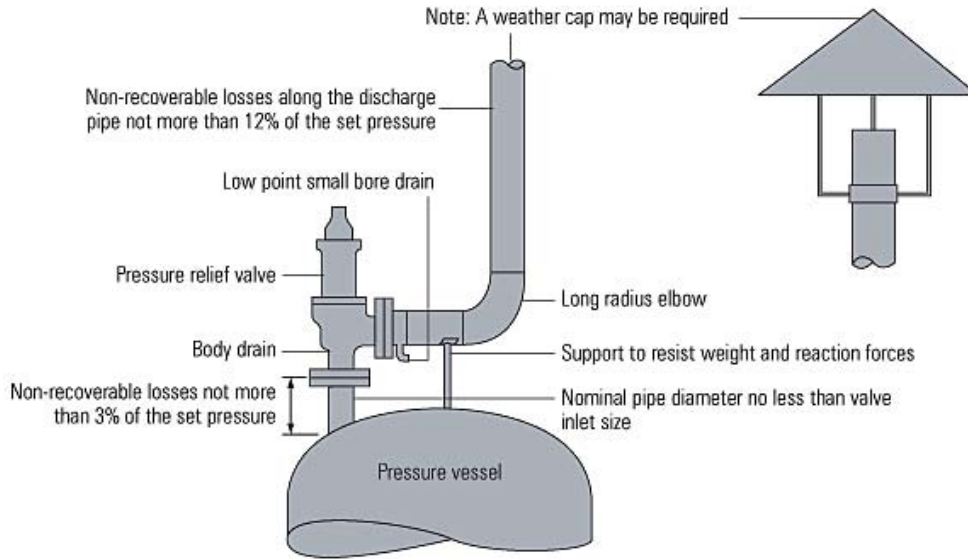
- ۱- گردن ظرف^۱ (گردن ظرف یک تکه لوله می‌باشد که ظرف را به اولین قسمت از لوله ورودی یا به تجهیز فشار شکن متصل می‌کند)
- ۲- یک یا دو قسمت از لوله ورودی^۲
- ۳- تجهیز تخلیه کننده^۳
- ۴- یک یا دو قسمت از لوله خروجی^۴

در شبیه سازی، سیستمی که مدل می‌شود ممکن است شامل یک لوله ورودی بدون تجهیز تخلیه کننده باشد یا شامل تجهیز تخلیه کننده متصل به ظرف و بدون لوله ورودی باشد. قرار دادن لوله‌های خروجی اختیاری است.

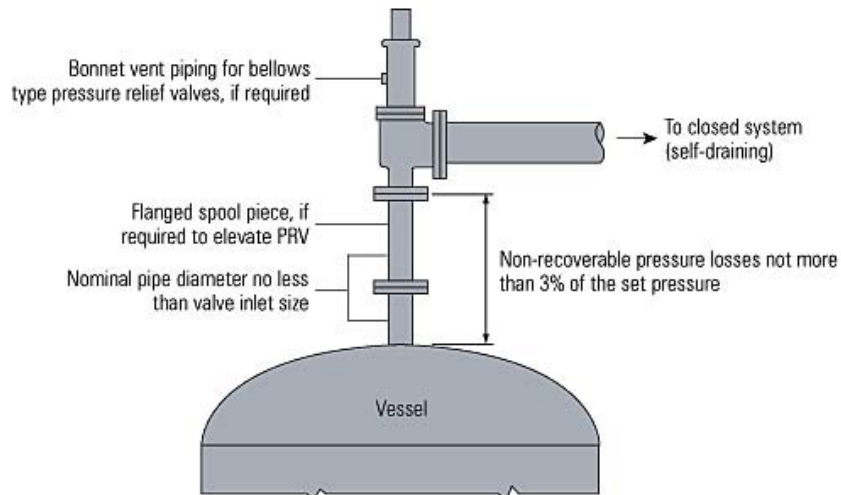


شیر اطمینان نصب شده روی خط لوله بخار

- 1 -A Vessel Neck
- 2 -One or Two Sections of Inlet Pipe
- 3 -Relief Device
- 4 - One or Two Sections of Outlet Pipe



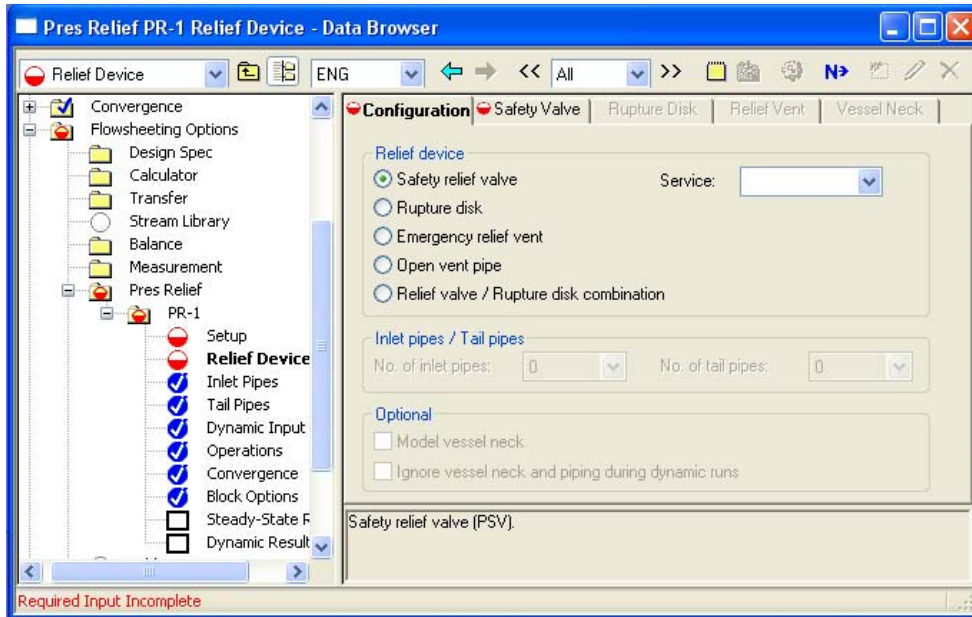
شیر اطمینان نصب شده روی ظرف تحت فشار برای سیستم باز



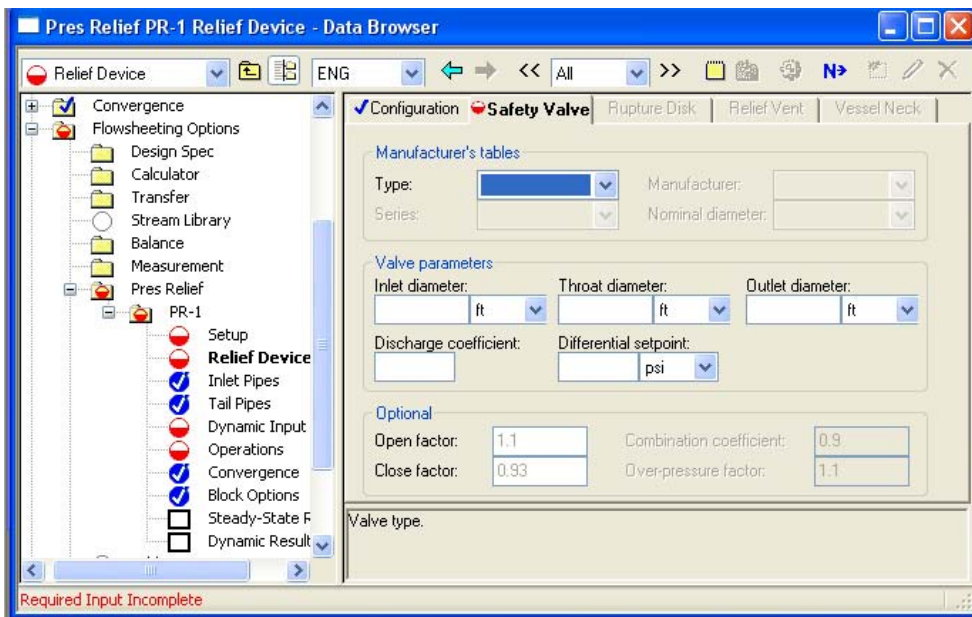
شیر اطمینان نصب شده روی ظرف تحت فشار برای سیستم بسته

با استفاده از فرم Relief Device در صفحه Configuration می توان پارامترهای زیر را انتخاب کرد:

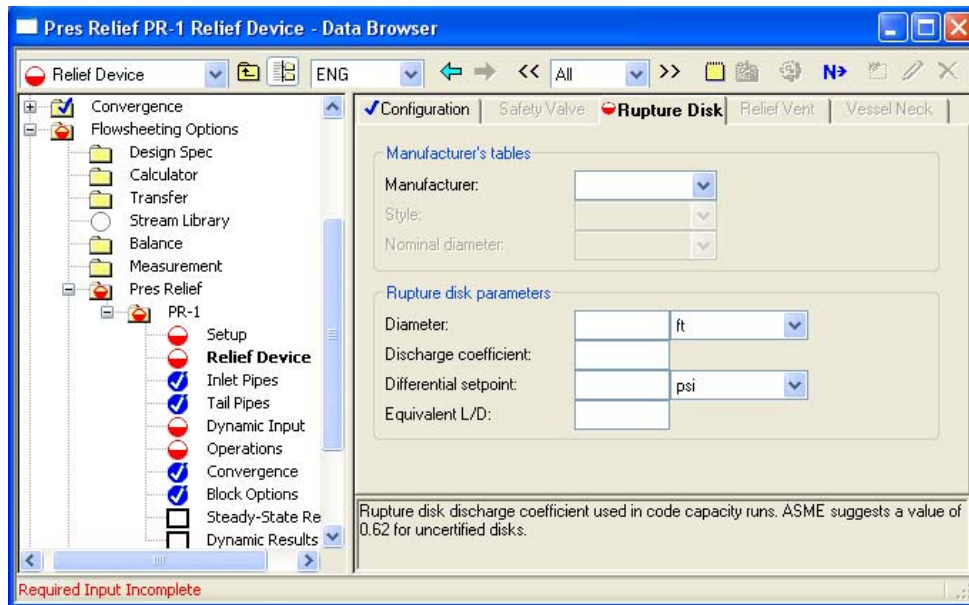
- ۱- انتخاب سیستم تخلیه فشار
- ۲- تعداد لوله های ورودی و خروجی از سیستم فشار شکن
- ۳- فعال و یا غیر فعال کردن اثرات گردن ظرف در محاسبات مربوط به شیر فشار شکن



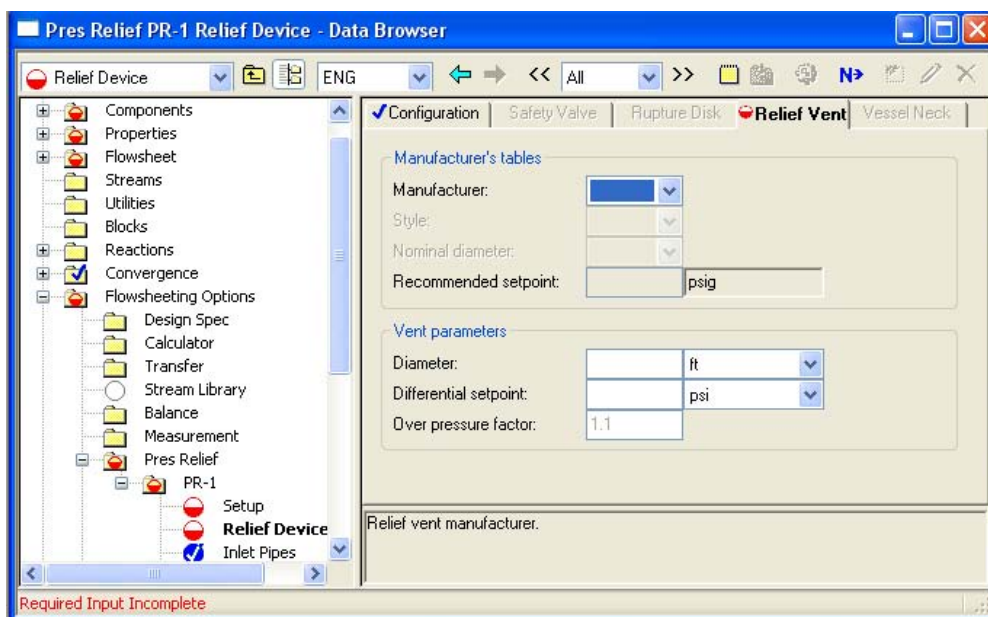
با استفاده از فرم Relief Device در صفحه Safety valve مطابق شکل زیر می توان دستگاه تخلیه فشار را همراه با مشخصات آن انتخاب کرد:



در صورتیکه در فرم Relief Device در صفحه Configuration نوع تجهیز، دیسک ایمنی انتخاب شده باشد در اینصورت صفحه Rupture Disk فعال می شود. در این صفحه مطابق شکل زیر می توان مشخصات دیسک ایمنی را وارد برنامه کرد:

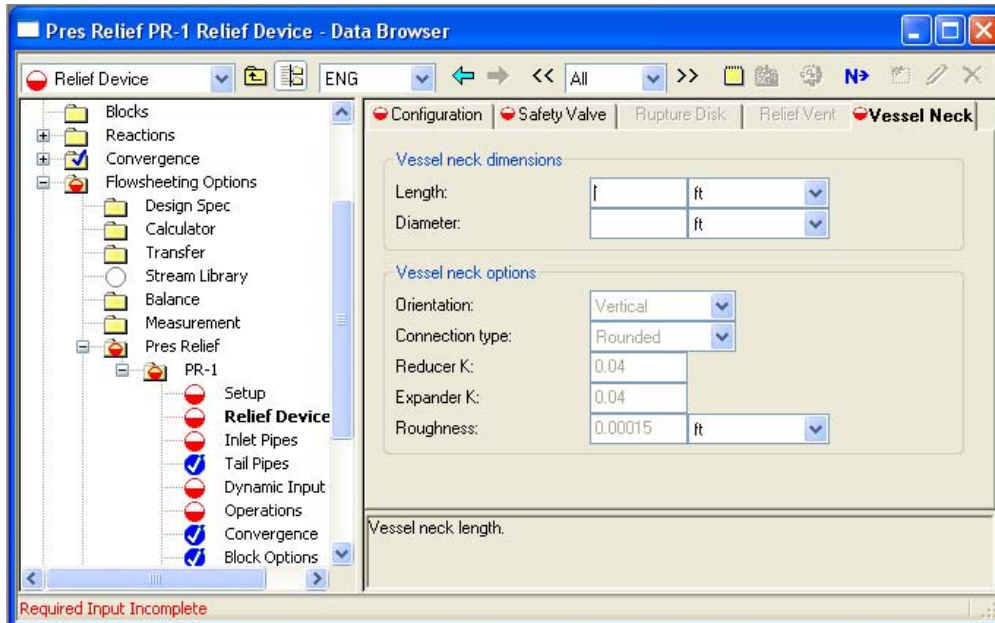


در صورتیکه در فرم Relief Device در صفحه Configuration نوع تجهیز، شیر تخلیه اضطراری^۱ (شیر تخلیه اضطراری بیشتر در سیستم‌های کم فشار استفاده می‌شود) انتخاب شده باشد در اینصورت صفحه Relief Vent فعال می‌شود. در این صفحه مطابق شکل زیر می‌توان مشخصات شیر تخلیه اضطراری را وارد برنامه کرد:

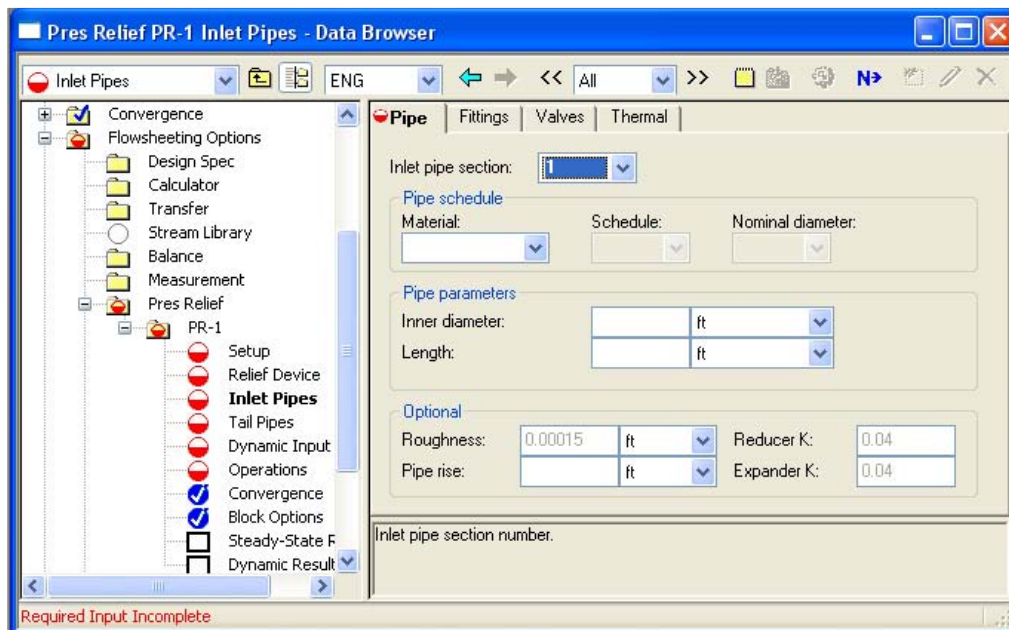


در صورتیکه در فرم Relief Device در صفحه Configuration چک باکس Model Vessel Neck انتخاب شده باشد، در اینصورت صفحه Vessel Neck فعال می‌شود. در این صفحه مطابق شکل زیر می‌توان مشخصات گردن ظرف را وارد برنامه کرد. این صفحه بیشتر در سناریوهای دینامیکی کاربرد دارد:

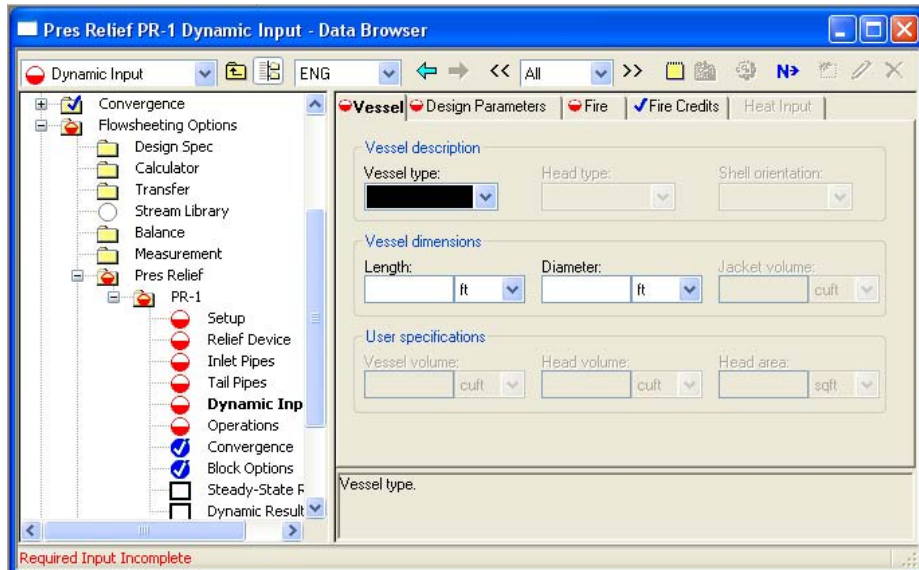
1 -Emergency Relief Vent (ERV)



در صورتیکه در فرم Relief Device در صفحه Configuration تعداد لوله‌های ورودی و خروجی بیشتر از صفر انتخاب شده باشد، در اینصورت فرم‌های Inlet Pipes و Tail Pipes فعال می‌شوند. در این صفحه مطابق شکل زیر می‌توان مشخصات لوله‌ها را وارد برنامه کرد:



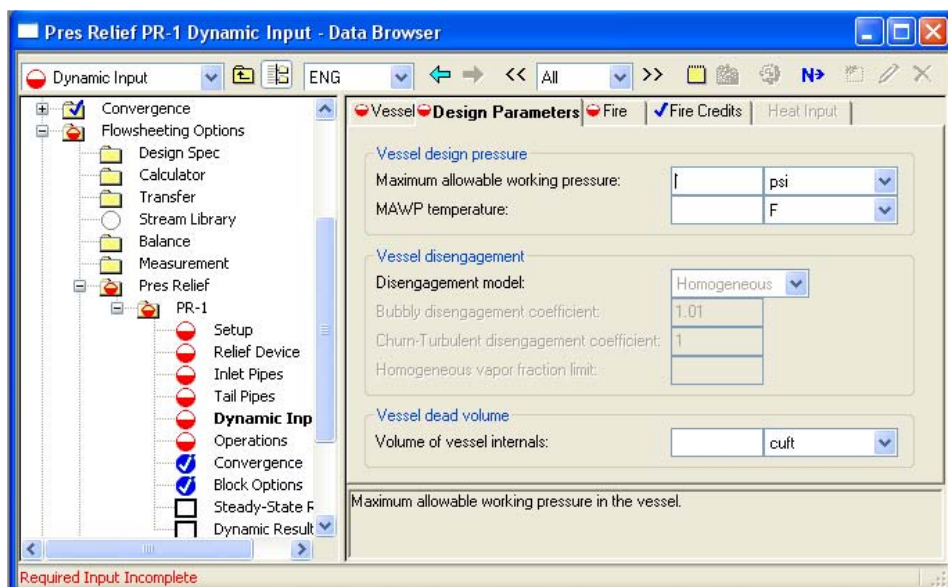
با استفاده از فرم Dynamic Input می‌توان پارامترهای مورد نیاز زیر را برای سناریوهای دینامیکی انتخاب کرد. در صفحه Vessel نوع و مشخصات ظرف مطابق شکل زیر وارد برنامه می‌شود:



نوع ظرف‌های قابل انتخاب در قسمت Vessel Type عبارتند از:

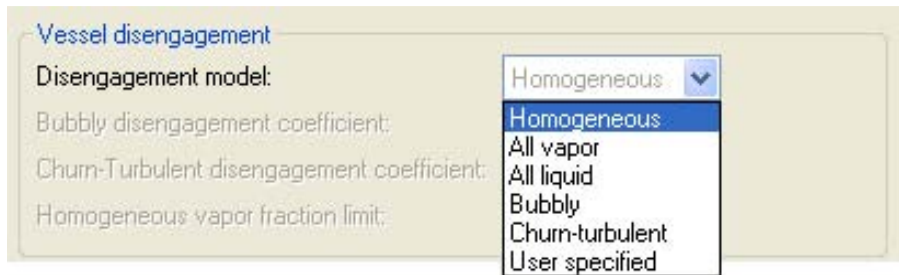


در فرم Dynamic Input و در صفحه Design Parameters مدل‌های رهایی^۱، MAWP، دمای MAWP و حجم فضای مرده در داخل ظرف از قبیل مجموع حجم میکسر، بافل‌ها و ... مطابق شکل زیر وارد برنامه می‌شوند:



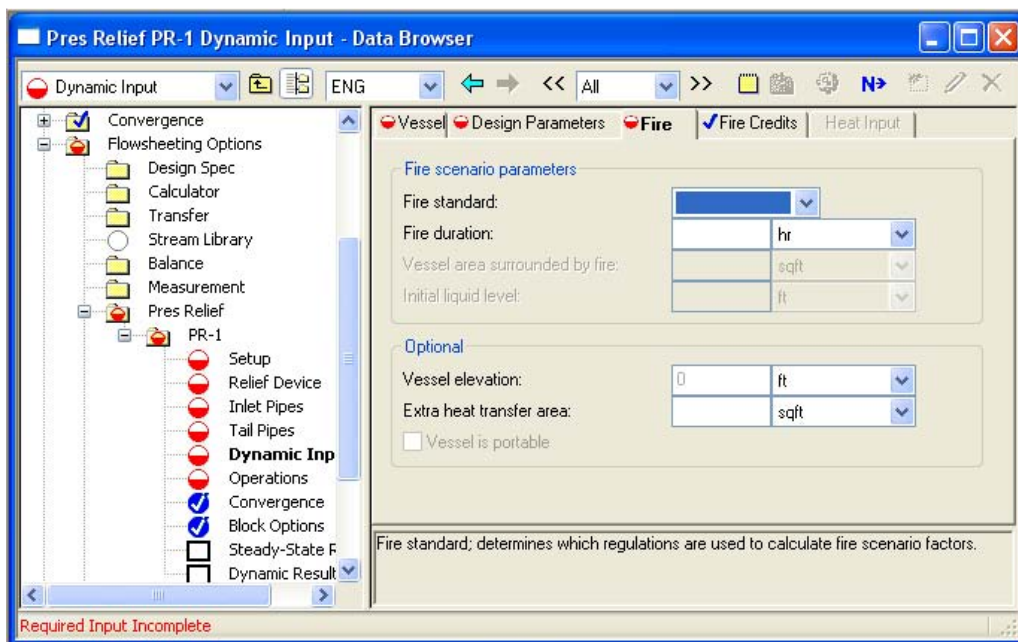
1- disengagement

مدل های رهایی قابل انتخاب در قسمت Vessel Disengagement عبارتند از:

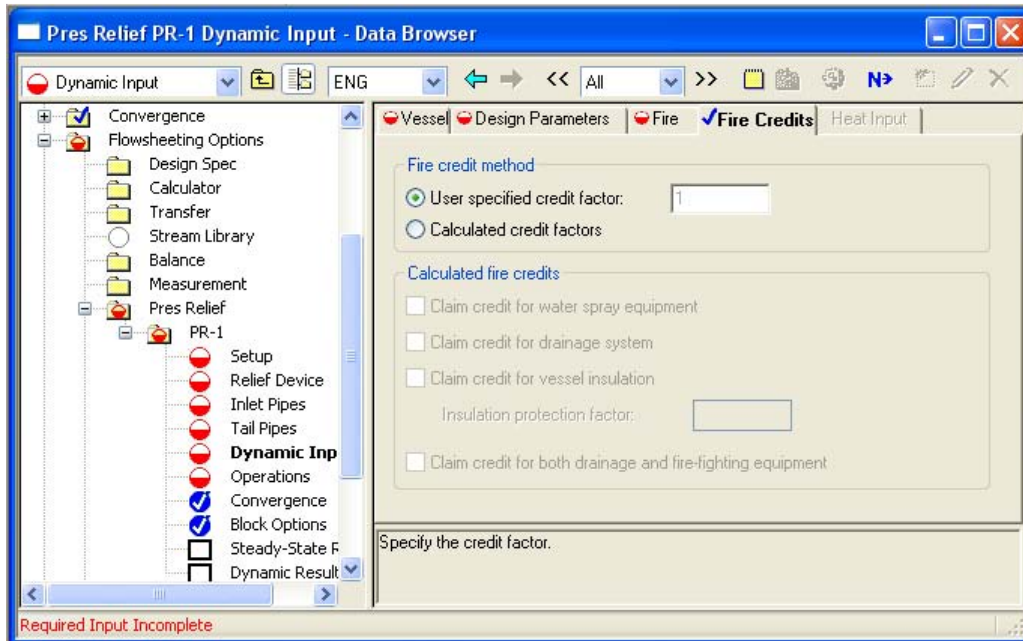


در صورت انتخاب گزینه Homogeneous درصد بخار^۱ خروجی از ظرف همان درصد بخار موجود در داخل ظرف خواهد بود. در صورت انتخاب گزینه های All Vapor و یا All Liquid به ترتیب ترکیبات خروجی از ظرف همگی بخار و یا همگی مایع خواهند بود. در صورت انتخاب گزینه Bubbly از مدل DIERS Bubbly برای محاسبه درصد بخار خروجی از ظرف استفاده می شود. و همچنین در صورت انتخاب گزینه Churn-turbulent از مدل DIERS Churn-turbulent برای محاسبه درصد بخار خروجی از ظرف استفاده می شود. با انتخاب گزینه User specified هم تخلیه به صورت Homogeneous انجام می شود و وقتی که درصد بخار داخل ظرف به درصد بخار تعیین شده توسط کاربر رسید پس از این زمان تخلیه فقط به صورت All Vapor انجام خواهد شد.

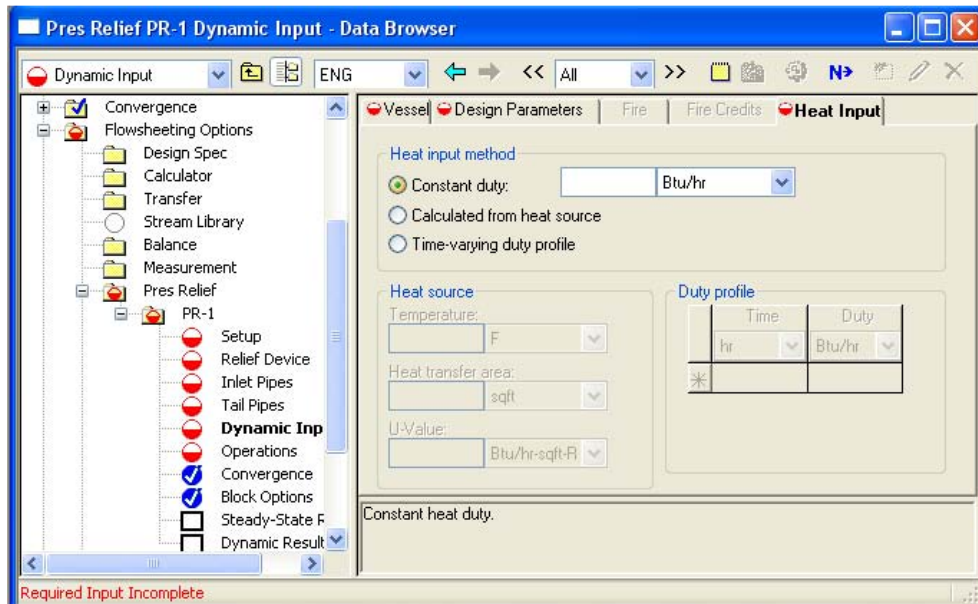
در صورتیکه در فرم Setup در صفحه Scenario، سناریوی سوم (Dynamic run with vessel engulfed with fire) انتخاب شده باشد در اینصورت در فرم Dynamic Input صفحات Fire Credits و Fire Credits مطابق شکل های زیر فعال خواهند شد.



1 - Vapor Fraction

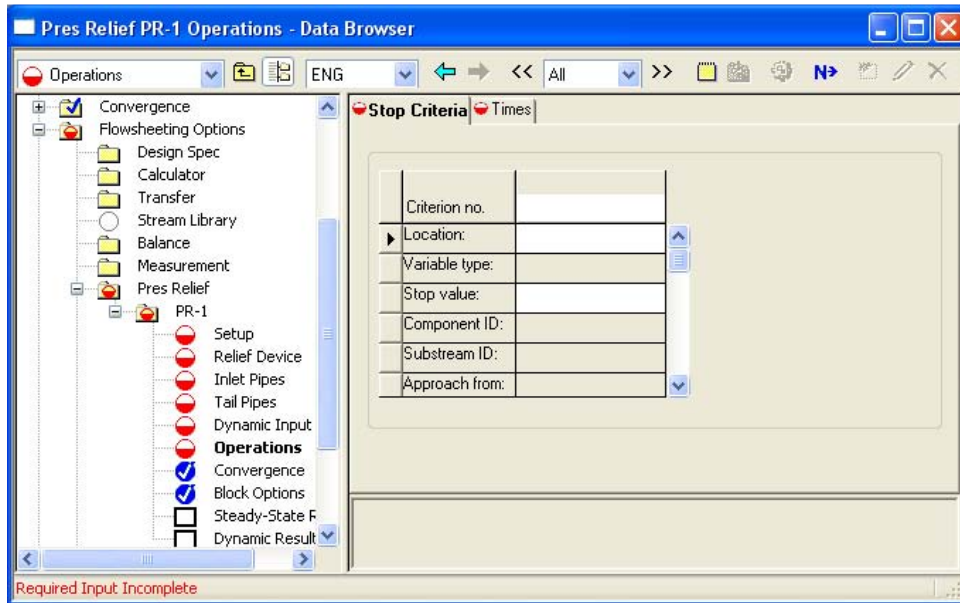


در صفحه Fire باید یکی از سه استاندارد آتش سوزی NFPA-30, API-520, API-2000، زمان آتش سوزی، سطح ظرف در معرض حریق، سطح مایع داخل ظرف، ارتفاع ظرف از سطح زمین و سطوح انتقال حرارت اضافه بر سطح ظرف را وارد برنامه کرد. در صفحه Fire Credits همانطور که قبلاً هم توضیح داده شد فاکتورهای اعتبار وارد برنامه می‌شوند. در صورتیکه در فرم Setup در صفحه Scenario، سناریوی چهارم (Dynamic run with Specified Heat Flux into Vessel) انتخاب شده باشد در اینصورت در فرم Dynamic Input صفحه Heat Input مطابق شکل زیر فعال خواهد شد.

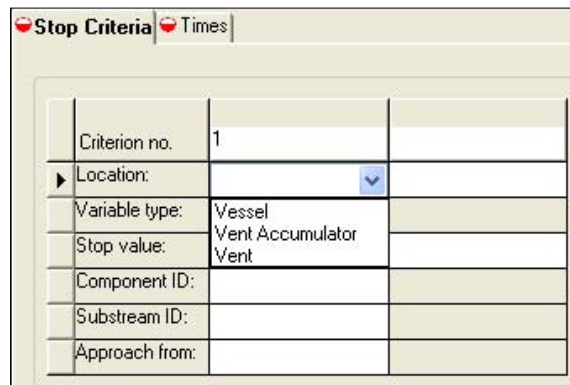


در این صفحه برای فلاکس حرارتی ورودی سه روش وجود دارد. در حالت Constant Duty فلاکس حرارتی ثابت وارد برنامه می‌شود. در حالت Calculated From Heat Source میزان فلاکس حرارتی با وارد کردن مشخصات منبع حرارتی از قبیل دما، سطح انتقال حرارت و ضریب انتقال حرارت محاسبه می‌شود و با انتخاب حالت Time Varying Duty Profile پروفایل دما بر حسب زمان توسط کاربر وارد برنامه می‌شود.

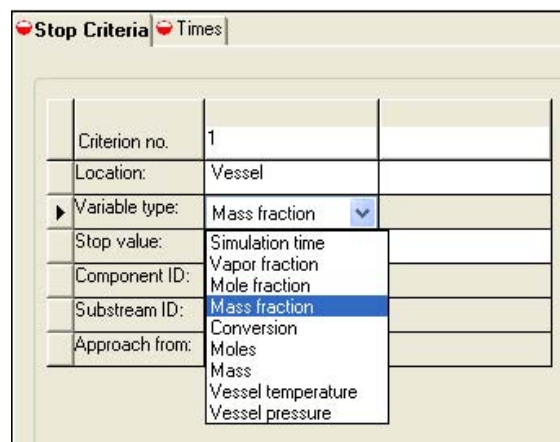
در سناریوهای دینامیکی از فرم Operation برای تعیین یک یا چندین متغیر به عنوان معیار توقف^۱ استفاده می‌شود. در این صورت زمانیکه مقدار هر کدام از این متغیرها از محدوده تعریف شده تجاوز نماید شبیه سازی متوقف می‌شود.



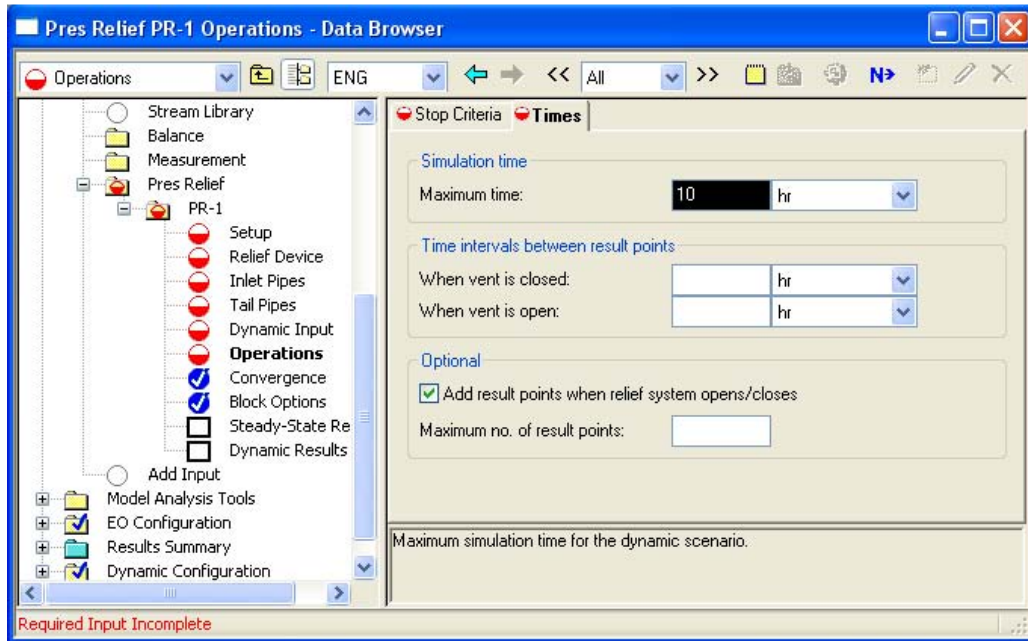
در این صفحه در قسمت Location موقعیت اعمال معیار توقف مطابق شکل زیر انتخاب می‌شود.



و در قسمت Variable Type بر حسب Location انتخاب شده نوع متغیر معیار توقف انتخاب می‌شود.



و در قسمت Stop Value مقدار متغیر انتخاب شده وارد می‌شود. در صفحه Times هم زمان‌های شبیه سازی و بازه‌های زمانی بین نقاط پروفایل نتایج در دو حالت باز و بسته بودن شیر تخلیه وارد برنامه می‌شود.



تحلیل نتایج در حالت پایا

در حالت اجرای پایا فرم نتایج از دو صفحه Summary و Property Profiles تشکیل شده است. در صفحه Summery همانطور که ملاحظه می‌شود موارد زیر گزارش می‌شوند:

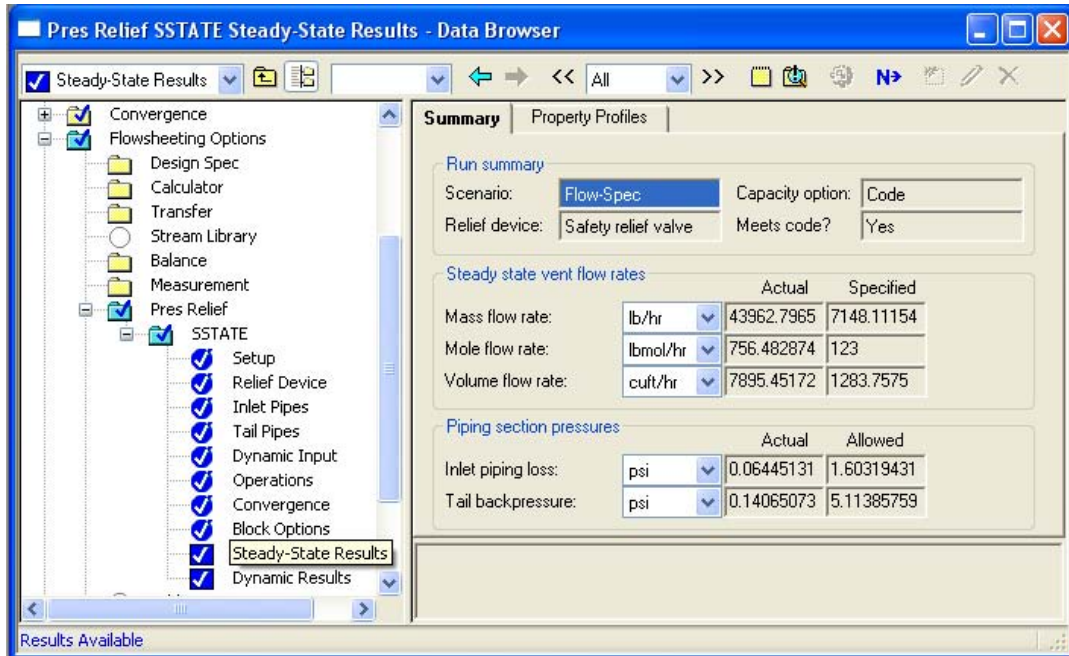
- خلاصه ورودی‌های برنامه (سناریو، نوع تجهیز فشار شکن و ...)
- اینکه شرایط کد تأمین شده یا نه؟
- شدت جریان (مولی، جرمی و حجمی) واقعی گذرنده از شیر فشار شکن که توسط برنامه محاسبه می‌شود.
- شدت جریان تخمینی که توسط کاربر در صفحه انتخاب سناریو وارد برنامه می‌شود.
- افت فشار مجازو افت فشار واقعی محاسبه شده در لوله‌های ورودی شیر فشار شکن
- Back Pressure مجاز و واقعی محاسبه شده توسط نرم افزار در لوله‌های خروجی شیر فشار شکن

اگر در قسمت Meet Code عبارت NO نمایش داده شود (شرایط کد تأمین نشود) می‌بایست در صفحه بعدی در قسمت Status دلیل آنرا پیگیری کرد. به یکی از دلایل زیر ممکن است شرایط کد تأمین نشود:

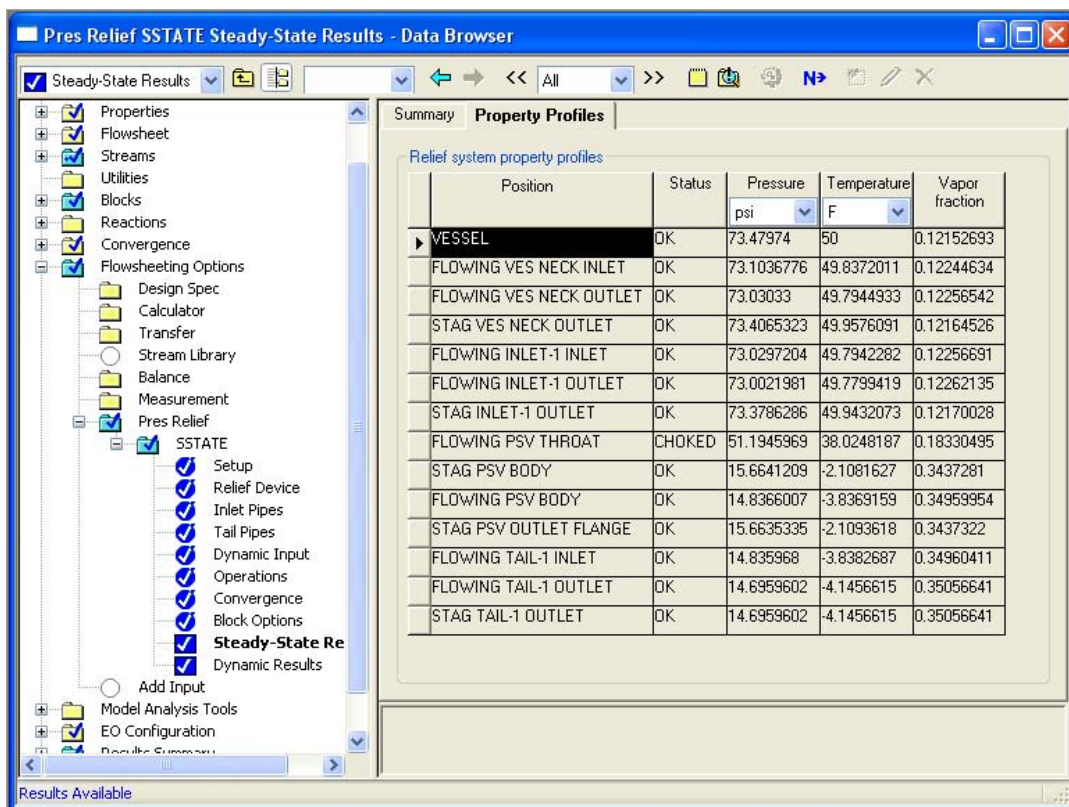
- افت فشار در لوله ورودی خیلی بالا باشد.
- افت فشار در لوله خروجی خیلی بالا باشد.
- قانون ۹۷٪ نقض شود.
- نقاط چوک در تجهیز فشار شکن اتفاق نیافتد.

در قسمت لوله کشی ورودی تلفات واقعی (محاسبه شده) برابر با افت فشار گردن ظرف و لوله‌های ورودی است که در ۱۰٪ فشار بالاتر از فشار مقرر محاسبه می‌شود. اگر این فیلد خالی باشد به این معنی است که فشار منبع بزرگتر از ۱۰٪ فشار بالاتر از فشار مقرر است. افت فشار مجاز هم به صورت درصدی از اختلاف فشار مقرر که در فرم Setup در صفحه Rules وارد شده است، محاسبه می‌شود.

برای لوله کشی خروجی هم فشار معکوس واقعی (محاسبه شده) در ۱۰٪ فشار بالاتر از فشار مقرر محاسبه می‌شود. اگر این فیلد خالی باشد به این معنی است که فشار معکوس بزرگتر از ۱۰٪ فشار بالاتر از فشار مقرر بوده یا از قانون ۹۷٪ استفاده شده است. افت فشار مجاز هم از ماکزیمم درصد مجاز تعیین شده در فرم Setup در صفحه Rules، محاسبه می‌شود.

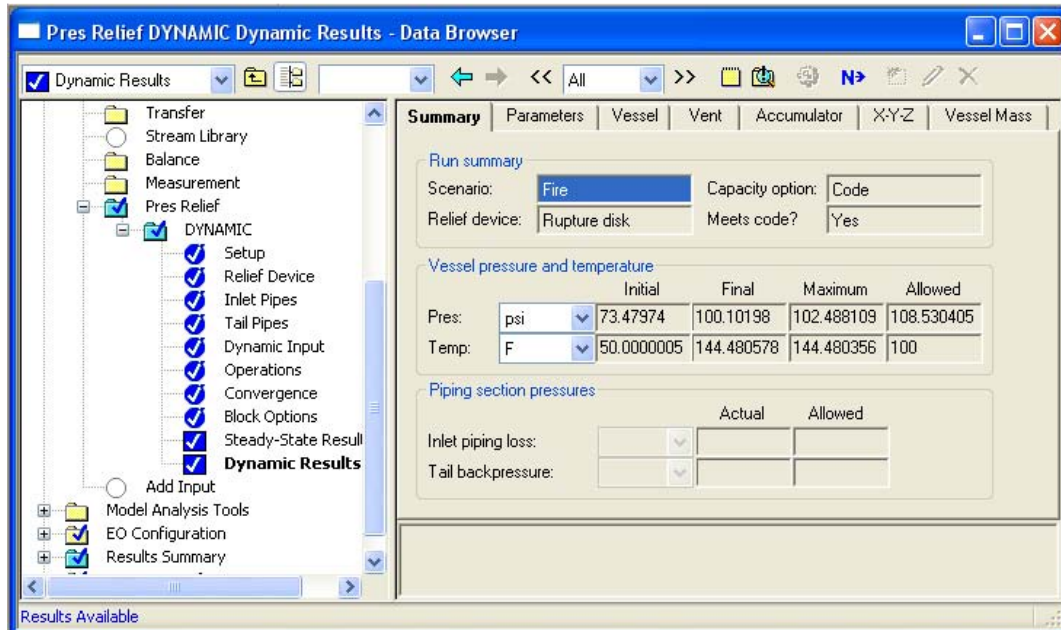


در صفحه Property Profile هم وضعیت جریان (از نظر اینکه چوک اتفاق می‌افتد یا نه) و پروفایل‌های فشار، دما و درصد بخار در طول شیر فشار شکن گزارش می‌شود.



تحلیل نتایج در حالت ناپایا

در حالت اجرای شبیه سازی پویا فرم نتایج از هفت صفحه تشکیل شده است. در صفحه اول، Summary، همانطور که در شکل زیر ملاحظه می شود موارد زیر گزارش می شوند:



- خلاصه ورودی‌های برنامه (سناریو، نوع تجهیز فشار شکن و ...)
- اینکه شرایط کد تأمین شده یا نه؟
- فشارهای ابتدا، انتها، ماکزیمم و مجاز ظرف
- دماهای ابتدا، انتها، ماکزیمم و مجاز ظرف
- افت فشار واقعی و مجاز از میان گردن ظرف و لوله‌های ورودی
- فشار معکوس واقعی و مجاز در لوله‌های خروجی

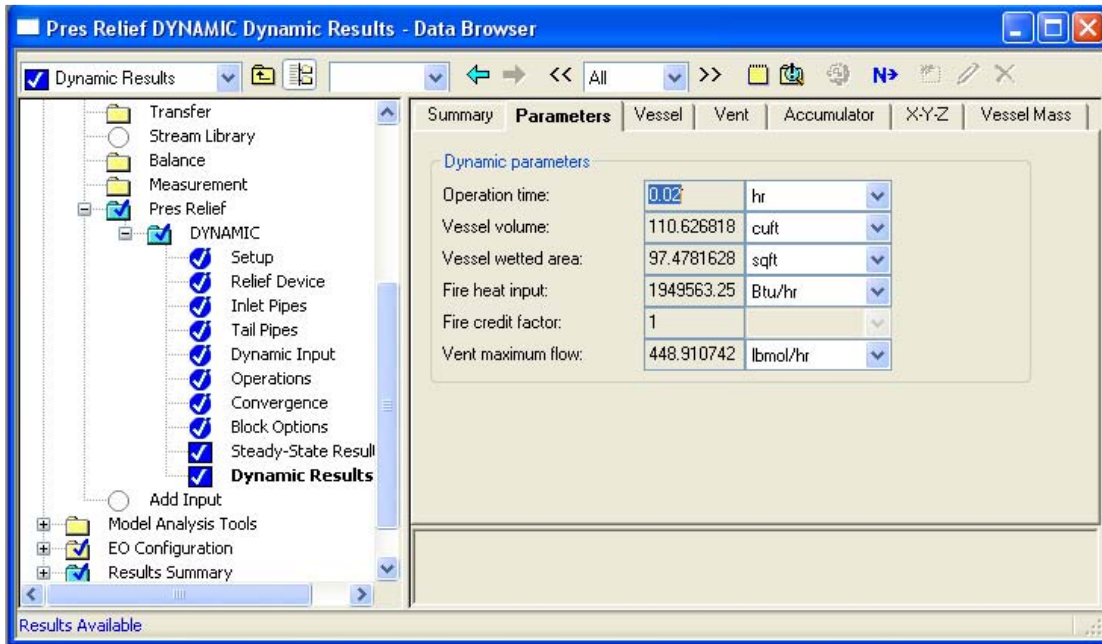
اگر در قسمت Meet Code عبارت NO نمایش داده شود (شرایط کد تأمین نشود) می‌بایست در صفحه Vessel در قسمت Status دلیل آنرا پیگیری کرد. به یکی از دلایل زیر ممکن است شرایط کد تأمین نشود:

- افت فشار در لوله ورودی در ۱۰٪ فشار بالاتر از فشار مقرر خیلی بالا باشد.
- افت فشار در لوله خروجی در ۱۰٪ فشار بالاتر از فشار مقرر خیلی بالا باشد.
- قانون ۹۷٪ نقض شود.
- نقاط چوک در تجهیز فشار شکن اتفاق نیافتد.
- فشار ظرف از ماکزیمم فشار مجاز تجاوز نماید.

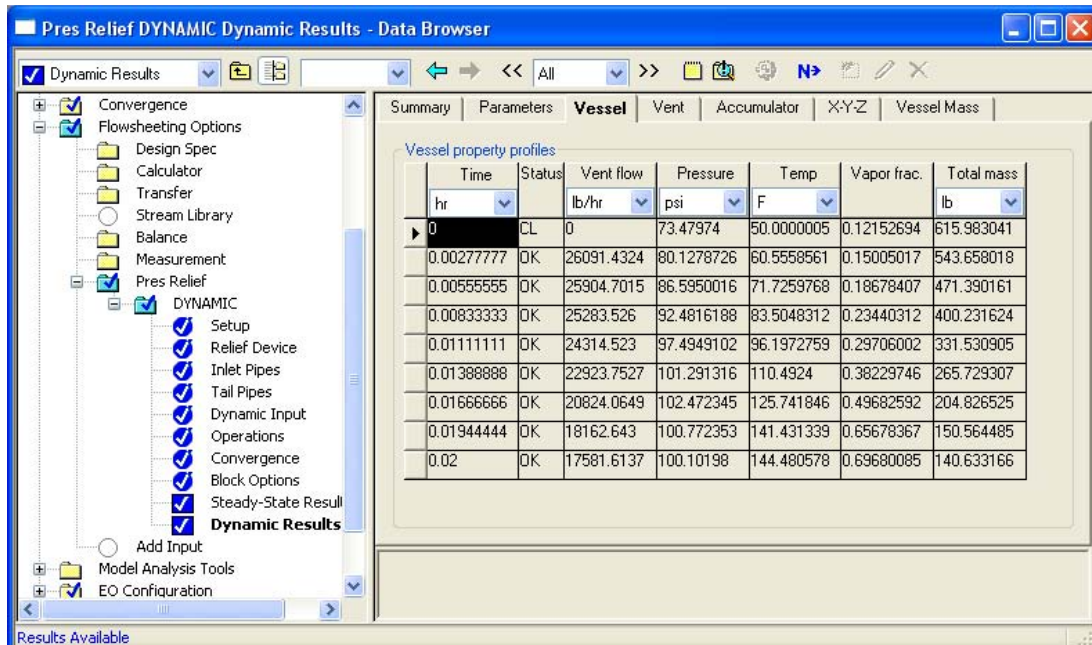
در قسمت لوله کشی ورودی تلفات واقعی (محاسبه شده) برابر با افت فشار گردن ظرف و لوله‌های ورودی است که در ۱۰٪ فشار بالاتر از فشار مقرر محاسبه می‌شود. اگر این فیلد خالی باشد به این معنی است که فشار منبأ بزرگتر از ۱۰٪ فشار بالاتر از فشار مقرر است. افت فشار مجاز هم به صورت درصدی از اختلاف فشار مقرر که در فرم Setup در صفحه Rules وارد شده است، محاسبه می‌شود.

برای لوله کشی خروجی هم فشار معکوس واقعی (محاسبه شده) در ۱۰٪ فشار بالاتر از فشار مقرر محاسبه می‌شود. اگر این فیلد خالی باشد به این معنی است که فشار معکوس بزرگتر از ۱۰٪ فشار بالاتر از فشار مقرر بوده یا از قانون ۹۷٪ استفاده شده است. افت فشار مجاز هم از ماکزیمم درصد مجاز تعیین شده در فرم Setup در صفحه Rules، محاسبه می‌شود.

در صفحه بعدی، Parameter، زمان اجرای برنامه (زمان عملکرد تجهیز فشار شکن)، حجم ظرف محاسبه شده، سطح خیس محاسبه شده برای ظرف، انرژی ورودی از آتش به ظرف بر اساس سطح خیس، فاکتورهای اعتبار آتش و ماکزیمم جریان خروجی از تجهیز فشار شکن گزارش می‌شوند.



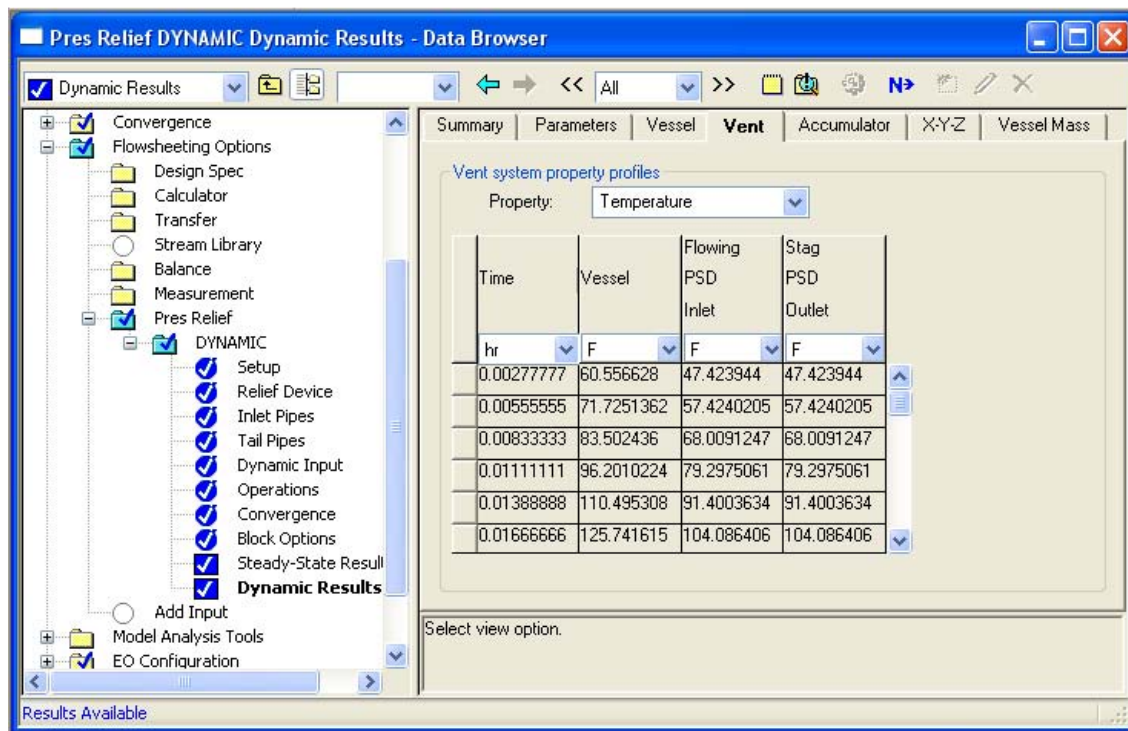
در صفحه بعدی، Vessel، جدول مشخصات ظرف در برابر زمان از قبیل وضعیت وقوع چوک در طول شیر، شدت جریان خروجی، فشار، دما، درصد بخار و جرم کلی گزارش می‌شود.



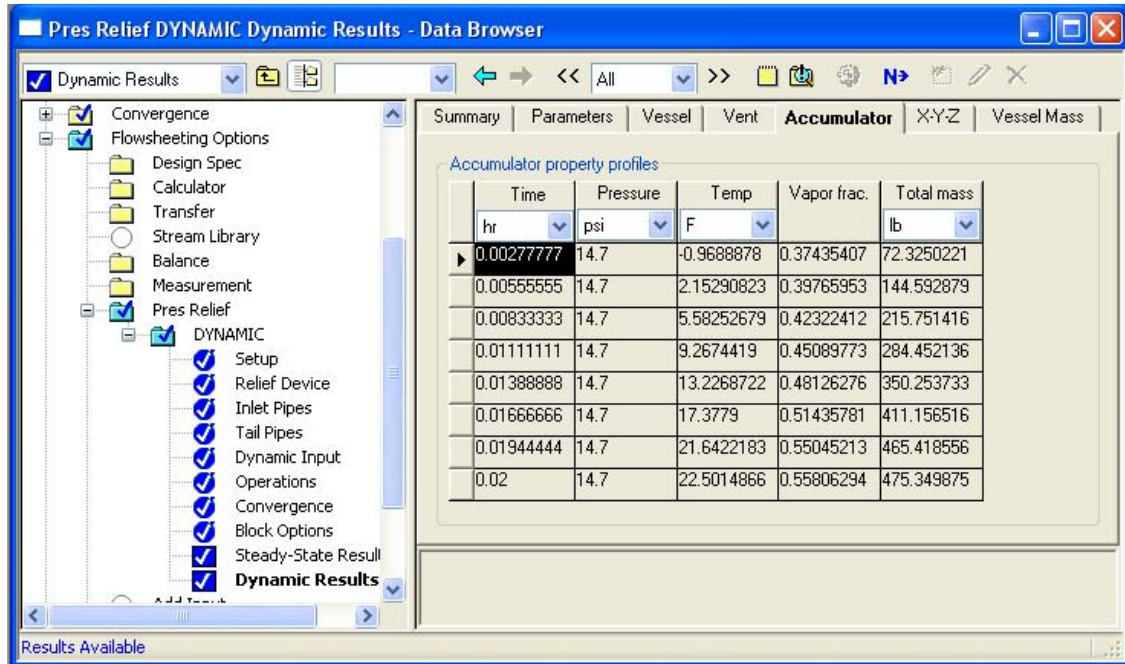
حالت‌های مختلفی که برای بیان پدیده چوک در ستون Status اتفاق می‌افتد در جدول زیر توضیح داده شده است:

Status	Meaning
CL	Vent closed
OK	Acceptable choke location and pressure
N	Choke at vessel neck
VF	Choke at valve flange
I1	Choke at Inlet Pipe 1
I2	Choke at Inlet Pipe 2
T1	Choke at Tail Pipe 1
T2	Choke at Tail Pipe 2
SH	Large static head
XT	Excess tail pressure

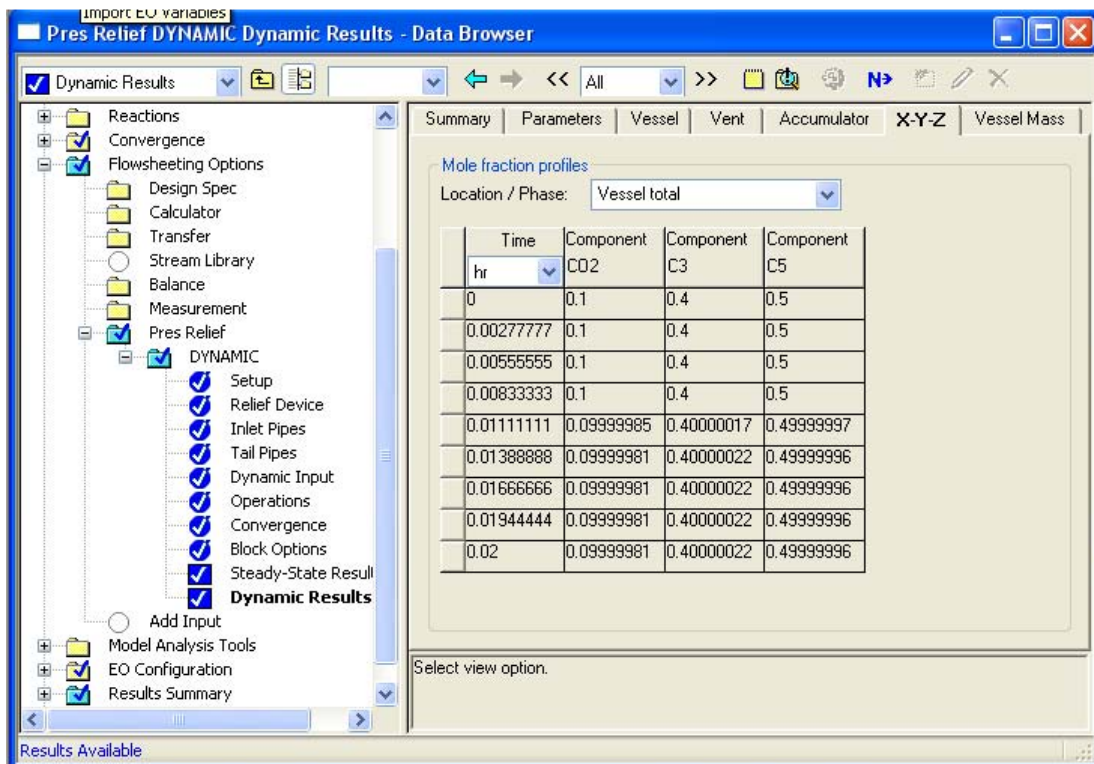
در صفحه Vent هم می‌توان پروفایل‌های دما، فشار، درصد بخار و دانسیته جرمی در ظرف و تجهیز فشار شکن را در برابر زمان مشاهده کرد:



در صفحه accumulator نیز مطابق شکل زیر می‌توان پروفایل‌های فشار، دما، درصد بخار و جرم کلی در داخل انباره را بر حسب زمان ملاحظه کرد:



در صفحه X-Y-Z مطابق شکل زیر می توان پروفایل های غلظت (جزء مولی) را در محتوی مایع ظرف، فضای بخار ظرف، کل ظرف، محل تخلیه شیر و انباره بر حسب زمان ملاحظه کرد:



در صفحه Vessel Mass مطابق شکل زیر می توان مقادیر جرمی اجزاء رادر داخل ظرف بر حسب زمان برای کلاس جریان مورد نظر ملاحظه کرد:

Pres Relief DYNAMIC Dynamic Results - Data Browser

Dynamic Results

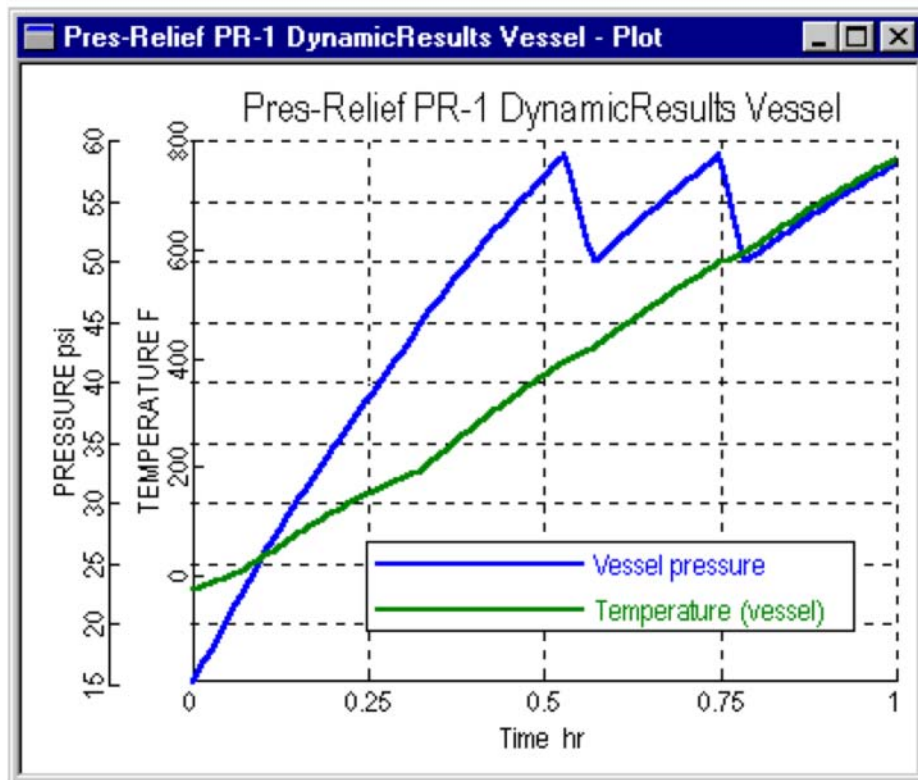
Summary Parameters Vessel Vent Accumulator X-Y-Z **Vessel Mass**

Component mass amounts in vessel
Substream: MIXED

Time	CO2	C3	C5
hr	lb	lb	lb
0	46.6478832	186.959206	382.375952
0.00277777	41.1707693	165.007581	337.479668
0.00555555	35.6979847	143.073306	292.61887
0.00833333	30.3092079	121.475725	248.446691
0.01111111	25.1065242	100.62417	205.800211
0.01388888	20.1234226	80.6524937	164.953391
0.01666666	15.511314	62.167663	127.147548
0.01944444	11.4021023	45.6983887	93.4639936
0.02	10.6500132	42.684097	87.2990556

Results Available

در شکل زیر یک نمونه از پروفایل دما و فشار ظرف بر حسب زمان برای مثالی از اجرای دینامیکی یک شیر فشار شکن نشان داده شده است:



تمرین

ابتدا جریانی را با مشخصات جدول زیر ایجاد نمایید. معادله ترمودینامیکی را معادله IDEAL در نظر بگیرید.

مشخصات خوراک	
دما (F)	۵۰
فشار (atm)	۵
شدت جریان مولی lbmole/hr	۱۰
درصد مولی CO ₂	۰/۱
درصد مولی پروپان	۰/۴
درصد مولی ایزوپنتان	۰/۵

الف) بررسی نمایید آیا سیستم فشار شکن با مشخصات جدول زیر برای تخلیه جریان به اتمسفر با مشخصات جریان خوراک و با دبی تخلیه ۱۲۳ lbmole/hr مناسب است یا خیر؟ مشخصات شیر فشار شکن مطابق جدول زیر است:

قطر ورودی شیر (in)	۴
قطر گلوگاه شیر (in)	۲/۲۸
قطر خروجی شیر (in)	۶
ضریب تخلیه خروجی	۰/۷۲۹
اختلاف فشار مقرر (atm)	۳/۸

- گردن ظرف را به طول ۶ اینچ و قطر ۴ اینچ در نظر بگیرید.
- لوله ورودی شیر فشار شکن به قطر ۴ اینچ و به طول ۱۲ اینچ و از جنس کربن استیل (Schedule 40) می باشد. ماکزیمم تلفات لوله ورودی را برابر ۳٪ DSP در نظر بگیرید.
- لوله خروجی شیر فشار شکن به قطر ۶ اینچ و به طول ۲۴ اینچ و از جنس کربن استیل (Schedule 40) می باشد. ماکزیمم تلفات لوله خروجی را برابر ۱۰٪ DSP در نظر بگیرید.

ب) مخزن افقی به طول ۸ فوت و به قطر ۴ فوت وبا هد فلنجی، با محتویات و شرایط جریان خوراک در نظر بگیرید که برای سیستم فشار شکن آن یک دیسک ایمنی با مشخصات جدول زیر در نظر گرفته شده است که موقع عمل کردن محتوی مخزن به سمت اتمسفر تخلیه می شود. اگر این مخزن به مدت یک ساعت در معرض آتش سوزی قرار گیرد منحنی تغییرات دما و فشار در برابر زمان را برای معیار توقف ۰/۰۲ ساعت گزارش نمایید. در چه فشاری دیسک ایمنی عمل می کند؟ MAWP مخزن را برابر ۱۰۰ psia و دمای MAWP را برابر ۱۰۰ F و ماکزیمم فشار مجاز ظرف را ۱۱۰٪ فشار MAWP در نظر بگیرید.

دیسک ایمنی	
شرکت سازنده	ZOOK
نوع	MONO
قطر اسمی (in)	۱/۵
اختلاف فشار مقرر (atm)	۳/۸



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

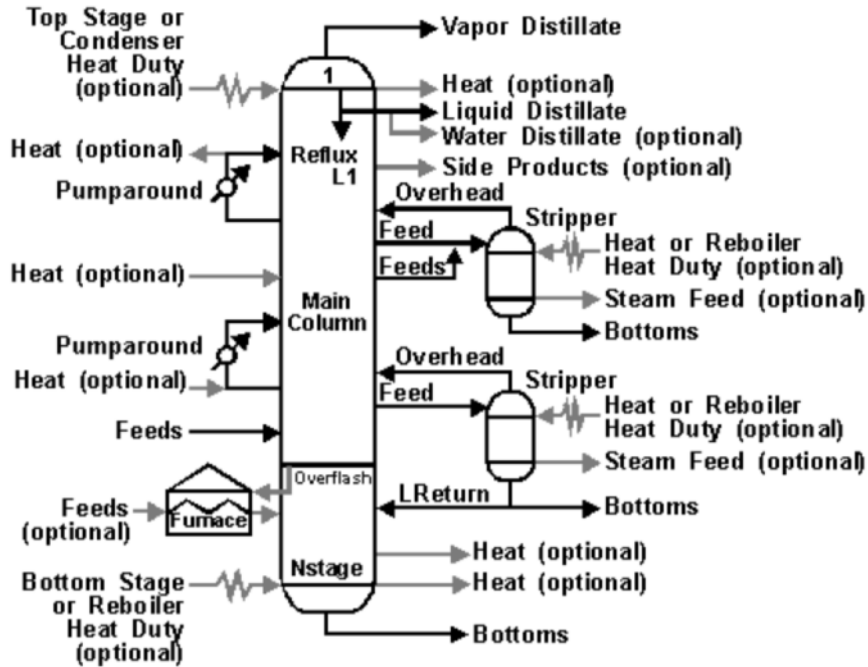
ASPEN PLUS

جلسه یازدهم

- مدیریت برش های نفتی در ASPEN PLUS
- تعریف Assay ها (جریان های نفتی)
- شبیه سازی برج تقطیر در خلأ و تقطیر اتمسفریک
- شبیه سازی و بهینه سازی اقتصادی فرآیند پالایش نفت خام
- تمرین ها

PetroFrac –

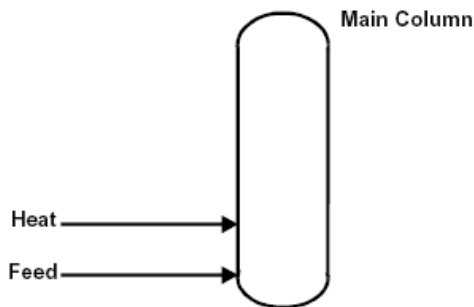
برج های PetroFrac مخصوص شبیه سازی برج های نفتی اند. همانطور که در شکل زیر ملاحظه می شود از یک کوره، چندین Pumparound و چند Side stripper تشکیل شده اند.



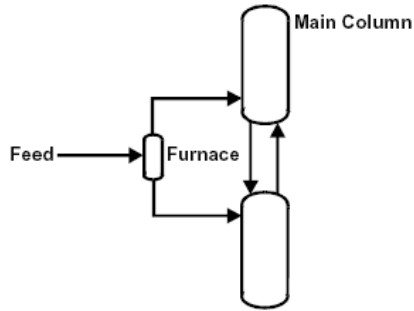
عمده موارد استفاده این مدل در عملیات های زیر است:

- Preflash tower
- Atmospheric crude unit
- Vacuum unit
- Catalytic cracker main fractionator
- Delayed coker main fractionator
- Vacuum lube fractionator

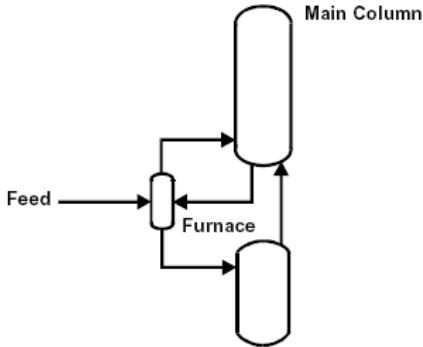
در مدل PetroFrac می توان از کوره در مسیر جریان خوراک استفاده نمود. انواع کوره های استفاده شده در برج های PetroFrac عبارتند از:



Furnace Modeled as a Stage Heat Duty



Furnace Modeled as a Single Stage Flash



Furnace Modeled as a Single Stage Flash with Overflash Bypass

مدل PetroFrac می تواند محاسبات مربوط به free water را برای هر مرحله برج مجزا انجام داده و قابلیت جداسازی آب خالص را در کندانسور یا در هر مرحله از برج را دارد. در این مدل هر دو نوع بازدهی مورفوری و بخارسازی را می توان به مراحل برج اعمال کرد. همچنین عملیات Tray Sizing و Tray Rating را می توان در این مدل به کار برد. این مدل توانایی شبیه سازی برج های پر شونده را هم از نوع Random Packing و هم از نوع Structure Packing داراست.

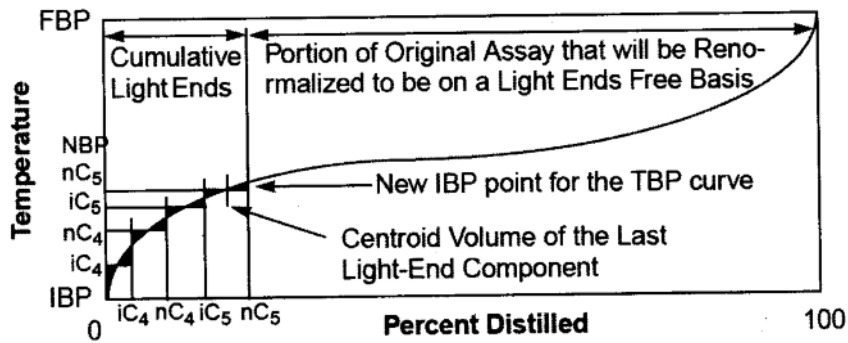
شبیه سازی در محیط های نفتی

جریان های نفتی شامل ترکیبات بسیار زیادی از قبیل فلزات ، خانواده سولفورها و هیدروکربن های سنگین هستند و میزان آنها در حوزه های مختلف نفتی متفاوت است. خالص سازی این جریانات و شکستن ترکیبات سنگین آنها به ترکیبات سبک تر یکی از پیچیده ترین و پر هزینه ترین فرآیندهای مهندسی شیمی است. و اغلب این سیستم های جداسازی نیاز به مقدار زیادی بخار برای خالص سازی دارند. نرم افزار ASPEN بانک اطلاعاتی گسترده ای از خواص جریان های نفتی حوزه های مختلف را در قسمت OIL LIBRARY دارد.

مدیریت برش های نفتی در Assay Data Analysis

برش های نفتی شامل تعداد زیادی از مواد بوده و امکان آنالیز دقیق مشخصات این ترکیبات پیچیده وجود ندارد. لذا جهت تعریف یک برش نفتی در نرم افزارهای شبیه سازی، از منحنی های مختلف نقطه جوش که بر اساس استانداردهای مختلف TBP و ASTM بدست می آیند، استفاده می گردد که در ادامه توضیح داده خواهد شد.

ASPEN بر اساس این منحنی های تولید شده ، منحنی اصلاح شده TBP ، ویسکوزیته ، چگالی و ... را برای برش های مختلف محاسبه می کند. در صورتیکه خواص فیزیکی برش ها نیز که مطابق آزمایش ها بدست آمده اند وارد سیستم شوند، منحنی های تولید شده ASPEN تنظیم و هموارتر می شوند تا با خواص کل سازگاری داشته باشند. در صورتیکه اطلاعات Light Ends ها معلوم باشد ASPEN قادر است تا بخش سبک منحنی TBP یا ... را با هیدروکربن های سبکتر از C_5 تعویض کند و منحنی تقطیر را بر نتایج این آنالیز تطبیق دهد. در صورتیکه نقطه شروع منحنی TBP با نقطه جوش سنگین ترین محصول سبک (Light Ends) منطبق نباشد ، در اینصورت ASPEN فرض را بر وجود خطا بر منحنی TBP گذاشته و نقطه شروع منحنی TBP را تصحیح می نماید.



پس از انجام این مراحل برش نفت خام باید به برش های کوچکتر شکسته شوند. محدوده دمایی هر یک از این برش ها را می توان به صورت دستی تعیین کرد و یا اینکه به خود نرم افزار اجازه داد که خود به طور بهینه این برش ها را تعیین نماید. ASPEN هر یک از این برش های کوچک را به عنوان یک Pseudo Component به فهرست مواد ما اضافه می کند و به طور خودکار تمامی خواص هر یک از این برش ها را محاسبه می نماید. تمام مراحل تعریف یک برش نفتی در قسمت Assay Data Analysis RUNTYPE قابل انجام است که شرح مراحل آن با ذکر مثالی توضیح داده خواهد شد.

روش های تقطیر استاندارد نفت خام و فرآورده ها

روش های تقطیر استاندارد نفت خام و فرآورده ها عبارتند از:

- ASTM D-2892
- ASTM D-5236
- ASTM D-2887
- ASTM D-86
- ASTM D-1160

روش تقطیر استاندارد ASTM D-2892

این روش تست برای تقطیر نفت خام با فشار بخار کمتر از ۱۲ psi تا نقطه جوش کمتر از 400°C در فشار اتمسفریک استفاده می شود. در این روش از یک برج تفکیک کننده با ۱۴ تا ۱۸ سینی تئوری و با نسبت رفلکس ۵ به صورت ناپیوسته (Batch) استفاده می شود. بر اساس دستگاه های موجود، مقدار نمونه از ۱ تا ۵۰ لیتر قابل تقطیر است. در انتهای هر برش دما و فشار و برای هر برش دانسیته و جرم ثبت می شوند. از این اطلاعات منحنی درصد تقطیر یافته جرمی یا حجمی در مقابل دما رسم می شود که به آن منحنی TBP اطلاق می شود.

NO.	دما در فشار اتمسفریک ($^{\circ}\text{C}$)	فشار mmHg	دمای واقعی ($^{\circ}\text{C}$)	وزن رسیور	وزن رسیور + وزن نمونه	درصد نمونه وزنی
1	IBP - 15	ROOM				
2	15-65	ROOM				
3	65-100	ROOM				
4	100-125	ROOM				
5	125-150	ROOM				
6	150-175	ROOM				
7	175-200	ROOM				
8	200-225	40				
9	225-250	40				
10	250-275	40				
11	275-300	40				
12	300-325	2				
13	325-350	2				
14	385-385	2				
15	385+					

روش تقطیر استاندارد ASTM D-5236

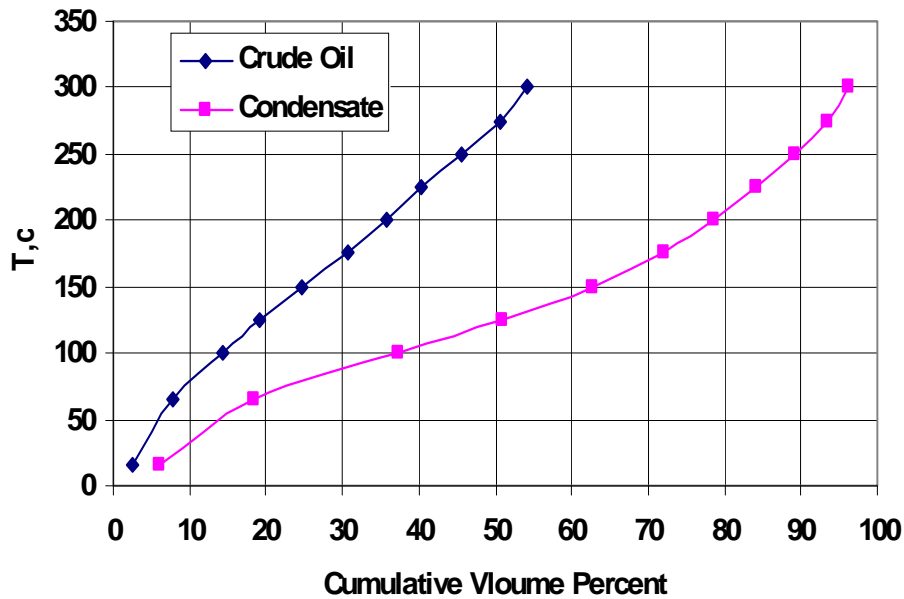
این روش تست برای تقطیر در شرایط خلأ مخلوط های هیدروکربنی سنگین که دمای شروع جوش آنها بالاتر از 150°C (300°F) است (از قبیل نفت خام های سنگین، تقطیر یافته های نفتی مانند برش های روغنی، باقیمانده های تقطیر و مخلوط های سنتزی) استفاده می شود. در این روش مطابق جدول زیر شرایط تقطیر خلأ در شرایط معادل تقطیر استاندارد تبدیل و گزارش می شوند.

NO.	دما در فشار اتمسفیریک ($^{\circ}\text{C}$)	وزن رسیور	وزن رسیور + وزن نمونه	درصد نمونه وزنی
1	385-425			
2	425-450			
3	450-475			
4	475-500			
5	500-530			
6	530-565			
7	565+			

در نهایت با تجمیع اطلاعات تقطیر ASTM D-2892 و ASTM D-5236 جدول تقطیر TBP برای برش تقطیر یافته تکمیل شده و منحنی آن رسم می شود:

FRAC .NO	BOILING RANGE OF FRAC.@ 1 atm (DEG. C)	WEIGHT PERCENT	CUTTING RANGE (WT %)	SP.Gr. @15.56/15. 56 $^{\circ}\text{C}$	Molecular Weight	VOLUME PERCENT T	CUTTING RANGE (VOL %)
1	IBP-15						
2	15-65						
3	65-100						
4	100-125						
5	125-150						
6	150-175						
7	175-200						
8	200-225						
9	225-250						
10	250-275						
11	275-300						
12	300-325						
13	325-350						
14	350-385						
15	385-425						
16	425-450						
17	450-475						
18	475-500						
19	500-530						
20	530-565						
21	565+						

برای نمونه در شکل زیر منحنی های تقطیر TBP یک نمونه نفت خام و کندانسیت ملاحظه می شود.

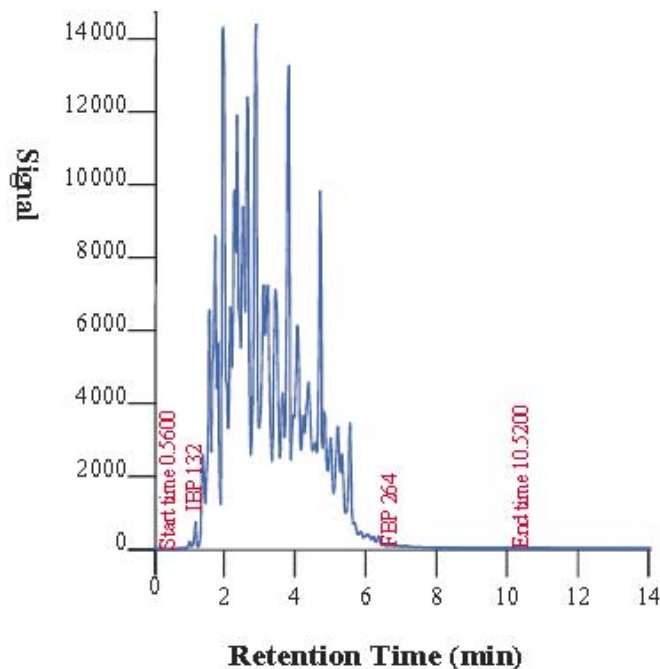


روش تقطیر استاندارد ASTM D-2887

این روش تست برای تقطیر برش های نفتی همراه با کروماتوگرافی گاز جهت تخمین توزیع محدوده نقطه جوش محصولات نفتی به کار می رود. این روش تقطیر برای محصولات نفتی از نقطه جوش ابتدایی 55°C (100°F) تا نقطه جوش انتهایی 538°C (1000°F) در فشار اتمسفریک کاربرد دارد. لازم به ذکر است از این روش برای آنالیز تقطیر گسولین استفاده نمی شود. روش تست گسولین روش ASTM D 3710 است.



دستگاه استاندارد تقطیر ASTM D-2887



یک نمونه نتیجه آنالیز سوخت جت با استاندارد تقطیر ASTM D-2887

روش تقطیر استاندارد ASTM D-86

این روش تست برای تقطیر محصولات نفتی (به ویژه سوخت های تقطیر یافته مانند بنزین طبیعی، سوخت هواپیما، نفت سفید، انواع گازوئیل و ...) تا نقطه جوش کمتر از 400°C در فشار اتمسفریک استفاده می شود. این روش برای برش هایی که حاوی باقیمانده های سنگین هستند به کار نمی رود.

ASTM D86		TEMPERATURE , $^{\circ}\text{C}$
IBP		
5.0	vol%	
10.0	vol%	
20.0	vol%	
30.0	vol%	
40.0	vol%	
50.0	vol%	
60.0	vol%	
70.0	vol%	
80.0	vol%	
90.0	vol%	
95.0	vol%	
FBP		

روش تقطیر استاندارد ASTM D-1160

این روش تست برای تعیین محدوده نقاط جوش محصولات نفتی سنگین در فشارهای پایین که می توانند ماکزیمم تا دمای 400°C تا حدی یا به طور کامل تبخیر شوند، استفاده می شود. در این روش شرایط تقطیر خلأ به کمک روابط مربوطه در شرایط معادل تقطیر استاندارد تبدیل و گزارش می شوند. در جدول زیر فاصله جوش برش های مختلف نفتی اشاره شده است:

فاصله جوش برشهای نفتی

فاصله جوش		برش
TBP F (°C)	ASTM F (°C)	
-	-	بوتانها و سبکتر
۹۰-۱۹۰ (۳۲/۲-۸۷/۸)	۹۰-۲۲۰ (۳۲/۲-۱۰۴/۴)	بنزین سبک تقطیر مستقیم (LSRG)
۱۹۰-۳۸۰ (۸۷/۷-۱۹۳/۳)	۱۸۰-۴۰۰ (۸۲/۲-۲۰۴/۴)	بنزین سنگین تقطی مستقیم (HSRG)
۳۸۰-۵۲۰ (۱۹۳/۳-۲۷۱/۱)	۳۳۰-۵۴۰ (۱۶۵/۵-۲۸۲/۲)	کروزن (نفت سفید)
۵۲۰-۶۱۰ (۲۷۱/۱-۳۲۱/۱)	۴۲۰-۶۴۰ (۲۱۵/۶-۳۳۷/۸)	گازوییل سبک (LGO)
۶۱۰-۸۰۰ (۳۲۱/۱-۴۲۶/۷)	۵۵۰-۸۳۰ (۲۸۷/۸-۴۴۳/۳)	گازوییل اتمسفری (AGO)
-۱۰۵۰ (۴۲۶/۷-۵۶۵/۶) ۸۰۰	۷۵۰-۱۰۵۰ (۳۹۸/۹-۵۶۵/۶)	گازوییل خلاء (VGO)
۱۰۵۰ (۵۶۵/۶)	۱۰۰۰ (۵۶۵/۵)	باقیمانده خلاء

تعیین معادله حالت مناسب برای شبیه سازی محیط های نفتی

معادلات ترمودینامیکی که نرم افزار ASPEN برای شبیه سازی جریان های نفتی و پالایش آنها بکار می برد عبارتند از:

- برای فشارهای کم در حد چند اتمسفر (برج های خلأ و برج های تقطیر اتمسفریک):

معادلات BK10 ، CHAO-SEA و GRAYSON

- برای فشارهای متوسط تا حد چند ۱۰ اتمسفر:

معادلات GRAYSON ، CHAO-SEA ، PENG-ROB و RK-SOAVE

- برای فرآیندهای غنی از هیدروژن :

معادلات GRAYSON ، PENG-ROB و RK-SOAVE

- برای واحدهای روغن:

معادلات PENG-ROB و RK-SOAVE

تمرین

۱۰۰،۰۰۰ بشکه در روز از مخلوط دو برش نفت خام با مشخصات زیر ، پس از عبور از یک برج تقطیر Preflash به دو جریان مایع و بخار تقسیم می شود. جریان مایع در یک کوره گرم شده و تمام این جریان ها وارد یک برج تقطیر اتمسفریک می شوند. در نهایت برش سنگین حاصل از تقطیر اتمسفریک وارد برج تقطیر در خلأ می شود. آنالیز ترکیبات سبک موجود در هر دو برش نفت خام عبارتند از:

OIL 1	
Ligh Ends	Composition (L. Volume Fraction)
H ₂ O	۰
Methane	۰/۰۰۱
Ethane	۰/۰۰۱۵
Propane	۰/۰۰۹
i-Butane	۰/۰۰۴
n-Butane	۰/۰۱۶
i-Pentane	۰/۰۱۲
n-pentane	۰/۰۱۷

OIL 2	
Ligh Ends	Composition (L. Volume Fraction)
H ₂ O	۰/۰۰۱
Methane	۰/۰۰۲
Ethane	۰/۰۰۵
Propane	۰/۰۰۵
i-Butane	۰/۰۱
n-Butane	۰/۰۱
i-Pentane	۰/۰۰۵
n-pentane	۰/۰۲۵

داده های تقطیر TBP به شرح جداول زیر می باشد:

OIL 1	
API Gravity = 31.4	
Assay %	T (F)
۶/۸	۱۳۰
۱۰	۱۸۰
۳۰	۴۱۸
۵۰	۶۵۰
۶۲	۸۰۰
۷۰	۹۰۳
۷۶	۱۰۰۰
۹۰	۱۲۵۵

OIL 2	
API Gravity = 34.8	
Assay %	T (F)
۶/۵	۱۲۰
۱۰	۲۰۰
۲۰	۳۰۰
۳۰	۴۰۰
۴۰	۴۷۰
۵۰	۵۵۰
۶۰	۶۵۰
۷۰	۷۵۰
۸۰	۸۵۰
۹۰	۱۱۰۰
۹۵	۱۳۰۰
۹۸	۱۴۷۵
۱۰۰	۱۶۷۰

و داده های مربوط به API Gravity به شرح جداول زیر می باشد:

OIL 1	
Mid % distillate	API Gravity
۵	۹۰
۱۰	۶۸
۱۵	۵۹/۷
۲۰	۵۲
۳۰	۴۲
۴۰	۳۵
۴۵	۳۲
۵۰	۲۸/۵
۶۰	۲۳
۷۰	۱۸
۸۰	۱۳/۵

OIL 2	
Mid % distillate	API Gravity
۲	۱۵۰
۵	۹۵
۱۰	۶۵
۲۰	۴۵
۳۰	۴۰
۴۰	۳۸
۵۰	۳۳
۶۰	۳۰
۷۰	۲۵
۸۰	۲۰
۹۰	۱۵
۹۵	۱۰
۹۸	۵

تعریف

فاکتور Watson (UOP)K که معیاری از پارافینی بودن برش می باشد :

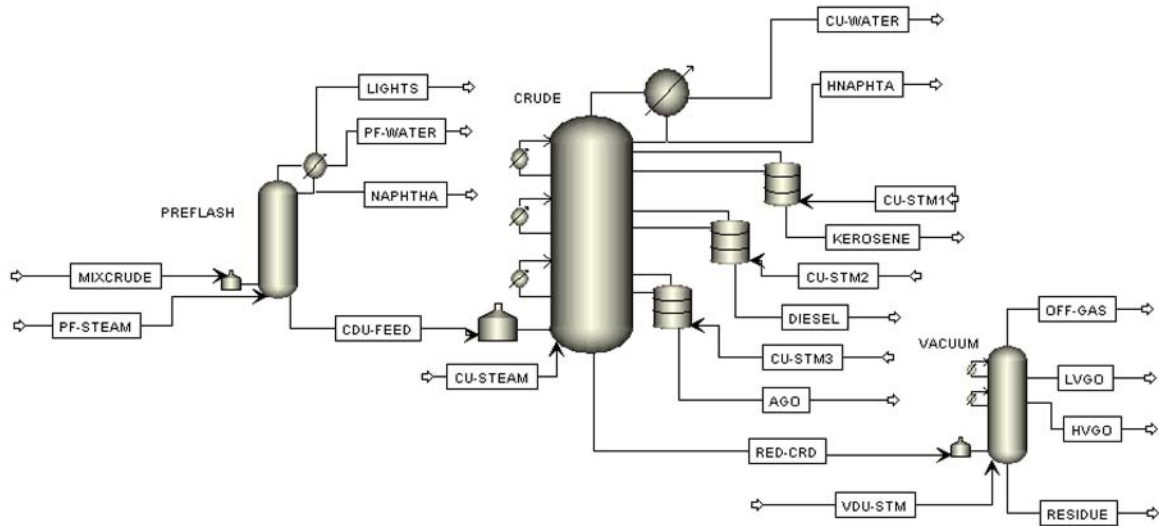
$$\text{Watson (UOP)K factor} = \frac{\sqrt[3]{BP_{\text{average}}}}{SG_{60^\circ F}}$$

قسمت اول : تعریف برش نفتی در محیط Assay Data Analysis

- دو برش OIL 1 و OIL 2 را به ترتیب با نسبت های ۰/۲ و ۰/۸ کسر حجمی ترکیب نموده و برش جدید MIXOIL را ایجاد نمایید و سپس برش جدید MIXOIL را بر اساس محدوده برش های تعیین شده در جدول زیر به مواد Pseudo Components تبدیل نمایید. برنامه را اجرا کرده و خواص ترکیبات Pseudo Components تولید شده را گزارش نمایید.

Lower Temp	Upper Temp	Increment
۱۰۰	۸۰۰	۲۵
۸۰۰	۱۲۰۰	۵۰
۱۲۰۰	۱۴۰۰	۱۰۰
۱۴۰۰	۱۶۴۰	۱۲۰

- مطلوبست رسم منحنی های تقطیر TBP ، ASTM D86 و ASTM D1160 در یک PLOT .
- پس از ایجاد برش نفتی در محیط Assay Data Analysis ، فرآیند تقطیر اتمسفریک و تقطیر در خلأ این برش نفتی را با مشخصات داده شده برای هر برج ، شبیه سازی نمایید. طرح کلی این فرآیند در صفحه بعدی ملاحظه می شود.



قسمت دوم : شبیه سازی برج PreFlash

- مدل ترمودینامیکی BK10 را برای شبیه سازی این فرآیند انتخاب نمایید.
- مشخصات خوراک نفت خام و بخار پشتیبانی ورودی به برج Pre Flash عبارتند از:

	MIXCRUDE
T (F)	۲۰
P (psi)	۶۰
Stdvol-Flow (bbl/day) MIXOIL	۱۰۰,۰۰۰

	PF-STEAM
T (F)	۴۰۰
P (psi)	۶۰
mass-Flow (lb/hr)	۵۰۰۰

- مشخصات برج Pre Flash (بدون ریپویلر و دارای یک کوره در خوراک ورودی)

مشخصات برج Pre Flash	
تعداد سینی های برج	۱۰
سینی ورود بخار و خوراک	۱۰
نوع کندانسور	جزئی
فشار کندانسور (psia)	۳۹/۷
دمای کندانسور (F)	۱۷۰
افت فشار کندانسور (psi)	۲
افت فشار برج (psi)	۳
دبی تخمینی محصول بالای برج $\left(\frac{bbl}{day}\right)$	۱۵۰۰۰
نوع کوره	Single Stage Flash
دمای کوره (F)	۴۵۰
فشار کوره (psia)	۵۰

- مطلوبست شبیه سازی برج Pre Flash به شرطی که دمای ۹۵% ASTM D86 برای گستره وسیعی از محصول نفتای بالای برج برابر ۳۷۵ F باشد. (متغیر مستقل را دبی محصول نفتا در نظر بگیرید).

- مقدار جریان محصول بالای برج را برای تحقق شرایط Design Spec بالا گزارش نمایید.
- نمودار پروفایل دمایی برج PreFlash را ترسیم نمایید.
- منحنی های TBP را برای جریان های خوراک و محصولات برج PreFlash ترسیم نمایید.

قسمت سوم : شبیه سازی برج تقطیر اتمسفریک

در این مرحله محصول خروجی از انتهای برج اول وارد برج تقطیر اتمسفریک می شود. این برج شامل سه Side Stripper و دو Pump Around است. مشخصات این برج همراه با متعلقات آن به شرح جدول ذیل است:

مشخصات برج Crude	
تعداد سینی های برج	۲۵
سینی خوراک	۲۲
نوع کندانسور	کلی
فشار کندانسور (psia)	۱۵/۷
افت فشار کندانسور (psi)	۵
افت فشار کل برج (psi)	۴
دبی تخمینی محصول بالای برج $\left(\frac{bbl}{day}\right)$	۱۳۰۰۰
نوع کوره	Single Stage Flash
Furnace Fractional Over Flash	۰/۰۳
فشار کوره (psia)	۲۴/۱۸

مشخصات خطوط بخار پشتیبانی:

	CU Steam	CU STM1	CU STM2	CU STM3
T (F)	۴۰۰	۴۰۰	۴۰۰	۴۰۰
P (psi)	۶۰	۶۰	۶۰	۶۰
m (lb/hr)	۱۲۰۰۰	۳۳۰۰	۱۰۰۰	۸۰۰

مشخصات پمپ های جانبی :

	P-1	P-2
Draw Stage	۸	۱۴
Return Stage	۶	۱۳
(bbl / day) Std Vol Flow	۴۹۰۰۰	۱۱۰۰۰
$(MMBTU / hr)$ Heat Duty	-۴۰	-۱۵

مشخصات استریپرهای جانبی :

	KEROSEN	DIESEL	AGO
Number Of Stages	۴	۳	۲
Liquid Draw Stage	۶	۱۳	۱۸
Overhead Return Stage	۵	۱۲	۱۷
(bbl / day) Product Std Vol Flow	۱۱۷۰۰	۱۶۵۰۰	۸۵۰۰

- مطلوبست شبیه سازی برج Crude به شرطی که دمای ASTM D86 95% برای گستره وسیعی از محصول نفتای سنگین بالای برج برابر ۳۲۵ F و دمای ASTM D86 95% برای گستره وسیعی از محصول دیزل میانه برج برابر ۶۴۰ F باشد. (متغیرهای مستقل را دبی محصول نفتا (Distillate Flow Rate) و دبی محصول دیزل (Bottom Flow Rate) در نظر بگیرید).
- میزان انرژی مصرفی کوره را گزارش نمایید.
- دمای جریان های برگشتی از پمپ های جانبی را گزارش نمایید.
- مقدار جریان های محصولات نفتا و دیزل را با تحقق شرایط Design Spec بالا گزارش نمایید.
- منحنی های ASTM را برای جریان های خوراک و محصولات برج CRUDE ترسیم نمایید.

قسمت چهارم : شبیه سازی برج تقطیر در خلأ

در این قسمت محصول پایین برج تقطیر اتمسفریک را وارد برج تقطیر خلأ می نماییم. مشخصات این برج همراه با متعلقات آن به شرح جداول ذیل است:

مشخصات برج Vacuum	
تعداد سینی های برج	۶
سینی خوراک	۶
کندانسور	ندارد
فشار بالای برج (mmHg)	۶۰
فشار پایین برج (mmHg)	۷۰
دبی تخمینی محصول LVGO $\left(\frac{bbl}{day}\right)$	۸۰۰۰
نوع کوره	Single Stage Flash with Liquid Runback
Furnace Fractional Over Flash	۰/۰۰۶
فشار کوره (psia)	۲/۰۳

مشخصات خطوط بخار پشتیبانی:

CU Steam	
T (F)	۴۰۰
P (psi)	۶۰
m (lb/hr)	۲۰۰۰۰

مشخصات جریان های محصول:

	LVGO	HVGO
Stage	۲	۴
Phase	Total Liquid	Liquid
m (bbl/day)	۸۰۰۰	۱۷۰۰۰

لازم به ذکر است دبی وارد شده برای جریان LVGO فقط یک دبی تخمینی است.

مشخصات پمپ های جانبی :

	P-1	P-2
Draw Stage	۲	۴
Return Stage	۱	۳
(<i>bbl / day</i>) Std Vol Flow	۲۰۰۰۰	۴۹۰۰۰
(<i>MMBTU / hr</i>) Heat Duty	-۲۸/۶	-۸۰

- مطلوبست شبیه سازی برج Vacuum به شرطی که بار حرارتی P-1 (Pump Around Duty) طوری تنظیم شود که دمای محصول بالایی برج (Stage Temperature) ۱۵۰ F شود.
- میزان انرژی مصرفی کوره را گزارش نمایید.
- دمای جریان های برگشتی از پمپ های جانبی را گزارش نمایید.
- نتایج جریان های محصولات برج Vacuum را گزارش نمایید.
- نمودارهای پروفایل برج Vacuum را ترسیم نمایید.
- منحنی های TBP را برای جریان های خوراک و محصولات برج Vacuum ترسیم نموده و نتایج را تحلیل نمایید.



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

ASPEN PLUS

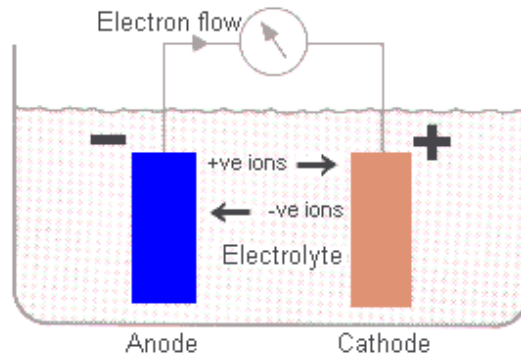
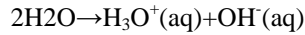
جلسه دوازدهم

- شبیه سازی فرآیند های شیمیایی در محیط های کنترلیت
- تعریف محلول های کنترلیت
- آشنایی با ترمودینامیک محلول های کنترلیت
- معرفی ترکیبات کنترلیت و واکنش ها با استفاده از Electrolyte Wizard
- تمرین ها

شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی در محیط های الکترولیتی

مقدمه

محلولهای آبی حاوی یون ، الکتروسیته را هدایت می کنند. آب خالص ، خود به مقدار جزئی یونیده می شود و رسانای ضعیفی است.

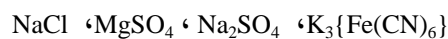


حرکت یونهای مثبت بطرف کاتد و یونهای منفی بطرف آند

ماده حل شده در یک محلول آبی که رسانایی الکتریکی آن بیش از آب خالص است، الکترولیت نامیده می شود. یک الکترولیت به طور کامل یا به طور جزئی در آب یونیده می شود. مواد حل شده کووالانسی که در محلول فقط به صورت مولکولی وجود دارند، رسانایی حلال را زیاد نمی کنند. این نوع مواد ، غیر الکترولیت نامیده می شوند. برای اکثر سیستم های الکترولیتی آب به عنوان حلال حضور دارد و برای سیستم های چند حلاله اجزای دیگری به عنوان حلال در محلول حضور دارند. الکترولیت ها کلاً به دو دسته تقسیم می شوند:

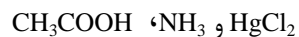
الکترولیت های قوی

این الکترولیت ها در محلول آبی به صورت کاملاً یونی هستند. چند نمونه از الکترولیت های قوی ، عبارتند از:



الکترولیت های ضعیف

الکترولیت های ضعیف به ترکیبات کووالانسی قطبی گفته می شود که در محلول آبی ، به طور ناقص تفکیک می شوند. رسانایی یک محلول ۱ مولار از یک الکترولیت ضعیف کمتر از رسانایی محلول ۱ مولار از یک الکترولیت قوی است. چند نمونه از الکترولیت های ضعیف عبارتند از:



در محلول های الکترولیت تجزیه مولکول ها در داخل حلال منجر به تغییر خواص فیزیکی و شیمیایی فاز مایع می گردد و گاهی این اجزای مولکولی تجزیه شده در داخل حلال به صورت نمک رسوب می کنند. لازم به ذکر است که یون ها و نمک ها اجزای غیر قابل تبخیرند و همیشه در محلول حضور دارند. محلول های الکترولیت دارای سه ویژگی متمایز زیر هستند:

- غیر ایده آل بودن فاز مایع از نظر ترمودینامیکی
- نوع واکنش های محلول های الکترولیت در فاز مایع
- ترکیبات حقیقی و ظاهری در داخل محلول

همانطور که گفته شد کنترلرولیت ها از اجزای مولکولی هستند که در داخل حلال به طور کامل به اجزای یونی تجزیه می شوند. تجزیه ترکیبات مولکولی در داخل محلول منجر به دو گروه از ترکیبات در داخل فاز مایع می شود:

- ترکیبات حقیقی (True Components)
- ترکیبات ظاهری (Apparent Components)

به اجزای یونی که در داخل فاز مایع وجود دارند اجزای حقیقی و به اجزای حل شده در داخل حلال که هیچ واکنش یونی در آنها اتفاق نیافتاده است ، اجزای ظاهری اطلاق می شود. این دو گروه از ترکیبات نقش مهمی در سیستم های کنترلرولیت دارند و نرم افزار Aspen هم سیستم های کنترلرولیتی را بر اساس یکی از این دو روش حل می کند. در روش ترکیبات حقیقی نرم افزار نتایج را در ترم های یونی و مولکولی گزارش می کند ولی در روش ترکیبات ظاهری نتایج بر اساس اجزای اصلی است. به عنوان مثال در روش ترکیبات ظاهری H_2S بیانگر S^{2-} , HS^- و خود H_2S است. محاسبات پیش فرض ASPEN بر اساس روش ترکیبات حقیقی است. به طور کلی زمانی از روش ترکیبات حقیقی استفاده می شود که ترکیبات ظاهری به راحتی قابل شناسایی در محلول نباشند و اجزای یونی هدف اصلی محاسبات باشند.

روش ترکیبات حقیقی بیشتر در کنترلرولیت های پیچیده مانند تصفیه پساب ها (Wast Water Treatment) و روش ترکیبات ظاهری بیشتر در کنترلرولیت های ضعیف مانند خالص سازی آب ترش (Sour Water Stripping) کاربرد دارد.

نکته

- روش ترکیبات حقیقی فقط در برج های تقطیر RadFrac و RateFrac قابل استفاده است و با مدل های دیگر تقطیر سازگاری ندارد.
- سیستم های مایع-مایع فقط با روش ترکیبات ظاهری قابل شبیه سازی هستند.
- روش اجزای ظاهری در راکتور RGIBBS فقط برای واکنش های فاز بخار قابل استفاده است ولی برای راکتورهای دیگر محدودیت کاربردی ندارد.
- روش اجزای حقیقی در راکتورهای RSTOIC و RYIELD قابل استفاده است ولی برای راکتورهای RGIBBS و RBATCH قابل استفاده نیست.
- برای واکنش هایی که شامل اجزای فرار می باشند (مانند HCL با NaCN) ، روش ترکیبات حقیقی موثرترند.
- برای جداسازی نمک ها روش ترکیبات حقیقی موثرترند.
- مدل هایی که از روش ترکیبات حقیقی استفاده می کنند ، به جز Tear Stream ها و برج های RateFrac با محلول کنترلرولیت های قوی ، آسانتر همگرا می شوند.

ترمودینامیک محلول های کنترلرولیت

ترمودینامیک محلول های کنترلرولیت ارتباط مستقیمی با ترکیبات تجزیه شده در داخل حلال و واکنش های مربوطه دارد. به طور کلی تجزیه های یونی در داخل حلال به اشکال زیر صورت می پذیرند:

- تجزیه کامل کنترلرولیت های قوی
- تجزیه جزئی کنترلرولیت های ضعیف
- واکنش های یونی بین اجزای یونی
- تشکیل یون های کمپلکس
- رسوب و تجزیه نمک ها در حلال

آنچه مسلم است شبیه سازی فرآیندهای درگیر با محلول های کنترلرولیتی ، به خاطر پیچیدگی بسیار زیاد ترمودینامیک این محلول ها ، بسیار پیچیده تر از محلول های غیر کنترلرولیت است. در اکثر سیستم های غیر کنترلرولیتی واکنش های شیمیایی

در داخل راکتور ها به وقوع می پیوندند در صورتیکه در محلول های الکترولیتی واکنش های تعادلی یونی در تمام مسیرها و تجهیزات فرآیندی رخ می دهند که این امر باعث افزایش حجم محاسباتی می گردد.

مدل های ترمودینامیکی الکترولیت ها

در شبیه سازی فرآیندهای الکترولیتی به دلیل غیر ایده آل بودن محلول برای محاسبات تعادل فازی ، تعادل شیمیایی و محاسبات موازنه جرم و انرژی خواص ترمودینامیکی زیر در شرایط دما و فشار داده شده باید محاسبه شوند:

- ضرایب فعالیت
- آنتالپی
- انرژی آزاد گیبس

که در این میان ضرایب فعالیت (ضرایب فعالیت یون ها ، ضرایب فعالیت مولکول های حلال و ضرایب فعالیت اجزاء حل شونده) از مهم ترین خواص قابل محاسبه برای شبیه سازی این نوع فرآیندها می باشند. بدین منظور مدل های مناسب ترمودینامیکی برای این فرآیندها عبارتند از:

- Pitzer
- Electrolyte NRTL
- Zemaitis

که از بین این مدل ها مدل Electrolyte NRTL قوی ترین مدل برای توصیف خواص الکترولیت ها به حساب می آید و قادر به شبیه سازی تمام محلول های الکترولیتی است. این مدل برای محلول های آبی با چندین یون و برای محدوده وسیعی از غلظت ها و دماها قابل استفاده است. این مدل می تواند محلول های بسیار رقیق الکترولیت ها و همچنین محلولهای غیر الکترولیت را شبیه سازی نماید. در محلول های غیر الکترولیت این معادله به معادله NRTL تبدیل می شود. در این مدل برای محاسبه خواص فاز گاز از مدل RK استفاده می شود.

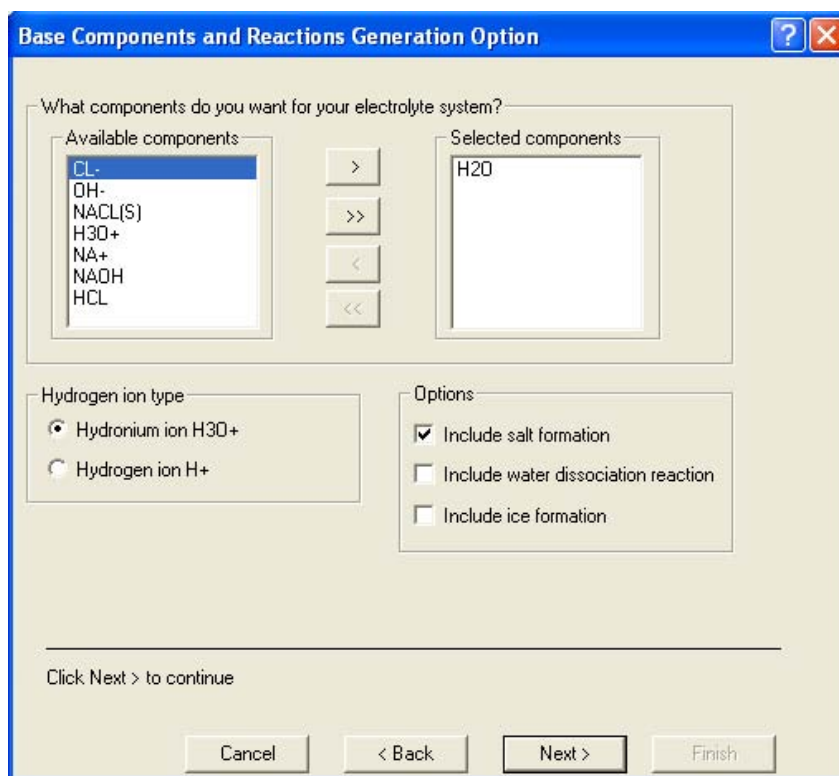
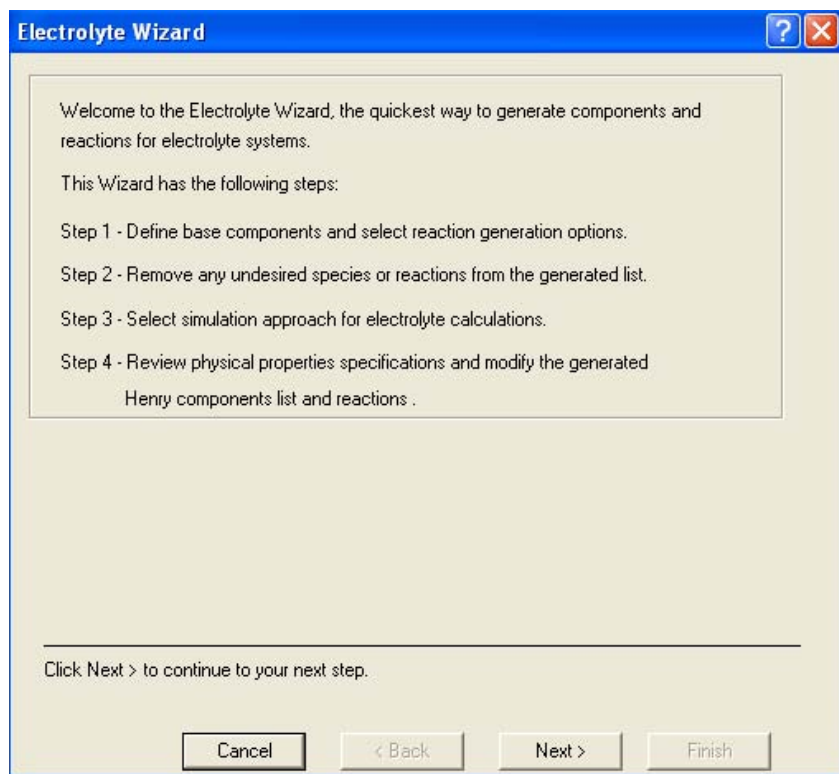
در این مدل اجزاء غیر قابل تجزیه به یون ها در حلال و حلالیت گازهای فوق بحرانی از قانون هنری تبعیت می کنند و ضرایب هنری برای مواد مختلف در بانک اطلاعاتی ASPEN موجود است.

برخی از مهم ترین سیستم های الکترولیتی که نرم افزار ASPEN قادر به شبیه سازی آنهاست ، عبارتند از:

- محلول های آمین (DGA , MEA , DEA , MDEA) در واحدهای شیرین سازی گاز طبیعی
- محلول های ترش (مخلوط آب با گازهای ترش از قبیل H_2S , NH_3 , CO_2 , HCN و ...)
- اسیدها و بازهای مخلوط با آب
- محلول های آب و نمک که این محلول می تواند شامل واکنش های رسوب هم باشد.

معرفی ترکیبات الکترولیت و واکنش ها با استفاده از Electrolyte Wizard

برای شبیه سازی فرآیندهای الکترولیت قبل از هر چیزی می بایست از وجود آب به عنوان یکی از ترکیبات انتخاب شده در لیست ترکیبات اطمینان حاصل نمود. سپس در صفحه Specification از پوشه Component روی گزینه Elec Wizard کلیک می کنیم. پنجره Electrolyte Wizard ظاهر خواهد شد. در این پنجره چهار مرحله برای شبیه سازی در محیط الکترولیت ها ذکر شده است که با کلیک کردن روی دکمه Next وارد مرحله اول آن یعنی انتخاب مواد تشکیل دهنده سیستم الکترولیتی می شویم.



این صفحه (Base Components and Reactions Generation Option) شامل قسمت های مختلف زیر است که به توضیح آنها پرداخته می شود:

- **Hydrogen ion type**: در این قسمت نوع هیدروژن موجود در سیستم تعیین می گردد. برای بسیاری از کاربردها توصیه می شود که H_3O^+ انتخاب شود.

- **Options**: این قسمت دارای سه گزینه زیر است:

• گزینه Include Salt Formation

این گزینه به صورت پیش فرض فعال است و اگر به حالت غیر فعال در آید به این معنی است که ASPEN در هنگام ایجاد واکنش هایی که امکان وقوع دارند، آن دسته از واکنش هایی که منجر به تشکیل نمک می شوند را ایجاد نکند. اگر این گزینه علامت خورده باشد حل مسئله الکترولیتی خیلی آسان خواهد شد. تنها مشکل اینست که ASPEN قادر نیست تا ته نشینی نمک را در داخل محلول در نظر بگیرد.

• گزینه Include Water Dissociation

با انتخاب این گزینه واکنش تجزیه آب ($2H_2O \rightarrow H_3O^+ + OH^-$) هم جزو واکنش های الکترولیتی در نظر گرفته می شود. این گزینه به صورت پیش فرض انتخاب نشده است ولی در صورت عدم انتخاب هم اگر واکنش های تولید شده شامل یون های H_3O^+ و OH^- باشند واکنش Water Dissociation به طور اتوماتیک در نظر گرفته خواهد شد. برای سیستم هایی هم که دارای یون های H_3O^+ و OH^- نباشند، در صورتی که در محاسبات نیاز به اندازه گیری PH و POH محلول باشد، این واکنش باید در نظر گرفته شود.

• گزینه Ice Include Formation

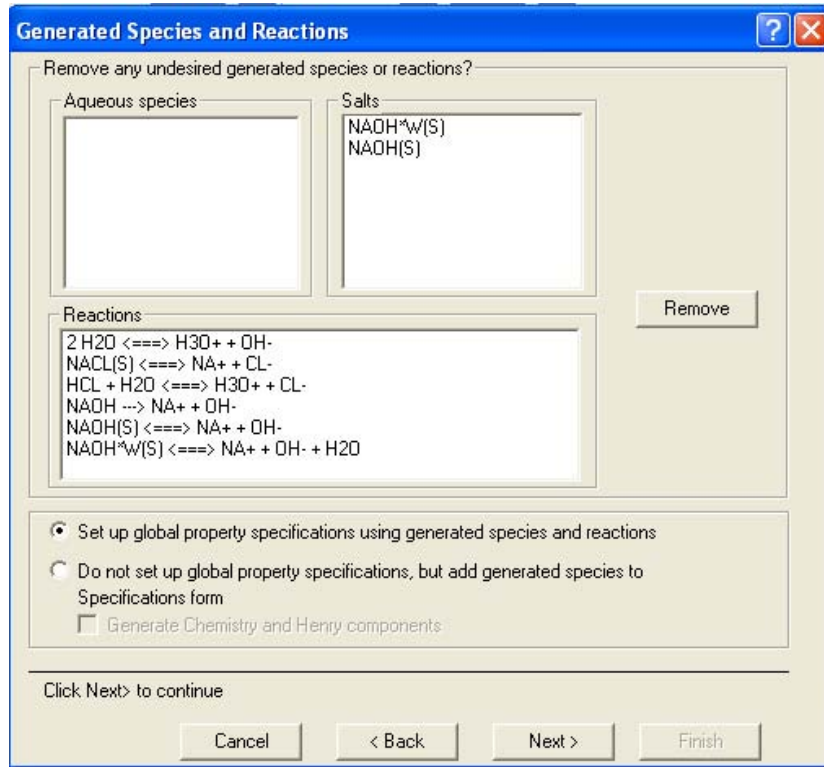
با انتخاب این گزینه محاسبات و تنظیمات مربوط به تشکیل یخ اعمال می شود. بعد از تنظیمات این پنجره با کلیک کردن روی گزینه Next وارد پنجره Generated Species and Reactions خواهیم شد. این صفحه شامل قسمت های زیر است:

– Remove any undesired generated species or reactions?

این قسمت شامل ۳ بخش می باشد. اولی مربوط به ذرات آبی (Aqueous Species)، دومی مربوط به نمک های تشکیل شده و سومی مربوط به لیست واکنش های شیمیایی تشکیل شده است. در بخش سوم نمک های جامد تشکیل شده در واکنش ها با علامت s در کنار نام ترکیب مشخص شده اند. علامت فلش های دو جهته در واکنش ها هم به مفهوم تعادل یونی و یا رسوب نمک می باشد. در این قسمت جهت حذف هر کدام از واکنش های موجود روی آن کلیک کرده و سپس روی دکمه Remove کلیک شود.

– در قسمت بعدی دو حالت قابل انتخاب است. حالت Global و حالت not Global. در صورت انتخاب حالت اول (Global) عملیات زیر انجام خواهد گرفت:

۱. اجزاء تولید شده را در صفحه انتخاب مواد می گذارد.



۲. واکنش های تولید شده را در پوشه Reaction می گذارد.
۳. ثابت های تعادلی واکنش ها را در پوشه Reaction می گذارد.
۴. ترکیبات فوق بحرانی (ترکیبات غیر قابل میعان) تحت عنوان ترکیبات هنری در پوشه مربوطه می گذارد.
۵. روش ENRTL را به عنوان ضریب فعالیت ترمودینامیکی انتخاب می کند.
۶. کلیه ضرایب دوتایی و پارامترهای جفت (Pair Parameters) را برای مدل ENRTL تولید و جایگذاری می کند.

پس از این مراحل با کلیک روی دکمه NEXT صفحه Simulation Approach ظاهر خواهد شد. اولین قسمت از این پنجره Which Simulation Approach do you want for your electrolyte calculation? می باشد که خود دارای دو قسمت زیر است:

- True Component Approach
- Apparent Component Approach

که توضیحات مربوط به آنها قبلاً داده شد. در مرحله بعدی با کلیک روی دکمه NEXT صفحه Summary ظاهر خواهد شد. در این صفحه خلاصه ای از تنظیماتی که در مراحل قبل انجام شده است و اطلاعاتی راجع به ترکیبات و بانک های اطلاعاتی در اختیار کاربر قرار داده می شود.

Simulation Approach

Which simulation approach do you want for your electrolyte calculation?

True component approach
 Apparent component approach

Generated reactions and Henry components will be placed in

Reactions Chemistry form. Chemistry ID : GLOBAL

Components Henry-Comps form. Henry component ID : GLOBAL

Click Next > to create the above Chemistry ID and Henry component ID

Cancel < Back Next > Finish

Summary

Properties used for your electrolyte system

Property method : ELECNRTL Chemistry ID : GLOBAL

Simulation approach : True component Henry component ID : GLOBAL

Components and databanks

The generated components now appear on the Components Specifications form.

Review generated Henry-Comps list Modify / Add reactions

You have completed the Electrolyte Wizard . Click Finish to exit.

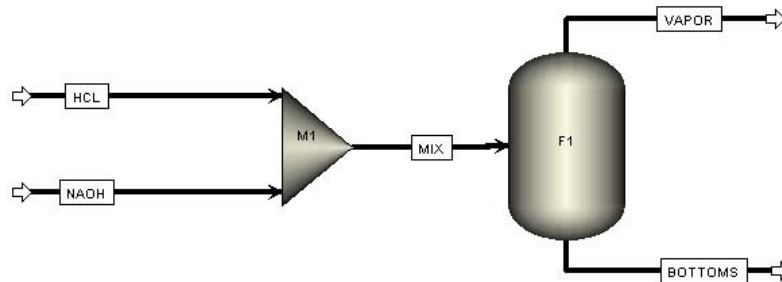
Cancel < Back Next > Finish

در قسمت Review generated Henry-comps list کاربر قادر خواهد بود تا تغییرات و اصلاحات لازم را در مورد اجزائی که از قانون هنری تبعیت می کنند اعمال کند.

تمرین ۱:

دو جریان خوراک محلول های آبی HCL و NaOH با مشخصات داده شده داخل یک میکسر شده و پس از اختلاط کامل به داخل یک فلش درام فرستاده می شوند.

Neutralization



مشخصات جریان خوراک HCL	
دما (C)	۲۵
فشار (bar)	۱
H ₂ O (mole flow) $\left(\frac{\text{kmole}}{\text{hr}}\right)$	۱۰
HCL (mole flow) $\left(\frac{\text{kmole}}{\text{hr}}\right)$	۱

مشخصات جریان خوراک NaOH	
دما (C)	۲۵
فشار (bar)	۱
H ₂ O (mole flow) $\left(\frac{\text{kmole}}{\text{hr}}\right)$	۱۰
NaOH (mole flow) $\left(\frac{\text{kmole}}{\text{hr}}\right)$	۱/۱

- افت فشار جداکننده را برابر صفر و VF آنرا برابر ۰/۷۵ در نظر بگیرید.
- فرآیند بالا را بر اساس ترکیبات حقیقی شبیه سازی نموده و مشخصات جریان های خروجی را به همراه دمای هر جریان و دمای نقطه حباب هر جریان و کسر جرمی ترکیبات ظاهری (Apparent) آن گزارش کرده و با مشخصات جریان MIX مقایسه و نتیجه گیری نمایید.

نکته:

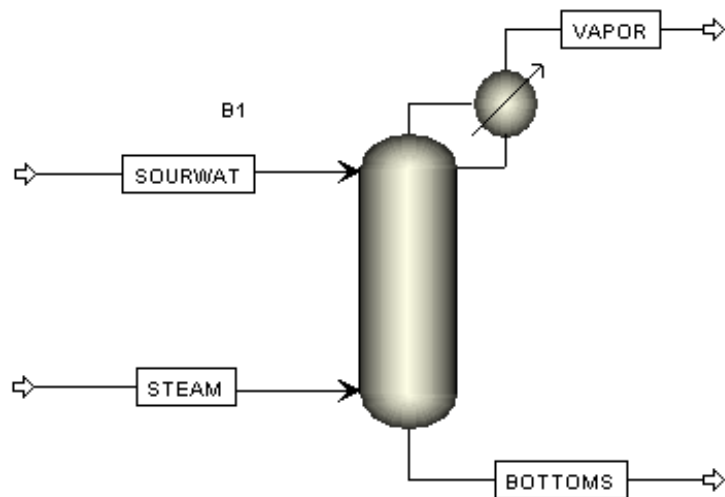
مرتبه (Rank) ماتریس اتمیک اجزاء شرکت کننده در واکنش های یونیزاسیون برابر ۴ است. بنابراین تعداد واکنش های مستقل یونیزاسیون برابر ۴ است.

$$\underline{M} = \begin{matrix} \text{Na} \\ \text{Cl} \\ \text{H} \\ \text{O} \end{matrix} \begin{bmatrix} \text{NaOH} & \text{HCl} & \text{H}_2\text{O} & \text{H}_3\text{O}^+ & \text{OH}^- & \text{Na}^+ & \text{Cl}^- & \text{NaCl(s)} \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \text{Rank (M)}=4$$

تمرین ۲

در این فرآیند شیرین سازی محلول ترش (مخلوط آب با گازهای ترش از قبیل CO_2 , NH_3 , H_2S) به کمک یک جریان بخار در داخل یک برج دفع با کندانسور جزئی اتفاق می افتد. مشخصات جریان های ورودی به شرح ذیل می باشند:

مشخصات جریان خوراک SOURWAT	
دما (F)	۱۹۰
فشار (psi)	۱۵
دبی جرمی کلی $\left(\frac{lb}{hr}\right)$	۱۰۰۰۰
H ₂ O (mass fraction)	۰/۹۹۷
H ₂ S (mass fraction)	۰/۰۰۱
NH ₃ (mass fraction)	۰/۰۰۱
CO ₂ (mass fraction)	۰/۰۰۱
مشخصات جریان STEAM	
VF	۱
فشار (psi)	۱۵
دبی جرمی کلی $\left(\frac{lb}{hr}\right)$	۲۰۰۰



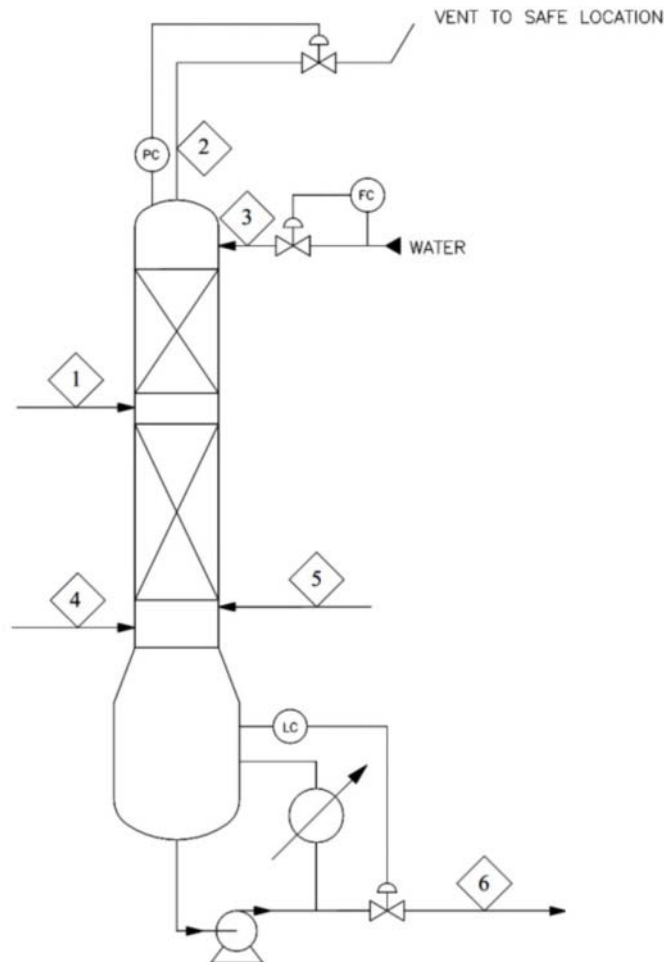
مشخصات برج تقطیر عبارتند از:

مشخصات برج دفع	
تعداد مراحل برج	۱۰
سینی خوراک SOURWAT	۳
نوع کندانسور	جزئی
فشار کل برج (psi) (ایزوبار)	۱۵
نسبت جریان برگشتی مولی	۲۵

- مطلوبست شبیه سازی فرآیند بالا بر اساس ترکیبات ظاهری به طوریکه با تغییر میزان RR و دبی جرمی جریان STEAM میزان آمونیاک در پایین برج به ۵ ppm و دمای کندانسور به ۱۹۰ F برسد. (محدوده تغییرات RR را بین ۵۰-۱۵ و محدوده تغییرات دبی جرمی جریان STEAM را بین $\left(\frac{lbmole}{hr}\right)$ ۲۰۰-۵۰ در نظر بگیرید).
- دبی جریان روی همه سینی های برج را همراه با کسر اجزاء به صورت حقیقی و PH هر مرحله گزارش نمایید. همچنین مقدار K را برای سینی ۱ در دو حالت ترکیبات ظاهری و ترکیبات حقیقی مقایسه نمایید.

تمرین ۳:

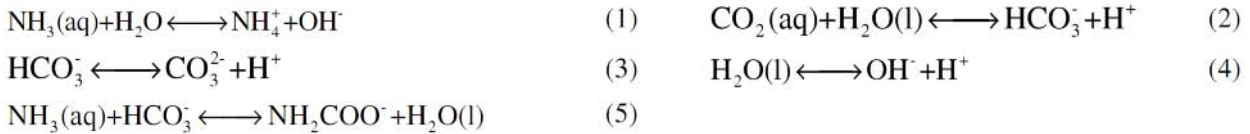
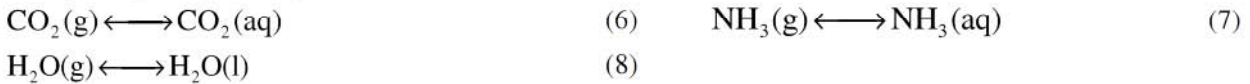
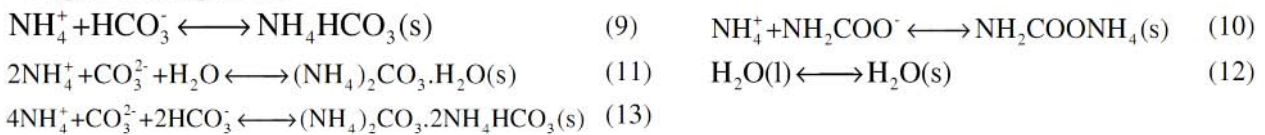
آب، آمونیاک و دی اکسید کربن در یک برج تقطیر واکنشی با یکدیگر واکنش داده و آمونیوم بی کربنات تولید میکنند. این برج یک برج آکنده بوده و دارای دو بستر پکینگ هر کدام به ارتفاع ۲۵۰۰ میلیمتر می باشد. پکینگ مورد استفاده از نوع sulzer 250Y است. فاصله بین دو بستر آکنده نیز ۵۰۰ میلیمتر است. قطر بالای برج ۶۵۰ و قطر پایین برج ۲۵۶۰ میلیمتر است. فرآیند فوق را با مشخصات داده شده در محیط الکترولیتی شبیه سازی و نتایج جریانها را گزارش نمایید.



مشخصات جریان های خوراک

stream	1	3	4	5
state	Liq	Liq	Gas	Gas
T,C	35	25	35	25
P, barg	2.28	2.28	2.28	2.28
Composition(mass)				
CO2	.48		1276.23	
H2O	10800.88	1600	23.73	
NH3	564.96		35.75	20.44
Ammonium bicarbonate	0	0	0	0

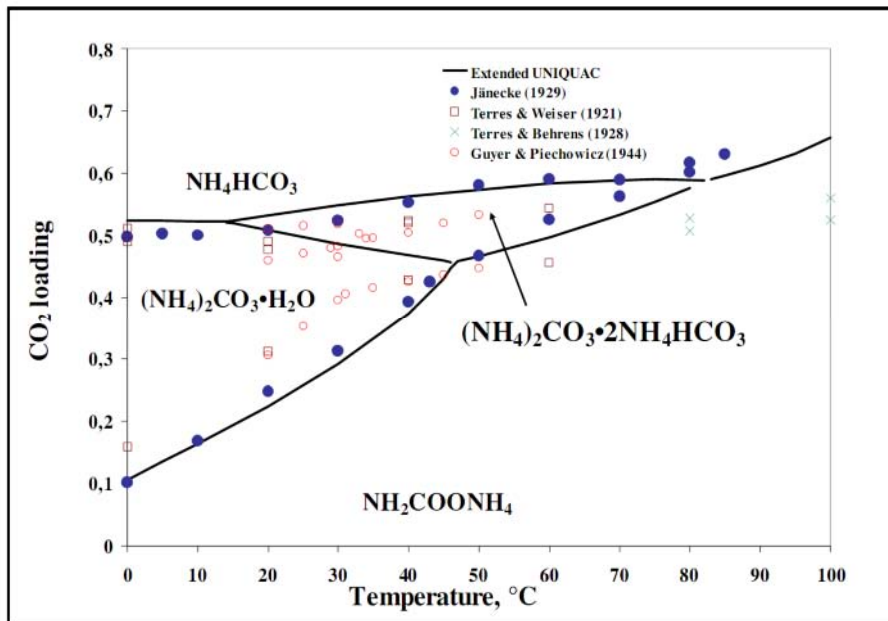
این فرآیند به دلایل اینکه یک سیستم سه فازی (گاز-مایع-جامد) است، واکنش های شیمیایی گرمازا در آن رخ می دهد، رسوب جامد بی کربنات سدیم روی ضریب انتقال حرارت تأثیر می گذارد و ... یک فرآیند پیچیده به حساب می آید. برای سیستم سه جزئی آب-آمونیاک-دی اکسید کربن در محیط الکترولیتی واکنش های زیر را می توان در نظر گرفت:

Speciation equilibriaVapor-liquid equilibriaLiquid-solid equilibria

Hence, five different solids can be formed during the process:

- Ammonium bicarbonate: NH_4HCO_3
- Ammonium carbonate: $(\text{NH}_4)_2\text{CO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$
- Ammonium carbamate: $\text{NH}_2\text{COONH}_4$
- Sesqui-carbonate: $(\text{NH}_4)_2\text{CO}_3 \cdot 2\text{NH}_4\text{HCO}_3$
- Ice: H_2O

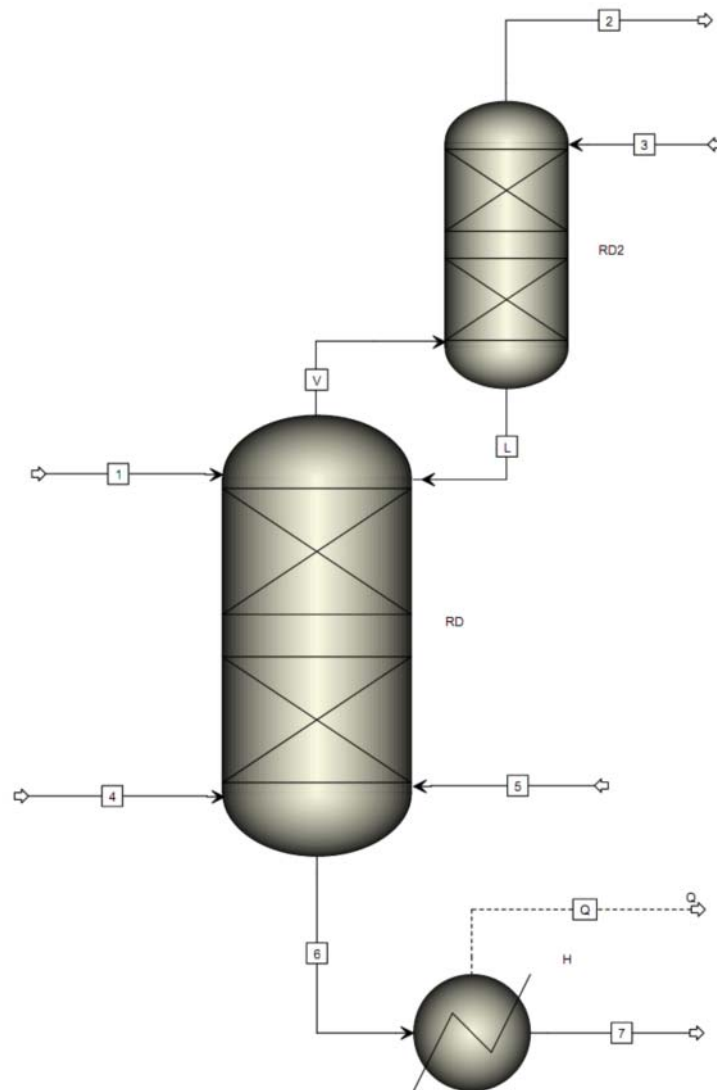
دیاگرام فازی تشکیل نمک ها در شکل زیر مشاهده می شود:



Phase diagram of the CO_2 - NH_3 - H_2O system

نکته:

برای سیستم CO_2 - NH_3 - H_2O معادله ترمودینامیکی اصلاح یافته UNIQUAC توسط Thomsen and Rasmussen توسعه داده شده است. در این مدل ضرایب اکتیویته در فاز مایع به کمک معادله اکتیویته UNIQUAC و ضرایب فوگاسیته فاز گاز به کمک معادله Soave-Redlich-Kwong (SRK) محاسبه می شوند. کلیه پارامترهای این مدل بر اساس بیش از ۲۰۰۰ دیتا تجربی روی تعادل فازی سیستم CO_2 - NH_3 - H_2O محاسبه شده اند و در بانک اطلاعاتی IVC-SEP electrolyte data bank که شامل خواص حرارتی و تعادل جامد مایع می شوند قرار دارد.



FLOWSHEET IN ASPEN PLUS



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

ASPEN PLUS

جلسه سیزدهم

- شبیه سازی فرآیندهای همراه با جامدات
- تمرین ها

شبیه سازی فرآیندهای همراه با ترکیبات جامد

جهت شبیه سازی فرآیندهای همراه با ترکیبات جامد قبل از هر چیزی می بایست نوع شاخه جریان های ورودی به واحد را از نظر نوع اطلاعات ورودی مشخص کرد. در نرم افزار ASPEN PLUS جهت انجام این کار باید در صفحه Setup قسمت Stream Class نوع شاخه جریان را انتخاب کرد. که عبارتند از:

MIXED : CONVEN	❖
MIXED + NC : MIXNC	❖
MIXED + CISOLID : MIXCISLD	❖
MIXED + NC + PSD : MIXNCPSD	❖
MIXED + CISOLID+ PSD : MIXCIPSD	❖
MIXED + CISOLID + NC : MIXCINC	❖
MIXED + CI + NC + PSD : MCINCPSD	❖

همانطور که ملاحظه می شود هر کدام از این Stream Class ها از یک یا چندین Sub Stream تشکیل شده اند که انواع آنها عبارتند از :

- **MIXED** : شامل ترکیبات متداول (Conventional) (جامد یا غیر جامد) می شود که حالت خالص دارند و با مشخصات MW ، دمای جوش ، فشار بخار ، ساختمان مولکولی و ظرفیت گرمایی مشخص می شوند. این ترکیبات در تعادلات شیمیایی و فازی گاز - مایع - جامد شرکت می کنند.
- **Conventional Inert Solid (CISOLID)** : شامل ترکیبات متداول می شود که در یک فاز جامد ظاهر می شوند. این ترکیبات در تعادلات فازی شرکت نمی کنند ولی در تعادلات شیمیایی می توانند شرکت کنند. به این جامدات به این دلیل که در تعادلات فازی شرکت نمی کنند جامدات بی اثر گفته می شود.
- **Nonconventional (NC)** : شامل ترکیبات غیر متداول می شوند که در فاز جامد ظاهر می شوند و بیشتر در Solid Handling کاربرد دارند. ترکیبات NC ترکیباتی هستند که از ترکیب چند ترکیب خالص با نسبت های متفاوت به وجود می آیند. مانند ذغال که از ترکیب مواد جامد با نسبت های متفاوت به وجود می آیند. این ترکیبات در تعادلات فازی و شیمیایی شرکت نمی کنند و فرقی عمده آنها با ترکیبات متداول در این است که با تخمین آنتالپی و دانسیته برای آنها به روش یک سری ضرایب تجربی که Component Attribute گفته می شود ، سایر خواص ترمودینامیکی دیگر محاسبه می شوند. برای این ترکیبات قادر به اختصاص غلظت در شاخه جریان نیستیم.
- **Particle Size Distribution (PSD)** : اشاره به توزیع اندازه ذرات جامد دارد .

Component Attribute ها

Component attribute به ترم هایی از یک مجموعه مشخصه های قابل شناسایی در ترکیبات NC گفته می شود که برای محاسبه خواص فیزیکی لازم است. از Component Attribute که بیانگر حالت ماده توسط یک یا چند جزء اصلی تشکیل دهنده آن می باشد ، برای تخمین آنتالپی و دانسیته ترکیبات NC استفاده می شود. معادلات حالت استاندارد و واحد های عملیاتی ASPEN PLUS از این Attribute ها در محاسبات مختلف استفاده نمی کنند اما با داشتن این خصوصیات می توان به خواص دیگر مواد که در محاسبات موازنه جرم و انرژی نقشی ندارند (رنگ و بو ...) دسترسی پیدا کرد. قابل ذکر است که Component Attribute را برای ترکیبات Conventional هم می توان به کار برد. انواع Component Attribute ها عبارتند از:

• PROXANAL :

این نوع Attribute از نوع Proximate Analysis می باشد که بر پایه درصد های وزنی اجزاء رطوبت (بر مبنای تر) ، کربن (بر مبنای خشک) ، مواد فرار و خاکستر می باشند.

• ULTANAL :

این نوع Attribute از نوع Ultimate Analysis می باشد که بر پایه درصد های وزنی اجزاء خاکستر (بر مبنای خشک) ، کربن (بر مبنای خشک) ، هیدروژن (بر مبنای خشک) ، نیتروژن (بر مبنای خشک) ، کلرین (بر مبنای خشک) ، سولفور (بر مبنای خشک) و اکسیژن (بر مبنای خشک) می باشند.

• SULFANAL :

این نوع Attribute از نوع Sulfur Analysis می باشد که بر پایه درصد های وزنی ذغال (پیریتیک (بر مبنای خشک) ، سولفات (بر مبنای خشک) و مواد آلی (بر مبنای خشک)) می باشند.

• GENERAL :

این نوع Attribute از نوع General Constituent Analysis می باشد که بر پایه درصد های وزنی اجزاء اصلی شماره ۱-۲۰ می باشند.

برای انتخاب یک یا چند نوع Attribute برای ترکیبات Conventional یا Nonconventional باید در قسمت Data Browser ، از پوشه Components وارد قسمت Attr-Comps شد.
برای مثال در مدل HCOALGEN برنامه از Component attribute های PROXANAL(PROXIMATE ANALYSIS) و ULTANAL(ULTIMATE ANALYSIS) و SULFANAL (SULFUR ANALYSIS) برای محاسبه آنتالپی، ظرفیت حرارتی و گرمای استاندارد تشکیل ذغال استفاده می کند.

معادلات حالت مورد استفاده در ترکیبات Nonconventional

معادلات مختلف برای محاسبه آنتالپی در ترکیبات Nonconventional عبارتند از:

: HCOALGEN

مدل آنتالپی ذغال است که Attribute مورد نیاز برای آن SULFANAL , PROXANAL , ULTANAL می باشند.

: HBOIE-R8

مدل آنتالپی ذغال است که Attribute مورد نیاز برای آن SULFANAL , PROXANAL , ULTANAL می باشند.

: HCJ1BOIE

مدل آنتالپی ذغال است که Attribute مورد نیاز برای آن SULFANAL , PROXANAL , ULTANAL می باشند.

: HCOAL-R8

مدل آنتالپی ذغال است که Attribute مورد نیاز برای آن SULFANAL , PROXANAL , ULTANAL می باشند.

: ENTHGEN

Attribute مورد نیاز برای آن GENERAL می باشد.

معادلات مختلف برای محاسبه دانسیته در ترکیبات Nonconventional عبارتند از:

: DCHARIGT

مدل دانسیته ذغال است که Attribute مورد نیاز برای آن SULFANAL, ULTANAL می باشند.

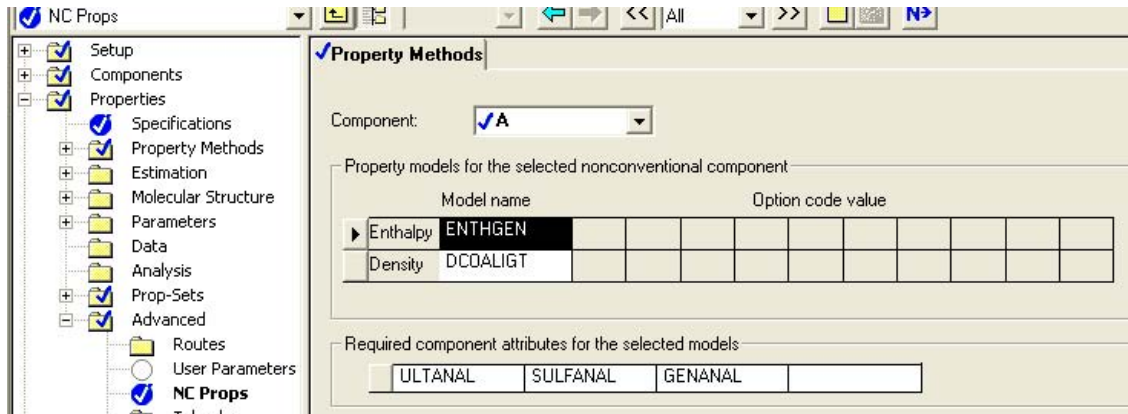
: DCOALIGT

مدل دانسیته ذغال است که Attribute مورد نیاز برای آن SULFANAL, ULTANAL می باشند.

: DNSTYGEN

Attribute مورد نیاز برای آن GENERAL می باشد.

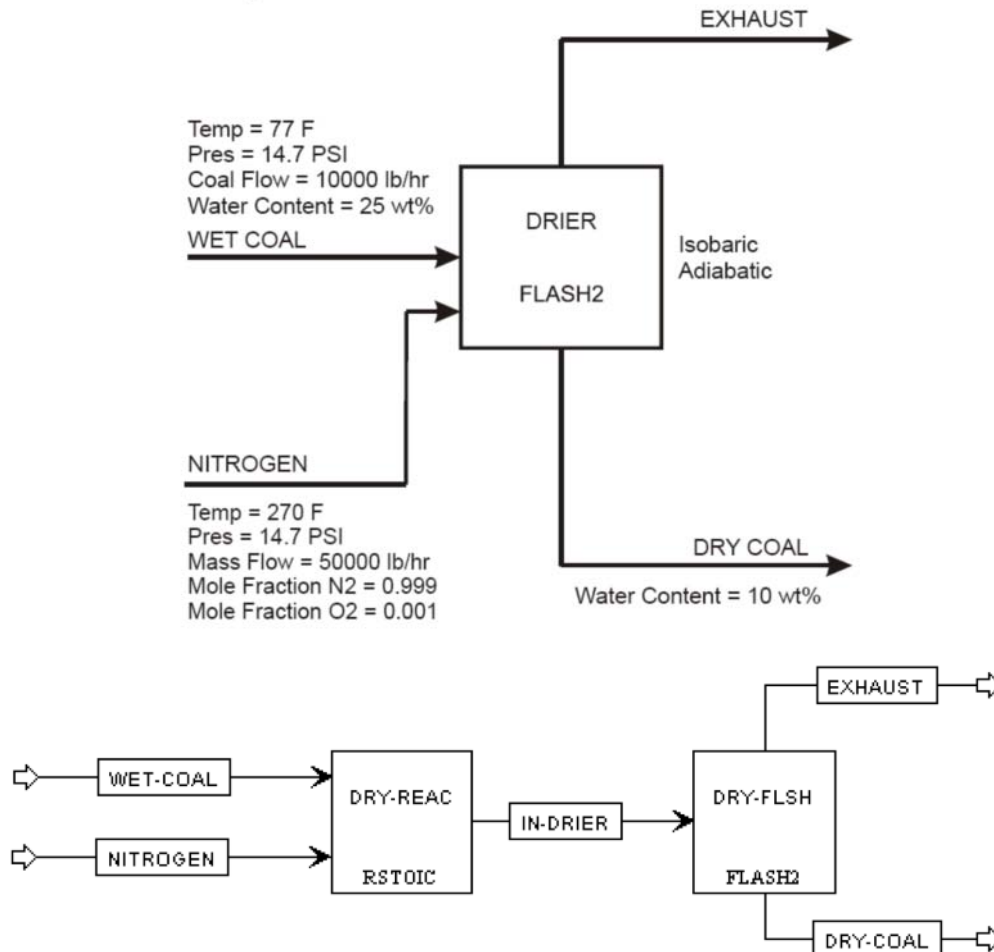
برای اختصاص هر کدام از این مدل ها به یک جزء Nonconventional، باید از پوشه Data Browser وارد پوشه Properties شده و از پوشه Advanced وارد قسمت NC-Props شویم:



با انتخاب مدل ها، ASPEN PLUS به صورت خودکار مستطیل های مربوط به attribute های مورد نیاز را انتخاب خواهد کرد. پس از انتخاب نوع Attribute ها جهت اختصاص مقادیر Attribute ها باید در صفحه input هر Stream در قسمت Comp Attribute اطلاعات لازم را وارد کرد.

تمرین ۱:

جریان ذغال مرطوب با رطوبت ۲۵٪ به همراه جریان گاز نیتروژن داغ مطابق شکل زیر وارد محفظه خشک کننده در شرایط آدیاباتیک و ایزوبار می شود تا ذغال خشک با رطوبت ۱۰٪ حاصل شود.



مطلوبست شبیه سازی این فرآیند با مشخصات داده شده در مسئله.

- محیط Solid انتخاب شود.
- کلاس جریان MIXNCPSD انتخاب شود.
- PP: IDEAL
- در این شبیه سازی برای محاسبه آنتالپی و دانسیته COAL از مدل های HCOALGEN و DCOALIGT استفاده نمایید.

مشخصات خوراک نیتروژن	
دما (F)	۲۷۰
فشار (psia)	۱۴/۷
دبی خوراک (lb/hr)	۵۰۰۰۰
نیتروژن (mol%)	٪۹۹/۹
اکسیژن (mol%)	٪۰/۱

مشخصات خوراک wet- coal	
دما (F)	۷۷
فشار (psia)	۱۴/۷
دبی خوراک (lb/hr)	۱۰۰۰۰

در نرم افزار توزیع اندازه ذرات در ۱۰ محدوده با فاصله هر کدام برابر ۲۰ میکرون در نظر گرفته شده است.

Substream name: **NCPSD**

Particle size distribution

PSD ID: **PSD** Units: **MU**

Interval	Lower limit	Upper limit	Weight fraction
1	0	20	
2	20	40	
3	40	60	
4	60	80	
5	80	100	
6	100	120	
7	120	140	
8	140	160	
9	160	180	
▶ 10	180	200	

در این مثال توزیع اندازه ذرات برای خوراک wet-coal مطابق جدول زیر است:

interval	Mass%
۷	۰/۱
۸	۰/۲
۹	۰/۳
۱۰	۰/۴

مقادیر component attribute ها به شرح جداول زیر است:

PROXANAL	
Moisture	۲۵
FC	۴۵/۱
VM	۴۵/۷
ASH	۹/۲

ULTANAL	
ASH	۹/۲
CARBON	۶۷/۱
HYDROGEN	۴/۸
NITROGEN	۱/۱
CHLORINE	۰/۱
SULFUR	۱/۳
OXYGEN	۱۶/۴

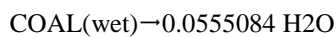
SULFANAL	
PYRITIC	۰/۶
SULFATE	۰/۱
ORGANIC	۰/۶

نکته:

- کلیه مقادیر (به غیر از درصد رطوبت در PROXANAL) بر حسب درصدهای جرمی عاری از آب می باشند.
- مقدار Sulfur در ULTANAL برابر مجموع مقادیر Sulfanals است.
- مقدار Ash در ULTANAL و PROXANAL یکی است.
- مجموع مقادیر ULTANAL برابر ۱۰۰ است.
- مجموع مقادیر PROXANAL برای FC، VM و Ash برابر ۱۰۰ است.
- برای راکتور و جداکننده شرایط آدیاباتیک و ایزوبار را در نظر بگیرید.

اگر چه فرآیند خشک شدن ذغال یک فرآیند شیمیایی نیست ولی در این مثال از مدل Rstoic برای تبدیل یک قسمت از ذغال به آب استفاده می کنیم.

برای خشک کردن ذغال از واکنش زیر استفاده نمایید و در فرض اول میزان تبدیل را برابر ۲۰٪ در نظر بگیرید:



نکته:

لازم به ذکر است که نرم افزار ASPEN تمام ترکیبات NC را با جرم مولکولی ۱ فرض می کند. بنابراین ۱ مول (۱ پوند) COAL به ۰/۰۵۵۵۰۸۴ مول (۱ پوند آب) تبدیل می شود.

در فرآیند خشک شدن ذغال تمام غلظت های مربوط به Component Attribute ها به غیر از غلظت آب در PROXANAL ثابت باقی می ماند. بنابراین باید مقدار غلظت آب را در PROXANAL برای COAL خروجی از راکتور را تغییر داد. جهت این کار در داخل راکتور در قسمت Component Attr. به عنوان فرض اولیه مقدار غلظت آب را در PROXANAL برابر ۱٪ فرض می کنیم.

معادلات موازنه جرم سیستم برای آب به صورت زیر است:

$$COALIN * \frac{H2OIN}{100} = COALOUT * \frac{H2OOUT}{100} + COALIN * CONV \quad (1)$$

$$COALIN = COALOUT + COALIN * CONV \quad (2)$$

Where:

COALIN	=	Mass flow rate of coal in stream WET-COAL
COALOUT	=	Mass flow rate of coal in stream IN-DRIER
H2OIN	=	Percent moisture in the coal in stream WET-COAL
H2ODRY	=	Percent moisture in the coal in stream IN-DRIER
CONV	=	Fractional conversion of coal to H ₂ O in the block DRY-REAC

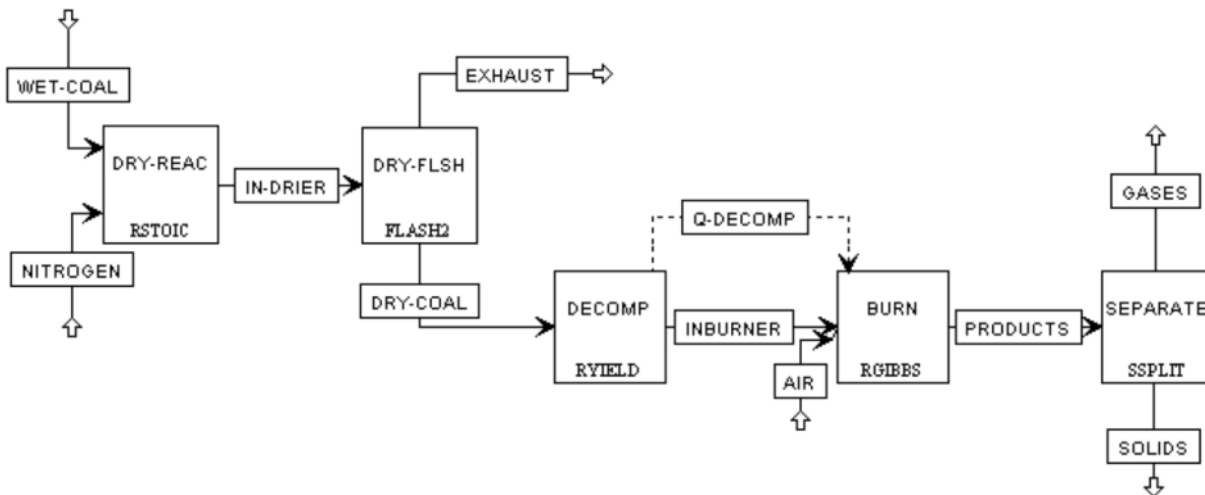
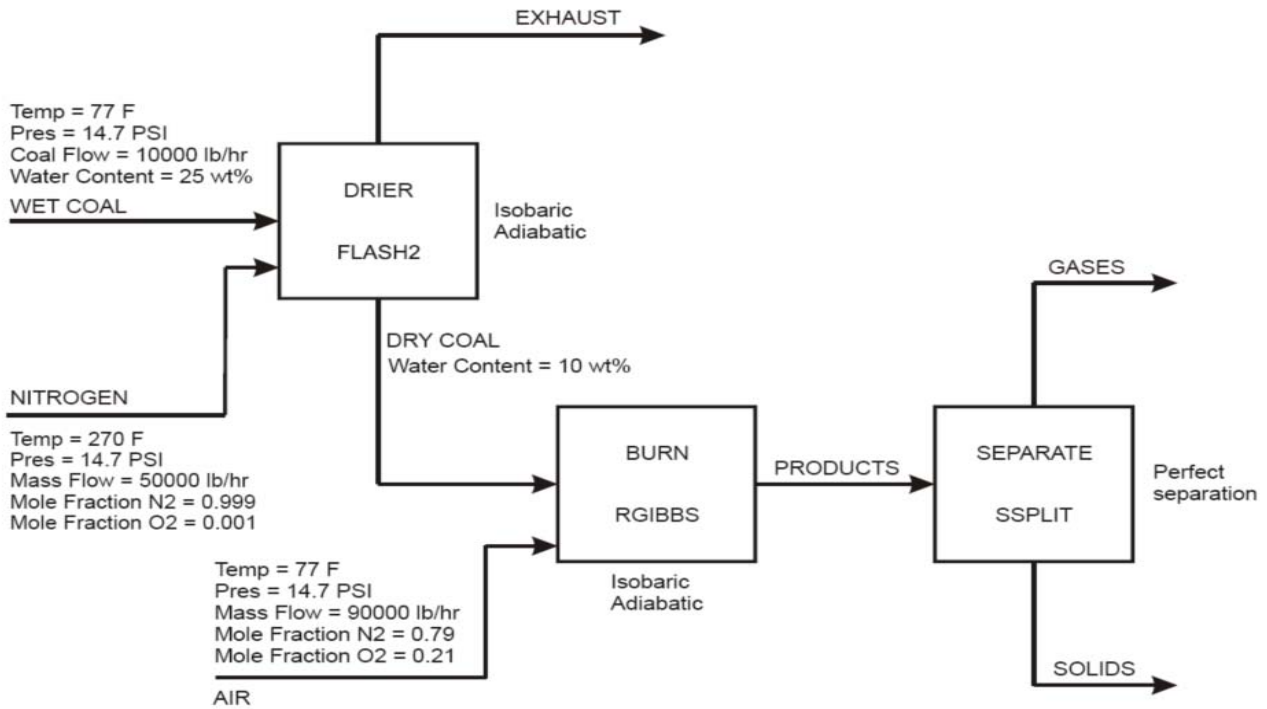
Equation 1 is the material balance for water, and equation 2 is the overall material balance. These equations can be combined to yield equation 3:

$$CONV = \frac{(H2OIN - H2OOUT)}{(100 - H2OOUT)} \quad (3)$$

جهت سازگاری هر سه پارامتر این رابطه در موازنه جرم راکتور از Calculator Block استفاده نمایید. برای حالتیکه رطوبت همراه ذغال خشک شده ۱۰٪ باشد مسئله را حل نمایید. پس از اجرا برنامه را با نام SOLID1 ذخیره نمایید.

تمرین ۲:

در ادامه تمرین ۱ شبیه سازی را مطابق با الگوی شکل زیر شبیه سازی نمایید. جهت شبیه سازی احتراق ذغال در کوره از مدل راکتور Rgibbs استفاده نمایید. اما به دلیل آنکه ترکیب ذغال از نوع NC است، انرژی آزاد گیبس برای ذغال قابل محاسبه نیست. به همین دلیل قبل از اینکه خوراک DRY COAL وارد راکتور گیبس شود، وارد راکتور RYIELD می شود تا به اجزای سازنده خود تبدیل شود. گرمای واکنش در ارتباط با تجزیه ذغال باید در احتراق ذغال لحاظ شود. بنابراین باید از یک شاخه انرژی برای انتقال گرمای واکنش از راکتور YIELD به راکتور GIBBS استفاده کنیم. در نهایت هم برای جدا کردن ASH از گازهای حاصل از احتراق از مدل SSPLIT استفاده می کنیم.



• کلاس جریان MCINCPD انتخاب شود.

• در این مرحله ترکیبات جدید زیر را به ترکیبات قبلی اضافه نمایید:

Component ID	Type	Component Name
NO2	Conventional	NITROGEN DIOXIDE
NO	Conventional	NITRIC OXIDE
S	Conventional	SULFUR
SO2	Conventional	SULFUR-DIOXIDE
SO3	Conventional	SULFUR-TRIOXIDE
H2	Conventional	HYDROGEN
CL2	Conventional	CHLORINE
HCL	Conventional	HYDROGEN-CHLORIDE
C	Solid	CARBON-GRAPHITE
CO	Conventional	CARBON-MONOXIDE
CO2	Conventional	CARBON-DIOXIDE
ASH	Nonconventional	

مشخصات جریان هوای ورودی به کوره عبارتست از:

مشخصات خوراک Air	
دما (F)	۷۷
فشار (psia)	۱۴/۷
دبی خوراک (lb/hr)	۹۰۰۰۰
mol% اکسیژن	٪۲۱
mol% نیتروژن	٪۷۹

در شبیه سازی قبلی گرمای واکنش ذغال توسط Component attribute های تعیین شده در مدل HCOALGEN محاسبه می شد. در ادامه شبیه سازی قبلی با توجه به توضیحات جدول زیر پارامترهای مدل HCOALGEN را در حالتی تنظیم نمایید که گرمای احتراق ذغال توسط خود کاربر وارد سیستم شود.

HCOALGEN Option Codes

Option Code Number	Option Code Value	Calculation Method	Parameter Names	Component Attributes
1 Heat of Combustion				
	1	Boie correlation	BOIEC	ULTANAL SULFANAL PROXANAL
	2	Dulong correlation	DLNGC	ULTANAL SULFANAL PROXANAL
	3	Grummel and Davis correlation	GMLDC	ULTANAL SULFANAL PROXANAL
	4	Mott and Spooner correlation	MTSPC	ULTANAL SULFANAL PROXANAL
	5	IGT correlation	CIGTC	ULTANAL PROXANAL
	6	User input value	HCOMB	ULTANAL PROXANAL
2 Standard Heat of Formation				
	1	Heat-of-combustion-based correlation	—	ULTANAL SULFANAL
	2	Direct correlation	HFC	ULTANAL SULFANAL PROXANAL
3 Heat Capacity				
	1	Kirov correlation	CP1C	PROXANAL
	2	Cubic temperature equation	CP2C	—
4 Enthalpy Basis				
	1	Elements in their standard states at 298.15K and 1 atm	—	—
	2	Component at 298.15 K	—	—

Property Methods

Component: COAL

Property models for the selected nonconventional component

	Model name	Option code value			
Enthalpy	HCOALGEN	6	1	1	1
Density	DCOALIGT				

Required component attributes for the selected models

PROXANAL ULTANAL SULFANAL

گرمای احتراق ذغال خشک را از مسیر زیر برابر با $\frac{11700 \text{ Btu}}{\text{lb}}$ وارد سیستم نمایید.

Properties | Parameters | Pure Component | None Conventional | Parameter | HCOMB

Input

Parameter: HCOMB Btu/lb

Nonconventional component parameter

COAL	
11700	

لازم به ذکر است که در مدل HCOMB گرمای واکنش بر مبنای ذغال خشک است و اگر مقدار گرمای احتراق را بر مبنای تر داشتیم می بایست از رابطه زیر آنرا بر مبنای خشک تبدیل می کردیم.

$$\text{HCOMB} = \text{Heat of Combustion (wet)} * \frac{100}{100 - \% \text{ Moisture}}$$

در رابطه با انتخاب روش های محاسبه خواص ASH هم مشابه COAL از الگوی زیر استفاده نمایید:

Property Methods

Component: ASH

Property models for the selected nonconventional component

	Model name	Option code value			
Enthalpy	HCOALGEN	1	1	1	1
Density	DCOALIGT				

Required component attributes for the selected models

PROXANAL ULTANAL SULFANAL

برای تجزیه ذغال به مواد سازنده آن (که در Component attribute های آن وارد شده اند) بدون در نظر گرفتن واکنش شیمیایی از مدل راکتور YIELD استفاده می کنیم. شرایط عملیاتی راکتور را به صورت زیر در نظر بگیرید:

شرایط عملیاتی راکتور	
دما (F)	۷۷
فشار (psia)	۱۴/۷

جهت شبیه سازی در صفحه مربوط به توزیع YIELD مقادیر فرضی و غیر واقعی زیر را وارد برنامه می کنیم. در ادامه حل مثال مقادیر واقعی YIELD توسط Calculator Block محاسبه و جایگزین خواهد شد.

Component	Basis	Yield
H2O	Mass	0.2
ASH	Mass	0.2
C (CIPSD)	Mass	0.1
H2	Mass	0.1
N2	Mass	0.1
CL2	Mass	0.1
S	Mass	0.1
O2	Mass	0.1

برای هر دو کلاس NCPSD و CIPSD توزیع اندازه ذرات محصولات حاصل از احتراق را در داخل مدل YIELD به شرح جدول ذیل وارد برنامه می کنیم:

interval	Mass%
۷	۰/۱
۸	۰/۲
۹	۰/۳
۱۰	۰/۴

ASH یکی از محصولات NC حاصل از احتراق ذغال است که میبایست از راکتور خارج شود. در صفحه راکتور می بایست Component attribute های مربوط به آنرا وارد نماییم که طبیعتاً به فرم زیر خواهند بود:

PROXANAL:

Element	Value
Moisture	0
FC	0
VM	0
Ash	100

ULTANAL:

Element	Value
Ash	100
Carbon	0
Hydrogen	0
Nitrogen	0
Chlorine	0
Sulfur	0
Oxygen	0

SULFUNAL:

Element	Value
Pyritic	0
Sulfate	0
Organic	0

مقادیر YIELD واقعی را می توان به راحتی از روی Component Attribute های جریان ذغال ورودی به راکتور به صورت دستی محاسبه و در داخل مدل راکتور جایگزین کرد. اما به جای این کار می توان از یک Calculator Block استفاده کرده و طریقه محاسبه و جایگزینی YIELD ها را در برنامه تعریف نماییم. در این صورت قادر خواهیم بود تا برای ذغال های مختلف با Component Attribute های مختلف، بدون محاسبه دستی YIELD و جایگزینی آن در مدل راکتور، برنامه را در حالت های مختلف اجرا نماییم.

Variable name	Info. flow	Definition
ULT		Compattr-Vec Stream=DRY-COAL Substream=NCPSD Component=COAL Attribute=ULTANAL
WATER		Compattr-Var Stream=DRY-COAL Substream=NCPSD Component=COAL Attribute=PROXANAL Element=1
H2O		Block-Var Block=DECOMP Variable=MASS-YIELD Sentence=MASS-YIELD ID1=H2O ID2=MIXED
ASH		Block-Var Block=DECOMP Variable=MASS-YIELD Sentence=MASS-YIELD ID1=ASH ID2=NCPSD
CARB		Block-Var Block=DECOMP Variable=MASS-YIELD Sentence=MASS-YIELD ID1=C ID2=CIPSD
H2		Block-Var Block=DECOMP Variable=MASS-YIELD Sentence=MASS-YIELD ID1=H2 ID2=MIXED
N2		Block-Var Block=DECOMP Variable=MASS-YIELD Sentence=MASS-YIELD ID1=N2 ID2=MIXED
CL2		Block-Var Block=DECOMP Variable=MASS-YIELD Sentence=MASS-YIELD ID1=CL2 ID2=MIXED
SULF		Block-Var Block=DECOMP Variable=MASS-YIELD Sentence=MASS-YIELD ID1=S ID2=MIXED
O2		Block-Var Block=DECOMP Variable=MASS-YIELD Sentence=MASS-YIELD ID1=O2 ID2=MIXED
*		

از آنجائیکه مقادیر ترکیب درصدی جرمی در ULTANAL بر مبنای خشک هستند، لذا با تعریف فاکتور FACT با استفاده از دستورات زیر مقادیر این ترکیب درصد ها را بر مبنای تر تبدیل می کنیم.

```

FACT = (100 - WATER) / 100
H2O = WATER / 100
ASH = ULT (1) / 100 * FACT
CARB = ULT (2) / 100 * FACT
H2 = ULT (3) / 100 * FACT
N2 = ULT (4) / 100 * FACT
CL2 = ULT (5) / 100 * FACT
SULF = ULT (6) / 100 * FACT
O2 = ULT (7) / 100 * FACT

```

برای انجام واکنش ها تا وقوع تعادل شیمیایی از مدل راکتور گیبس استفاده می کنیم. این راکتور از مینیمم کردن انرژی آزاد گیبس سیستم میزان توزیع محصولات در جریان خروجی از راکتور را محاسبه می کند. محصولات مورد انتظار در خروجی راکتور را مطابق جدول زیر وارد برنامه نمایید. لازم به ذکر است که کربن به صورت جامد از راکتور خارج می شود.

Component	Phase	Component	Phase
H2O	Mixed	SO3	Mixed
N2	Mixed	H2	Mixed
O2	Mixed	CL2	Mixed
NO2	Mixed	HCL	Mixed
NO	Mixed	C	Pure Solid
S	Mixed	CO	Mixed
SO2	Mixed	CO2	Mixed

محصولات خروجی از راکتور را وارد مدل SSPLIT نموده و جریان جامد را از جریان گازی کاملاً جدا نمایید. پس از اجرا برنامه را با نام SOLID2 ذخیره نمایید.



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

ASPEN PLUS

جلسه چهاردهم

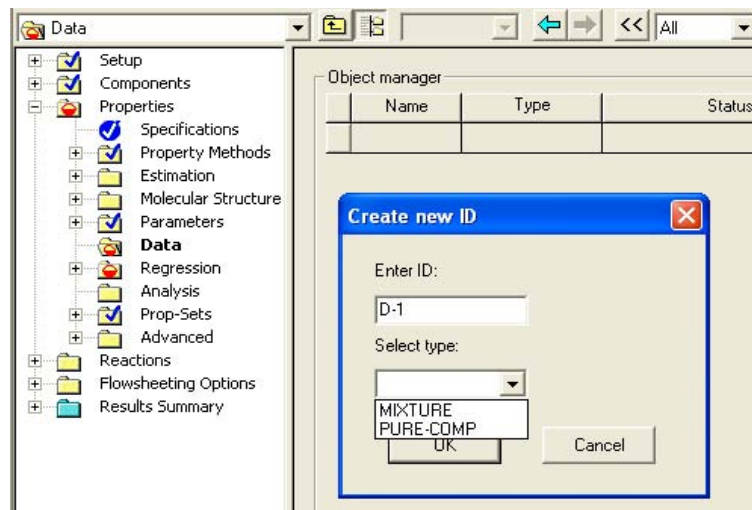
- آشنایی با رگرسیون داده های خواص
- شبیه سازی واحد تولید اتیلن اکساید
- شبیه سازی فرآیند تولید مونومر وینیل کلراید

رگرسیون داده های خواص

یکی از مهم ترین قابلیت های نرم افزار ASPEN PLUS رگرسیون داده های آزمایشگاهی برای بهتر کردن ضرایب یا پارامترهای مدل ترمودینامیکی است. رگرسیون در مورد خواص وابسته به دما در ترکیبات خالص (Pure-Comp) و ضرایب دو جزئی (Mixture) مخلوط ها از قبیل :

- دانسیته
- ظرفیت حرارتی
- اطلاعات تعادلی بخار-مایع
- اطلاعات تعادلی مایع-مایع
- ضرایب فعالیت
- و ...

صورت می گیرد. بدین منظور در قسمت Setup/Specification نوع اجرا (Run type) را باید Date Regression انتخاب کرد. جهت ورود جدول داده های خواص ، پس از انتخاب ترکیبات و مدل ترمودینامیکی وارد پوشه Data از قسمت Properties خواهیم شد.



باید توجه داشت که معادله ترمودینامیکی انتخاب شده برای اجرای شبیه سازی همان معادله ترمودینامیکی انتخاب شده برای رگرسیون داده های خواص باشد.

پس از انتخاب یکی از دو گزینه خواص وابسته به دما در ترکیبات خالص (Pure-Comp) و ضرایب دو جزئی (Mixture) مخلوط ها در قسمت Select Type ، وارد پنجره Setup شده و ترکیبات مورد نظر را برای ورود اطلاعات تجربی مربوط به آنها انتخاب می کنیم. در قسمت های مربوط به فشار ثابت و دمای ثابت هم در صورتی که فعال باشند اطلاعات مربوطه را وارد می کنیم. در این صورت این مقادیر ثابت دما و یا فشار برای تمام نقاط داده های تجربی اعمال خواهند شد. در قسمت Property هم خاصیت مورد بررسی را انتخاب خواهیم کرد. پس از این مرحله وارد پنجره Data شده و جدول اطلاعات تجربی خاصیت مورد نظر را وارد خواهیم کرد.

پنجره مربوط به حالت انتخاب Pure-Comp

پنجره مربوط به حالت انتخاب Mixture

	TEMPERATURE	X	X	Y	Y
Usage	F	METHANOL	H2O	METHANOL	H2O
Std-Dev	0.1	0.1%	0%	1%	0%
*					

پنجره ورود داده های تجربی

ستون اول جدول ورود داده های تجربی مربوط به مقادیر انحراف استاندارد از پیش تعریف شده برای دما ، فشار ، ترکیبات مایع ، ترکیبات بخار و خاصیت های مربوط به هر ردیف می باشد که در صورت نظر می توان مقادیر آنها را تغییر داد. در صورتی که بخواهیم ASPEN برخی از ردیف های اطلاعات تجربی وارد شده یا مقادیر انحراف استاندارد های وارد شده را در نظر نگیرد ، در ستون مربوط به Usage آن ردیف گزینه Ignore را فعال خواهیم نمود. نمودار اطلاعات تجربی وارد شده را در قسمت Plot Wizard می توان مشاهده کرد.

پس از تکمیل این مرحله وارد پوشه Regression شده و مطابق شکل زیر وارد محیط رگرسیون می شویم:

Data set	Weight	Consistency	Reject data	Test method	Area tolerance %	Point tolerance
D-1	1	<input checked="" type="checkbox"/> Perform test	<input type="checkbox"/> Reject	Area tests	10	
D-2	1	<input type="checkbox"/> Perform test	<input type="checkbox"/> Reject	Area tests	10	
*		<input type="checkbox"/> Perform test	<input type="checkbox"/> Reject			

در پنجره Set Up پس از انتخاب جداول داده های تجربی در قسمت Data Set ، وارد صفحه بعدی Parameters خواهیم شد:

Type	Parameter	Parameter	Binary parameter	
Name/Element	OMGPRS	OMGPRS	PRKIJ	
Component or group	N2	H2O	N2	
			H2O	
Usage	Regress	Regress	Regress	
Initial value			0	
Lower bound			-10000	
Upper bound			10000	
Scale factor	1	1	1	

در قسمت Type ، پارامترهایی که می بایست برای ترکیبات انتخاب شده تحت رگرسیون واقع شوند همراه با مقادیر اولیه و محدوده های حل را انتخاب می نماییم. لازم به ذکر است که در بیشتر موارد اطلاعات این صفحه به صورت خودکار توسط سیستم خواص فیزیکی ASPEN تکمیل شده است. گزینه های قابل انتخاب در قسمت Type مطابق جدول زیر هستند:

Option	For
Parameter	Pure component parameter
Binary Parameter	Binary parameter
Group parameter	UNIFAC group parameter
Group binary parameter	UNIFAC group binary parameter
Pair parameter	Electrolyte NRTL model pair parameter
Chemistry	Equilibrium constants for electrolyte chemistry

در صفحه بعدی (Report) ، جهت نمایش نتایج اضافی از قبیل مقادیر K ، ضرایب فعالیت ، دما و فشار نقطه حباب و فراریت نسبی در صفحه نتایج اجرای رگرسیون قابل انتخاب هستند. صفحه بعدی (Algorithm) هم مربوط به انتخاب نوع تابع هدف و الگوریتم حل رگرسیون می باشد.

تمرین ۱

اتیلن اکساید یک ماده شیمیایی است که برای تولید اتیلن گلیکول ، پلیمرهای با جرم مولکولی سبک و سنگین و کاربردهای دیگر به عنوان افزودنی مواد شوینده استفاده می شود. این ماده از فعالیت واکنشی بالایی برخوردار است و به همین خاطر در بسیاری از جاها به عنوان یک ماده واکنشگر استفاده می شود. PFD این فرآیند در شکل صفحه بعدی ملاحظه می شود. جریان های خوراک اتیلن ، جریان برگشتی و جریان هوای فشرده و خشک شده مخلوط و گرم شده و وارد راکتور اول می شود. واکنش گرمازا است و در نتیجه بخار فشار بالا در پوسته راکتور تولید می شود. میزان تبدیل در راکتور پایین نگه داشته می شود تا واکنش به سمت تولید محصول مطلوب پیش برود. خروجی راکتور سرد و فشرده شده و به برج شستشو با آب فرستاده می شود تا اتیلن اکساید تولید شده جذب آب شود. بخار جدا شده از برج شستشو گرم شده و وارد راکتور دوم می شود. خروجی راکتور دوم نیز مانند راکتور اول سرد و فشرده شده و به برج شستشو با آب فرستاده می شود. قسمتی از بخارات واکنش نداده به اول خط بازگردانی می شود و جریان های مایع محصولات زیر برج های شستشو با آب با هم ترکیب شده ، سرد شده و وارد برج تقطیر می شود تا محصول مطلوب اتیلن اکساید از آب جدا شود. خلوص لازم برای اتیلن اکساید در بالای برج ۹۹/۹٪ است. داده های تعادلی T_x-y در فشار ۱ اتمسفر برای آب و اتیلن اکساید و TP_x-y برای آب و نیتروژن مطابق جداول زیر هستند:

T (F)	P (psi)	X _{N2}	X _{H2O}	Y _{N2}
100	50	0.00004	0.99996	0.9798
100	200	0.00014	0.99986	0.995
100	450	0.0003	0.9997	0.9976
100	950	0.0006	0.9994	0.9988
100	1500	0.0009	0.9991	0.991
100	2000	0.00116	0.99884	0.993
200	50	0.00002	0.99998	0.767
200	200	0.00011	0.99989	0.9395
200	450	0.00025	0.99975	0.9723
200	950	0.00051	0.99949	0.9863
200	2000	0.00101	0.99899	0.9925
300	950	0.00065	0.99935	0.9214
400	450	0.00026	0.99974	0.4266
400	950	0.00088	0.99912	0.7055
400	1500	0.00152	0.99848	0.8025
600	2000	0.00294	0.99706	0.1445

T (C)	X _{EO}	X _{H2O}	Y _{EO}	Y _{H2O}
50	0.04	0.96	0.86	0.14
37.6	0.065	0.935	0.937	0.063
31.5	0.082	0.918	0.9595	0.0405
31	0.095	0.905	0.9648	0.0352
16.4	0.21	0.79	0.9818	0.0182
15.1	0.232	0.768	0.9841	0.0159
15	0.274	0.726	0.9845	0.0155
14.3	0.432	0.568	0.9853	0.0147
13.7	0.56	0.44	0.9845	0.0155
13.2	0.615	0.385	0.9853	0.0147
12	0.875	0.125	0.9888	0.0112
11.9	0.89	0.11	0.9905	0.0095
11.8	0.91	0.09	0.99	0.01
11.7	0.933	0.067	0.9934	0.0066
11.5	0.951	0.049	0.9927	0.0073

Process Water	
T (°C)	۲۵
P (bar)	۳۰
H ₂ O (mole flow) (kmol/hr)	۵۰۰۰۰
Ethylene	
T (°C)	۲۵
P (bar)	۵۰
E (mole flow) (kmol/hr)	۷۱۲/۹۱
EO (mole flow) (kmol/hr)	۰
O ₂ (mole flow) (kmol/hr)	۰
N ₂ (mole flow) (kmol/hr)	۰
CO ₂ (mole flow) (kmol/hr)	۰
H ₂ O (mole flow) (kmol/hr)	۰

Air	
T (C)	۲۵
P (bar)	۱
E (mole flow) (kmol/hr)	۰
EO (mole flow) (kmol/hr)	۰
O ₂ (mole flow) (kmol/hr)	۳۲۸۱/۳۵
N ₂ (mole flow) (kmol/hr)	۱۴۱۰۰/۰۹
CO ₂ (mole flow) (kmol/hr)	۰
H ₂ O (mole flow) (kmol/hr)	۰

Valve	P (bar)
V-701	۲۷
V-702	۲۷
V-703	۲۶/۵
V-704	۱۰

Compressor	P (bar)	بازدهی آیزنتروپیک
C-701	۳	٪۸۰
C-702	۹	٪۸۰
C-703	۲۷	٪۸۰
C-704	۳۰/۱۵	٪۸۰
C-705	۳۰/۱۵	٪۸۰

Heater	T (°C)	Δ P (bar)
E-701	۴۵	۰/۳
E-702	۴۵	۰/۳
E-703	۲۴۰	۰/۳
E-704	۴۵	۰/۳
E-705	۲۴۰	۰/۳
E-706	۴۵	۰/۳
E-707	۴۵	۰/۳

COLUMN	T-701	T-702	T-703
تعداد سینی های برج	۵	۵	۲۵
سینی خوراک	۱و۵	۱و۵	۱۲
نوع کندانسور	ندارد	ندارد	جزئی
دمای کندانسور ©	-	-	۱۰
نوع ریویلر	ندارد	ندارد	kettle
شدت جریان محصول بالای برج (kg / hr)	-	-	۱۰۰۰۰
نسبت جرمی جریان برگشتی	-	-	۸
فشار بالای برج (bar)	۳۰	۳۰	۴

- میزان Split Fraction کلیه Splitter ها برابر ۰.۵۰ است.
- راکتور اول از نوع پلاگ و همدمما (در دمای ورودی) با افت فشار ۰.۷۵ بار می باشد. راکتور دارای ۱۰۰۰ لوله ، هر کدام با طول ۴ متر و قطر ۷/۳۸ سانتیمتر می باشد.
- راکتور دوم از نوع پلاگ و همدمما (در دمای ورودی) با افت فشار ۰.۷۵ بار می باشد. راکتور دارای ۵۰۰ لوله ، هر کدام با طول ۴ متر و قطر ۹/۳۳ سانتیمتر می باشد.
- واکنش های زیر در داخل راکتور به وقوع می پیوندند.

$$E + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow EO \quad r_1 = \frac{1.96 e^{-\frac{2400}{RT}} P_E}{1 + 9.8 \times 10^{-4} e^{-\frac{11199.9}{RT}} P_E}$$

$$E + 3O_2 \rightarrow 2CO_2 + 2H_2O \quad r_1 = \frac{0.0936 e^{-\frac{6400}{RT}} P_E}{1 + 9.8 \times 10^{-4} e^{-\frac{11199.9}{RT}} P_E}$$

$$EO + \frac{5}{2}O_2 \rightarrow 2CO_2 + 2H_2O \quad r_1 = \frac{0.42768 e^{-\frac{6200}{RT}} P_{EO}^2}{1 + 3.3 \times 10^{-5} e^{-\frac{21199.9}{RT}} P_{EO}^2}$$

$$E : \left(\frac{cal}{mol} \right) \quad , \quad R = 1.987 \left(\frac{cal}{mol.K} \right)$$

- میزان بازیافت اتیلن اکساید در برج تقطیر ۰.۹۸ است. محدوده تغییرات دبی جرمی جریان ۳۲ را بین ۱۵۰۰۰- در نظر بگیرید.

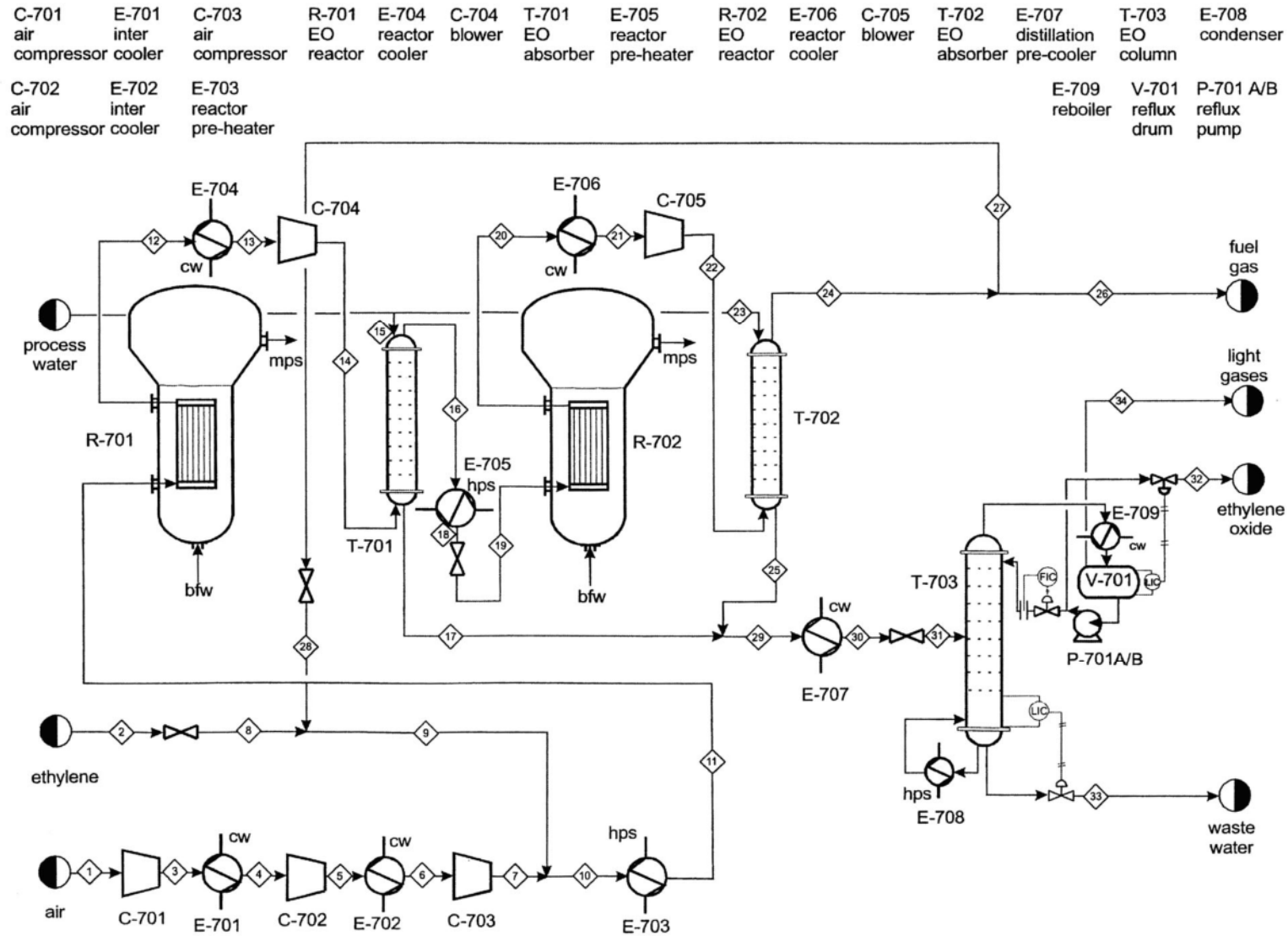
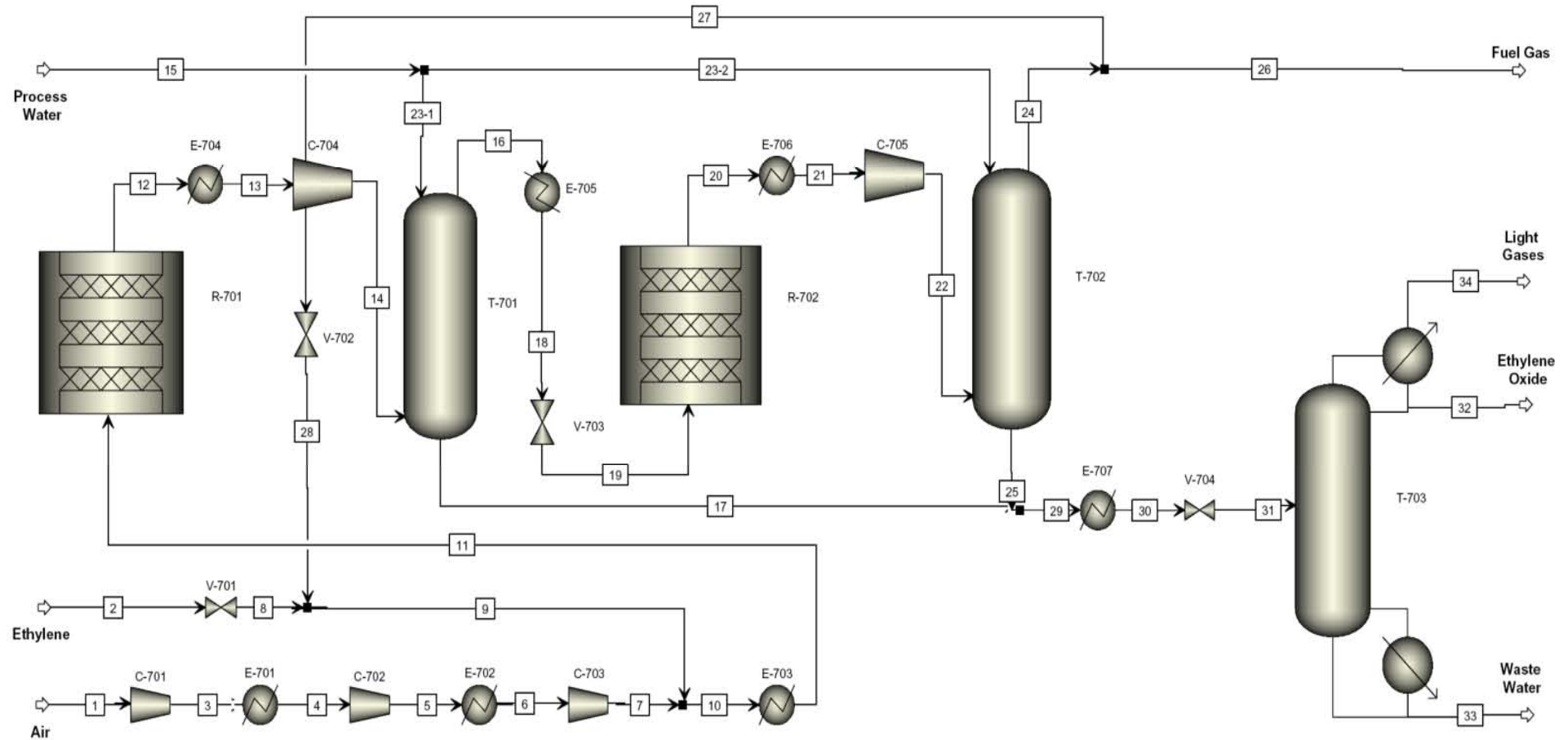


Figure 1: Process Flow Diagram for Ethylene Oxide Production

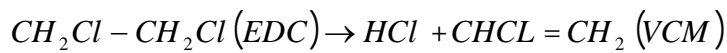
ETHYLENE OXIDE PRODUCTION PLANT



تمرین ۲:

شبیه سازی فرآیند تولید مونومر وینیل کلراید

مونومر وینیل کلراید (VCM) توسط یک فرآیند تحت فشار غیر کاتالیستی از طریق پیرولیز ۱۰۲ دی کلرواتان (EDC) مطابق واکنش زیر تولید می شود.



واکنش کراکینگ EDC در دمای C ۵۰۰ و فشار ۳۰ بار در داخل یک کوره Fired Furnace اتفاق می افتد. خوراک EDC با دبی ۱۰۰۰ kgmol/hr در دمای C ۲۰ و فشار ۳۰ بار وارد راکتور می شود. میزان تبدیل EDC در داخل راکتور ۵۵٪ است. گازهای داغ تولید شده از راکتور قبل از ورود به برج تفکیک سازی به میزان C ۱۰ خنک می شود. به منظور خالص سازی محصول VCM از دو ستون تقطیر استفاده می شود. در ستون اول محصول HCL از بالای برج گرفته شده و خروجی پایین برج جهت خالص سازی مجدد به عنوان خوراک وارد برج دوم می شود. محصول VCM از بالای برج دوم گرفته شده و جریان پایین برج که شامل EDC واکنش نداده می شود به کوره بازگردانی می شود. محصولات بالای هر دو برج به صورت مایع اشباع است. برج اول در فشار ۲۵ بار و برج دوم در فشار ۸ بار کار می کنند.

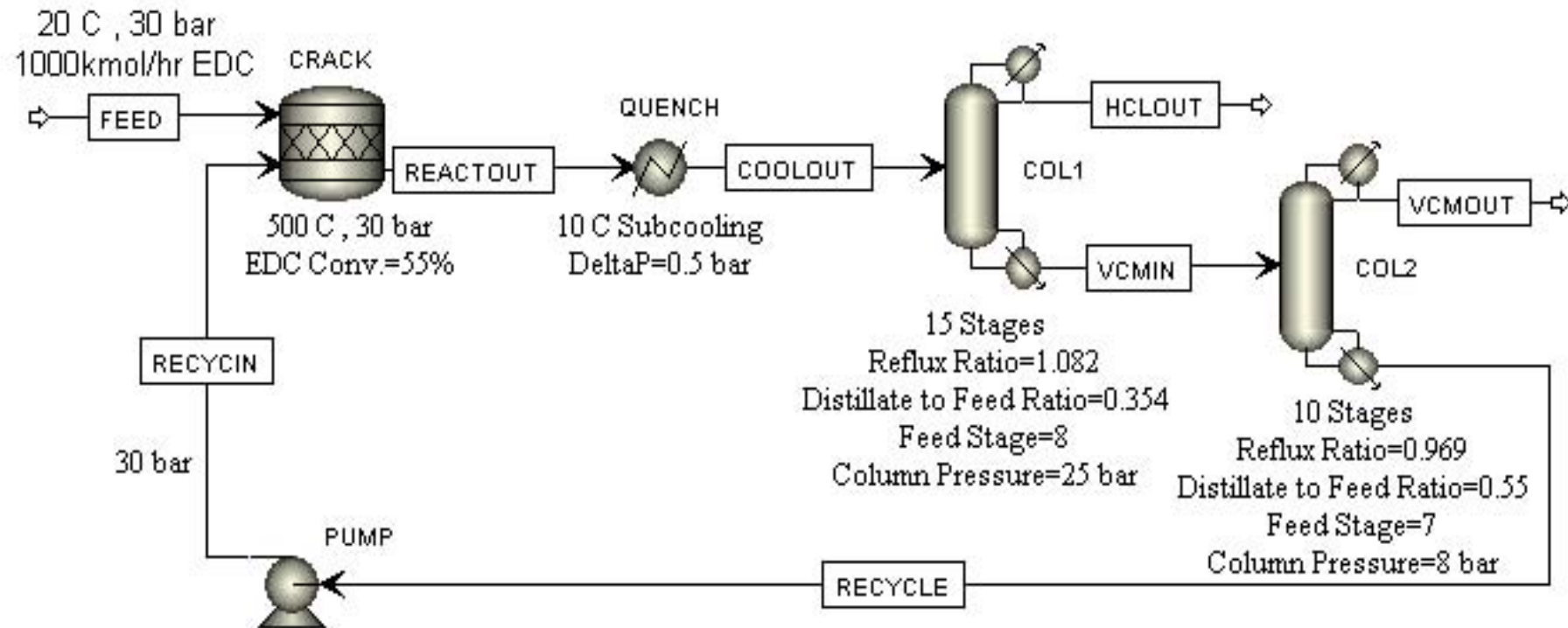
(معادله حالت : RK-SOAVE)

مطلوبست :

- بار حرارتی کوره
- دمای خروجی Quench
- بار حرارتی Quench
- بار حرارتی کندانسور و ریپویلر برج دوم
- غلظت VCM در جریان محصول VCM

مطلوبست نمودارهای بار حرارتی کوره و بار حرارتی Quench در تابعیت با میزان تبدیل EDC. (میزان تبدیل EDC به VCM در داخل کوره بین ۵۰٪ و ۵۵٪ متغیر است).

فرآیند تولید مونومر وینیل کلراید (VCM)





دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

ASPEN PLUS

جلسه پانزدهم

- آشنایی با Manipulators

آشنایی با Manipulators

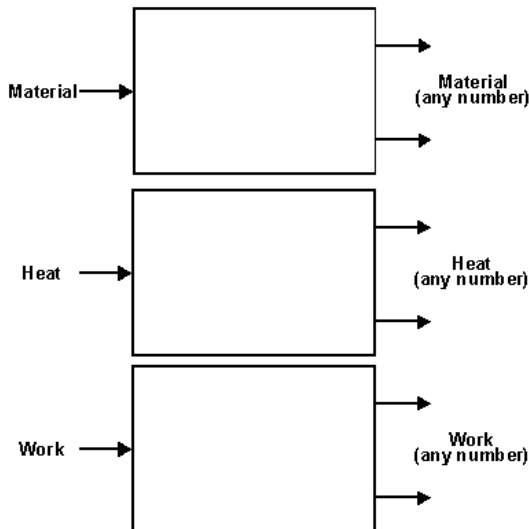
مدل Multi

مدل Multi شدت جریان های ترکیبات و شدت جریان کل شاخه جریان را در یک مضربی که در صفحه مشخصات این بلوک مشخص می شود ، ضرب می کند . همینطور در شاخه های کار و انرژی هم مدل Multi آنها را در یک مضرب معلوم ضرب می کند. مدل Multi برای زمانی مفید است که طی شبیه سازی شرایط دیگر تعیین کننده شدت جریان هستند. این مدل قادر نیست تا موازنه های جرم و انرژی را برقرار سازد . برای شاخه های مواد ، جریان خروجی دارای همان ترکیب درصدها و خواص جریان ورودی است.



در صفحه اتصالات این مدل جریان ورودی و خروجی باید از یک نوع (جرم ، کارو انرژی) باشند. در صفحه مشخصات مدل Multi فاکتور ضرب تنها مشخصه ورودی این مدل است. این فاکتور برای شاخه جریان مثبت و برای شاخه های کار و انرژی می تواند مثبت یا منفی باشد که این تغییر علامت مربوط به جهت کار و انرژی می شود. از آنجاییکه در این مدل فشار ورودی با فشار خروجی برابر است ، از این مدل در محیط شبیه سازی پویا نمی توان استفاده کرد.

مدل DUPL



این مدل یک شاخه جریان جرم یا کار یا انرژی را به چندین جریان همسان در خروجی کپی می کند. از این مدل برای شبیه سازی همزمان واحدهای مختلف با یک شاخه جریان استفاده می شود. این مدل موازنه های جرم و انرژی را بین جریان های ورودی و خروجی برقرار نمی سازد .

از آنجاییکه در این مدل دبی و فشار جریان ورودی با دبی و فشار جریان های خروجی برابر است ، از این مدل در محیط شبیه سازی پویا نمی توان استفاده کرد.

مدل ClChng

مدل ClChng نوع جریان (Stream Class) را بین بلاک ها و قسمت های مختلف فلوشیت تغییر می دهد. در این مدل مطابق شکل زیر فقط یک جریان ورودی و فقط یک جریان خروجی وجود دارد.



در این بلاک هیچ نیازی به اطلاعات ورودی نیست. در این بلاک اطلاعات مربوط به Substream ها در جریان ورودی به جریان خروجی کپی می شود و حین انتقال آندسته از Substream ها که در جریان خروجی موجودند ولی در جریان ورودی

وجود ندارند ، برابر صفر فرض می شود و آندسته از Substream ها که در جریان ورودی وجود دارند ولی در جریان خروجی موجود نیستند ، حذف می شوند.

مدل CICHng در حالتیکه برخی از Substream ها که شامل اطلاعات مربوط به جریان کار ، انرژی و یا مواد می شوند ، حین انتقال حذف شوند ، موازنه جرم و انرژی را برقرار نمی سازد.

برای تعیین دامنه نمایش اطلاعات مربوط به error ها و warning های مربوط به جریانهای بلاک و شبیه سازی ، در بلاک CICHng و در قسمت Input Diagnostics Sheet تنظیمات مربوطه را می توان انجام داد.

مدل Analyzer

این مدل به ما اجازه می دهد تا مقادیر ترکیب درصدی مواد و خصوصیات جریان را برای استفاده در شبیه سازی EO و فازهای بهینه سازی یک فلوشیت محاسبه کنیم. در این مدل به دو صورت می توان عمل نمود. یا یک جریان ورودی و یک جریان خروجی به بلاک وصل کنیم که در اینصورت جریان ورودی به عنوان جریان مرجع در نظر گرفته می شود و یا اینکه جریانی را به این بلاک وصل نکنیم و در داخل صفحه مشخصات بلاک یک شاخه جریان را به عنوان جریان مرجع تعیین کنیم.



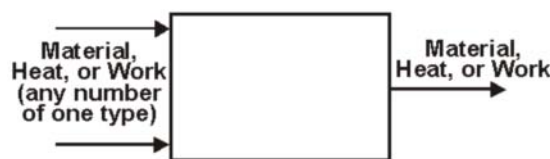
مدل Analyzer مشخصات انتخاب شده در صفحه مشخصات بلاک (دما یا جزء بخار VF را همراه با یک فشار) را به جریان وصل شده و یا جریان مرجع تعیین شده اعمال کرده و خواص مورد نیاز جریان را محاسبه می کند. شرایط پیش فرض همان شرایط جریان ورودی یا شرایط جریان مرجع می باشند. برای حالتیکه جریانهای ورودی و خروجی داده شده باشند ، جریان خروجی کپی جریان ورودی خواهد بود. زمانیکه شبیه سازی در حالت SM قرار دارد این بلاک هیچ تأثیری روی جریان نخواهد گذاشت.

مدل Feedbl

Feedbl از نوع مدل mole-flow می باشد که برای تعریف جریان های مواد خوراک برای فلوشیت RT-Opt استفاده می شود. و قادر است تا شدت جریان ها ، ترکیب درصدها و خواص جریان را محاسبه کند. اگر یک صفحه جدید در Aspen باز کنیم هیچ لزومی به استفاده از این مدل نیست. Aspen Plus به طور اتوماتیک تمام خصوصیات لازم و ضروری برای خوراک را ایجاد و لحاظ می کند. این مدل مشابه مدل Analyzer است با این تفاوت که شامل یک معادله اضافی برای محاسبه شدت جریان مولی کل جریان ورودی است. این امر تضمین می کند که ترکیب درصدهای جریان ورودی و شدت جریان مولی کلی با یکدیگر سازگار هستند. این مدل هیچ تأثیری روی جریان در حین اجرای Aspen ندارد. این مدل یک جریان ورودی و یک جریان خروجی دارد. زمانیکه شبیه سازی در حالت SM قرار دارد این بلاک هیچ تأثیری روی جریان نخواهد گذاشت.

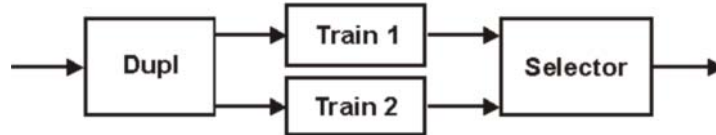
مدل Selector

این بلاک مانند یک سوئیچ بین جریان های ورودی مختلف عمل می کند. چندین جریان وارد این بلاک شده و فقط یک جریان انتخاب شده از آن خارج می شود. این بلاک قادر است تا برای شاخه های جریان مواد ، انرژی و کار استفاده شود.



تنها ورودی مورد نیاز برای بلاک Selector ، ID جریان ورودی است که می بایست در جریان خروجی کپی شود. این بلاک می تواند برای شاخه های جریان های مواد ، انرژی و کار استفاده شود. زمانی از این بلاک استفاده می شود که گزینه های

(Trains) متعددی برای شبیه سازی وجود داشته باشد و یا خوراک های مختلفی در فرآیند مورد بررسی واقع شوند. برای مثال همانطور که در شکل زیر ملاحظه می شود جریان خوراک توسط بلاک Dupl به دو رشته جریان موازی که هر کدام تحت عملیات جداگانه ای واقع می شوند ، تقسیم شده و سپس جهت انتخاب هر کدام از این جریان ها برای منظورهای شبیه سازی مورد نظر وارد بلاک Selector می شوند.



تعریف جریان Load :

جریان های Load جریان های انرژی (Heat Streams) هستند که دارای پروفایل انرژی و پروفایل دمایی در طول جریان می باشند. انتقال حرارت از یک جریان Load به جریان مواد یا انتقال حرارت از یک جریان Load به جریان های دیگر می تواند توسط مدل MHeatX مدل شود.

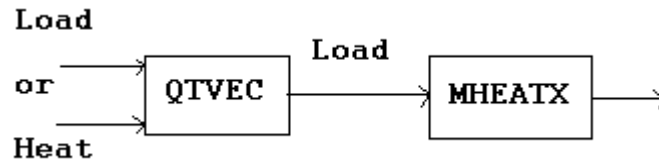
یک جریان Load می تواند برای ثابت داده های تغییر دمایی و تغییر حرارتی یک جریان ماده در طول مسیر حرکتی آن که ممکن است از چندین واحد عملیاتی عبور کند و طی آن انرژی بگیرد یا انرژی از دست بدهد ، بکار برده شود. برای درک فیزیکی جریان Load ، یک جریان ماده با دمای T_{in} را فرض کنید که از چهار واحد عملیاتی Heater به ترتیب به نام های H3 ، H2 ، H1 و H4 عبور می کند و حین عبور از هر کدام از این هیترها به ترتیب انرژی های Q1 ، Q2 ، Q3 و Q4 را از دست می دهد و به ترتیب به دماهای T1 ، T2 ، T3 و T4 می رسد. نمودار این تغییرات می تواند به صورت شکل زیر نشان داده شود:

$$\begin{array}{rcl}
 Q1+Q2+Q3+Q4 & T_{in} & \left. \vphantom{Q1+Q2+Q3+Q4}} \right\} H1 \\
 Q2+Q3+Q4 & T1 & \left. \vphantom{Q2+Q3+Q4}} \right\} H2 \\
 Q3+Q4 & T2 & \left. \vphantom{Q3+Q4}} \right\} H3 \\
 Q4 & T3 & \left. \vphantom{Q4}} \right\} H4 \\
 0 & T4 &
 \end{array}$$

باید توجه داشت که اگر جریان مواد طی حرکت خود از سمت ورودی به سمت خروجی انرژی از دست بدهد در اینصورت $T_{in} > T1 > T2 > T3 > T4$ و $Q4$ ، $Q3$ ، $Q2$ ، $Q1$ و T_{in} عنوان جریان داغ مدل MHeatX استفاده شود. و اگر جریان مواد طی حرکت خود از سمت ورودی به سمت خروجی انرژی بگیرد در اینصورت $T_{in} < T1 < T2 < T3 < T4$ و $Q4$ ، $Q3$ ، $Q2$ ، $Q1$ و T_{in} عنوان جریان سرد مدل MHeatX استفاده شود. یک جریان Load زمانی که از یک واحد عملیاتی خارج می شود اطلاعات مربوط به تغییرات دمایی و حرارتی آن جریان را از ورودی تا خروجی به همراه دارد. تعداد نقاط دمایی در جریان Load خروجی را می توان در صفحه Stream Class جریان های Load تعیین کرد همچنین در این صفحه می توان تعیین کرد که کدام یک از جریان های انرژی جریان های Load هستند. مدل های Qtvec ، Flash3 ، Flash2 ، Heater ، RadFrac ، MultiFrac ، MHeatX قادرند تا جریان های Load را در خروجی مدل محاسبه کنند. برای مدل های RadFrac و MultiFrac امکان این وجود دارد که برای هر کدام از مراحل برج یا برای یک سری از مراحل برج جریان Load محاسبه شود. اگر جریان های Load در ورودی مدل های غیر از MHeatX یا Qtvec که جریان های Load را پشتیبانی نمی کنند بکار برده شوند ، این جریان ها به عنوان جریان های انرژی در نظر گرفته می شوند.

مدل Qtvec

مدل Qtvec قادر است تا چندین جریان انرژی را ترکیب کرده و یک جریان Load ایجاد کند یا پروفایل دمایی یک جریان Load را بگیرد.



در صفحه Specification می توان دمای شروع جریان Load خروجی یا اختلاف دمای بین دو نقطه اول را وارد کرد. باید توجه داشت که اگر افزایش دمایی از جریان ورودی تا خروجی داشته باشیم اختلاف دما را منفی وارد کنیم. به صورت پیش فرض فرض می شود که اختلاف دمایی دو نقطه اول برابر صفر باشد.

The screenshot shows the 'Specifications' dialog box. Under the heading 'Outlet load stream specifications', there are two radio button options. The first option, 'Specify starting temperature', is selected. To its right, there is a text input field and a dropdown menu set to 'F'. The second option, 'Specify temp. difference between first two points:', is unselected. To its right, there is another text input field and a dropdown menu set to 'F'.



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

ASPEN PLUS

جلسه شانزدهم

- روش حل (EO) Equation Oriented در نرم افزار Aspen Plus
- سازگار کردن مدل با تخمین پارامتر و تطبیق داده ها

روش حل Equation Oriented (EO) در نرم افزار Aspen Plus:

در نرم افزار Aspen Plus روش حل استاندارد روش SM است. در این روش حل کننده (Solver) هر مدل در داخل فلوشیت را به صورت متوالی یا پی در پی حل می کند و با توجه به داده های وارد شده در جریان ورودی مدل، جریان خروجی توسط همان مدل محاسبه می شود. اگر چه روش SM در بسیاری از انواع شبیه سازی ها مؤثر است اما برای انواع مختلف مسائل بسیار وقت گیر است. برای مثال زمانی که جریان برگشتی وجود داشته باشد به محاسبات تکرار شونده نیاز است که باعث افزایش زمان محاسبات می شود.

روش EO یک روش دیگر برای اجرای شبیه سازی در نرم افزار Aspen Plus است. در این روش بر خلاف روش SM تمامی معادلات مدل ها جمع شده و به صورت همزمان حل می شوند. به همین دلیل به این روش حل همزمان هم گفته می شود. روش EO برای مسائل مختلفی که روش SM ضعیف عمل می کند می تواند خیلی مؤثر واقع شود از جمله:

- شبیه سازی فرآیندهای با جریان برگشتی زیاد
- شبیه سازی فرآیندهای با Design Spec های زیاد
- فرآیندهای با انتگرالیون حرارتی بالا^۱
- بهینه سازی فرآیند
- سازگار کردن مدل با تخمین پارامتر و تطبیق داده ها^۲

حل موارد فوق به روش SM به دلیل اینکه برای همگرایی حل نیاز به تعداد زیادی حلقه های همگرایی تو در تو دارد، دشوار است. اما در روش حل EO بدون اینکه نیاز به حل حلقه های تو در تو باشد، به دلیل حل همزمان معادلات، تعداد متغیرها و معادلات می تواند خیلی زیاد باشد.

جهت شروع کار با روش EO فرض بر اینست که کاربر به طور کامل به روش حل SM آشناست. روش EO زمانی خوب جواب می دهد که تمام متغیرها نزدیک به جواب باشند. بنابراین روش EO برای حل یک شبیه سازی نیاز به تخمین های اولیه خوب برای تمام متغیرها دارد. به همین دلیل قبل از شروع حل به روش EO، برنامه شبیه ساز باید یکبار به روش SM اجرا شود. البته ممکن است برنامه حین اجرا به روش SM به همگرایی کامل نرسد بلکه مهم اینست که هر کدام از مدل ها حداقل یکبار حل شوند.

حالت های مختلف حل برنامه به دو روش SM و EO

در روش حل SM برنامه فقط یک حالت حل به نام Simulation دارد. در این حالت ورودی های مدل به عنوان پارامترهای ثابت مدل در نظر گرفته می شوند و بقیه مقادیر و پارامترهای مدل محاسبه می شوند. در این روش درجه آزادی وجود ندارد. اما در روش حل EO حالت های حل مختلفی وجود دارد که عبارتند از:

- **Simulation:** در این روش درجه آزادی صفر است و بر اساس اطلاعات داده شده خوراک و شرایط عملیاتی مدل، خروجی مدل محاسبه می شود.
- **Parameter Estimation:** در این روش درجه آزادی صفر است و داده های جریان ورودی مدل به همراه خروجی های مورد نظر مدل ثابت هستند و در نتیجه پارامترهای مدل محاسبه می شوند. در این روش برای تخمین پارامترهای مدل یک متغیر اندازه گیری شده به ازاء هر پارامتر تخمین زده شده مورد نیاز است.
- **Reconciliation:** این روش برای سازگار کردن مدل (model tuning) استفاده می شود. در این روش از مینیمم کردن وزنی حداقل مربعات تابع هدف انحراف های بین تخمین های مدل و مقادیر اندازه گیری شده در واحد استفاده می شود. در این حالت ممکن است تعداد درجه های آزادی سیستم زیاد باشد.

1 -highly heat-integrated processes

2 -model tuning via parameter estimation and data reconciliation

- **Optimization:** در این حالت با تغییر در شرایط عملیاتی واحد ماکزیمم مقدار تابع هدف سود محاسبه می شود. البته در این روش پارامترهای تعیین شده در حالت حل model tuning ثابت باقی می ماند و تغییر نمی کنند. اگر چه در روش SM، تمام حالت های مختلف حل از قبیل بهینه سازی، تخمین پارامترها و تطبیق داده ها وجود دارد، ولی زمان حل همگرایی مخصوصاً در فلوشیت های پیچیده خیلی بالاست.
 - در هر کدام از حالت های چهارگانه حل EO که در بالا بدان اشاره شد، وضعیت متغیرها^۱ به یکی از سه صورت زیر می تواند باشد:
 - **Fixed:** در این حالت حل کننده (solver) نمی تواند مقدار متغیر را تغییر دهد. به دلیل اینکه این متغیر ثابت است و توسط کاربر وارد برنامه شده است.
 - **Free:** در این حالت حل کننده (solver) مقدار متغیر را به عنوان نتیجه محاسبات محاسبه می کند و هر مقداری که قبل از حل برنامه توسط کاربر برای متغیر در این وضعیت وارد شود فقط به عنوان حدس اولیه در محاسبات از آن استفاده می شود.
 - **Degree of Freedom (DOF):** در این حالت حل کننده (solver) آزاد است تا متغیر را تغییر دهد تا تابع هدف را به منظور مورد نظر برساند.
- در جدول زیر به وضعیت متغیرهای روش EO در حالت های مختلف حل برنامه اشاره شده است:

Specification	Simulation	Parameter Estimation	Reconciliation	Optimization
Calculated	Free	Free	Free	Free
Constant	Fixed	Fixed	Fixed	Fixed
Measured	Free	Fixed	Fixed	Free
Parameterized	Fixed	Free	Free	Fixed
Optimized	Fixed	Fixed	Fixed	DOF
Reconciled	Fixed	Fixed	DOF	Fixed
Independent	Fixed	Fixed	DOF	DOF

در روش EO به صورت پیش فرض وضعیت متغیرها در هر کدام از چهار حالت حل برنامه به دو صورت Fixed و Free است. برای مثال مشخصه هایی که در فرم های ورودی مدل توسط کاربر وارد برنامه می شوند از جنس Fixed (Specification=constant) و مشخصه هایی که توسط برنامه محاسبه می شوند از جنس Free (Specification=Calculated) هستند.

- علاوه بر وضعیت متغیرها که باید مشخص شوند، مشخصه های دیگری هم برای متغیرها باید وارد برنامه شوند که عبارتند از:
- **Value:** در این قسمت مقدار اولیه متغیر وارد برنامه می شود. اگر وضعیت متغیر از نوع Free باشد، مقدار آن طی حل برنامه ممکن است عوض شود.
 - **Lower Bound:** در این قسمت کمترین حد مجاز متغیر وارد برنامه می شود.
 - **Upper Bound:** در این قسمت بیشترین حد مجاز متغیر وارد برنامه می شود. اگر چه حدهای بالا و پایین را برای همه متغیرها می توان معین کرد ولی همواره این حدود اعمال نمی شوند. اعمال شدن این حدود در برنامه بستگی به انتخاب حالت حل برنامه و انتخاب نوع الگوریتم همگرایی آن دارد.
 - **Step Bound:** در این قسمت طول گام تغییرات متغیر در ابتدا تا انتهای حل وارد برنامه می شود.
 - **UOM:** در این قسمت واحد اندازه گیری متغیر وارد برنامه می شود که به صورت پیش فرض برابر با واحد انتخاب شده در خروجی برنامه شبیه ساز است.

¹ -Variable Specification

- **Bound Type:** در این قسمت نوع محدوده به سه صورت زیر وارد برنامه می شود:
 - ✓ **Hard:** در صورت انتخاب این گزینه، در زمان حل برنامه محدوده حل رعایت خواهد شد. انتخاب پیش فرض برنامه در این حالت قرار دارد.
 - ✓ **Relaxed:** در صورت انتخاب این گزینه، اگر در ابتدای اجرای برنامه متغیر در خارج از محدوده حل نوسان کند در اینصورت دامنه محدوده به سمت مقدار جاری متغیر حرکت می کند.
 - ✓ **Soft:** در صورت انتخاب این گزینه، هر میزان انحراف از محدوده به ضریب وزنی محدوده ضرب شده و به تابع هدف اضافه می شود^۱.
- **Soft Bound Weight:** از فاکتور وزنی زمانی که نوع محدوده در حالت Soft باشد استفاده می شود. مدل های زیر فرمولاسیون روش EO را ندارند اما همه این مدل ها به غیر از مدل راکتور RBatch می توانند در این روش با استفاده از لایه اختلال^۲ به کار گرفته شوند:

- Absbr
- Aerotran
- Distl
- DSTWU
- Hetran
- HTRI-XIST
- MCompr
- MHeatX
- MultiFrac
- Pipe
- Pipeline
- RBatch
- RGibbs
- SCFrac
- User/User2

مدل های زیر فرمولاسیون روش EO را (حتی با استفاده از لایه اختلال) ندارند:

- Solid substreams and solids-handling unit operation models
- Mass-balance-only simulations
- Balance Blocks
- Data-Fit
- Optimization (use EO Optimization run mode instead)
- Constraint (specify variable bounds instead)

مدل های زیر فرمولاسیون روش EO را دارند:

- Analyzer
- Flash2
- HxFIux
- RadFrac

برای این مدل موارد ذکر شده در ذیل فرمولاسیون EO را ندارند اما می توانند با استفاده از لایه اختلال به کار گرفته شوند:

1 -Penalty Function 2 - Perturbation Layer:

لایه اختلال مکانیزمی است که توسط آن یک مدل به صورت بسته^۲ به روش EO حل می شود. از این مکانیزم برای مدل هایی که در قسمتی از شبیه سازی با فرمولاسیون EO پشتیبانی نمی شوند، استفاده می شود. لایه اختلال مدل را ایزوله کرده و متغیرهای EO را برای ورودی ها و خروجی های مدل تولید می کند و سپس یک ماتریس ژاکوبین که نشاندهنده روابط بین ورودی ها و خروجی هاست، محاسبه می شود. برای مدل های بزرگ این روش می تواند بسیار زمانبر باشد. دقت ماتریس ژاکوبین به همگرایی مدل بستگی دارد.

- Thermosyphon Reboiler (Thermosyphon reboiler is supported in the EO formulation when vfrac is one of the specifications.)
- TPSAR with pressure update
- RadFrac internal design specs which manipulate the feed flow (hide such a design spec in EO, and use an EO Spec Group to perform the manipulation)
- Rate-based calculations with RateSep

این مدل قادر است محاسبات سه فاز را در فرمولاسیون EO انجام دهد. کاربر قادر است با انتخاب گزینه Phase splitting on all specified trays از مسیر زیر محاسبات سه فاز را برای تمام مراحل برج در فرمولاسیون EO در نظر بگیرد.

RadFrac | Block Options | EO Options | Additional Variables dialog box.

- RYield

برای این مدل موارد ذکر شده در ذیل فرمولاسیون EO را ندارند اما می توانند با استفاده از لایه اختلال به کار گرفته شوند:

- User yield subroutines
- Specifications which result in renormalized yields during sequential-modular calculations
- Petroleum characterization option for specifying yield

- Valve

برای این مدل موارد ذکر شده در ذیل فرمولاسیون EO را ندارند اما می توانند با استفاده از لایه اختلال به کار گرفته شوند:

- True species electrolytes (apparent approach is supported in the EO formulation)
- Specification of Minimum Outlet Pressure other than the default setting Use lower for simulation
- Design mode calculations without the specification of valve parameters

این مدل قادر است محاسبات سه فاز را در فرمولاسیون EO انجام دهد.

- Compr

برای این مدل موارد ذکر شده در ذیل فرمولاسیون EO را ندارند اما می توانند با استفاده از لایه اختلال به کار گرفته شوند:

- Suction nozzle parameters
- Multiple performance curves at different speeds

- Flash3

- Mixer

- RCSTR

برای این مدل موارد ذکر شده در ذیل فرمولاسیون EO را ندارند اما می توانند با استفاده از لایه اختلال به کار گرفته شوند:

- True species electrolytes (apparent approach is supported in the EO formulation)
- Polymer kinetics

- Selector

- Decanter

برای این مدل موارد ذکر شده در ذیل فرمولاسیون EO را ندارند اما می توانند با استفاده از لایه اختلال به کار گرفته شوند:

- User KLL subroutine
- KLL correlation

- FSplit

برای این مدل موارد ذکر شده در ذیل فرمولاسیون EO را ندارند اما می توانند با استفاده از لایه اختلال به کار گرفته شوند:

- Specifications which result in renormalized split fractions during sequential-modular calculations

- Mult

- REquil

برای این مدل موارد ذکر شده در ذیل فرمولاسیون EO را ندارند اما می توانند با استفاده از لایه اختلال به کار گرفته شوند:

- Reactions involving solids

- Sep

برای این مدل موارد ذکر شده در ذیل فرمولاسیون EO را ندارند اما می توانند با استفاده از لایه اختلال به کار گرفته شوند:

- Specifications which result in renormalized split fractions during sequential-modular calculations
- Dupl
- Heater
- PetroFrac

برای این مدل موارد ذکر شده در ذیل فرمولاسیون EO را ندارند اما می توانند با استفاده از لایه اختلال به کار گرفته شوند:

- Ratio of steam to products specifications
- Stage pseudostreams for main shell and strippers with total liquid/total vapor phase
- Free-water stage specifications in the main column (other than in the condenser) or in strippers
- Pack Rating or Pack Sizing with pressure update
- Prop-sections
- Features that are globally unsupported
- Some features in Petrofrac are not supported in the EO formulation. When these features appear in Petrofrac blocks running in EO mode, they are dropped from the problem specifications with a warning.
- Design specs involving property differences
- Design specs and manipulated variables spanning different columns

- RPlug

در روش EO ساینز مدل RPLUG از روی شبکه نقاط پروفایل تولید شده طی حل به روش SM تعیین می شود. نتایج حل دو روش برای این مدل معمولاً متفاوت است. این تفاوت زمانیکه شیب پروفایل دما و غلظت در طول راکتور تیز باشد بیشتر است.

برای این مدل موارد ذکر شده در ذیل فرمولاسیون EO را ندارند اما می توانند با استفاده از لایه اختلال به کار گرفته شوند:

- True species electrolytes (apparent approach is supported in the EO formulation)
- User pressure drop calculations
- User heat transfer calculations
- Option to ignore catalyst volume in rate/residence time calculations

- Sep2

برای این مدل موارد ذکر شده در ذیل فرمولاسیون EO را ندارند اما می توانند با استفاده از لایه اختلال به کار گرفته شوند:

- Specifications which result in renormalized split fractions during sequential-modular calculations

- Extract

برای این مدل موارد ذکر شده در ذیل فرمولاسیون EO را ندارند اما می توانند با استفاده از لایه اختلال به کار گرفته شوند:

- User KLL subroutine
- KLL correlation
- Pseudo streams

- HeatX

برای این مدل موارد ذکر شده در ذیل فرمولاسیون EO را ندارند اما می توانند با استفاده از لایه اختلال به کار گرفته شوند:

- Rigorous method (with geometry)
- Phase-specific heat transfer coefficients and zone analysis with multiple shells

- Pump

برای این مدل موارد ذکر شده در ذیل فرمولاسیون EO را ندارند اما می توانند با استفاده از لایه اختلال به کار گرفته شوند:

- Power, discharge pressure, and pressure-ratio performance curves
- Multiple performance curves of other types

برای این مدل موارد ذیل فرمولاسیون EO را دارند:

- Single performance curves for head
- head coefficient
- pressure change

- RStoic

برای این مدل موارد ذکر شده در ذیل فرمولاسیون EO را ندارند اما می توانند با استفاده از لایه اختلال به کار گرفته شوند:

- Specifications which result in modified conversions during sequential-modular calculations

- User3

برای این مدل موارد ذکر شده در ذیل فرمولاسیون EO را ندارند اما می توانند با استفاده از لایه اختلال به کار گرفته شوند:

- Flash specifications

- Calculator

این بلاک در روش EO فقط با استفاده از لایه اختلال اجرا می شود. برای غیر فعال کردن Calculator در روش EO باید از مسیر EO Options Sheet روش حل را در حالت Ignore block during EO solution قرار داد. علاوه بر این محدودیتهای زیر وجود دارند:

- Calculator blocks using the Excel interface are not supported in EO.
- Vector variable specifications are not supported in EO.
- Only Calculator blocks that specify at least one variable as an import variable or export variable are run in EO.
- Calculator block flash specifications are ignored in EO.
- Calculator blocks used in EO mode should not manipulate outlet stream variables of blocks, or modify accessed variables (such as in Fortran statements like $T=T+10$). This type of manipulation is only appropriate for tear streams in SM calculations. The variables you are manipulating should have Constant specifications before the Calculator block is applied.
- Execute-time specifications only have meaning for SM sequencing, and are ignored in EO.

- Design-Spec

این بلاک در روش EO فقط با استفاده از لایه اختلال اجرا می شود. برای غیر فعال کردن Design Spec در روش EO باید از مسیر EO Options sheet | EO Input | its (مسیر اختصاصی بلاک) یا از مسیر EO Configuration | EO Options sheet | Model Type sheet (برای کل شبیه سازی) روش حل را در حالت Ignore block during EO solution قرار داد. علاوه بر این محدودیتهای زیر وجود دارند:

- Vector variable specifications in Design-Specs are not supported in EO.

- Measurement

- Transfer

این بلاک در روش EO اجرا می شود. فقط محدودیتهای زیر وجود دارند:

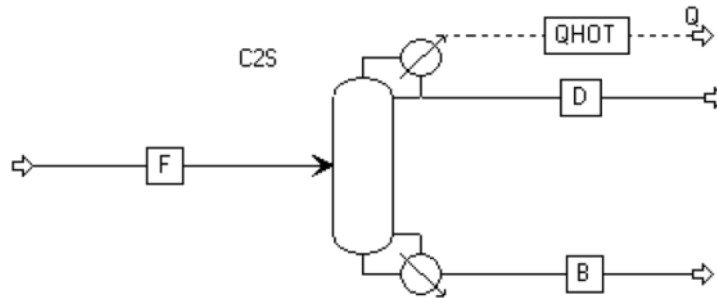
- EO does not support the transfer of stream flow.
- Flash specifications in Transfer blocks are ignored in EO.

- Utility blocks

در ادامه چهار مثال در مورد کاربرد روش حل EO برای حالت های Simulation, Parameter Estimation, Reconciliation و Optimization بحث و بررسی خواهد شد.

تمرین ۱:

برج تقطیر با مشخصات داده شده را شبیه سازی نموده و سپس با نام EO1.apw ذخیره نمایید.



مشخصات برج	
تعداد مراحل برج	۱۰۰
سینی خوراک	۶۰
نوع کندانسور	Total
دبی جرمی Distillate $\left(\frac{kg}{hr}\right)$	۳۹۰۰۰
نسبت جریان برگشتی جرمی	۴

مشخصات جریان خوراک	
دما (C)	۲۵
فشار (bar)	۲۵
دبی جرمی کل $\left(\frac{kg}{hr}\right)$	۵۰۰۰۰
Ethylene (% mole)	۰/۸
Ethane (% mole)	۰/۲

پروفایل فشار برج	
مرحله	فشار (bar)
۱	۲۰
۲	۲۰/۵
۶۰	۲۱
۱۰۰	۲۱/۵

معادله حالت: SRK

بازدهی مورفری را برای تمام مراحل برابر ۹۰٪ در نظر بگیرید.

الف) ابتدا مسئله را به روش Sequential Modular (SM) حل کرده و درصد مولی اتان در محصول بالای برج و درصد مولی اتیلن در محصول پایین برج را گزارش نمایید.

ب) مسئله را با روش Equation Oriented (EO) حل نمایید.

ج) در روش حل (EO) شرایط طراحی را به گونه ای تغییر دهید که ۰/۰۱٪ مولی اتان در محصول بالای برج و ۱/۵٪ مولی اتیلن در پایین برج داشته باشیم. شدت جریان Distillate و شدت جریان برگشتی را به عنوان متغیرهای طراحی در نظر بگیرید.

راهنمایی ۱:

کلیه متغیرهای ثابت و محاسبه شونده را مطابق جدول زیر از مسیر **EO Configuration | Spec Group** وارد برنامه نمایید:

Variable	User Spec
C2S.D.STR.C2H6	Constant
C2S.B.STR.C2H4	Constant
C2S.BLK.DISTILLATE_MASS	Calculated
C2S.BLK.REFL_RATIO_MASS	Calculated

مقادیر متغیرهای ثابت (درصد مولی اتان در محصول بالای برج و درصد مولی اتیلن در پایین برج) را مطابق جدول زیر از مسیر **EO Configuration | EO Input Configure** وارد برنامه نمایید:

Variable	Value
C2S.D.STR.C2H6	0.0001
C2S.B.STR.C2H4	0.015

پس از اجرای برنامه مقادیر درصد مولی اتان در محصول بالای برج و درصد مولی اتیلن در محصول پایین برج و مقادیر محاسبه شده برای متغیرها را گزارش نمایید.
 ج) در روش حل (EO) تابع سود این فرآیند را با توجه به داده های جدول زیر بهینه سازی نمایید.

Term	Variable	Cost	Units
C2PROD	C2S.BLK.DISTILLATE_MASS	0.4	\$/KG
C2REC	C2S.BLK.BOTTOMS_MASS	0.1	\$/KG
C2DUTY	C2S.QHOT.STR.HEAT	-450.	\$/MMKCAL

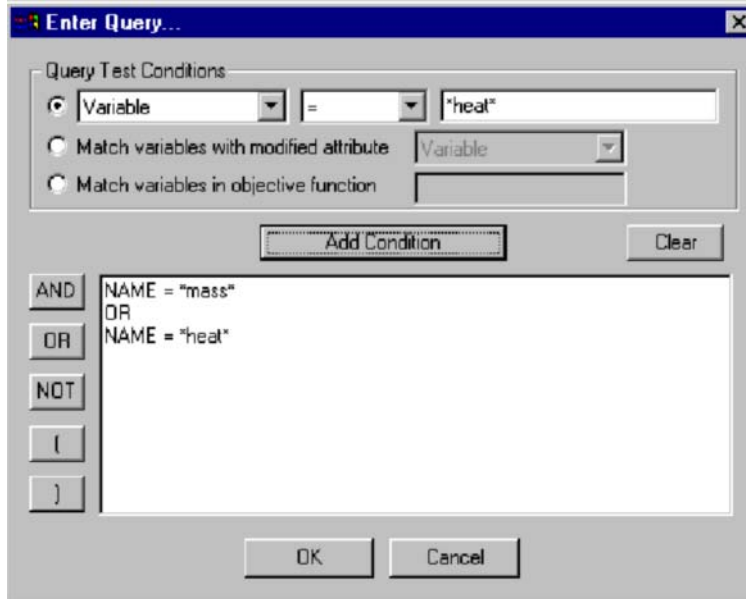
تابع سود (Profit) را از مسیر **EO Configuration | Objective** به صورت خطی تعریف نمایید:

$$\text{Objective} = \sum \text{Variable} * \text{Cost} = \text{C2PROD} * 0.4 + \text{C2REC} * 0.1 - \text{C2DUTY} * 450$$

شدت جریان Distillate و شدت جریان برگشتی را از مسیر **EO Configuration | Spec Group** به عنوان متغیرهای طراحی در حالت Calculated و ترکیب درصدهای اتان و اتیلن را در بالا و پایین برج به عنوان متغیرهای بهینه شونده در حالت Optimized در نظر بگیرید.

راهنمایی ۲:

برای انتخاب راحت متغیرها بهتر است مطابق شکل زیر از امکانات Query dialog box استفاده نماییم:



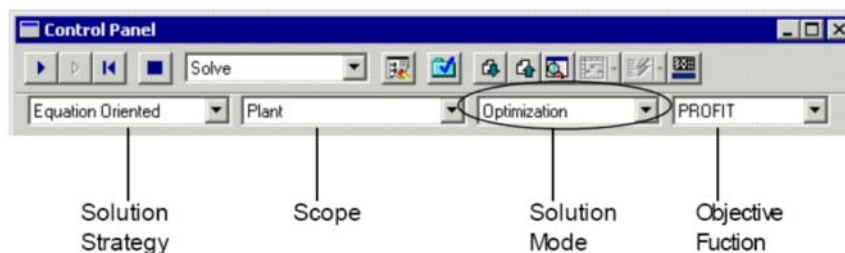
قیدهای زیر را از مسیر EO Configuration | EO Input Configure برای بهینه سازی اعمال نمایید:

Variable	Lower	Upper
C2S.D.STR.C2H6	0.00001	0.0002
C2S.B.STR.C2H4	0.001	0.05

پس از اجرای برنامه مقادیر درصد مولی اتان در محصول بالای برج و درصد مولی اتیلن در محصول پایین برج و مقادیر محاسبه شده برای متغیرها را گزارش نمایید و سپس برنامه را ذخیره نمایید.

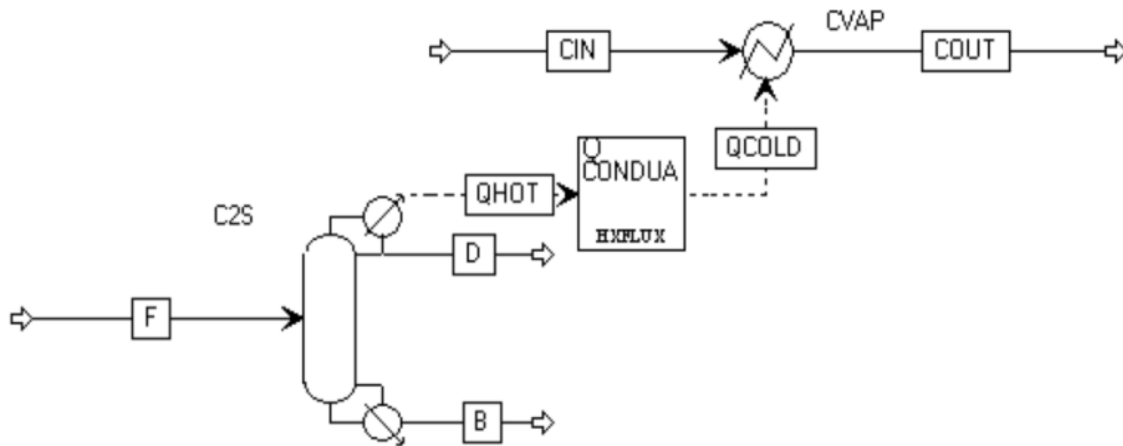
راهنمایی ۳:

برای اجرای برنامه در حالت بهینه سازی، در صفحه Control Panel مطابق شکل زیر حالت حل را در Optimization قرار دهید.



تمرین ۲:

در ادامه تمرین ۱، PFD داده شده در شکل زیر را تکمیل نموده و بر اساس اطلاعات داده شده شبیه سازی نمایید:



- در این تمرین از مدل HXFLUX برای محاسبه سطح انتقال حرارت کندانسور استفاده می شود. برای حل اولیه، از مقادیر فرضی جدول زیر برای دماهای ورودی و خروجی این مدل استفاده نمایید:

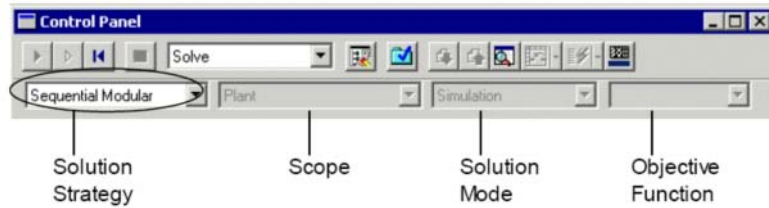
Field	Value 1	Value 2
Inlet hot stream	Temperature	-30
Inlet cold stream	Temperature	-40
Outlet hot stream	Temperature	-30
Outlet cold stream	Temperature	-40

- مقدار ضریب انتقال حرارت کلی کندانسور را برابر $30000 \text{ kcal/hr sqm K}$ در نظر بگیرید.
- ترکیب پروپیلن را به لیست مواد اضافه نموده و مشخصات جریان CIN را مطابق جدول زیر وارد نمایید:

مشخصات جریان CIN	
VF	۰
فشار (bar)	۱/۵
دبی جرمی کل $\left(\frac{kg}{hr}\right)$	۱۵۰۰۰
Ethylene (% mole)	۰
Ethane (% mole)	۰
Propylene (% mole)	۱

- افت فشار مدل CVAP را برابر ۰/۱ بار در نظر بگیرید.

الف) ابتدا برنامه را در حالت حل (SM) قرار داده و اجرا نمایید. سپس دمای جریانهای Distillate و COUT را با مقادیر داده شده در مدل HXFLUX مقایسه نمایید.



ب) مسئله را با روش (EO) حل نمایید.

ج) در روش حل (EO) شرایط طراحی را به گونه ای تغییر دهید که جریان خروجی از CVAP به صورت بخار اشباع باشد. دبی جریان ورودی به CVAP را به عنوان متغیر طراحی در نظر بگیرید.

Variable	User Spec
CVAP.BLK.COUT_VAPOR_FRACTION	Constant
CIN.BLK.MASS	Calculated

Variable or alias	Value
CVAP.BLK.COUT_VAPOR_FRACTION	1

د) جهت محاسبه دقیق سطح انتقال حرارت کندانسور با استفاده از مدل HXFLUX می بایست ارتباط بین دماهای جریان های ورودی و خروجی کندانسور را با مدل HXFLUX برقرار ساخت. جهت این کار می بایست از طریق مسیر EO Configuration / Connections / Configuration Sheet اطلاعات جدول زیر را وارد کرده و سپس برنامه را اجرا نمایید.

Name	Destination	Source
THIN	CONDUA.BLK.H_IN_TEMP	C2S.BLK.TEMP_2
THOUT	CONDUA.BLK.H_OUT_TEMP	C2S.BLK.TEMP_1
TCIN	CONDUA.BLK.C_IN_TEMP	CVAP.BLK.COUT_TEMP
TCOUT	CONDUA.BLK.C_OUT_TEMP	CVAP.BLK.COUT_TEMP

ه) در روش حل (EO) تابع سود این فرآیند را با توجه به داده های جدول زیر بهینه سازی نمایید. شدت جریان Distillate و شدت جریان برگشتی را به عنوان متغیرهای طراحی در نظر بگیرید.

Term	Variable	Cost	Units
C2PROD	C2S.BLK.DISTILLATE_MASS	0.4	\$/KG
C2REC	C2S.BLK.BOTTOMS_MASS	0.1	\$/KG
C3R	CIN.BLK.MASS	-0.05	\$/KG

پس از اجرای برنامه مقادیر درصد مولی اتان در محصول بالای برج و درصد مولی اتیلن در محصول پایین برج و مقادیر محاسبه شده برای متغیرها را گزارش نمایید و سپس برنامه را ذخیره نمایید.

نکته:

در روش حل SM ترکیبات با شدت جریان صفر در یک جریان تأثیر کمی در عملکرد اجرای شبیه سازی دارد. به خاطر اینکه هر واحد عملکردی (UO) می تواند ترکیبات بی اثر را (بدون دبی) قبل از اجرا فیلتر کند. اما در روش EO هر ترکیبی (حتی بی اثر) متغیرها و معادلاتی را به برنامه اضافه می کند که منجر به افزایش حجم حافظه محاسباتی و زمان محاسبات برنامه می شود. به همین خاطر در محیط EO می توان گروه های ترکیباتی (Component Groups) مختلفی را برای جریان ها تعیین کرده و در آنها ترکیبات با دبی صفر را فیلتر کرد. برای مثال در این تمرین می توان از مسیر Components | Comp-Groups ترکیبات زیر را در دو گروه طبقه بندی کرد:

C2GROUP: C2H4, C2H6

C3GROUP: C3H8

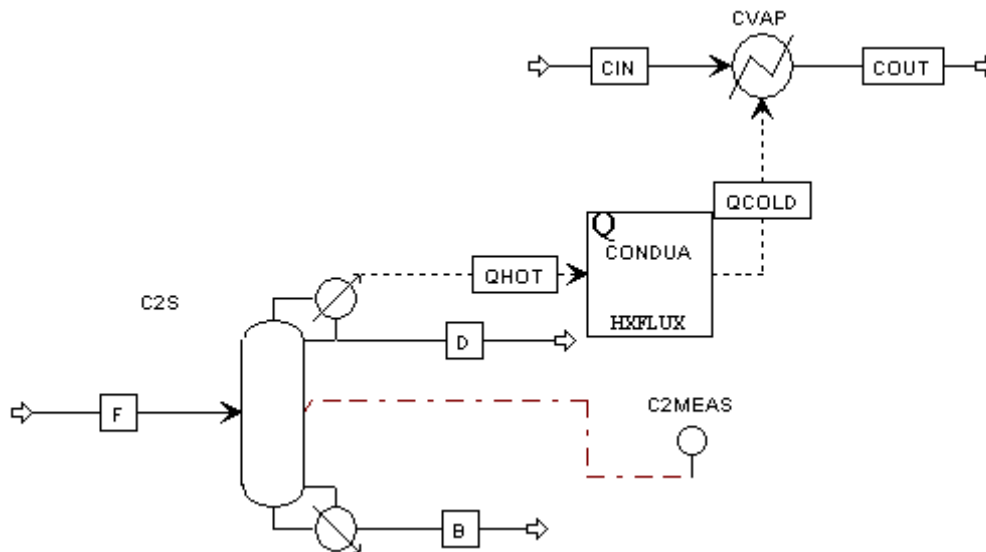
EO Configuration | EO سپس از روی فلوشیت اصلی دو فلوشیت (Flow sheet section) جدید ایجاد کرده و از مسیر EO Configuration | EO Options | Flow sheet Sections گروه های ترکیبات را به صورت زیر به آنها اختصاص دهید:

C2SET, (which holds RADFRAC block C2S): Select C2GROUP

C3SET, (which holds HEATER block CVAP): Select C3GROUP

تمرین ۳:

در ادامه تمرین ۲، از مدل measurement برای انجام عملیات Parameter Estimation جهت تیون کردن مدل شبیه سازی با داده های پلنت استفاده خواهیم کرد.



فرض کنید برای فلوشیت بالا مقادیر اندازه گیری شده پلنت به شرح زیر باشند:

- Feed mass flow = 50000
- Feed ethane mole fraction = 0.2
- Distillate mass flow = 41000
- Bottoms mass flow = 12000
- Mass reflux ratio = 4.3
- Propylene stream mass flow = 140000

از بین این متغیرها ۳ متغیر زیر را با مقادیر اندازه گیری شده بالا به عنوان شرایط عملیاتی ثابت برج در نظر بگیرید:

- Distillate mass flow
- Bottoms mass flow
- Mass reflux ratio

علاوه بر متغیرهای بالا دو متغیر بهینه شده زیر (از تمرین ۲) را هم به عنوان شرایط عملیاتی ثابت برج در نظر بگیرید:

- Optimized distillate ethane mole fraction
- Optimized bottoms ethylene mole fraction

به کمک Parameter Estimation متغیرهای زیر را تخمین بزنید:

- Offset for the feed mass flow
- Offset for the feed ethane mole fraction
- Offset for the propylene stream mass flow
- Tower Murphree efficiency

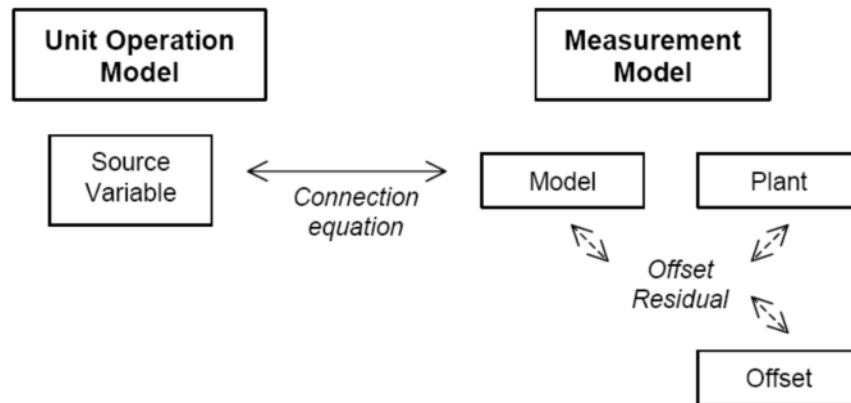
نکته:

استفاده از بلاک measurement یک راه مناسب برای استفاده از دیتاهای فرآیندی در محاسبات مدل است. این مدل در هر دو روش EO و SM کاربرد دارد. هر متغیر اندازه گیری شده در بلاک measurement می تواند به یک EO variable (Open Variable) و یا به یک SM Variable (Close Variable) و یا تلفیقی از هر دو معرفی شود. در روش EO مدل measurement برای هر متغیر اندازه گیری شده سه متغیر زیر را در یک معادله در نظر می گیرد:

- Plant
- Model
- Offset

- $Offset = Plant - Model$

متغیر Plant به مقدار اندازه گیری شده واقعی پلنت و متغیر Model به مقدار پیش بینی شده توسط مدل و Offset به اختلاف این دو گفته می شود. در روش EO یک معادله دیگر وجود دارد که مقدار پیش بینی شده مدل را به متغیر مبدأ (Open Variable) در بلاک اصلی^۱ ارتباط می دهد. به متغیر مبدأ Source Variable گفته می شود. در روش EO بعد از حل مسئله مقدار Model Variable با مقدار Source Variable برابر خواهد بود. در شکل زیر به ارتباط بین این متغیرها اشاره شده است:



از مسیر Flowsheeting Options | Measurement می توان برای ایجاد یک بلاک measurement اقدام نمود. پس از نصب این بلاک هر سه نوع متغیرهای EO در فرمت blockid.BLK.tag_description_variable قابل انتخاب خواهند بود. از مسیر Options | Flowsheet Tools می توان نحوه نمایش این بلاک و جریانهای همراه آن را کنترل کرد.

نکته ۲:

در بلاک measurement در صفحه Input در قسمت Calculate Option چهار روش زیر قابل انتخاب است:

Before connection processing

Calculation Option	Variable Specifications			
	Source	Model	Plant	Offset
Calc-Model	Constant	Calculated	Constant	Constant
Calc-Offset*	Calculated	Constant	Constant	Calculated
Calc-Plant	Calculated	Constant	Calculated	Constant
Param-Offset	Calculated	Constant	Measured	Parameterized

After connection processing

Calculation Option	Variable Specifications			
	Source	Model	Plant	Offset
Calc-Model	Calculated	Calculated	Constant	Constant
Calc-Offset*	Calculated	Calculated	Constant	Calculated
Calc-Plant	Calculated	Calculated	Calculated	Constant
Param-Offset	Calculated	Calculated	Measured	Parameterized

*Calc-Offset is the default.

البته کاربر می تواند در هر کدام از روش های انتخابی بالا از مسیر Spec Groups | EO Configuration | مشخصه های اندازه گیری^۱ را تغییر دهد. مشخصه های اندازه گیری ترکیبی از متغیرهای Plant و Offset به شرح جدول زیر است:

Measurement Specification	Plant Variable Specification	Offset Variable Specification
Calculated	Measured	Parameterized
Constant	Constant	Constant
Measured	Measured	Constant
Parameterized	Constant	Parameterized
Optimized	Optimized	Constant
Reconciled	Constant	Reconciled
Independent	Optimized	Reconciled

- اگر یک متغیر در چندین Spec Group تعریف شده باشد ملاک برای برنامه مشخصه های آخرین Spec Group برای آن متغیر خواهد بود.
- زمانیکه کاربر بخواهد یک مشخصه اندازه گیری برای Source Variable در نظر بگیرد نباید مشخصه آنرا تغییر دهد. بلکه به جای آن می بایست مشخصه های متغیرهای Plant و Offset را با توجه به نوع مشخصه اندازه گیری مطابق جدول بالا تغییر دهد.

مراحل حل مسئله:

- یک بلاک measurement تحت عنوان C2MEAS اضافه نموده و در قسمت Calculate Option گزینه Parameter- Offset را انتخاب نمایید. (با انتخاب این روش مشخصه اندازه گیری برای همه متغیرها در حالت Calculated قرار خواهد گرفت).
- ۸ متغیر زیر را به عنوان Open Variable مطابق جدول زیر در بلاک measurement معرفی نمایید:

Index	Tag	Open Variable
1	F	F.BLK.MASS
2	XF	F.BLK.C2H6_MOLE_FRAC
3	D	C2S.BLK.DISTILLATE_MASS
4	B	C2S.BLK.BOTTOMS_MASS
5	RR	C2S.BLK.REFL_RATIO_MASS
6	XD	C2S.D.STR.C2H6
7	XB	C2S.B.STR.C2H4
8	C3R	CIN.BLK.MASS

• از مسیر EO Configuration | Spec Groups، مشخصه های اندازه گیری را برای ۸ متغیر بالا مطابق جدول زیر انتخاب نمایید:

Measurement	Specification
F	Parameterized
XF	Parameterized
XD	Optimized
XB	Optimized
D	Measured
B	Measured
RR	Measured
C3R	Calculated

این مشخصه ها به Parameter Estimation اجازه خواهد داد تا دبی و ترکیب درصد جریان خوراک را به همراه بازدهی مورفوری برج تغییر دهد.
 به دلیل اینکه در بلاک measurment روش محاسباتی Parameter-Offset انتخاب شده است، بنابراین کفایت فقط مشخصه های ۷ متغیر اول را به شرح جدول زیر تغییر داد:

Variable	User Spec	Parameterized
C2MEAS.BLK.XD_MODEL	Calculated	Free
C2MEAS.BLK.XD_PLANT	Optimized	Fixed
C2MEAS.BLK.XD_OFFSET	Constant	Fixed
C2MEAS.BLK.XB_MODEL	Calculated	Free
C2MEAS.BLK.XB_PLANT	Optimized	Fixed
C2MEAS.BLK.XB_OFFSET	Constant	Fixed
C2MEAS.BLK.F_MODEL	Calculated	Free
C2MEAS.BLK.F_PLANT	Constant	Fixed
C2MEAS.BLK.F_OFFSET	Parameterized	Free
C2MEAS.BLK.XF_MODEL	Calculated	Free
C2MEAS.BLK.XF_PLANT	Constant	Fixed
C2MEAS.BLK.XF_OFFSET	Parameterized	Free
C2MEAS.BLK.D_PLANT	Measured	Fixed
C2MEAS.BLK.D_OFFSET	Constant	Fixed
C2MEAS.BLK.B_PLANT	Measured	Fixed
C2MEAS.BLK.B_OFFSET	Constant	Fixed
C2MEAS.BLK.RR_PLANT	Measured	Fixed
C2MEAS.BLK.RR_OFFSET	Constant	Fixed
C2S.BLK.EFF_1	Parameterized	Free

نکته:

برای مشخصه هایی که متغیرهای Plant و Offset آنها هر دو در حالت Fixed قرار دارند (برای مثال مقادیر متغیرهای F, XF, XD و XB)، متغیر Source Variable از بلاک measurement محاسبه خواهد شد.

- مقادیر متغیرهای اندازه گیری شده را در صفحه EO Configuration | EO Input | Configure مطابق جدول زیر وارد برنامه می نماییم:

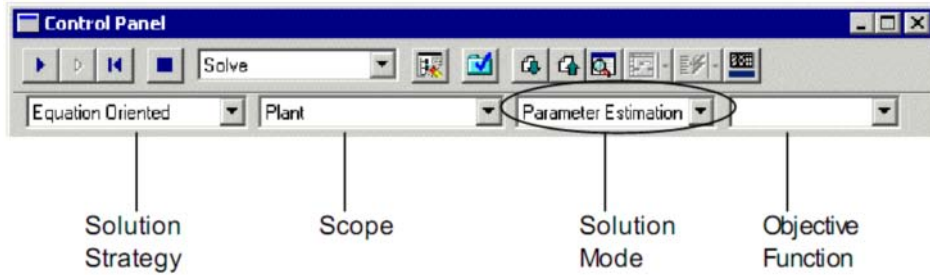
Variable or alias	Value
C2MEAS.BLK.F_PLANT	50000
C2MEAS.BLK.XF_PLANT	0.2
C2MEAS.BLK.D_PLANT	41000
C2MEAS.BLK.B_PLANT	12000
C2MEAS.BLK.RR_PLANT	4.3
C2MEAS.BLK.C3R_PLANT	140000

- همچنین در این صفحه متغیرهای XD و XB را که قبلاً انتخاب شده اند به فرمت متغیرهای بلاک measurement در آورید:

Change this	To this
C2S.D.STR.C2H6	C2MEAS.BLK.XD_PLANT
C2S.B.STR.C2H4	C2MEAS.BLK.XB_PLANT

- به صفحه Control Panel رفته، در قسمت Command Line در پایین صفحه عبارت Check Measurements را تایپ کرده و از وضعیت مشخصه های انتخاب شده با پیام *All measurements are correctly specified* اطمینان حاصل نمایید.

- به صفحه Control Panel رفته، روش اجرای برنامه را در حالت SM قرار داده، برنامه را یکبار Reinitialize نموده و اجرا نمایید. سپس برنامه را در حالت EO و مود حل Parameter Estimation مطابق شکل زیر اجرا نمایید.



پس از اجرای برنامه بازدهی مورفری و مشخصه های خوراک بر اساس داده های اندازه گیری شده پلنت محاسبه خواهند شد. جهت دیدن نتایج برنامه به انتهای صفحه EO Configuration | EO variables مراجعه نمایید. همچنین نتایج اجرای برنامه را می توان از مسیر:

Flowsheeting Options | Measurement | C2MEAS | Results

ملاحظه کرد.

- به صفحه Control Panel رفته، در حالت EO مود حل را در حالت Optimization قرار داده و تابع هدف Profit را انتخاب نمایید.

نکته:

انتقال برنامه از حالت Parameter Estimation به Optimization باعث می شود تا:

- متغیرهای Measured از حالت Fixed به حالت Free تغییر داده شوند. یا به عبارت دیگر متغیرهای B, D, RR و محاسبه می شوند.
- متغیرهای Parameterized از حالت Free به حالت Fixed تغییر داده شوند. یا به عبارت دیگر متغیرهای XF, F و بازدهی مورفری در مقدار ثابت بدست آمده از Parameter Estimation قرار داده می شوند.
- تمامی Offset ها در حالت Fixed قرار داده می شوند.

- به صفحه Control Panel رفته، در قسمت Command Line در پایین صفحه عبارت Check Measurements تایپ کرده و از وضعیت مشخصه های انتخاب شده با پیام *All measurements are correctly specified* اطمینان حاصل نمایید.
- برنامه را اجرا نمایید. بهینه سازی با مقادیر بدست آمده برای بازدهی مورفری برج و مشخصه های خوراک از مرحله قبل (Parameter Estimation) اجرا خواهد شد.

تمرین ۴:

در ادامه تمرین قبلی عملیات Reconciliation جهت تیون کردن مدل با داده های پلنت انجام خواهد شد. Reconciliation یک عملیات بهینه سازی است که نتایج آن در مقایسه با Parameter Estimation متفاوت است. همانطور که قبلاً هم اشاره شد مقادیر اندازه گیری شده پلنت به شرح زیر می باشند:

- Feed mass flow
- Feed ethane mole fraction
- Distillate mass flow
- Distillate ethane mole fraction
- Bottoms mass flow
- Bottoms ethylene mole fraction
- Mass reflux ratio
- Propylene stream mass flow

برای عملیات Reconciliation پنج متغیر DOF به شرح ذیل وجود دارند:

- Feed mass flow
- Feed ethane mole fraction
- Distillate ethane mole fraction
- Bottoms ethylene mole fraction
- Tower Murphree efficiency

به کمک Reconciliation، برنامه ۵ متغیر DOF را تا زمانی که تابع هدف $(\sum [Offset / \sigma]^2)$ کمینه شود، تغییر می دهد. تابع هدف شامل ۸ Offset متغیر بالا می باشد.

- به صفحه Control Panel رفته، روش اجرای برنامه را در حالت SM قرار داده، برنامه را یکبار Reinitialize نموده و اجرا نمایید. سپس برنامه را در حالت EO قرار دهید تا مدل Synchronize شود..
- از مسیر EO Configuration | Spec Groups، مشخصه های اندازه گیری را برای ۸ متغیر بالا مطابق جدول زیر انتخاب نمایید:

Measurement	Specification
F	Reconciled
XF	Reconciled
XD	Independent
XB	Independent
D	Calculated
B	Calculated
RR	Calculated
C3R	Calculated

در طی عملیات Reconciliation متغیرهای Offset برای بازدهی مورفری، ترکیب درصد محصولات برج، دبی خوراک و ترکیب درصد خوراک، متغیرهای DOF هستند. این متغیرها برای کمینه کردن مجموع مربعات همه Offset های مربوط به ۸ متغیر اندازه گیری استفاده می شود.

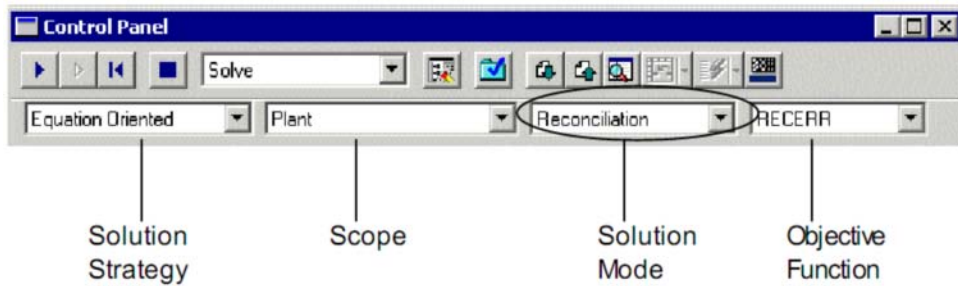
Spec Group تعریف شده برای حل قبلی (Parameter Estimation) را غیر فعال کرده و مشخصه های جدول بالا را تعریف نمایید. به دلیل اینکه در بلاک measurement روش محاسباتی Parameter-Offset انتخاب شده است، بنابراین کفایت فقط مشخصه های ۴ متغیر اول را به شرح جدول زیر تغییر داد:

Variable	User Spec	Reconciliation
C2MEAS.BLK.F_MODEL	Calculated	Free
C2MEAS.BLK.F_PLANT	Constant	Fixed
C2MEAS.BLK.F_OFFSET	Reconciled	DOF
C2MEAS.BLK.XF_MODEL	Calculated	Free
C2MEAS.BLK.XF_PLANT	Constant	Fixed
C2MEAS.BLK.XF_OFFSET	Reconciled	DOF
C2MEAS.BLK.XD_MODEL	Calculated	Free
C2MEAS.BLK.XD_PLANT	Optimized	Fixed
C2MEAS.BLK.XD_OFFSET	Reconciled	DOF
C2MEAS.BLK.XB_MODEL	Calculated	Free
C2MEAS.BLK.XB_PLANT	Optimized	Fixed
C2MEAS.BLK.XB_OFFSET	Reconciled	DOF
C2S.BLK.EFF_1	Reconciled	DOF

- برای عملیات Reconciliation تابع هدف $\sum [Offset / \sigma]^2$ را از مسیر EO Configuration | Objective با نام RECERR مطابق جدول زیر معرفی نمایید:

Term	Variable	Standard deviation	Physical type	Units
F	C2MEAS.BLK.F_OFFSET	1000	Mass-Flow	Kg/hr
XF	C2MEAS.BLK.XF_OFFSET	0.05		
D	C2MEAS.BLK.D_OFFSET	1000	Mass-Flow	Kg/hr
B	C2MEAS.BLK.B_OFFSET	500	Mass-Flow	Kg/hr
RR	C2MEAS.BLK.RR_OFFSET	0.1		
XD	C2MEAS.BLK.XD_OFFSET	0.0005		
XB	C2MEAS.BLK.XB_OFFSET	0.01		
C3R	C2MEAS.BLK.C3R_OFFSET	10000	Mass-Flow	Kg/hr

- در مسیر EO Configuration | Objective در مقابل فیلد Reconciliation گزینه RECERR را انتخاب نمایید تا تابع هدف مربوط به عملیات Reconciliation انتخاب شود.
- به صفحه Control Panel رفته و در حالت EO Mode حل Reconciliation را مطابق شکل زیر انتخاب نموده و برنامه را اجرا نمایید.



- اگر برنامه به دلیل پایان تعداد تکرارها حین اجرا متوقف شد یکبار دیگر برنامه را اجرا نمایید. جهت دیدن نتایج برنامه به انتهای صفحه EO Configuration | EO variables مراجعه نمایید. پس از اجرای برنامه بازدهی مورفری و مقادیر محاسبه شده برای Offset ها را ملاحظه نمایید.
- به صفحه Control Panel رفته، در حالت EO Mode حل را در حالت Optimization قرار داده و تابع هدف Profit را انتخاب کرده و برنامه را اجرا نمایید.