

## مدلسازی واحدهای اولفینی با استفاده از روشهای مهندسی - تخمینی

سجاد بهرامی ریحان<sup>۱\*</sup>، رامین کریمزاده<sup>۲</sup>

۱- عسلویه، شرکت پتروشیمی جم، واحد فرایند

۲- تهران، دانشگاه تربیت مدرس، دانشکده مهندسی شیمی

پیام نگار: S\_bahrami@jpcomplex.com

### چکیده

با توجه به اهمیت واحدهای اولفینی در کشور و همچنین پیچیدگی آنها، برای واحدهای بزرگ بهینه کردن شرایط عملیاتی و بهره‌وری، بسیار مهم به نظر می‌رسد. از آنجایی که مدلسازی و شبیه‌سازی بعضی از قسمتهای این واحد توسط روابط و معادلات سنگین ریاضی صورت می‌پذیرد لذا استفاده از یک روش صحیح و در عین حال ساده و کاربردی که در آن بجای استفاده از روشها و معادلات پیچیده دیفرانسیلی و ریاضی از روشها و فرمولهای ساده استفاده شده باشد بسیار مفید خواهد بود. در واقع با استفاده از این روش می‌توان بسیاری از پارامترهای طراحی و عملیاتی واحد را بررسی و در مورد تغییرات و در نهایت بهینه‌سازی آنها اظهار نظر کرد. در این کار پژوهشی مطالعه و مدلسازی واحد اولفین مجتمع پتروشیمی جم که از لحاظ ظرفیت بعنوان یکی از بزرگترین واحدهای اولفین جهان محسوب می‌شود، مورد بررسی قرار گرفته و واحدهای سردسازی و جداسازی آن توسط روابط و روشهای تخمینی و تقریبی و با کمک نرم‌افزار اکسل مدلسازی گردید و شبیه‌سازی و نتایج آن ارائه شد. در نهایت جهت بررسی بیشتر این روش، شش حالت عملیاتی مختلف مورد بررسی قرار گرفت و محاسبات آن توسط این روابط صورت پذیرفت. نتایج بدست آمده قابل قبول و در بسیاری از حالتها نزدیک به شرایط طراحی بود.

کلمات کلیدی: اولفین، مدلسازی، روشهای مهندسی - تخمینی

### ۱- مقدمه

کک‌گیری و خنک می‌شوند. همچنین ترکیبات سنگین آن به عنوان نفت کوره جدا می‌گردد. بقیه مواد باقیمانده بصورت گاز به کمپرسور وارد و فشار آن بالا رفته و پس از مرحله خشک کردن وارد قسمت سرد می‌شود. در این مرحله، سردسازی توسط چیلرهای خاص و همچنین سیکلهای تبرید صورت گرفته و هیدروژن و متان بعنوان سبکترین اجزاء جدا می‌شوند. در قسمت بعد محصولات دو کربنی اعم از اتیلن و اتان جدا می‌شوند. البته مقداری استیلن همراه اتیلن و اتان می‌باشند که این مقدار از طریق واکنش هیدروژناسیون به اتیلن و اتان تبدیل می‌گردد. در مرحله بعد محصولات سه کربنی از قبیل

واحدهای اولفینی که به واحدهای کراکینگ نیز معروف می‌باشند با تکنولوژیهای گوناگون و متنوعی طراحی شده‌اند. در یکی از این طراحیها ابتدا خوراک گازی (شامل اتان) و خوراک مایع (که بیشتر شامل برشهای سه، چهار و پنج کربنه می‌باشند) به کوره‌های کراکینگ وارد شده و پس از عملیات کراکینگ و واکنش، محصولات مختلفی از جمله اتیلن، پروپیلن، متان، هیدروژن، استیلن، متیل استیلن و پروپان‌دی‌ان و بنزین پیرولیز و دیگر محصولات تولید می‌شود. محصول گاز شکسته شده، سپس در قسمت گرم،

آورده‌اند[۴]. در این طرح تحقیقاتی با استفاده از روشها و روابط مهندسی- تخمینی و سرانگشتی که دارای خطای اندکی در محاسبات می‌باشند، فرایند و همچنین تجهیزات موجود در قسمت سرد واحد اولفین شرکت پتروشیمی جم شامل واحدهای کمپرسور گاز و شستشو با کاستیک و خشک کردن، متان‌زدایی و سردسازی، جدا سازی برشهای دو کربنی، سه کربنی و چهار کربنی را مدلسازی و شبیه‌سازی کرده و در نهایت با استفاده از این محاسبات، می‌توان نتایج خوبی در خصوص میزان محصولات تولیدی و همچنین پارامترهای عملیاتی را بدست آورد.

## ۲- تئوری

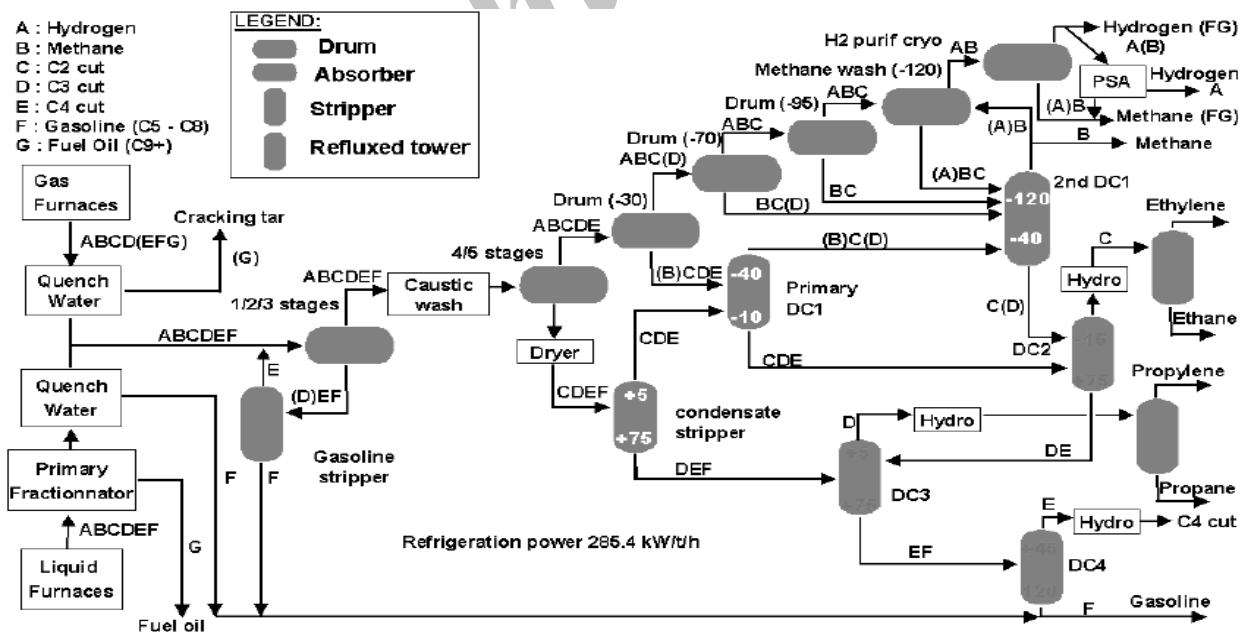
### ۲-۱ فرایند تبخیر آبی

روابط (۱)، (۲) و (۳) در این فرایند مورد استفاده قرار می‌گیرند[۵]:

$$Fz_i = z_i(F - V) + K_i x_i V \quad (1)$$

$$y_i = \frac{z_i}{1 + \left(\frac{V}{F}\right)(K_i - 1)} \quad (2)$$

پروپیلن، پروپان، متیل استیلن و پروپان‌دی‌ان جدا می‌شوند. مشابه آنچه که برای استیلن بیان شد، متیل استیلن و پروپان‌دی‌ان نیز با هیدروژنه کردن به پروپیلن و پروپان تبدیل می‌شوند. در مرحله بعد محصولات چهار کربنی از قبیل بوتادی‌ان، بوتن و از این قبیل و همچنین برش‌های پنج کربنه و بالاتر (تحت عنوان بنزین پیرولیز) جدا می‌شوند. برشهای چهار کربنی یا جهت استحصال محصول ۳ و ۱ بوتادی‌ان به واحد بوتادی‌ان ارسال می‌گردد و یا در راکتورهای هیدروژناسیون هیدروژنه شده و به عنوان خوراک مایع به کوره‌های مایع تزریق می‌شوند. شکل (۱) نمایی کلی از واحد اولفین (با کراکهای گاز و مایع) را نشان می‌دهد[۱]. در خصوص مطالعه، مدلسازی و بهینه‌سازی در واحدهای اولفین اقدامات متعددی صورت گرفته است. بعنوان مثال مدلسازی و بهینه‌سازی واحد اولفین پتروشیمی امیرکبیر توسط آقای زرین آبادی و همکارانش صورت پذیرفته است[۲]. آقای پائول و همکارانش در خصوص ایجاد تغییرات لازم به منظور بهینه‌سازی و دستیابی به حالت بهینه کنترل واحد اولفین مطالعات موثری را صورت داده‌اند[۳]. در یک مجتمع پتروشیمی در ونزوئلا خانم رومرو با شبیه‌سازی واحد اولفین، حالت بهینه عملیاتی ناحیه جداسازی برشهای  $C_2$  و  $C_3$  را بدست



شکل ۱- نمایی کلی از واحد اولفین[۱]

واحد به واحد براساس روشهای لویس - ماتسونوتیل - گدس می‌باشند، موجود است [۵]. جدا از این روشهای پیچیده و بعضاً بسیار طولانی، می‌توان در محاسبات سرانگشتی از روشهای تخمینی که ساده‌تر می‌باشند استفاده کرد که در ادامه به آن خواهیم پرداخت.

## ۲-۲-۱ حداقل تعداد مراحل

حداقل تعداد مراحل را می‌توان از رابطه فنسک (روابط (۴) و (۵)) بدست آورد [۵]:

$$N_{Min} = S / \ln(\alpha LK / HK)_{av} \quad (4)$$

$$S = \frac{(\frac{x_{LK}}{x_{HK}})D}{(\frac{x_{LK}}{x_{HK}})B} \quad (5)$$

در این روابط  $N_{min}$  حداقل تعداد مراحل،  $(\alpha LK / HK)_{av}$  ضریب فراریت نسبی متوسط جز سبک به سنگین،  $S$  پارامتر جداسازی،  $x_{LK}$  کسر مولی جز کلیدی سبک و  $x_{HK}$  کسر مولی جز کلیدی سنگین می‌باشند. برای بدست آوردن  $(\alpha LK / HK)_{av}$  می‌توان از روشهای فایر، سیدر، کارتیکا، مک کارمیک و راج استفاده کرد [۵]. البته می‌توان از روش ون وینکل (یعنی  $\alpha_{av} = (\alpha_{top} + \alpha_{bot}) / 2$ ) و روش مادکس (یعنی تخمین ضریب متوسط با استفاده از دمای متوسط  $(T_{av} = T_{top} + T_{bot}) / 2$ ) نیز استفاده کرد [۵]. هنگامی که نامساوی داگلاس صادق باشد، فراریت نسبی تقریباً در سراسر برج ثابت است و ساده‌ترین و مناسب‌ترین تخمین برای  $\alpha_{av}$  روشهای فایر، سیدر، کارتیکا، مک کارمیک و راج می‌باشند [۵].

## ۲-۲-۲ حداقل جریان برگشتی

روش آندروود برای بدست آوردن حداقل جریان برگشتی مورد استفاده قرار می‌گیرد. این روش یک معادله است که ترکیب درصد خوراک، شرایط دمایی خوراک و فراریت نسبی در دمای متوسط برج برای فاکتور  $\theta$  (که یک رابطه بین فراریت نسبی اجزاء

در این روابط  $F$  شدت جریان مولی خوراک و  $z_i$  کسر مولی جز مورد نظر در جریان خوراک،  $V$  شدت جریان مولی بخار خروجی و  $y_i$  کسر مولی جزء مورد نظر،  $L$  شدت جریان مایع خروجی و  $x_i$  کسر مولی جزء مورد نظر و  $K_i$  ضریب توزیع می‌باشند. برای محاسبات تبخیر آبی برای ترکیبات غیر ایده‌آل باید از قانون رائولت استفاده کنیم [۵]. حال اگر اجزای مخلوط از نظر شیمیایی مشابه هم باشند، نیروهای جاذبه مولکولی بین اجزاء، مقدار کوچکی است و چون در محاسبات مربوط به فرایندهای پتروشیمیایی خواص اکثر اجزاء به هم نزدیک می‌باشند در نتیجه  $\gamma_i = 1$  و ضریب توزیع بصورت زیر تعریف می‌شود [۵]:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{P_i^{sat}}{P_t} \quad (3)$$

در این رابطه  $P_i^{sat}$  فشار بخار جز مورد نظر و  $P_t$  فشار کل سیستم می‌باشد. جهت انجام محاسبات مربوط به تبخیر آبی (فلاش) ابتدا از رابطه (۲) مقدار  $V$  (از روش حدس و خطا) و کسر مولی  $Y_i$  و سپس کسر مولی  $x_i$  را از رابطه  $y_i = K_i x_i$  بدست می‌آوریم. در ضمن مقادیر ضریب توزیع یا مقادیر  $K$  را می‌توان هم از کتابهای مرجع بدست آورد [۵، ۱۱] و یا هر وقت که در محدوده دما و فشار مورد نظر این مقادیر پیدا نشد می‌توان به عنوان یک قانون سرانگشتی از رابطه (۳) (نسبت فشار بخار به فشار کل) آنرا بدست آورد [۵، ۱۲]. بعنوان یک قانون سرانگشتی دیگر، اگر  $K_i \gg 1$  باشد آنگاه:  $V y_i = F z_i = f_i$  و اگر  $K_i \ll 1$  باشد آنگاه:  $L x_i = F z_i = f_i$  می‌شود. بنابراین برای بدست آوردن شدت جریانهای بخار و مایع برای اجزایی که  $K_i > 10$  آنگاه  $V = \sum_{i=1}^n f_i$  و برای اجزایی که  $K_i < 0.1$  آنگاه  $L = \sum_{i=1}^n f_i$  البته این روش برای اجزایی که مقادیر  $K_i$  آنها بین  $0.1$  تا  $10$  باشد مورد استفاده قرار نمی‌گیرد. برای مخلوطهای غیر ایده‌آل روش تخمینی یا تقریبی وجود ندارد [۵، ۱۲].

## ۲-۲-۲ فرایند تقطیر

بطور کلی قابل اعتمادترین روش طراحی در فرایند تقطیر، روش تیل-گدس می‌باشد. روش‌های دیگری نیز که بیشتر شامل گردآوری معادلات واحدهای تعادلی و حل تکراری آنها به صورت

می‌باشند[۵]. چانگ (رابطه ۱۰) نشان داد که رابطه هنگ‌سبدیک بهترین برآزش نمودار برای اعداد (نمودار) گیلیند می‌باشد[۵].

$$Y = 0.75(1-x^{0.5668}) \quad (۸)$$

این معادله در محدوده  $0.1 < x < 1$  کاربرد دارد. مقادیر  $x$  کمتر از  $0.1$  اهمیت کاربردی کمتری دارند.

$$Y = 1 - \exp\left(\frac{(1+54.4x)(x-1)}{(11+117.2x)(x^{0.5})}\right) \quad (۹)$$

$$Y = 1 - \exp\left(1.49 + 0.315x - \frac{1.905}{x^{0.1}}\right) \quad (۱۰)$$

#### ۲-۲-۴ محل سینی خوراک

مهم‌ترین و بهترین رابطه برای پیدا کردن سینی خوراک رابطه فنسک و رابطه کرکیرایج (رابطه ۱۱) می‌باشد[۵]. هر دو روش تقریبی هستند.

$$\frac{N_R}{N_S} = \left(\frac{z_{HK}}{z_{LK}} \left(\frac{X_{B,LK}}{X_{D,HK}}\right)^2 \frac{B}{D}\right)^{0.206} \quad (۱۱)$$

در این رابطه  $N_R$  تعداد مراحل واقعی،  $N_S$  تعداد مراحل در قسمت جریان‌سازی،  $z_{HK}$  کسر مولی جز کلیدی سنگین در خوراک و  $z_{LK}$  کسر مولی جز کلیدی سبک در خوراک،  $B$  میزان محصول پایین و  $D$  میزان محصول بالای برج،  $X_{B,LK}$  کسر مولی جز کلیدی سبک در پایین و  $X_{D,K}$  کسر مولی جز کلیدی سنگین در بالای برج می‌باشند. روش اسمیت-برنکلی برای زمانی که خواهیم یک برج را تحلیل کرده و از آن برای طراحی یک برج جدید استفاده کنیم مورد استفاده قرار می‌گیرد. این روش هم برای تقطیر و هم برای استخراج و جذب به کار برده می‌شود[۵]. روش اسمیت-برنکلی محاسبات برج را بر مبنای مراحل متوالی بصورت برعکس انجام می‌دهد. این روش تعداد مراحل، نسبت جریان برگشتی، محل واقعی سینی خوراک، ترکیب درصد محصول را تشریح می‌کند. باید دقت کرد که این روش برای برج‌هایی که چگالنده جزیی دارند

می‌باشد) را به هم مرتبط می‌سازد. در این روش فرض می‌شود که فراریتهای نسبی در دمای متوسط برج و جریان مولی سرریز  $(L_0 = L_1 = \dots = L)$  ثابت هستند[۵]. در این روش اگر توزیع اجزای کلیدی نداشته باشیم از روابط (۶) و (۷) استفاده می‌کنیم:

$$1-q = \sum_{j=1}^n \frac{\alpha_j \times z_j}{\alpha_j - \theta} \quad (۶)$$

$$1 + (L/D)_{min} = \sum_{j=1}^n \frac{\alpha_j \times x_{Dj}}{\alpha_j - \theta} \quad (۷)$$

در روابط (۶) و (۷) پارامتر  $q$  نشان‌دهنده کیفیت یا میزان مایع بوده که از شرایط خوراک بدست می‌آید. روشهای دیگری از جمله روش براون-مارتین، روش کالبرن، روش شیراز (برای سیستمهای که اجزای غیر کلیدی توزیع شده دارند) نیز جهت محاسبه حداقل جریان برگشتی مورد استفاده قرار می‌گیرند[۵]. بارنس و همکارانش رابطه آندروود را برای ستونهای شامل چند خوراک توسعه دادند[۵]. یاس و همکارانش یک فاکتور تصحیح برای توسعه رابطه آندروود برای برجهایی که شامل چند خوراک یا چند محصول جانبی هستند ارائه داده‌اند. این روش حداقل جریان برگشتی معلوم را برای یک خوراک، در صورتی که خوراک دیگری نداشته باشیم، را محاسبه می‌کند و سپس یک فاکتور تصحیح برای اضافه کردن هر کدام از خوراکیها (یا محصولات جانبی) به مقدار حداقل جریان برگشتی تخصیص می‌دهد[۵]. پس از محاسبه مقدار  $R_{min}$  جهت محاسبه  $R_{opt}$  از روشهای تخمینی موجود در جدول (۱) استفاده می‌کنیم [۵].

#### ۲-۲-۳ رابطه بین مراحل - جریان برگشتی

مهم‌ترین و پرکاربردترین روابط در این زمینه بوسیله گیلیند و اربار-مادکس ارائه شده‌اند[۵]. رابطه اربار-مادکس بخصوص در نسبت حداقل جریان برگشتیهای پایین صحیح‌تر است. با توجه به اینکه روش گیلیند یک روش گرافیکی است می‌توان جهت راحتی کار آنرا به معادله تبدیل کرد. کینگ پیشنهاد داد که رابطه اجالچی (رابطه ۸) زمانی که دقت خیلی بالا مورد نیاز نیست و رابطه مولوکائف (رابطه ۹) زمانی که دقت بالایی مدنظر است مناسب

که مورد استفاده قرار می‌گیرد ۱۰۰٪ باشد. بنابراین مقدار  $N_{theo}$  تعداد سینی‌های نظری یا مراحل در برج بدون جوش‌آور و چگالنده جزئی را نشان می‌دهد.  $E_o$  بازدهی سینی کلی بر مبنای اطلاعات آزمایشی و واقعی سیستم‌های مشابه یا اطلاعات گراف عملیاتی، می‌باشد [۱۳ و ۵].

### ۲-۲-۶ موازنه حرارتی برجهای تقطیر

اگر یک برج تقطیر با یک خوراک و محصول بالا و پایین را در نظر بگیریم جهت بدست آوردن بار حرارتی جوش‌آور و چگالنده بصورت زیر اقدام می‌کنیم:

$$Fh_F + Q_B = Dh_D + Bh_B + Q_C \quad (13)$$

در این رابطه  $h_D$  آنتالپی کل محصول مقطر (بالای برج)،  $h_F$  آنتالپی کل خوراک،  $h_B$  آنتالپی کل محصول ته برج،  $Q_B$  بار حرارتی ری بویلر، و  $Q_C$  بار حرارتی چگالنده می‌باشند [۵، ۱۳].

### ۲-۳ فرایند جذب

برای مطالعه فرایند جذب دو روش متفاوت وجود دارد. یکی جذب هیدروکربنها با استفاده از یک هیدروکربن رقیق و دیگری، جذب ترکیبات غیر آلی توسط محلولهای یونی [۶]. برای طراحی این برجها از ضریب انتقال جرم استفاده می‌شود. در برجهای جذب، ثابت تعادل تخیل برای بدست آوردن ضرایب جذب و دفع مورد استفاده قرار می‌گیرد. در سال ۱۹۷۴ روش ادمیستر- براون- شروود برای بدست آوردن ضرایب جذب و دفع مورد استفاده قرار گرفت و همچنین گراف ادمیستر بعنوان یک روش تخمینی و تقریبی کاربرد زیادی داشت [۶]. در روش ادمیستر با فرض معلوم بودن مقدار افزایش دما در طول برج، میزان بازدهی و همچنین میزان جریان مولی ورودی، بقیه پارامترهای برج از جمله شدت جریان و میزان دما در سینی‌های مختلف را با استفاده از روش هارتان و فرانکلین بدست می‌آورند [۵]. معادله اسمیت- برنکلی به منظور بهینه‌سازی جذب‌کننده‌های هیدروکربنی ساده یا جوش‌آوردار مورد استفاده قرار می‌گیرد [۶].

مورد استفاده قرار نمی‌گیرد. این روش می‌تواند برای بررسی و دستیابی به اثرات اغتشاش بر روی عملکرد برج و رسیدن به یک نقطه بهینه در کنترل برج، مفید باشد. این روش حتی برای محاسبات بهینه‌سازی مستقیم و برای مطالعات بازآوری مفید است [۵]. رایس روش اسمیت- برنکلی را برای بهبود بازدهی دما و ترکیب درصد سینی‌ها بصورت تکی توسعه داد و برای کنترل برج، موفقیت‌های خوبی بدست آورد [۵]. روش (معادله) اسموکر برای سیستم‌های دو جزئی با تعداد سینی‌های زیاد مناسب و مفید می‌باشد [۵]. هاهمن رابطه اسموکر را برای برجهای پیچیده توسعه و تعمیم داد [۵]. جعفری و همکارانش یک رابطه تقریبی و ساده برای تقطیر سیستم‌های دو جزئی از ساده‌سازی حل (جواب) معادله اسموکر بدست آوردند. معادله ذکر شده بویژه در سیستم‌های کنترلی، هنگامی که می‌خواهیم اثر آشفستگی و کنترل مورد نیاز برای تصحیح آن، را مورد بررسی قرار دهیم مفید است [۵]. داگلاس و همکارانش رابطه (۱۱) را برای تقطیر سیستم‌های چند جزئی توسعه داده‌اند [۵].

### جدول ۱- مقادیر نسبت برگشتی بهینه به حداقل

$R_{opt} / R_{min}$	شرایط کندانسور
۱/۲ - ۱/۳	کندانسورهایی که با هوا و یا آب کولینگ کار می‌کنند
۱/۱ - ۱/۲	کندانسورهایی که توسط سیال مبرد با سطح دمایی نسبتاً بالا کار می‌کنند
۱/۰۵ - ۱/۱	کندانسورهایی که توسط سیال مبرد با سطح دمایی نسبتاً پایین کار می‌کنند ( $150^\circ\text{F} <$ )

### ۲-۲-۵ تعداد واقعی سینی‌ها

از سینی‌های نظری در جریان برگشتی عملیاتی، سینی‌های واقعی برای نصب را می‌توان بدست آورد:

$$N_{act} = \frac{N_{theo}}{E_o} \quad (12)$$

فرض می‌شود که بازدهی جوش‌آور و همینطور هر چگالنده جزئی

## ۲-۴ کمپرسور

در این روابط،  $E_p$  و  $E_A$  به ترتیب بازدهی آدیاباتیک و بازدهی پلی تروپیک می‌باشند.

## ۲-۴-۲ محاسبه دمای خروجی هر مرحله

مقدار دمای خروجی پس از افزایش فشار برای حالت آدیاباتیک به صورت زیر محاسبه می‌گردد:

$$\frac{T_2}{T_1} = \left( \frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{K-2}{K}} \quad (18)$$

برای حالت پلی تروپیک بجای مقدار  $K$  مقدار  $N$  را قرار می‌دهیم. بعضی اوقات برای دمای گاز باید محدودیت در نظر گرفت. برای طراحی کمپرسورهای چند مرحله‌ای دما را زیر ۲۵۰ تا ۳۰۰ درجه فارنهایت در نظر می‌گیرند. اگر نسبت تراکم زیاد باشد معمولاً کمپرسور را یک مرحله‌ای در نظر نمی‌گیرند. همچنین کمپرسورها را با بیشتر از هشت مرحله طراحی نمی‌کنند [۱۷ و ۱۵].

## ۲-۵ منبسط‌کننده

منبسط‌کننده‌ها برای مواردی از جمله کاهش فشار سرد سازها، بازیافت  $C_2$ ، بازیافت  $C_3/C_4$ ، کنترل نقطه شبنم، فرایند اتانول و غیره بکار می‌روند [۱۸، ۶، ۷]. بازدهی منبسط‌کننده، برابر با نسبت انرژی واقعی بازیافت شده به حداکثر انرژی نظری می‌باشد (رابطه (۱۹)).

$$\eta = \frac{H_B - H_A}{H_{B1} - H_A} \quad (19)$$

در این رابطه،  $H_B$  آنتالپی خروجی واقعی،  $H_A$  آنتالپی ورودی واقعی،  $H_{B1}$  آنتالپی خروجی نظری می‌باشند. بعنوان یک روش سرانگشتی معمولاً مقدار بازدهی را حدود ۸۰٪ تا ۸۵٪ می‌توان در نظر گرفت. محتوای مایع در خروجی منبسط‌کننده بین ۱۰٪ تا ۳۰٪ (وزنی) تغییر می‌کند. انرژی موثر منبسط‌کننده‌ها [۱۷ و ۶] را می‌توان از رابطه تخمینی (۲۰) بدست آورد.

با استفاده از گرافهای موجود در کتابهای مرجع می‌توان پارامترهای مختلف مربوط به کمپرسورها را بدست آورد که عبارتند از:

- محدوده کاربرد و عملکرد انواع کمپرسورهای سانتریفوژ رفت و برگشتی و کمپرسورهای جریان محوری با استفاده از فشار خروجی و شدت جریان [۶ و ۷].
- ضریب تراکم‌پذیری توسعه یافته با استفاده از دما و فشار کاهش یافته [۶ و ۷].
- نسبت تعمیم یافته ظرفیت گرمایی گازها ( $K=C_p/C_v$ ) با استفاده از وزن مولکولی [۶ و ۷].
- بازدهی پلی تروپیک کمپرسورهای سانتریفوژ، جریان محوری و رفت و برگشتی [۶ و ۷].
- رابطه بین بازدهی آدیاباتیک و پلی تروپیک [۶ و ۷].

## ۲-۴-۱ محاسبه هد و توان کمپرسورهای سانتریفوژ

با استفاده از رابطه (۱۴) می‌توان هد پلی تروپیک ( $H_{poly}$ ) و رابطه (۱۵) هد آدیاباتیک ( $H_{Ad}$ ) مورد نیاز برای کمپرسورهای سانتریفوژ و جریان محوری را محاسبه کرد [۱۷ و ۱۵]:

$$H_{poly} = \frac{ZRT_2}{(N-1)/N} \left[ \left( \frac{P_2}{P_1} \right)^{(N-1)/N} - 1 \right] \quad (14)$$

$$H_{Ad} = \frac{ART_2}{(K-1)/K} \left[ \left( \frac{P_2}{P_1} \right)^{(K-1)/K} - 1 \right] \quad (15)$$

در روابط بالا  $Z$  ضریب تراکم‌پذیری،  $R$  ثابت جهانی گازها،  $T_1$  و  $P_1$  دما و فشار ورودی،  $T_2$  و  $P_2$  دما و فشار خروجی،  $N$  نمای پلی تروپیک و  $k$  نمای آدیاباتیک می‌باشند. توان مورد نیاز ( $HP$ ) را می‌توان با استفاده از یکی از بازدهی‌ها و یکی از هدها بدست آورد (روابط (۱۶) و (۱۷)) [۱۷ و ۷]:

$$HP = \frac{WH_{poly}}{33000E_p} \quad (16)$$

$$HP = \frac{WH_{Ad}}{33000E_A} \quad (17)$$

$C_3$  و  $C_4$  (در فاز مایع). در این راکتورها ترکیبات غیر اشباع با هیدروژن واکنش داده و به محصولات مطلوب و یا جانبی تبدیل می‌شوند. در نهایت به منظور انجام محاسبات فقط از معادلات در حالت یک بعدی [۱۰] استفاده می‌کنیم که عبارتند از:

$$\rho_g C_p \frac{d}{dz}(T) = \sum \rho_B (-\Delta H_i) r_i \quad (22)$$

$$u_z \frac{d}{dz}(C_i) = \rho_B r_i \quad (23)$$

در این روابط  $\rho_g$  چگالی گاز،  $\rho_B$  چگالی توده،  $r_i$  سینتیک واکنش،  $\Delta H_i$  تغییرات آنتالپی جز مورد نظر در طول واکنش،  $z$  طول بستر کاتالیست، و  $u_z$  نیز سرعت سطحی در جهت  $z$  می‌باشند.

## ۲-۷ مبدلهای حرارتی

در مدلسازی مبدلهای حرارتی جدا از نوع و کاربرد آنها فقط از رابطه موازنه حرارتی برای بدست آوردن پارامترهای لازم استفاده می‌کنیم که این روابط عبارتند از:

$$m c_p (t_{in} - t_{out}) = M C_p (T_{in} - T_{out}) \quad (24)$$

$$m c_p (t_{in} - t_{out}) = M \lambda_i \quad (25)$$

در این روابط:  $M C_p, T$  مربوط به سیال گرم و  $m c_p, t$  مربوط به سیال سرد و یا خنک‌کننده است [۱۳ و ۱۴]. مقادیر مربوط به ظرفیتهای حرارتی یا  $C_p$  برای حالت طراحی در ۱۰۰٪ ظرفیت از کتابهای مرجع استخراج می‌شود و برای حالت‌های دیگر محاسبات همین عدد بدون تغییر در نظر گرفته می‌شود. همچنین  $\lambda_i$  گرمای نهان تبخیر سیال می‌باشد که در حالات مختلف متفاوت خواهد بود. لازم به ذکر است کلیه بطور مشابه برای آنتالپی نیز همین شرایط برقرار می‌باشد. بنابراین با وجود این دو فرض در محاسبات مربوط به موازنه‌های حرارتی در حالت‌های مختلف عملیاتی مورد بحث، مقداری خطا بوجود می‌آید.

$$\Delta H = 0.5 C_p T_1 \left[ 1 - \left( \frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{K-1}{K}} \right] \quad (20)$$

در اینجا  $\Delta H$  انرژی مؤثر واقعی،  $C_p$  ظرفیت حرارتی در فشار ثابت،  $T_1$  و  $P_1$  دما و فشار ورودی،  $T_2$  و  $P_2$  دما و فشار خروجی و  $K = C_p / C_v$  می‌باشند. برای منبسط‌کننده‌های بزرگ معادله  $\Delta H$  ممکن است مقداری خطا داشته باشد و باید با احتیاط از آن استفاده کرد. در واقع از این رابطه برای چک کردن و مقایسه اطلاعات داده شده توسط سازنده با اطلاعات طراحی بکار می‌رود. برای بدست آوردن دمای خروجی [۱۷، ۶] منبسط‌کننده از فرمول (۲۱) استفاده می‌کنیم:

$$T_2 = T_1 \left( \frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{K-1}{K}} + \left( \frac{\Delta H}{C_p} \right) \quad (21)$$

باید توجه داشت که سیال فرایندی پس از عبور از منبسط‌کننده به زیر نقطه شبنم نیاید.

## ۲-۶ راکتورهای کاتالیستی ثابت بستر

راکتورهای کاتالیستی ثابت بستر را یا به صورت مدل شبه هموزن یا به صورت مدل غیر همگن در نظر می‌گیرند. جهت شبیه‌سازی و مدلسازی این نوع راکتورها بایستی معادله انتقال گرما و انتقال جرم را در طول بستر بدست آورده و حل کنیم. میزان انتقال گرما در بسترهای پر شده یک فرایند بسیار پیچیده و شامل مکانیزم‌های مختلفی می‌باشد [۸، ۹، ۱۰]. اگر راکتور مورد مطالعه عایق باشد یا قطر آن خیلی بزرگ باشد به طوری که میزان افت حرارت از آن بسیار ناچیز باشد می‌توان این راکتور را به صورت آدیاباتیک در نظر گرفت. چون راکتورهای موجود در واحد اولفین عایق می‌باشند و هیچ افت حرارتی از دیواره بستر نداریم و همچنین با توجه به فرضیات ساده‌سازی مختلف، می‌توان معادله مدل انتقال گرما را بصورت یک بعدی و در حالت پایدار در نظر گرفت. معادله انتقال جرم نیز مشابه انتقال گرما به صورت یک بعدی می‌باشد [۸، ۹، ۱۰]. در واحد اولفین سه راکتور کاتالیستی ثابت بستر وجود دارد. راکتور هیدروژناسیون برش  $C_2$  (در فاز گاز)، راکتور هیدروژناسیون برش

## ۳- مقایسه و بحث

تمامی تجهیزات و مسیره‌های فرایندی موجود در واحدهای کمپرسور گاز و شستشو با کاستیک و خشک کردن، بازیابی اتیلن و متان زدایی و سردسازی، جداسازی برشهای دو کربنی، جداسازی برشهای سه کربنی، جداسازی برشهای چهارکربنی، کدگذاری و سپس محاسبات آنها توسط روابط و روشهای مطرح شده و به کمک نرم‌افزار اکسل انجام و این قسمتها در واقع مدلسازی و شبیه‌سازی شد. در تمامی قسمتها و کلیه خطوط فرایندی، موازنه‌های جرم و انرژی بدست آمد [۱۶]. بعنوان نمونه نتایج حاصل از مدلسازی و مقایسه آنها با اطلاعات واقعی، برای برج جداسازی اتیلن از اتان ( $C_2$  Splitter) را در جدول (۲)، برج جداسازی پروپیلن از پروپان ( $C_3$  Splitter) را در جدول (۳)، برج دی پروپانایزر را در جدول (۴) و همچنین کمپرسور گاز در جدول (۵) در حالت طراحی را ملاحظه می‌فرمایید.

## جدول ۲- مقایسه نتایج حاصل از شبیه‌سازی با مقادیر واقعی برای برج جداسازی پروپیلن از پروپان

برج جداسازی $C_3$		پارامترها
واقعی	مدلسازی	
	۱۰/۴۴	$R_{min}$
	۸۷/۴۳	$N_{min}$
	۱۵۹/۱۴	$N_{Th}$
۱۷۹	۱۸۰/۸۵	$N_{Act}$
	۰/۸۸	Efficiency
۶۰/۴۲	۶۱/۴۶	$Q_c$ (Mw)
۵۶/۹۷	۵۸/۷۵	$Q_r$ (Mw)

## جدول ۳- مقایسه نتایج حاصل از شبیه‌سازی با مقادیر واقعی برای برج جداسازی اتیلن از اتان

برج جداسازی $C_2$		پارامترها
واقعی	مدلسازی	
	۳/۰۵	$R_{min}$
	۳۲/۷۹	$N_{min}$
	۸۴/۳۴	$N_{Th}$
۱۴۳	۱۴۲/۹۶	$N_{Act}$
	۰/۵۹	Efficiency
۷۵/۵	۷۴/۲	$Q_c$ (Mw)
۴۰/۱	۳۸/۴۴	$Q_r$ (Mw)

## جدول ۴- مقایسه نتایج حاصل از شبیه‌سازی با مقادیر واقعی برای برج دی پروپانایزر

برج دی پروپانایزر		پارامترها
واقعی	مدلسازی	
	۰/۳۶۷۶	$R_{min}$
	۱۲/۹۳	$N_{min}$
	۴۰/۲۸۷	$N_{Th}$
۵۰	۵۱/۶۵	$N_{Act}$
	۰/۷۸	Efficiency
۱۴/۳	۱۳/۲۶۵	$Q_c$ (Mw)
۱۱/۶۵	۱۲/۲۹۴	$Q_r$ (Mw)

## جدول ۵- مقایسه نتایج حاصل از شبیه‌سازی با مقادیر واقعی برای کمپرسور گاز

واقعی	مدلسازی	پارامترها
۱/۲۴	۱/۱۶	$K=C_p/C_v$
۰/۸۳	۰/۸۴	E
	۱/۱۹۶۵	N
۰/۹۹	۰/۹۸	Z(Comp.F)
	۷۱/۳۴۲	R / Mw
	۱/۸۱۵	$r_p$ (Press. Ratio)
	۱۵۱۵۳۱/۷۴	Polytropic. Head
۶۲/۹۳۷	۶۲/۶۹	Total of Comp. Work (Mw)



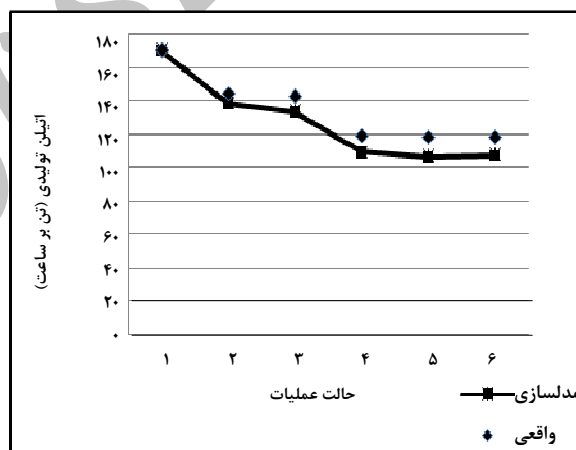
## ۴- نتیجه گیری

همانگونه که نشان داده شد نتایج حاصل از شبیه سازی با این روش قابل قبول بوده به گونه ای که مقادیر بدست آمده برای تجهیزات و مشخصات جریانهای فرایندی، نزدیک به مقادیر طراحی و واقعی بود. با استفاده از این روش مدلسازی در کنار دیگر نرم افزارهای معمول، به راحتی می توان تجهیزات و در نهایت کل یک فرایند را به راحتی مدلسازی و شبیه سازی و جهت انجام محاسبات فرایندی و همچنین پیش بینی تولیدات، از آن استفاده کرد. در واقع استفاده از این روش بسیار ساده بوده و حتی با استفاده از آن می توان محاسبات اقتصادی ساده ای جهت برآورد میزان درآمد و یا سود یک واحد عملیاتی (تفاوت درآمد حاصل از محصول و هزینه خوراک و مصرف سرویسهای جانبی) انجام داد.

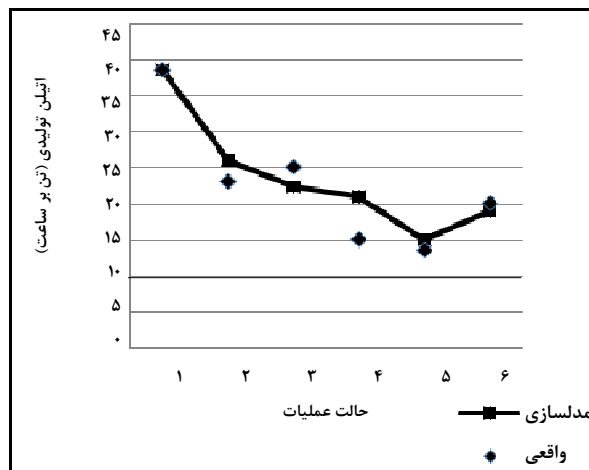
## مراجع

- [1] Technip, "10th Olefin Complex Cracking Plant Operating Manual", Rev 0 (Feb 2004).
- [2] Zarinabadi, S., Ziarifar, E., Marouf, M.S., Samimi, A., "Modeling and Simulation for Olefin Production in Amir Kabir Petrochemical", Proceedings of the World Congress on Engineering and Computer Science, Vol II (2010).
- [3] Leggett, P. D., Teeter, E. A., Stout R. M., "Olefin plant revamp affects processcontrol, real time optimization", Oil & Gas journal, Houston(05/08/2000).
- [4] Romero, "Optimize Olefin Operations", Ana Maria Compos complex Venezuela, pages 1 to 5, Hydrocarbon processing (April 2012).
- [5] Kister, Henry Z., "Distillation Design", Engineering Advisor Brown & Root Braun Alhambra, California, Chapter 3, pages 87 to 126, McGraw-Hill, Inc., New York (1992).
- [6] Branan, Carl R., "Rules of Thumb for Chemical Engineers", 3rd Ed., Gulf Professional Publishing an imprint of Elsevier Science, Oxford, (2000).
- [7] Walas, Stanley M., "Chemical Process Equipment, Selection and Design", Department of Chemical and Petroleum Engineering University of Kansas, Butterworth-Heinemann, Washington, chapters 6,12,13,14, (1990).
- [8] Fogler, H. Scott, "Element of Chemical Reaction Engineering", 2stEd., Prentice-Hall International Inc. (1992).
- [9] Bertly, J. M., "Experiments In Catalytic Reaction Engineering", first Ed., vol. 124, Chapter 8, New york, Elsevier, (1992).
- [10] Gobbo1, R., Soares1, R. P., Lansarin1 M. A., Lansarin, A. R., Ferreira, J. M. P., "Modeling, Simulation and Optimization of a Front-end System for Acetylene Hydrogenation Reactors", Brazilian Journal of Chemical Engineering, Vol. 21, No. 04, (2004).

پس از انجام محاسبات در حالت طراحی با ۱۰۰٪ ظرفیت و بدست آوردن نتایج، به منظور بررسی بیشتر روش اعمال شده، شش حالت مختلف عملیاتی با ظرفیتهای تولیدی متفاوت مورد بررسی قرار گرفت که نتایج قابل قبولی بدست آمد. از آنجائیکه مهم ترین محصول تولیدی در واحدهای اولفینی اتیلن می باشد، لذا نمودار میزان تولید این محصول با استفاده از مدلسازی و مقایسه آن با مقادیر واقعی در شکل (۲) نشان داده شده است. یکی دیگر از پارامترهای مهم و مورد بحث در واحد اولفین میزان پروپیلن تولیدی واحد می باشد. نتایج حاصل از مدلسازی و مقایسه آن با مقادیر واقعی برای تولید این محصول نیز در شکل (۳) نشان داده شده است. ملاحظه می کنیم که نتایج حاصل از شبیه سازی بسیار نزدیک به مقادیر واقعی می باشد.



شکل ۲- مقایسه میزان واقعی اتیلن تولیدی با نتایج حاصل از مدلسازی



شکل ۳- مقایسه میزان واقعی پروپیلن تولیدی با نتایج حاصل از مدلسازی

- [11] Danesh, A., "PVT and Behavior of Petroleum Reservoir Fluids", Pages 372 to 384, Elsevier, Netherland, (1998).
- [12] Hilmen, Eva-Katrine, "Separation of Azeotropic Mixtures: Tools for Analysis And Studies on Batch Distillation Operation", A thesis submitted for the Degree of Dr. Ing, chapter 2, University of Science and Technology Department of Chemical Engineering, (2000).
- [13] Ludwig, E., "Applied Process Design For Chemical and Petrochemical Plants", Vol. 1, chapter 1, Vol. 2, chapter 8, Vol. 3, chapters 10&12, 3rd Ed., Gulf Publishing Co., Butterworth- Heinemann, (1983).
- [14] Kern, D. Q., "Process Heat Transfer", chapters 1&2, 1st Ed., McGraw- Hill Book Co., Singapore, (1965).
- [15] Brown, Royce N., "Compressor Selection and Sizing", chapter 2, 2st Ed., Gulf Professional Publishing, Butterworth- Heinemann, (1986, 1997).
- [16] Douglas, James M., "Conceptual Design of Chemical Processes", chapters 1,4,5,6,7,10, 2st Ed., McGraw-Hill, New york, (1987).
- [۱۷] بهرامی ریحان، سجاد، "کاربرد روابط مهندسی-تجربی در طراحی، شبیه‌سازی و بهینه‌سازی واحد الفین"، کارشناسی ارشد، دانشگاه آزاد اسلامی واحد شاهرود (۱۳۸۸).
- [۱۸] مولوی، حامد، سنندجی، فرناز، "طراحی و بهره‌برداری از تجهیزات نفت، گاز و پتروشیمی"، ویرایش اول، انتشارات اندیشه سرا، تهران (۱۳۸۵).

Archive of SID