به نام خدا

دانشگاه صنعتی شریف

دانشکده مهندسی شیمی و نفت

درس: عملیات واحد صنعتی

استاد درس: دکتر حسین عسکری‌پور – بهار 1403

بخش اول پروژه (تقطیر):

بررسی و تحلیل کارایی و دقت روش مک‌کیب - تیلی در تقطیر دو جزئی

زمان بارگذاری بخش اول پروژه: 29 اسفند 1402

ویرایش ۰۰

لطفا به نکات زیر توجه فرمائید:

- هنگام نگارش و تحویل پروژه، توجه به نحوه نگارش گزارش آکادمیک و رعایت مقررات تحویل تکالیف و پروژه‌های درسی داشته باشید. چرا که احتمال دارد که شامل بخش کمی از بارم‌بندی این بخش باشد.
- نام‌گذاری فایل نهایی زیپ پروژه به صورت UO_PRJ_[STUDENT ID].zip (و یا rar.) باشد.
- فایل‌های شبیه‌سازی هایسیس باید با فرمت xml باشند ولی برای ورژن هایسیس 12.1 تحویل با فرمت hsc نیز مانعی ندارد.
- انتظار می‌رود که شبهه‌های احتمالی در برنامه نوشته شده در متلب با کامنت گذاشتن در محیط برنامه توضیح داده شود.
- شرح روند برنامه‌سازی، شبیه‌سازی و چالش‌های آنها به همراه تحلیل و بررسی نتایج هر خواسته الزامی می‌باشد.
- بدیهیست که مشورت در هر بخشی از خواسته‌های پروژه با دانشجوهای دیگر بلامانع است ولی کپی کردن خواسته‌ها، برنامه و یا گزارش نهایی از یک‌دیگر باعث لحاظ شدن نمره صفر برای هر دو طرف در هر خواسته پروژه می‌شود.
- در صورت وجود هرگونه ابهام و یا مشکل در صورت پروژه از طریق راه‌های ارتباطی زیر با دستیار آموزشی در ارتباط باشید.

  Gmail: pooriamotahari@gmail.com
  Telegram: @Jalyx
- در صورت وجود مشکل در صورت پروژه، ویرایش جدید آن آپلود شده و در سایت و گروه تلگرامی درس اطلاع رسانی خواهد شد.
- بارم‌بندی بخش اول و نیز ددلاین آن به زودی اعلام خواهد شد.

1 شرح پروژه

تا اینجای درس شما با فرضیات، خروجی‌های و کارایی‌های روش مک‌کیب[1] در تقطیر دو جزئی مواد آشنا شدید. در قسمت اول پروژه درس از شما خواسته می‌شود که میزان دقت و قابل اتکا بودن این روش را با ساختن برنامه‌ای در محیط متلب[2] و مقایسه خروجی‌های این برنامه با نرم‌افزار شبیه‌سازی هایسیس[3] بررسی کنید.

این بررسی در تحلیل سه مثال صنعتی انجام می‌شود. در هر یک از این سه مثال، ابتدا ویژگی‌ها و مشخصه‌های خاص[4] برج‌های تقطیر با برنامه روش مک‌کیب نوشته شده توسط دانشجو در نرم‌افزار متلب محاسبه می‌شود و همان ورودی‌ها این‌بار به نرم‌افزار شبیه‌سازی هایسیس داده می‌شوند. در نهایت خروجی‌های برنامه نوشته شده در متلب با شبیه‌سازی هایسیس مورد مقایسه و تحلیل قرار می‌گیرند.

سه مثال صنعتی مورد بررسی در بخش اول پروژه به شرح زیر می‌باشند:

1. **تولید متانول از گاز سنتز:** در واحدهای تولید متانول به طور گسترده از گاز سنتز (حاوی کربن منوکساید و هیدروژن) بعنوان خوراک واحد استفاده می‌شود. در راکتور این واحد، واکنش‌های تعادلی متعددی رخ می‌دهد که در نتیجه آن، آب در جریان خروجی بصورت محصول ناخواسته خارج می‌شود. در پایین دست این واحد، متانول خالص سازی شده و آب با روش تقطیر از متانول جدا می‌شود.
2. **متیله کردن تولوئن:** زایلن‌ها بطور گسترده در صنایع رنگ و رزین استفاده می‌شوند. معمولا برای تولید زایلن از واکنش متیله کردن تولوئن و یا بنزن استفاده می‌شود ولی مشکل این واکنش عدم گزینش پذیری فضایی و تولید هر سه محصول اورتو، پارا و متا زایلن[5] است. یکی از

[1] McCabe-Thiele Method

[2] Mathworks: MATLAB

[3] ASPEN: HYSYS

[4] Specs

[5] Ortho, Para and Meta Xylene

روش‌های جداسازی اورتو زایلن و پارا زایلن استفاده از برج‌های تقطیر با سینی‌های زیاد است چراکه نقطه جوش این دو گونه نزدیک به هم می‌باشد.

3. **تولید اتیل استات از واکنش استریفیکاسیون**[6]: اتیل استات حلال مناسبی در صنایع مختلف می‌باشد. یکی از ساده‌ترین روش‌های تولید اتیل استات، واکنش استریفیکاسیون با حضور کاتالیست اسید سولفوریک می‌باشد:

$$EtOH + AcOH \rightleftharpoons AcOEt + H_2O$$

بدلیل تعادلی بودن این واکنش و کانورژن پایین، از استیک اسید اضافی برای پیشرفت بیشتر واکنش استفاده می‌شود. به طبع آن استیک اسید اضافی در خروجی باقی‌مانده و باید از اتیل‌استات با روش تقطیر جدا شود.

در این مثال‌ها بدلیل استفاده از نرم‌افزار شبیه‌سازی زیرشاخه اسپن[7]، داده‌های تعادلی باید از دیتابیس NIST[8] در نرم‌افزار ASPEN One استخراج و در گزارش تحویلی ذکر شود.

[6] Esterification

[7] ASPEN

[8] National Institute of Standards and Technology

2 خواسته‌ها

خواسته اول- برنامه‌ای در محیط متلب بنویسید که با استفاده از روش مک‌کیب مشخصه‌های برج تقطیر با کندانسور کامل مناسب برای جداسازی خوراک ورودی را به کاربر بازگرداند. همچنین دیاگرام روش مک‌کیب نیز باید بعنوان خروجی نمایش داده شود. در ادامه ورودی‌ها و خروجی‌های لازم برای برنامه مورد نظر ذکر شده‌است:

جدول 1: ورودی‌های برنامه متلب

Feed Specs	Other Specs
Z_F	X_D
q	X_B
F	R/R_{min}

جدول 2: خروجی‌های برنامه متلب

Outlets	Stages	Other Specs
Distillate Flow (D)	Number of stages (N_{TP})	Minimum Molar Reflux (R_{min})
Bottoms Flow (B)	Min number of stages (N_{min})	Visualized McCabe Diagram
	Feed stage (N_F)	

لازم به ذکر است که در ارزیابی حدود 5 تا 10 ورودی درست و یا نادرست به‌همراه داده‌های تعادلی خود دانشجو به برنامه داده می‌شود و نمره این بخش بر حسب تعداد خروجی‌های درست (±15%) برنامه است. دقت شود که یکی از این ورودی‌ها، ورودی داده شده در ادامه صورت پروژه (خواسته سوم) می‌باشد که برای مقایسه با شبیه‌سازی هایسیس مورد استفاده قرار می‌گیرد.

خواسته دوم (امتیازی)- از برنامه متلب تحویلی، پس از ارزیابی برای خروجی‌های درست، تست Runtime گرفته می‌شود. به 10 درصد اول برنامه‌ها که کمترین Runtime برای محاسبه خروجی را دارند نمره امتیازی اضافه تعلق می‌گیرد.

خواسته سوم- برای سه مثال گفته شده در بخش شرح پروژه، ورودی‌های زیر را درنظر بگیرید.

جدول 3: ورودی مخصوص خواسته سوم برنامه متلب برای مقایسه سه مثال گفته شده

Feed Specs	Pressure Specs	Other Specs
$Z_F = 0.5$	$P_D = 100$ KPa	$X_D = 0.99$
Saturated Liquid Feed	$P_B = 150$ KPa	$X_B = 0.01$
F = 100 Kmol/h	$P_F = 150$ KPa	$R/R_{min} = 2$

این ورودی‌ها را به‌همراه داده‌های تعادلی اجزای هر سه مثال به برنامه نوشته شده در خواسته اول بدهید. از طرفی دیگر با این ورودی‌ها برای هر سه مثال برج‌های Shortcut ایجاد کرده و خروجی‌های این برج‌هارا با خروجی‌های برنامه خود مقایسه کنید. خروجی شبیه‌سازی هایسیس با خروجی برنامه متلب نوشته شده چه تفاوت‌هایی دارند؟ دلیل این اختلاف‌ها چه می‌تواند باشد؟ تحلیل کرده و در گزارش شرح دهید.

خواسته چهارم (امتیازی)- در صورت مقایسه روش پانچون ساواریت[9] با دو خروجی دیگر (شبیه‌سازی و روش مک‌کیب از متلب) به دانشجو نمره اضافه امتیازی تعلق می‌گیرد. بدلیل زیاد شدن حجم پروژه با این خواسته، مانعی در استفاده از متلب، اکسل و یا به صورت دستی وجود ندارد. داده‌های تعادلی و ترمودینامیکی از دیتابیس NIST استخراج و در گزارش ذکر شود.

خواسته پنجم- خروجی‌های گرفته شده از برنامه متلب خود را به عنوان ورودی مشخصه به برج تقطیر معمولی در نرم‌افزار هایسیس بدهید. از آنجایی که در شبیه‌سازی، برج تقطیر معمولی جریان‌های خروجی از برج محاسبه خواهند شد، تفاوت جریان‌های خروجی از برج تقطیر شبیه‌سازی شده را با مشخصات جریان‌های خروجی در ورودی متلب در جدول 3 را مقایسه، بررسی و تحلیل کنید.

خواسته ششم- خواسته‌های سوم و پنجم را این‌بار با فرض فشار ثابت اتمسفریک در کل برج انجام دهید. اختلاف خروجی‌های شبیه‌سازی با خروجی‌های برنامه نوشته شده در متلب چه تغییری خواهد کرد؟ مشاهدات، تحلیل‌ها و دلایل خود را گزارش دهید.

خواسته هفتم- آیا فرض ثلبت و برابر در نظر گرفتن فشار بالا و پایین برج در روش مک‌کیب فرض خوبیست؟ به عبارتی دیگر تغییرات و یا ثابت بودن فشار بالا و پایین برج چه تاثیری بر خروجی شبیه‌سازی می‌گذارد؟ شدت این تاثیر کم یا زیاد است؟ تحلیل کرده و گزارش دهید.

[9] Ponchon-Savarit Method