





دانشگاه صنعتی ارومیه
گروه مهندسی شیمی

طراحی فرایندهای شیمیایی

دکتر فاطمه بهادری



راههای ارتباطی

• Bahadorif@yahoo.com

• ایجاد گروه

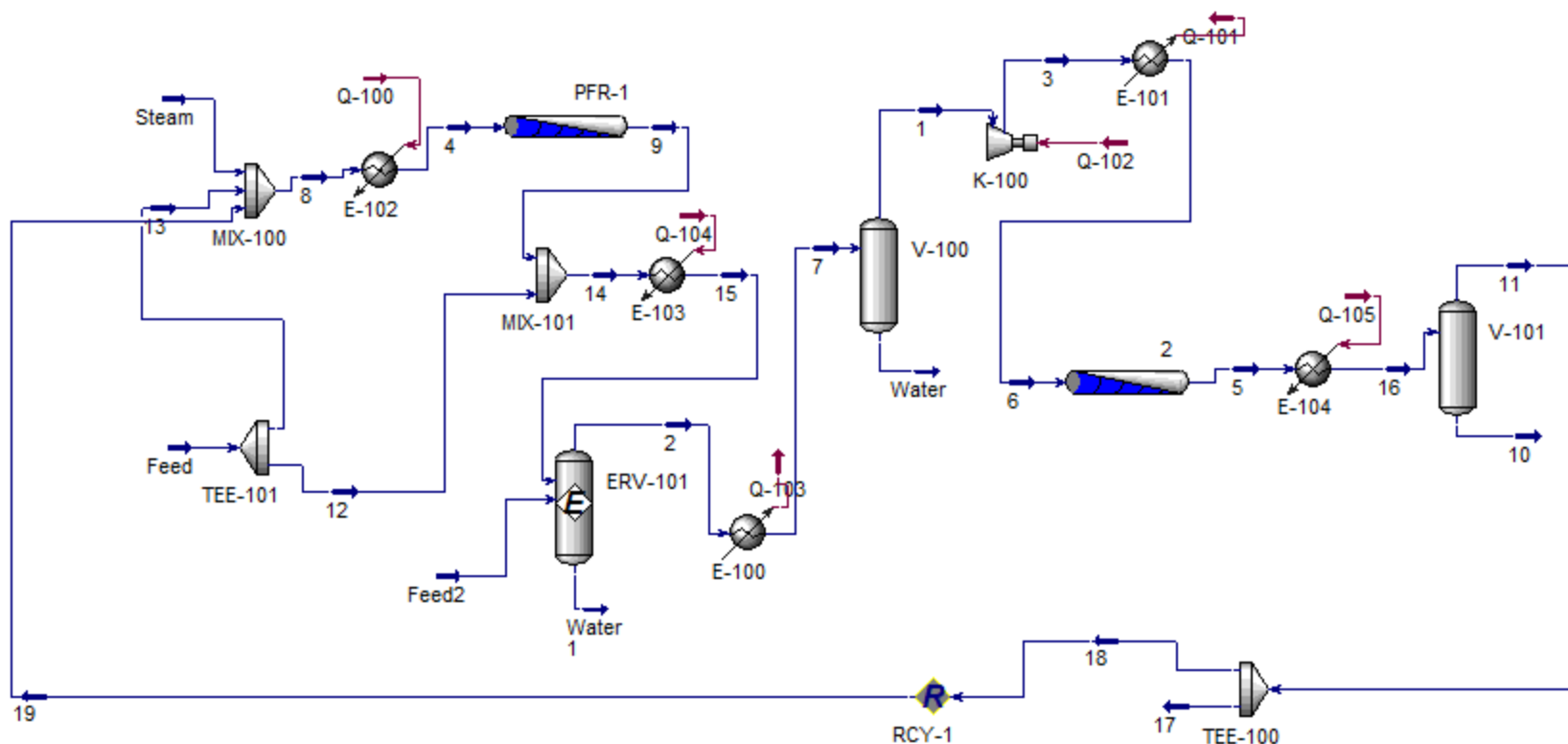


رفرنسها:

- 1. J. M. Douglas, *Conceptual Design of Chemical Processes*, Mc. Graw Hill, NY, 1998
- 2. Seider, Seader, Lewin, Widagdo, *Product and Process Design Principles; Synthesis, Analysis, and Evaluation*, John Wiley & Sons, Inc., third edition, 2010.

فصل اول: طراحی مفهومی فرآیند - مفاهیم کلی

هدف از طراحی مفهومی فرآیند تعیین بهترین نمودار جریان فرآیند (مناسب ترین تجهیزات و بهترین ترکیب و چیدمان آنها) و بهینه سازی شرایط عملکرد فرآیند برای تولید محصول مورد نظر است.





فصل اول: طراحی مفهومی فرآیند - مفاهیم کلی

هدف از طراحی مفهومی فرآیند تعیین بهترین نمودار جریان فرآیند (مناسب ترین تجهیزات و بهترین ترکیب و چیدمان آنها) و بهینه سازی شرایط عملکرد فرآیند برای تولید محصول مورد نظر است.

مشکل اصلی

به دلیل تعامل شدید بخش های مختلف فرآیند بر روی یکدیگر، اجزای فرآیند را نمی توان به طور جداگانه بهینه کرد.

تعداد متغیرها و انتخاب ها برای طراحی بسیار زیاد است.

ساده کردن طراحی فرآیند

با در نظر گرفتن محاسبات نه چندان دقیق و با غریبال کردن متغیرها، متغیرهایی که تاثیر کمی دارند و یا گزینه هایی که سودآوری کمتری دارند کنار گذاشته می شوند.



اهداف طراحی مفهومی فرآیند

هدف از طراحی مفهومی فرآیندهای شیمیایی تعیین بهترین نمودار جریان فرآیند است به طوری که در آن:

- مناسب ترین تجهیزات قابل استفاده در فرآیند انتخاب شوند.

- بهترین ترکیب و چیدمان این تجهیزات در نظر گرفته شود.

- بهترین شرایط عملکرد برای تولید محصول مورد نظر تعیین شود.

- تصمیم گیری در مورد متغیرهای ناپیوسته (یعنی متغیرهایی که تنها مقادیر صحیح می پذیرند مثل تعداد و نوع راکتورها و ...)

- تصمیم گیری در مورد متغیرهای پیوسته (یعنی متغیرهایی که در بین محدوده مجاز، کلیه مقادیر ممکن را می پذیرند، مانند دما، فشار و ...)



اهداف طراحی مفهومی فرآیند

تعیین مناسب ترین تجهیزات
تعیین بهترین ترکیب و چیدمان

تصمیم گیری متغیرهای ناپیوسته

بهینه سازی شرایط عملکرد

تصمیم گیری در مورد متغیرهای پیوسته

داگلاس معتقد است که تعداد 10^9 - 10^4 گزینه متفاوت می تواند برای تولید یک محصول وجود داشته باشد.

روش قدیمی طراحی یک فرآیند، بهینه کردن تک تک واحدهای عملیاتی و کنارهم قرار دادن آنها می باشد.

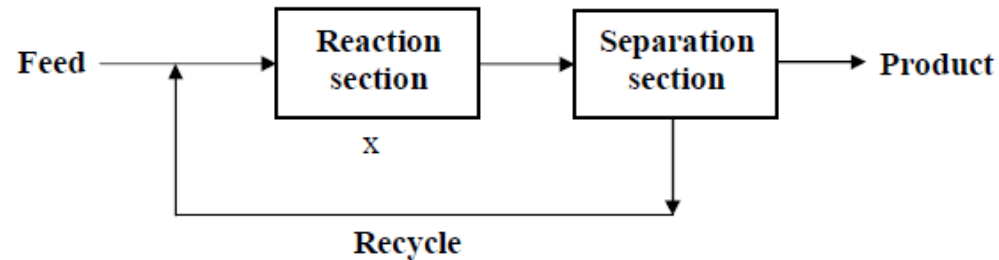
تعامل شدید واحدهای عملیاتی

نیاز به طراحی سیستماتیک

اهداف طراحی مفهومی فرآیند

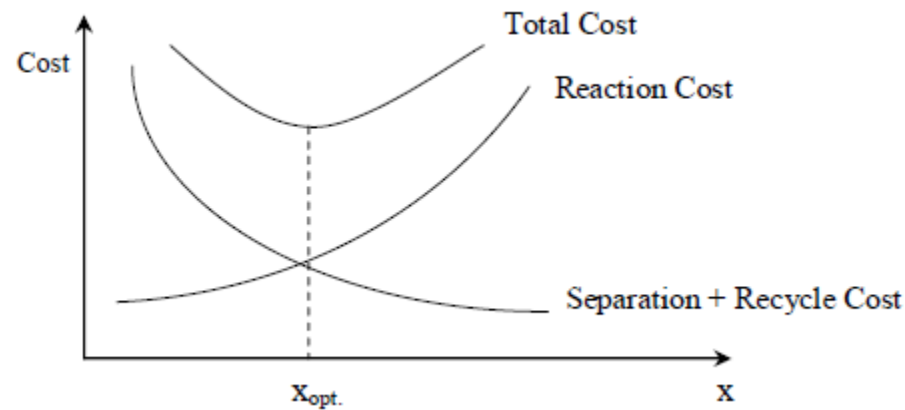
متغیرهای طراحی و نقش آنها در طراحی

بالانس اقتصادی سود و زیان trade off



$x \uparrow \Rightarrow$ Reactor cost $\uparrow$
 (Separation + Recycle cost) $\downarrow$

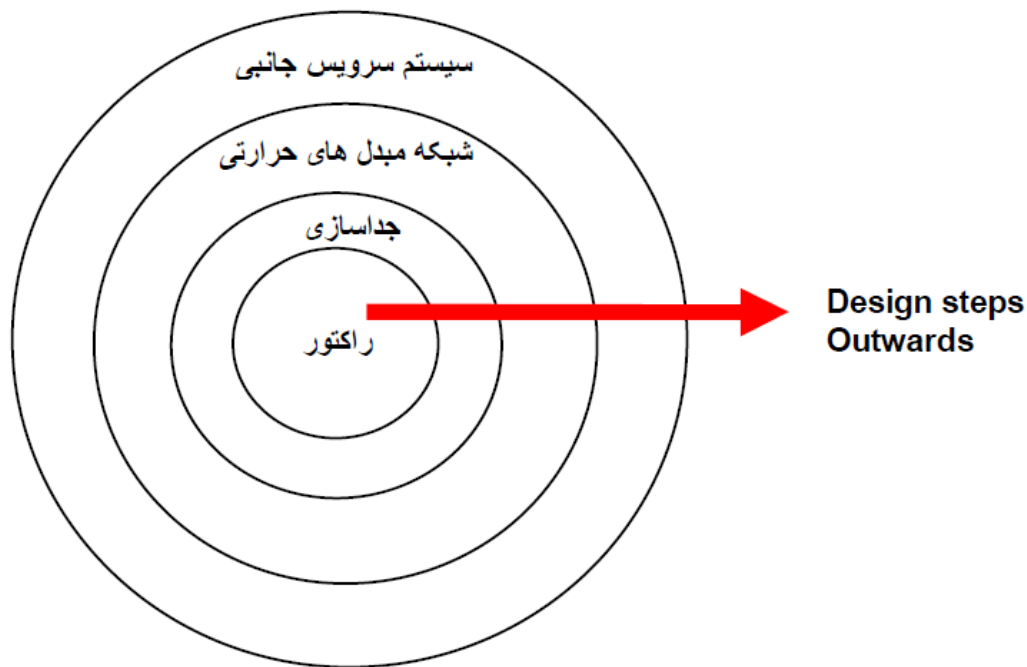
$x \downarrow \Rightarrow$ Reactor cost $\downarrow$
 (Separation + Recycle cost) $\uparrow$



نوع دیگر تقسیم بندی متغیرهای طراحی

- متغیرها با تأثیر محلی (مانند نسبت جریان برگشتی و ...)، تغییر این متغیرها تنها بر روی همان تجهیز مورد نظر تأثیر می گذارد.
- متغیرها با تأثیر کلی (مانند درصد تبدیل راکتور و ...)، تغییر این متغیرها بر روی منطقه قابل توجهی از فرآیند تأثیر می گذارد.

Onion diagram دیاگرام پیازی



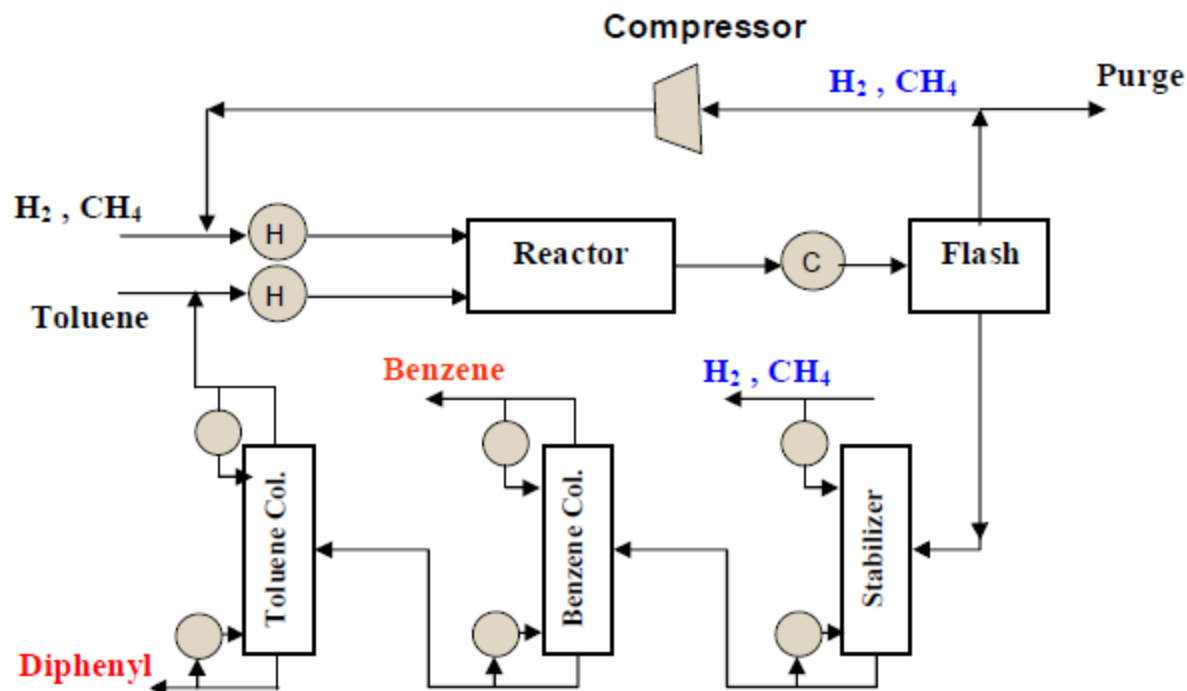
روش پیشنهادی داگلاس برای حل مسئله

کل فرآیند ← جزء فرآیند

فرآیند صنعتی آلکیل زدایی هیدروژنی تولوئن برای تولید بنزن (فرآیند Hydrodealkylation-HDA)



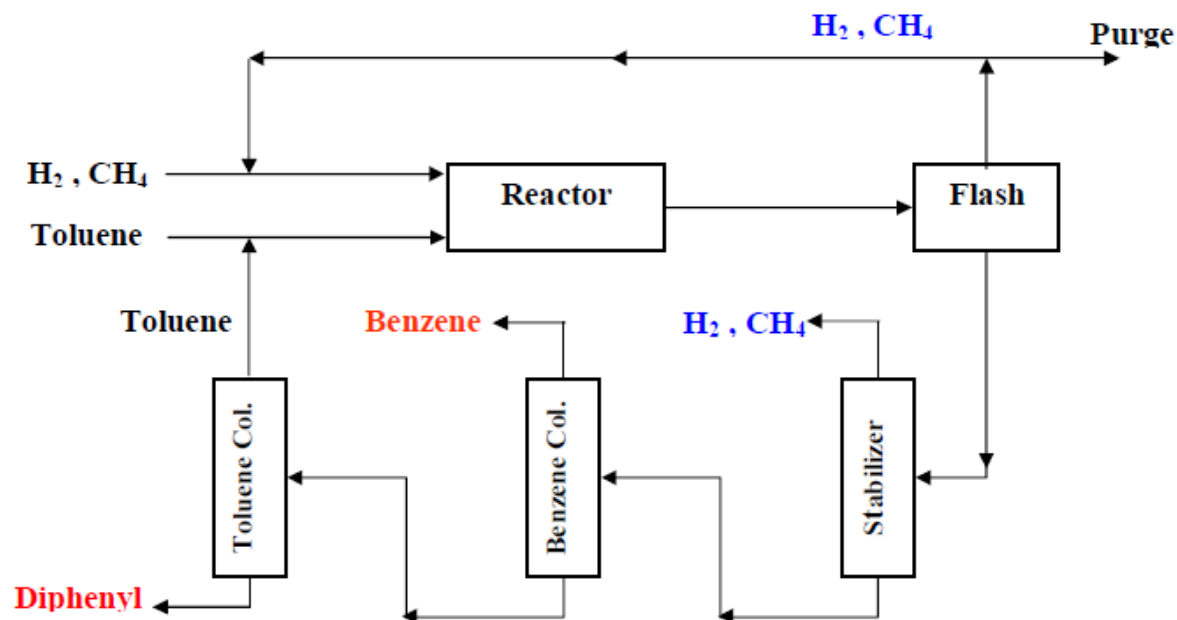
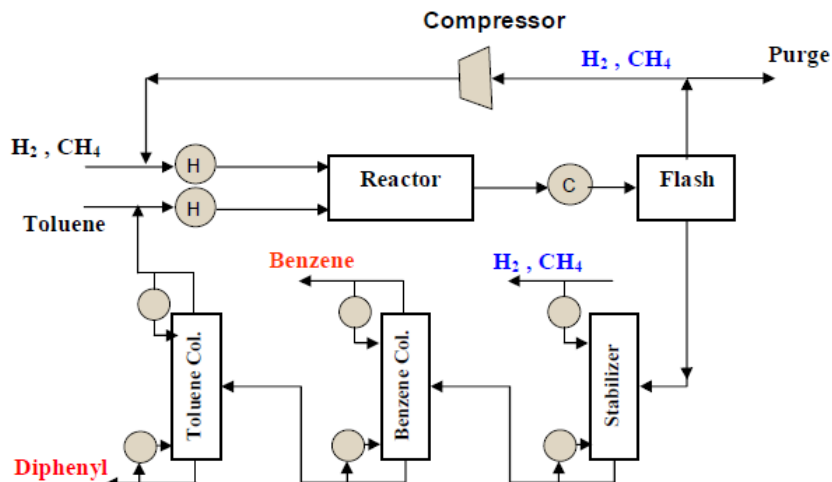
این فرآیند در محدوده دمایی ۱۱۵۰ تا ۱۳۰۰ درجه فارنهایت و فشار حدود ۵۰۰ Psi انجام می شود. نسبت هیدروژن به تولوئن در ورودی راکتور حدود ۵ به ۱ است.



روش پیشنهادی داگلاس برای حل مسئله

ساده سازی

- حذف تمامی مبدل های حرارتی، تانک ها و مخازن ذخیره سازی
- ترکیب کردن همه برج های تقطیر
- ساده سازی ساختار عمومی سیستم جداسازی
- یکی کردن کل سیستم جداسازی
- جمع کردن کل فرآیند در یک



روش پیشنهادی داگلاس برای حل مسئله

ساده سازی

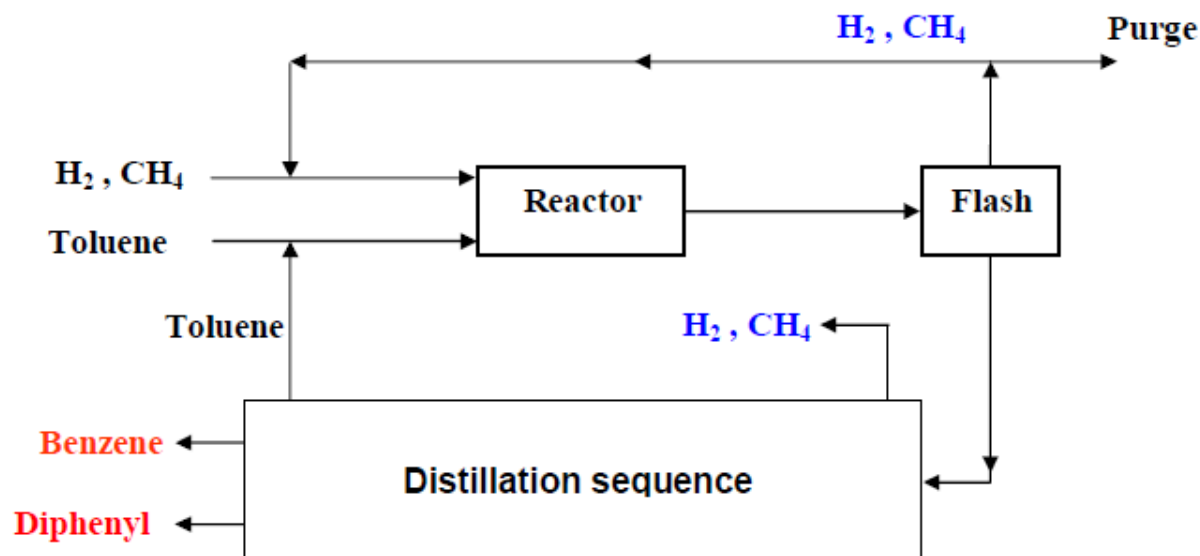
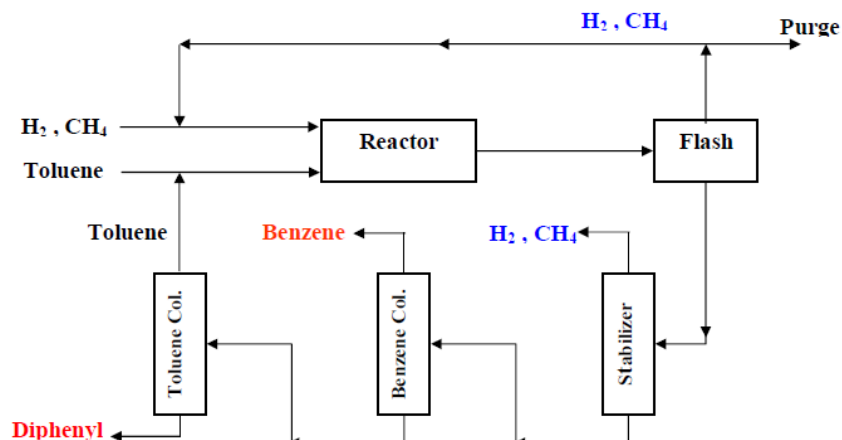
- حذف تمامی مبدل های حرارتی، تانک ها و مخازن ذخیره سازی

- ترکیب کردن همه برج های تقطیر

- ساده سازی ساختار عمومی سیستم جداسازی

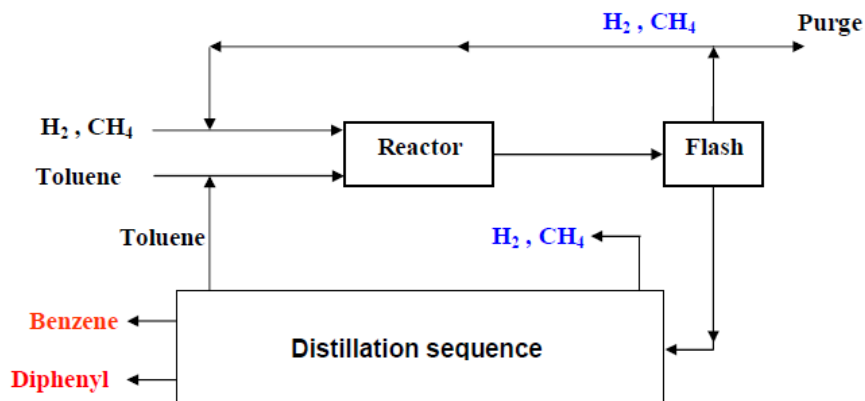
- یکی کردن کل سیستم جداسازی

- جمع کردن کل فرآیند در یک



روش پیشنهادی داگلاس برای حل مسئله

ساده سازی



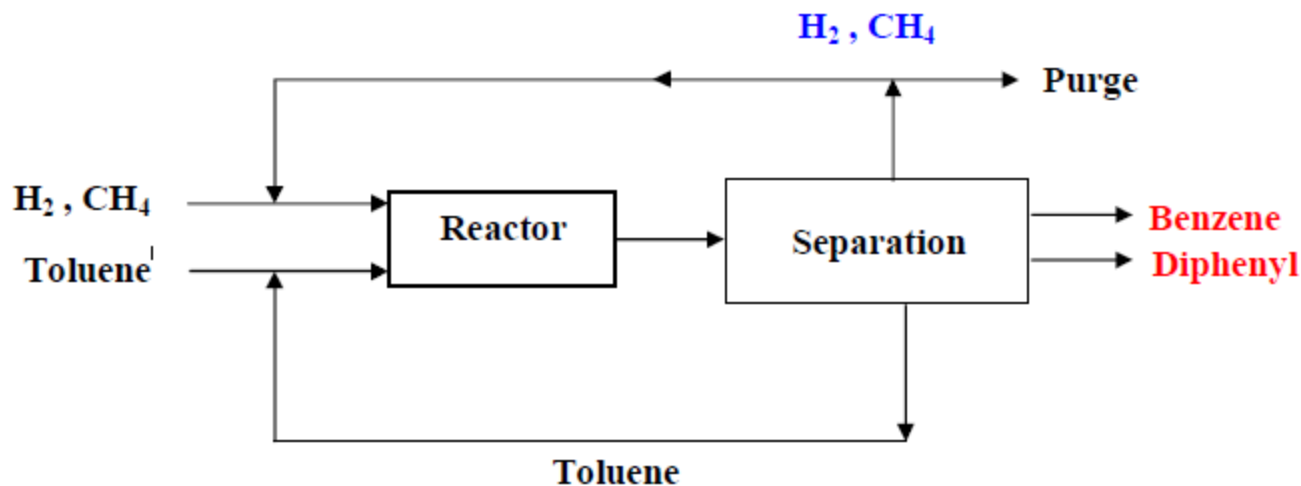
- حذف تمامی مبدل های حرارتی، تانک ها و مخازن ذخیره سازی

- ترکیب کردن همه برج های تقطیر

- ساده سازی ساختار عمومی سیستم جداسازی

- یکی کردن کل سیستم جداسازی

- جمع کردن کل فرآیند در یک



روش پیشنهادی داگلاس برای حل مسئله

ساده سازی

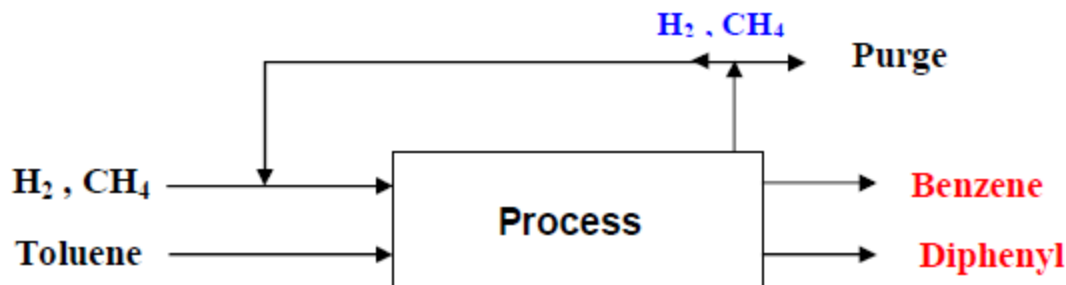
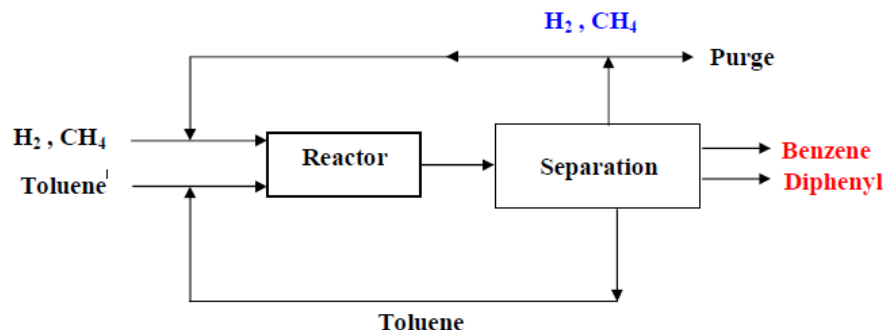
- حذف تمامی مبدل های حرارتی، تانک ها و مخازن ذخیره سازی

- ترکیب کردن همه برج های تقطیر

- ساده سازی ساختار عمومی سیستم جداسازی

- یکی کردن کل سیستم جداسازی

- جمع کردن کل فرآیند در یک Box





مزایا و محدودیت های روش داگلاس (روش تصمیم گیری سلسله مراتبی)

مزایا

اگر طرح سودآور نباشد، می توان گزینه های دیگر را بررسی و یا طراحی را متوقف کرد و دیگر لزومی به ادامه طراحی نیست.

در این روش در هر مرحله تعداد گزینه ها کم است (چون روش تکاملی است). پس احتمال از دست دادن گزینه های ممکن به شدت کاهش می یابد. پس این یک روش سیستماتیک برای تعیین گزینه ها است.

محدودیت

این روش نمی تواند برای فرایندهای ناپیوسته بکار رود.

این روش نمی تواند برای فرایندهایی که با ماکرو مولکولها مانند پلیمرهای سنگین و یا جامدات سر و کار دارند بکار رود و فقط برای فرایندهایی که با سیالات نیوتنی سر و کار دارند (تعادل بین فاز مایع و گاز وجود دارد) بکار می رود.



مبانی اقتصادی مورد نیاز برای انجام طراحی مفهومی

ارزیابی سودآوری هر طرح مستلزم برآورد هر دو نوع هزینه های عملیاتی و سرمایه ای می باشد.

\$/year

هزینه های عملیاتی

یکسان سازی مبنای هزینه

\$

هزینه های سرمایه ای

افزایش تعداد سینی های برج جذب

مقدار بیشتری از حل شونده بازیابی می شود.

مبانی اقتصادی مورد نیاز برای انجام طراحی مفهومی

ارزش پول

اگر فرض کنیم ارزش فعلی یک سرمایه گذاری برابر با مقدار P باشد، و نرخ بهره سالانه پول برابر i باشد، در این صورت واضح است که ارزش P بعد از یک سال برابر با مقدار F_1 خواهد بود:

$$F_1 = P + iP = P(1+i)$$

بعد از دو سال ارزش P برابر است با مقدار F_2 :

$$F_2 = P(1+i) + iP(1+i) = P(1+i)^2$$

به همین ترتیب بعد از n سال ارزش P برابر است با F_n :

$$F_n = P(1+i)^n$$

اگر تعداد دفعات پرداخت بهره در سال برابر با q باشد (مثلاً برای پرداخت بهره به صورت ماهانه $q=12$)، در این صورت ارزش P بعد از n سال برابر است با مقدار:

$$F_n = P(1 + i/q)^{nq}$$

Future worth

ارزش آتی سرمایه

مبانی اقتصادی مورد نیاز برای انجام طراحی مفهومی

ارزش پول

ارزش فعلی سرمایه را با داشتن نرخ بهره و تعداد سال های عمر سرمایه

$$F = \{i(1+i)^n / [(1+i)^n - 1]\} P$$

که در آن ضریب $\{i(1+i)^n / [(1+i)^n - 1]\}$ ، که به **CCF** معروف است بر حسب $1/yr$ است. بنابراین با این ضریب می توانیم ارزش هزینه سرمایه گذاری (**P**) که بر حسب \$ (دلار) است را به هزینه سالانه فعلی (**F**) بر حسب $$/yr$ تبدیل کنیم که عبارتست از:

Capital Charge Factor

$$F = CCF \times P \quad (\$/yr)$$

بنابراین با این روش می توان هر دو هزینه های سرمایه ای و عملیاتی را بر یک مبنا یعنی بر حسب $$/yr$ بیان کرد تا بتوان آنها را با هم جمع کرد و مشکلی در موازنه هزینه های عملیاتی و سرمایه ای برای بهینه سازی فرآیند وجود نداشته باشد.

مبانی اقتصادی مورد نیاز برای انجام طراحی مفهومی

مثال

قیمت دستگاهی $P = 10^6$ دلار است. تعداد سال های عمر دستگاه $n = 10$ سال و نرخ بهره بانکی $i = 10\%$ می باشد. هزینه سالانه دستگاه چقدر است؟

$$CCF = i(1 + i)^n / [(1 + i)^n - 1] = 0.1(1 + 0.1)^{10} / [(1 + 0.1)^{10} - 1]$$

$$CCF = 0.163 \text{ (1/yr)}$$

$$F = CCF \times P = 0.163 \times 10^6 \text{ (\$/yr)}$$

$$F = 163000 \text{ (\$/yr)}$$

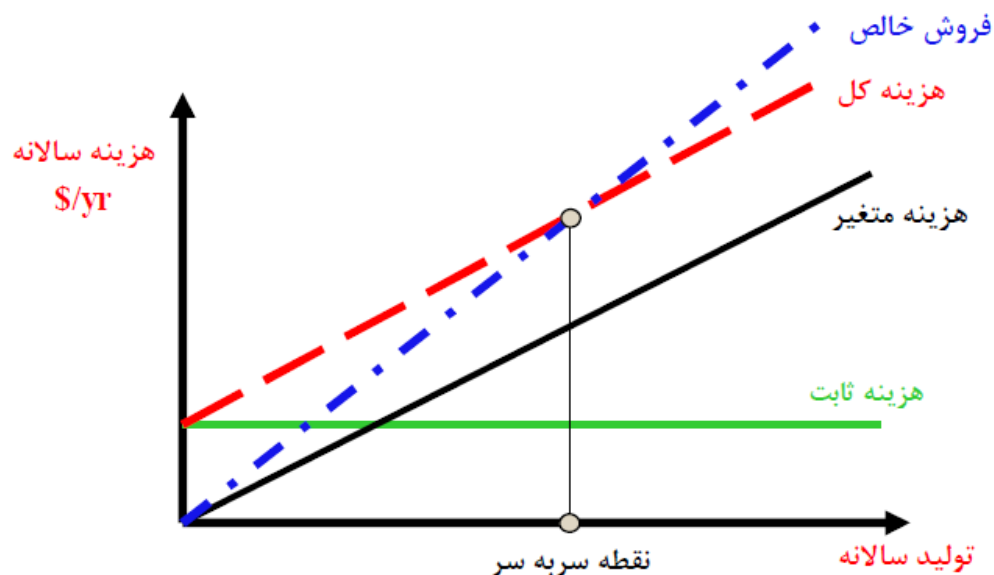
یعنی هزینه این دستگاه معادل ۱۶۳۰۰۰ دلار در سال است که در ۱۰ سال معادل ۱۶۳۰۰۰۰ دلار می باشد و این معادل آن است که اگر مبلغ ۱۰۰۰۰۰۰ دلار کنونی را در بانک پس انداز کرده بودیم بهره سالانه ۱۰ درصدی آن را (سالی ۱۶۳۰۰۰ دلار) دریافت می کردیم. پس این هزینه ای است که در اثر خرید دستگاه هر سال متحمل می شویم.

مبانی اقتصادی مورد نیاز برای انجام طراحی مفهومی

Break even analysis آنالیز نقطه سر به سر

آنالیز نقطه سر به سر منجر به تعیین حداقل ظرفیت تولید می شود که در آن، طرح آغاز به سودآوری می کند. اگر میزان تولید کمتر از نقطه سر به سر باشد، طرح سودآوری نداشته و باید کنار گذاشته شود.

هزینه سالانه مورد نیاز



هزینه های ثابت

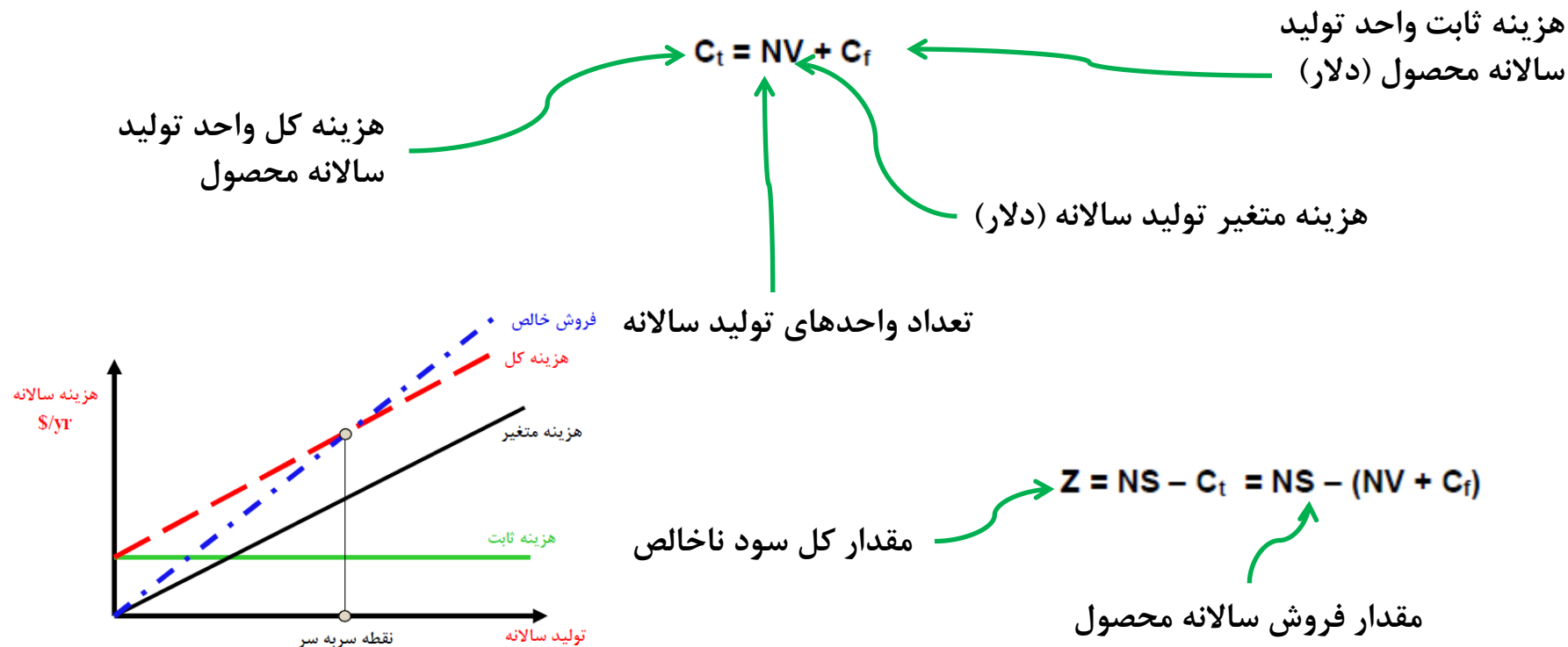
به مقدار تولید وابسته نیستند و در طول مدت پروژه ثابت می باشند، مانند هزینه خرید زمین، ساخت سوله

هزینه های متغیر

به مقدار تولید وابسته هستند، مانند هزینه خوراک مورد نیاز، هزینه انرژی

Break even point

مبانی اقتصادی مورد نیاز برای انجام طراحی مفهومی



$$@ \text{BEP}, Z = 0$$

$$N_{\text{BEP}}S - (N_{\text{BEP}}V + C_f) = 0$$

$$N_{\text{BEP}}S = N_{\text{BEP}}V + C_f$$

$$N_{\text{BEP}} = C_f / (S - V)$$

مبانی اقتصادی مورد نیاز برای انجام طراحی مفهومی

هزینه کل سالانه Total Annualized Cost (TAC)

$$\text{هزینه جاری } (\$/\text{yr}) + (\text{CCF } 1/\text{yr}) \times \text{هزینه سرمایه } (\$) = \text{هزینه کل سالانه } (\$/\text{yr})$$

قیمت یک کمپرسور 10^6 دلار است. اگر تعداد سال های عمر کمپرسور $n = 10$ سال و نرخ بهره بانکی 10% $i =$ و هزینه سالانه مصرف انرژی آن 45000 دلار در سال باشد، کل هزینه سالانه این کمپرسور چقدر است؟

$$\text{CCF} = i(1+i)^n / [(1+i)^n - 1] = 0.1(1+0.1)^{10} / [(1+0.1)^{10} - 1] \quad \text{CCF} = 0.163 \text{ (1/yr)}$$

$$\text{هزینه مصرف انرژی } (\$/\text{yr}) + \{ \text{CCF } (1/\text{yr}) \times \text{قیمت کمپرسور } (\$) \} = \text{هزینه کل سالانه کمپرسور } (\$/\text{yr})$$

$$(\$/\text{yr}) = \{ 10^6 (\$) \times 0.163 \text{ (1/yr)} \} + 45000 (\$/\text{yr})$$

$$(\$/\text{yr}) = 163000 + 45000 = 208000 (\$/\text{yr})$$

مبانی اقتصادی مورد نیاز برای انجام طراحی مفهومی

تخمین هزینه های جاری و سرمایه ای

هزینه های جاری مثلا هزینه انرژی: کل انرژی الکتریسته مورد نیاز جریان در یک واحد ضرب در قیمت واحد انرژی

هزینه های سرمایه ای

Guthrie's correlations

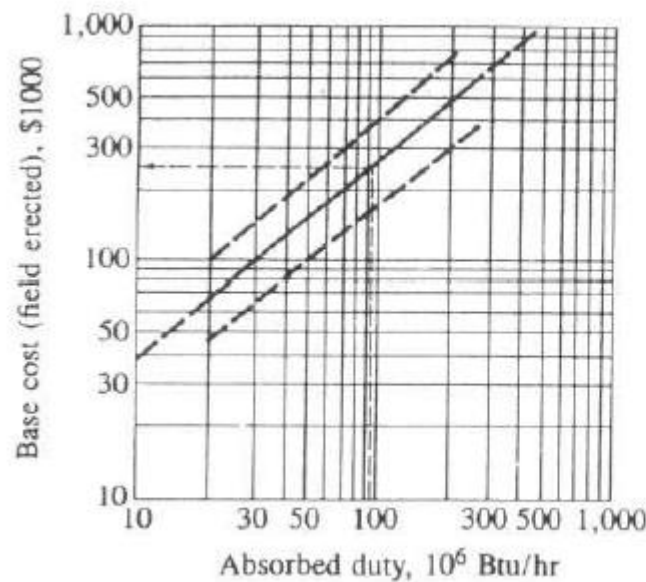


FIGURE E2-1
Process furnaces. [K. M. Guthrie,
Chem. Eng., 76(6): 114 (March 24,
1969).]

مبانی اقتصادی مورد نیاز برای انجام طراحی مفهومی

تخمین هزینه های سرمایه ای

$$\text{Purchased Cost, \$} = \left(\frac{\text{M\&S}}{280} \right) (5.52 \times 10^3) Q^{0.85} F_c$$

where Q = adsorbed duty, 10^6 Btu/hr; $20 < Q < 300$

$$F_c = F_d + F_m + F_p$$

$$\text{Installed Cost, \$} = \left(\frac{\text{M\&S}}{280} \right) (5.52 \times 10^3) Q^{0.85} (1.27 + F_c)$$

TABLE E.2-1
Correction factors F_c for process furnace

Design type	F_d	Radiant tube material	F_m	Design pressure, psi	F_p
Process heater	1.00	Carbon steel	0.0	Up to 500	0.00
Pyrolysis	1.10	Chrome/moly	0.35	1000	0.10
Reformer (no catalyst)	1.35	Stainless	0.75	1500	0.15
				2000	0.25
				2500	0.40
				3000	0.60

مبانی اقتصادی مورد نیاز برای انجام طراحی مفهومی

به روز رسانی روابط هزینه

روابط گاتری برای برآورد هزینه های خرید و نصب تجهیزات، در سال ۱۹۶۸ ارائه شده اند. متداول ترین روش برای به روز رسانی روابط هزینه خرید و نصب تجهیزات، استفاده از شاخص های هزینه ارائه شده توسط مارشال و سویفت می باشد که به شاخص **M&S** معروف است. این شاخص هزینه، به طور فصلی در مجله **Chemical Engineering** به روز رسانی می شود.

به روز رسانی هزینه تجهیزات با استفاده از شاخص هزینه **M&S** با استفاده از رابطه زیر انجام می شود:

$$\{ \text{M\&S در سال مبنا} / \text{M\&S به روز شده} \} \times \text{هزینه تجهیز در سال مبنا} = \text{هزینه به روز شده تجهیز}$$

<https://www.chemengonline.com/2019-cepci-updates-january-prelim-and-december-2018-final/>

روش تعیین گزینه های محتمل در طراحی و ارزیابی سریع آنها

فرض می کنیم جریان مخلوطی شامل $10/3 \text{ mol/hr}$ استن و 687 mol/hr هوا، به عنوان بخشی از یک فرآیند صنعتی، برای جلوگیری از آلودگی زیست محیطی به flare فرستاده می شود. سؤال مورد نظر طراحی در این جا این است که آیا بازیافت بخشی از استن، سودآوری دارد؟ قیمت استن $0/27 \text{ \$/lb}$ است.

Economic Potential

پتانسیل اقتصادی

درصد بازیافت استن؟

بازیافت کامل

$EP = \text{هزینه مواد اولیه} - \text{ارزش محصول}$

$$EP = (10/3 \text{ mol/hr}) (0/27 \text{ \$/lb}) (58 \text{ lb/mol}) (8150 \text{ hr/yr}) = 1/315 \times 10^6 \text{ \$/yr}$$

ساعات یک سال: ۸۷۶۰

فرآیندهای پیوسته: ۸۰۰۰-۸۳۰۰ ساعت در سال

فرآیندهای ناپیوسته: ۷۵۰۰ ساعت در سال

زمان های تلف شده ناشی از تعمیرات، خرابی های پیش بینی نشده، فقدان خوراک و



روش تعیین گزینه های محتمل در طراحی و ارزیابی سریع آنها

گزینه های فرآیند برای بازیافت حلال (سیستم بازیافت گاز)

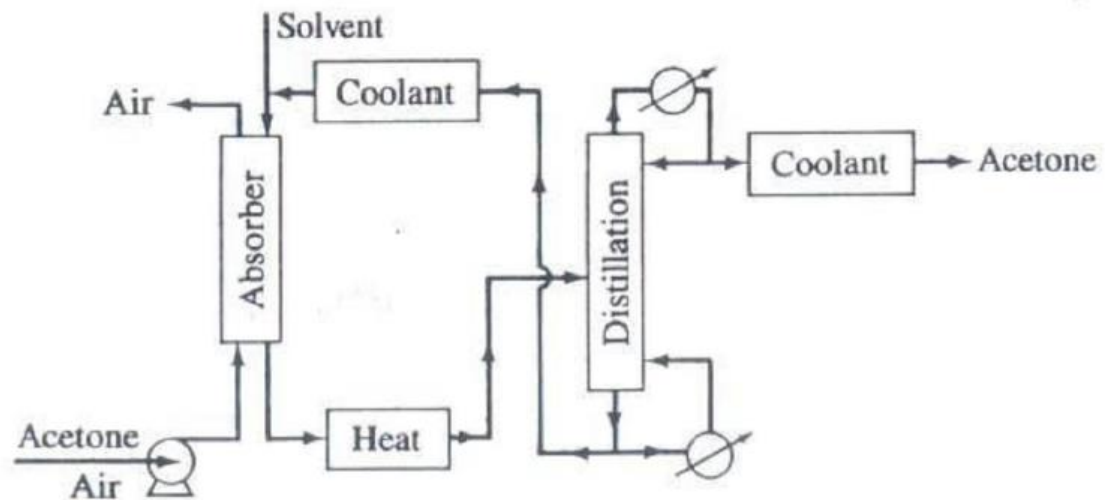
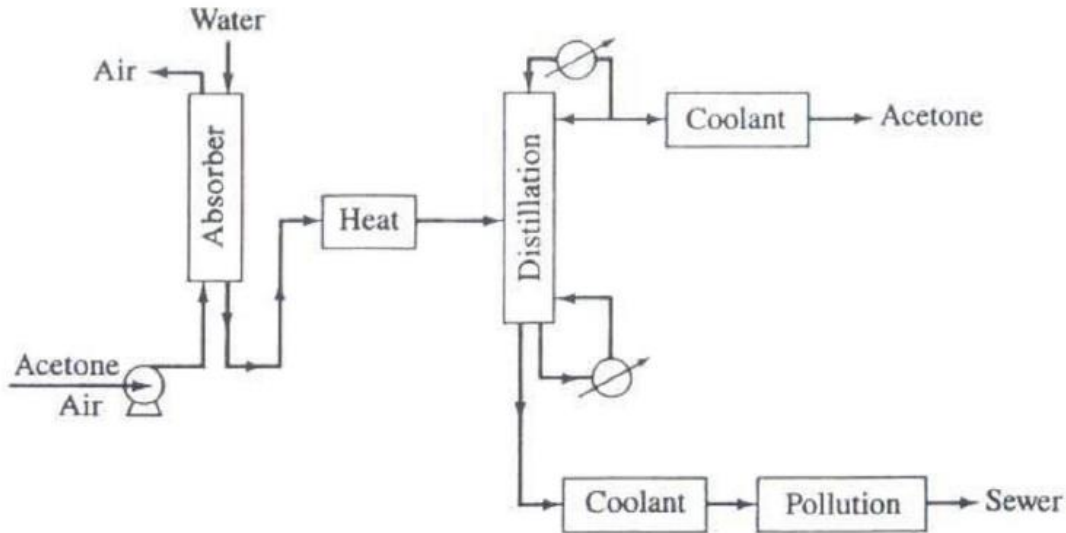
- چگالش (Condensation)
فشار بالا (high pressure)
دما پایین (low temperature)
ترکیبی (شامل هر دو سیستم بالا)
- جذب (Absorption)
- جذب سطحی (Adsorption)
- سیستم جداسازی غشائی (Membrane)
- فرآیند واکنشی (Reaction)

غلظت حل شونده در جریان گاز کمتر از ۵ درصد باشد، جذب سطحی ارزانه ترین گزینه برای جداسازی است.

روش تعیین گزینه های محتمل در طراحی و ارزیابی سریع آنها

طراحی یک واحد جذب گاز

حلال



طراحی یک واحد جذب گاز

جریان گاز ورودی به برج جذب شامل $10/3$ استن و 687 (mol/hr) هوا می باشد.

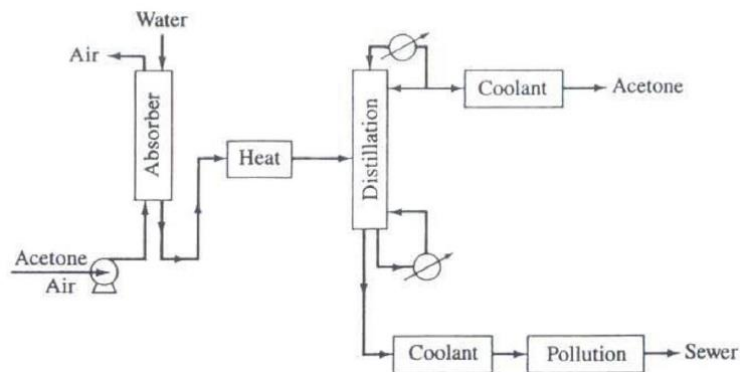
آب ورودی به برج جذب خالص است

گاز خروجی از برج جذب: هوا، مقداری استن دارد.

جریان ورودی به برج تقطیر: آب، استن و مقداری هوای حل شده دارد.

محصول بالای برج تقطیر: استن و آب

محصول پایین برج: آب به همراه مقداری استن



محل هدررفت استن

بالانس اقتصادی

- همراه گاز خروجی از برج جذب (با هوا)

- از پایین برج تقطیر

هزینه سرمایه ای برج جذب
و تقطیر

درجه بازیافت استن



طراحی یک واحد جذب گاز

جریان گاز ورودی به برج جذب شامل $10/3$ (mol/hr) استن و 687 (mol/hr) هوا می باشد.

بیش از ۹۹ درصد از مواد با ارزش بازیابی شوند: حدس اولیه: ۹۹/۵

$$L=1.4mG$$

شدت حلال: L

شدت جریان گاز: G

شیب خط تعادل بخار مایع: mG

استن - آب در دمای ۷۷ درجه فارنهایت و فشار ۱ اتمسفر

$$\gamma = 6.7$$

$$p^{\circ} = 220 \text{ mmHg}$$

$$m = \gamma \frac{p^{\circ}}{P_T} = 6.7 \times \frac{220}{760} = 2.02$$

طراحی یک واحد جذب گاز

جریان گاز ورودی به برج جذب شامل $10/3 \text{ (mol/hr)}$ استن و 687 (mol/hr) هوا می باشد.

موازنه مواد

$$L = 1/4 mG = 1/4(2/0.2)(687) = 1943 \text{ mol/hr}$$

مقدار آب ورودی به برج جذب

$$10.3 \times (1 - 0.995) = 0.05$$

$$\text{استن ورودی به برج تقطیر} = 10/3 - 0/0.5 = 10/25 \text{ mol/hr}$$

$$\text{استن در جریان بالای برج تقطیر} = (0/995)(10/25) = 10/2 \text{ mol/hr}$$

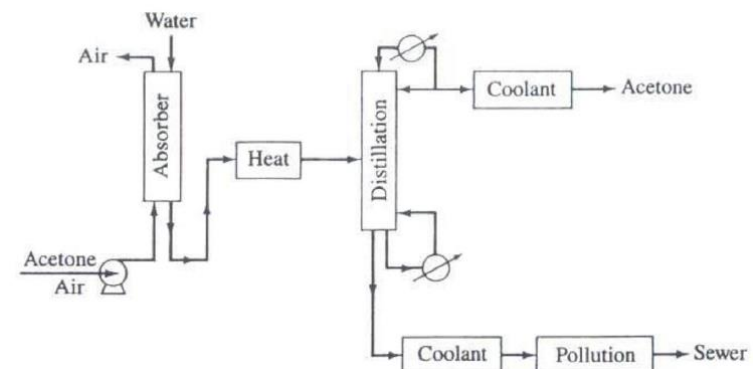
$$\text{کل جریان بالای برج تقطیر} = 10/2 \div 0/99 = 10/3 \text{ mol/hr}$$

$$\text{آب در جریان بالای برج تقطیر} = 10/3 - 10/2 = 0/1 \text{ mol/hr}$$

شدت جریان استن و آب خروجی از پایین برج تقطیر برابر است با:

$$\text{استن} = (0/0.05)(10/25) = 0/0.5 \text{ mol/hr}$$

$$\text{آب} = 1943 - 0/1 = 1942/9 \text{ mol/hr}$$





طراحی یک واحد جذب گاز

هزینه های جریان

اتلاف استن از بالای برج جذب:

$$(\$0.27/\text{lb})(58 \text{ lb/mol})(0.0515 \text{ mol/hr})(8150 \text{ hr/yr}) = \$6600 \text{ /yr}$$

اتلاف استن در پایین برج تقطیر:

$$(\$0.27/\text{lb})(58 \text{ lb/mol})(0.025 \times 0.005 \text{ mol/hr})(8150 \text{ hr/yr}) \approx \$6600 \text{ /yr}$$

هزینه تصفیه آب آلوده به استن (با فرض BOD \\$0.25/lb و BOD 1 lb / 1 lb)

$$(\$0.25/\text{lb BOD})(1 \text{ lb BOD}/1 \text{ lb استن})(58 \text{ lb/mol})(0.05125 \text{ mol/hr})(8150 \text{ hr/yr}) = \$6100 \text{ /yr}$$

هزینه استفاده از سیستم فاضلاب (با فرض 0.2 دلار به ازای 1000 گالن):

$$(\$0.2/\text{gal})(1 \text{ gal}/8.34 \text{ lb})(18 \text{ lb/mol})(1943 \text{ mol/hr})(8150 \text{ hr/yr}) = \$6800 \text{ /yr}$$

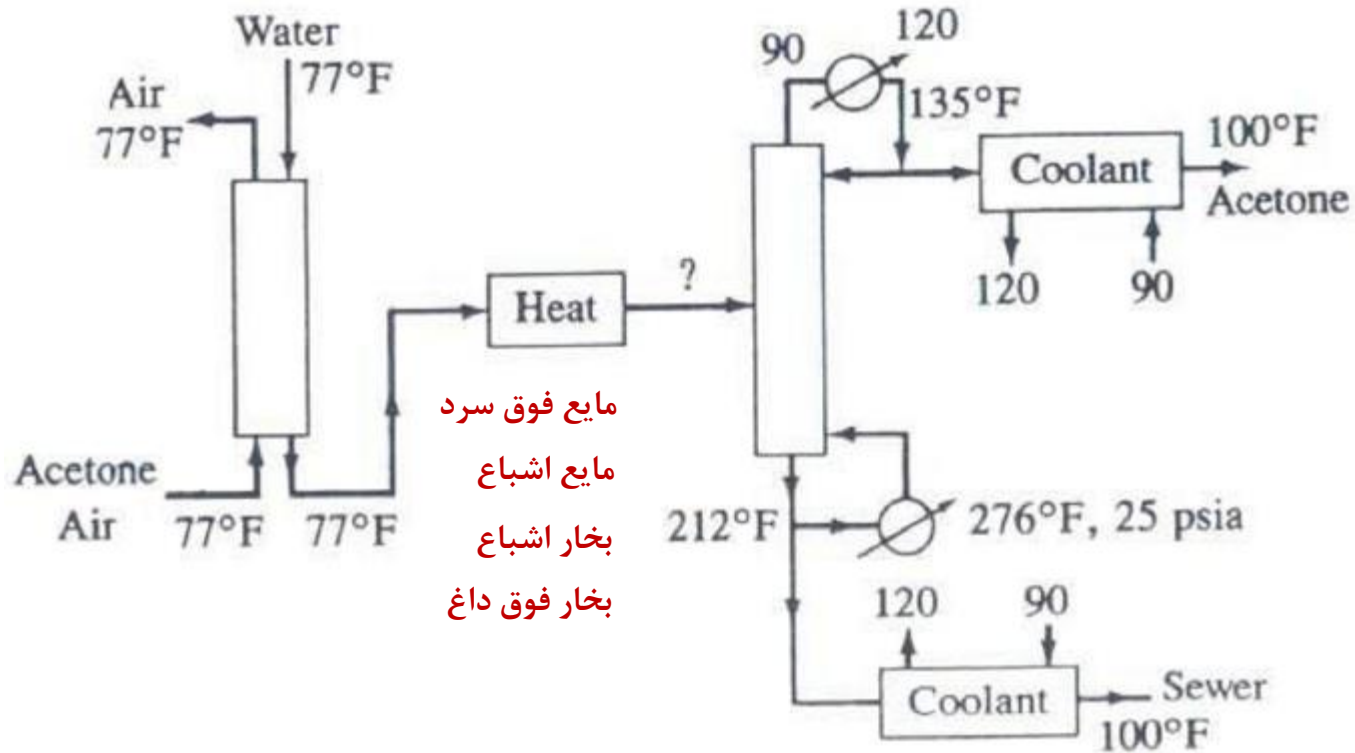
هزینه حلال آب (با فرض 0.75 دلار به ازای 1000 گالن):

$$(\$0.75/\text{gal})(1 \text{ gal}/8.34 \text{ lb})(18 \text{ lb/mol})(1943 \text{ mol/hr})(8150 \text{ hr/yr}) = \$25600 \text{ /yr}$$

$$(\$6600 + \$6600 + \$6100 + \$6800 + \$25600) \text{ /yr} = \$51700 \text{ /yr}$$

طراحی یک واحد جذب گاز

موازنه انرژی



طراحی یک واحد جذب گاز

جریان گاز ورودی به برج جذب شامل $10/3$ (mol/hr) استن و 687 (mol/hr) هوا می باشد.

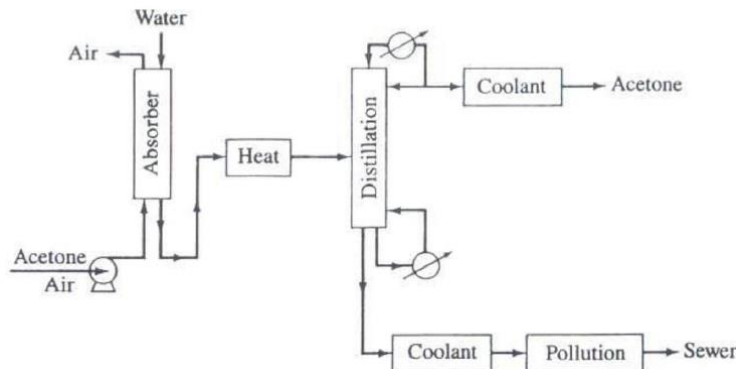
برآورد هزینه برج جذب

$$N + 1 = \frac{\ln \left(\left(\frac{L}{mG} - 1 \right) \left(\frac{y_{in} - mx_{in}}{y_{out} - mx_{in}} \right) \right)}{\ln \left(\frac{L}{mG} \right)}$$

x_{in} : غلظت یا کسر مولی استن (solute) در حلال ورودی به برج جذب

y_{in} : غلظت یا کسر مولی استن در گاز ورودی به برج جذب

y_{out} : غلظت یا کسر مولی استن در گاز خروجی از برج جذب



$$L = 1.4mG$$

$$m = \gamma \frac{p^\circ}{P_T}$$

طراحی یک واحد جذب گاز

تأثیر فشار برج جذب

$$m = \gamma \frac{p^\circ}{P_T}$$

$$L = 1.4mG$$

$$N + 1 = \frac{\ln \left(\left(\frac{L}{mG} - 1 \right) \left(\frac{y_{in} - mx_{in}}{y_{out} - mx_{in}} \right) \right)}{\ln \left(\frac{L}{mG} \right)}$$

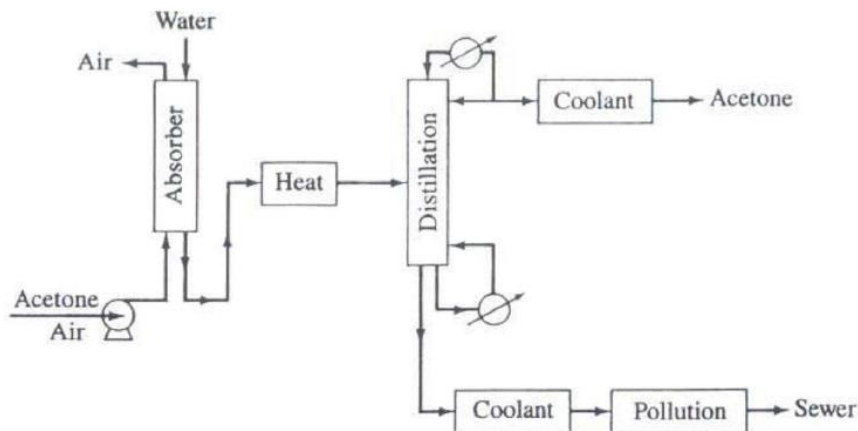
اثر نوع حلال

$$m = \gamma \frac{p^\circ}{P_T}$$

$$\gamma_w = 6.7$$

$$\gamma_{MIBK} = 1$$

Methyl isobutyl ketone



طراحی یک واحد جذب گاز

تأثیر دما در برج جذب

استن - آب در دمای ۷۷ درجه فارنهایت و فشار ۱ اتمسفر

$$\gamma = 6.7$$

$$p^{\circ} = 220 \text{ mmHg}$$

$$m = \gamma \frac{p^{\circ}}{P_T} = 6.7 \times \frac{220}{760} = 2.02$$

$$L = 1.4mG$$

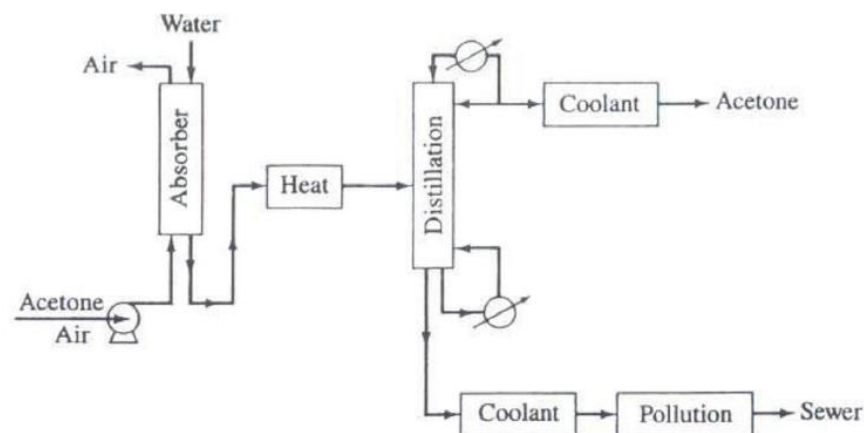
$$N + 1 = \frac{\ln \left(\left(\frac{L}{mG} - 1 \right) \left(\frac{y_{in} - mx_{in}}{y_{out} - mx_{in}} \right) \right)}{\ln \left(\frac{L}{mG} \right)}$$

استن - آب در دمای ۱۰۰ درجه فارنهایت و فشار ۱ اتمسفر

$$\gamma = 7.8$$

$$p^{\circ} = 421 \text{ mmHg}$$

$$m = \gamma \frac{p^{\circ}}{P_T} = 7.8 \times \frac{421}{760} = 4.32$$





طراحی یک واحد جذب گاز

محاسبات برج جذب

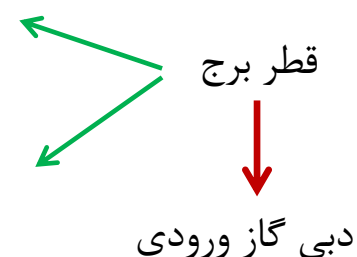
پارامترهای مؤثر در هزینه برج ها طول و قطر آنها است

فاصله اولین سینی تا آخرین سینی برج = (فاصله بین دو سینی) (۱ - تعداد سینی ها)

حدود ۴ متر (۲ متر برای بالای برج به عنوان فضای آزاد و توری و دو متر برای پایین برج) اضافه می شود تا طول برج به دست آید.

قطر برج خیلی کم باشد ← سرعت گاز افزایش می یابد و پدیده ماندگی بوجود می آید.

قطر برج خیلی زیاد باشد ← سرعت گاز کم می شود و weeping رخ می دهد.



$$V_{\max} = f(\rho_L, \rho_G)$$

$$V = 0.75 V_{\max}$$



طراحی یک واحد جذب گاز

محاسبات برج جذب

$$N + 1 = \frac{\ln \left(\left(\frac{L}{mG} - 1 \right) \left(\frac{y_{in} - mx_{in}}{y_{out} - mx_{in}} \right) \right)}{\ln \left(\frac{L}{mG} \right)}$$

$$x_{in} = * \quad N + 1 = \frac{\ln \left((0.4) \left(\frac{y_{in}}{y_{out}} \right) \right)}{\ln(1.4)}$$

۹۹ درصد بازیابی

$$N + 1 = \frac{\ln \left((0.4) \left(\frac{100}{1} \right) \right)}{\ln(1.4)} = 10.96$$

$$N = 9.96 \rightarrow 10$$

۹۹/۹ درصد بازیابی

$$N = 16.8 \rightarrow 17$$

طراحی یک واحد جذب گاز

محاسبات برج تقطیر

$$\text{Fenske's eq.: } N_m = \frac{\ln\{[x_D/(1-x_D)][(1-x_W)/x_W]\}}{\ln \alpha} = \frac{\ln SF}{\ln \alpha}$$

SF=separation factor

$$\text{Underwood's eq.: } \frac{R_m Z_F + q x_D}{R_m(1-Z_F) + q(1-x_D)} = \frac{\alpha[x_D(q-1) + Z_F(R_m+1)]}{(R_m+1)(1-Z_F) + (q-1)(1-x_D)}$$

$$\text{Gilliland's eq.: } \frac{N - N_m}{N + 1} = 0.75 \left[1 - \left(\frac{R - R_m}{R + 1} \right)^{0.5699} \right]$$

 α ضریب فعالیت و مقداری ثابت R_m و N_m حداقل تعداد سینی ها و حداقل جریان برگشتیحداقل نسبت برگشتی (R_m) بی نهایت سینی q نسبت گرمای مورد نیاز برای تبخیر ۱ مول خوراک، به گرمای تبخیر است.برای خوراک بخار اشباع $q=0$ مایع اشباع $q=1$ مخلوط دو فازی $0 < q < 1$ است. Z_F کسر مولی استن در خوراک و x_D کسر مولی استن در بالای برج تقطیر است.



طراحی یک واحد جذب گاز

محاسبات برج تقطیر

روش FUG

با داشتن حداقل تعداد سینی ها و حداقل جریان برگشتی (R_m و N_m)، تعداد سینی های تئوری (N_t) از رابطه Gilliland محاسبه می شود. البته در این روش N با فرض بازده ۱۰۰٪ محاسبه شده است. در طراحی مفهومی معمولاً بازده هر سینی ۵۰٪ فرض می شود. بنابراین تعداد واقعی سینی ها از دو برابر N به دست می آید.

$$N_{actual} = 2 \times N$$

برای محاسبه قطر برج، با تعیین سرعت ماکزیمم و با استفاده از دبی گاز، سطح مقطع برج به دست می آید.

$$\text{سطح عبور گاز} \times \frac{1}{2} = \text{سطح مقطع سینی (سطح ناودانی + سطح عبور گاز)}$$

اطلاعات مورد نیاز برای آغاز طراحی مفهومی

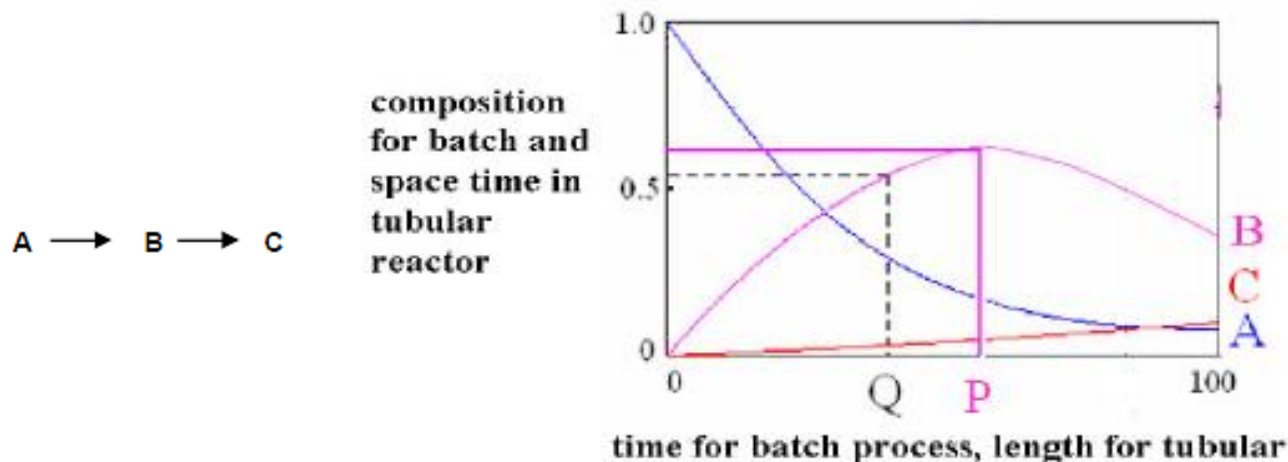
اطلاعات واکنشی و شرایط انجام واکنش

استوکیومتری تمام واکنش ها واکنش هایی که خیلی کم اتفاق می افتند.

حداکثر بازدهی

شرایط فرآیندی هر واکنشی توسط شیمیدان ها تعیین می شود.

تعیین شرایط مناسب برای رسیدن به حداکثر مقدار محصول

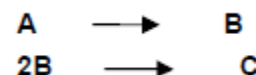
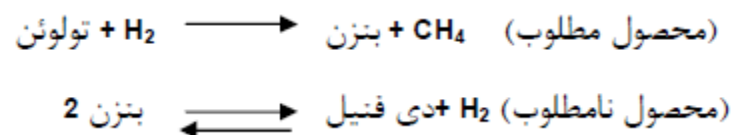


اطلاعات مورد نیاز برای آغاز طراحی مفهومی

اطلاعات توزیع غلظت محصولات بر اساس میزان تبدیل (و احتمالاً دمای راکتور، نسبت مولی واکنشگرها یا فشار)

واکنش های رقابتی

مثال فرآیند آلکیل زدایی هیدروژنی تولوئن برای تولید بنزن (HAD)



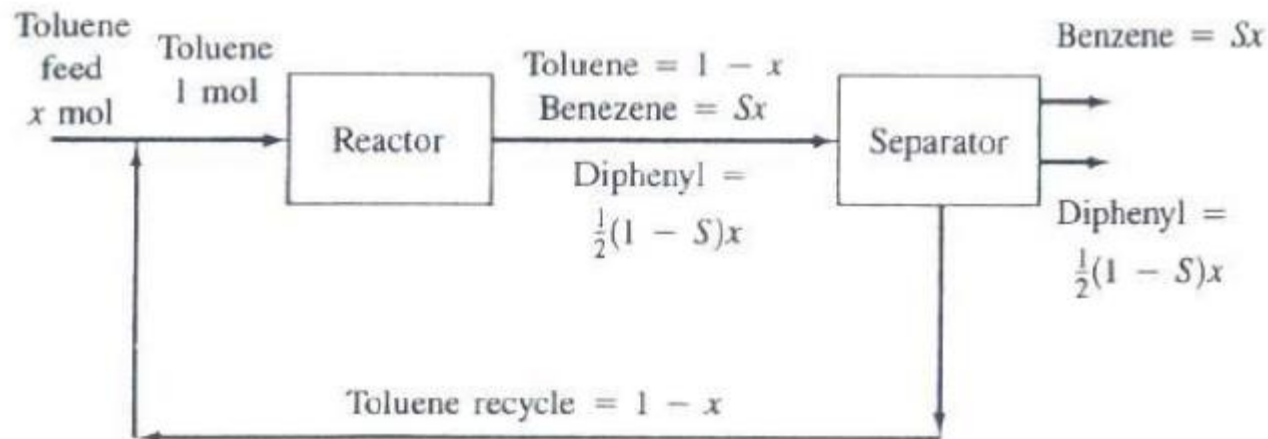
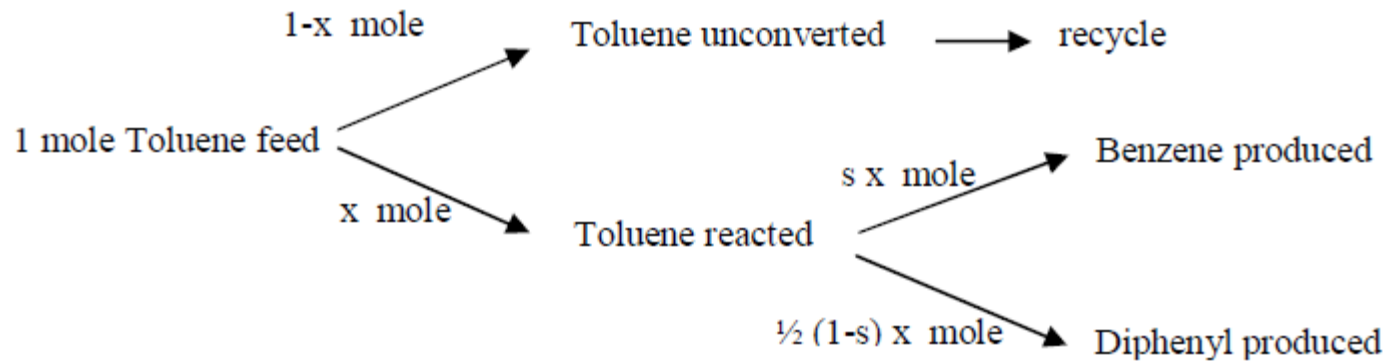
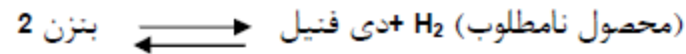
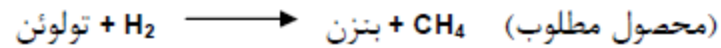
هزینه های مواد اولیه و افت گزینش پذیری

$$\text{conversion}(x) = \frac{\text{moles of A converted}}{\text{moles of A fed to reactor}}$$

$$\text{selectivity}(s) = \frac{\text{moles of B produced}}{\text{moles of A converted}}$$

$$\text{selectivity loss} = \frac{\text{moles of C produced}}{\text{moles of A converted}}$$

اطلاعات مورد نیاز برای آغاز طراحی مفهومی





اطلاعات مورد نیاز برای آغاز طراحی مفهومی

$$S=f(x)$$

محدوده دما و فشار واکنش

فاز واکنش

اطلاعاتی درباره میزان تبدیل بر حسب سرعت پرشدن یا زمان اقامت

$$t=f(x) \quad \frac{\text{حجم راکتور}}{\text{دبی حجمی جریان}}$$

شرایط راکتور در صورت وجود کاتالیست (همگن، Slurry، Packed bed)

تناژ تولید

داروها

خلوص محصول در برابر قیمت

خلوص ۹۹/۹ درصد یا همراه با یک ماده بی اثر

خلوص مواد اولیه در برابر قیمت



اطلاعات مورد نیاز برای آغاز طراحی مفهومی

مشکلات فرآیندی

مواد سرطانزا، اشتعال پذیر، خورنده، رسوب گذار، تشکیل پلیمرها، واکنش های زنجیره ای، مواد تجزیه شونده، تشکیل کک و ...

اطلاعات سایت

فشار، دما، ارتفاع از سطح دریا، دسترسی به منبع آب و سیستم دفع فاضلاب،

خواص فیزیکی همه مواد

تصمیم گیری در مورد پیوسته یا ناپیوسته بودن فرایند

Continuous: شرایط عملیاتی نسبت به زمان در تمامی نقاط ثابت است

Batch: در فرآیند ناپیوسته شرایط با زمان تغییر می کند.

Semi-batch or semi-continuous

پارامترهای انتخاب فرآیند پیوسته

ظرفیت تولید

در صورتیکه ظرفیت تولید واحد مورد نظر کمتر از 10^6 بشکه در سال (حدوداً معادل ۵۰۰ تن در سال) باشد، از فرآیند ناپیوسته استفاده می شود. اگر ظرفیت تولید بیشتر از $10^6 \times 10$ بشکه در سال (معادل ۵۰۰۰ تن در سال) باشد، فرآیند پیوسته بکار می رود. برای ظرفیت تولید بین این دو مقدار، می تواند از فرآیند پیوسته یا ناپیوسته استفاده شود.

تصمیم گیری در مورد پیوسته یا ناپیوسته بودن فرایند

فشار بازار

محصولات فصلی کودهای شیمیایی

این واحد های ناپیوسته باید طوری طراحی شوند که در مابقی سال بتوان محصولات مشابهی را تولید کرد و این کار با تغییرات اندکی در واحد امکان پذیر باشد.

مسائل عملیاتی

سرعت کم واکنش راکتور ناپیوسته

مخلوط های دوغابی راکتور ناپیوسته

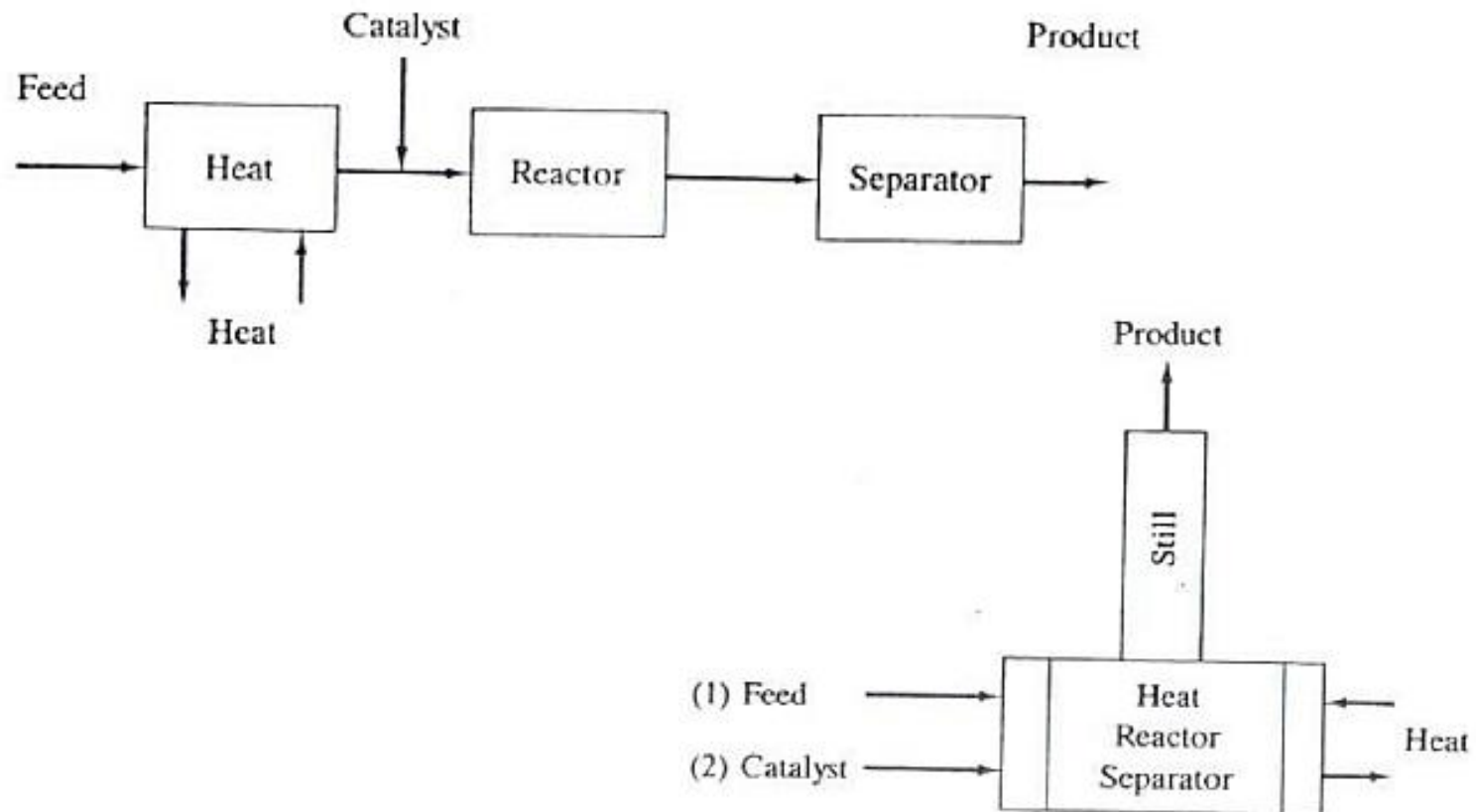
هر چند ساعت لازم است سیستم متوقف شود و پمپ ها و سایر تجهیزات تمیز و گرفتگی آنها برطرف شود.

برای واکنش های کند و فرآیندهایی که با ایجاد **fouling** و یا **plugging** همراه هستند

تصمیم گیری در مورد پیوسته یا ناپیوسته بودن فرایند

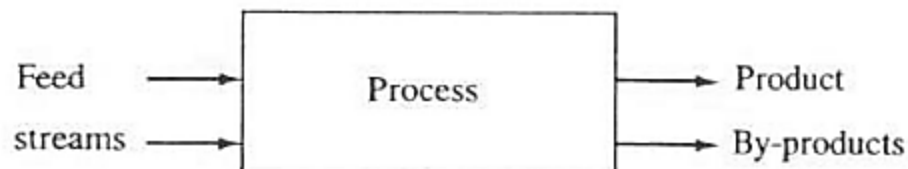
عملیات چند گانه در یک تجهیز منفرد

طراحی واحد به صورت ناپیوسته باعث کاهش تعداد تجهیزات می شود



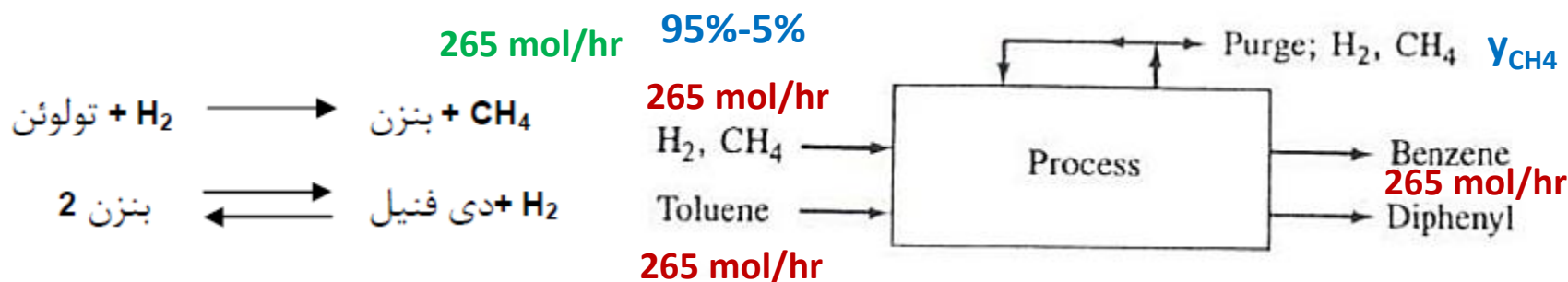
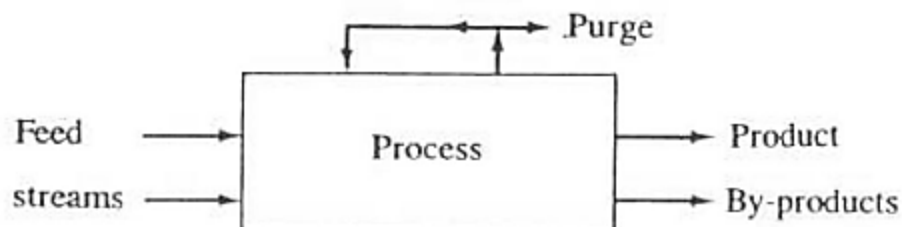
تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

بازیابی بیش از ۹۹ درصد مواد با ارزش



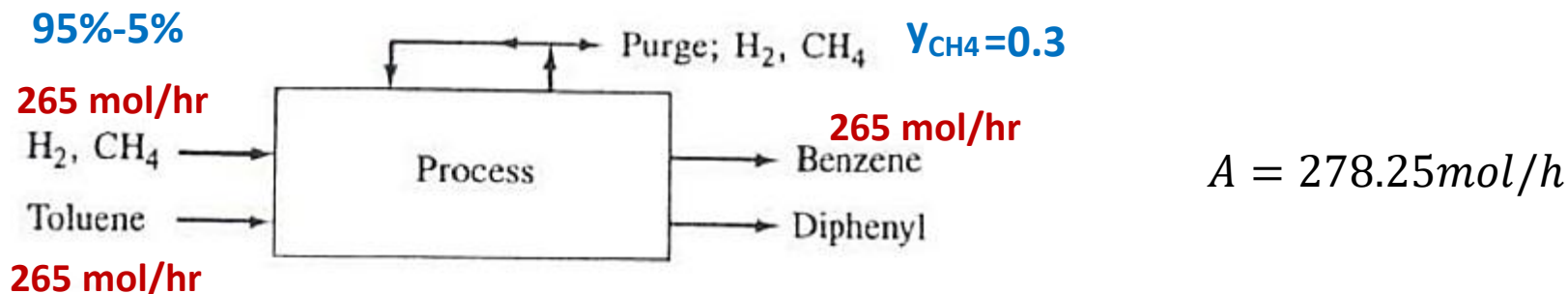
هوا و آب به عنوان واکنشگر

افزایش متغیرهای طراحی با تأثیر کلی



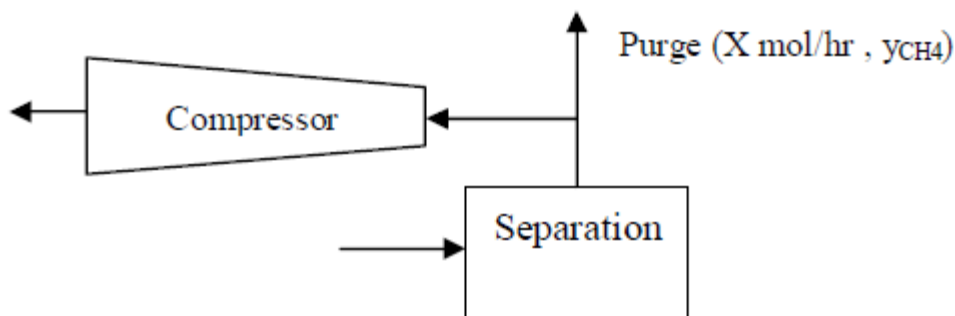
$$A = (\text{متان تولیدی} + \text{متان به صورت ناخالصی همراه هیدروژن}) = 0.05 \times 265 + 265 = 278.25 \text{ mol/hr}$$

تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

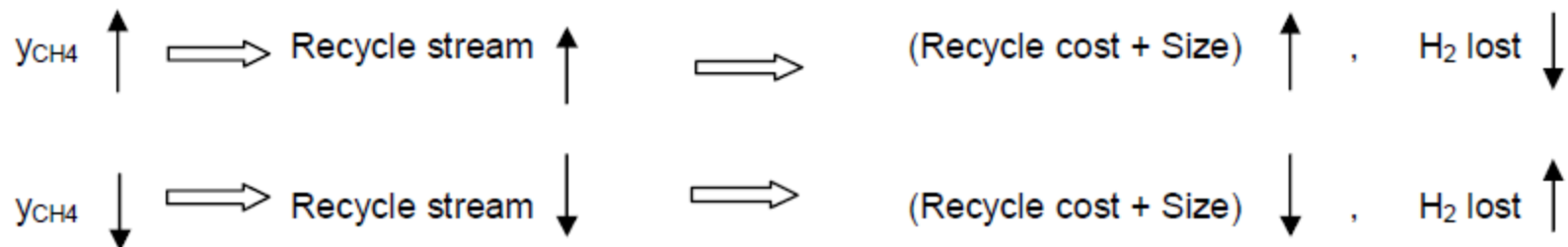
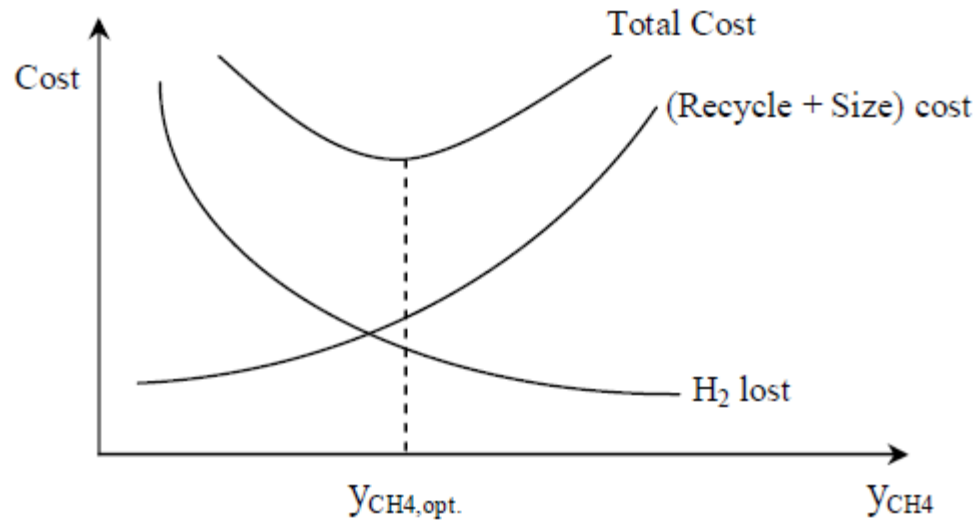


$$Q_{Purge} \times 0.3 = 278.25 \text{ mol/hr}$$

$$Q_{Purge} = \frac{278.25}{0.3} = 927.5 \frac{\text{mol}}{\text{hr}}$$



تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان



تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

برای تعیین پتانسیل اقتصادی بر حسب متغیرهای طراحی در این مرحله، باید به شش سؤال اساسی زیر پاسخ داده شود.

- ۱- آیا لازم است خوراک ورودی به فرآیند را خالص سازی کنیم؟ (در صنعت همیشه خوراک ورودی به همراه ناخالصی است)
- ۲- اگر فرآیند دارای محصول جانبی برگشت پذیر است، این محصول را به راکتور برگردانیم یا از فرآیند خارج کنیم؟
- ۳- آیا باید از جریان **purge** و **recycle** استفاده کنیم؟
- ۴- آیا لازم است تمام واکنشگرهای عمل نکرده را بازیابی کنیم و به راکتور برگردانیم یا خیر؟
- ۵- چه تعداد جریان به عنوان محصول از فرآیند خارج می شوند؟ (جریان های خوراک معلوم است)
- ۶- تعداد و نوع متغیرهای طراحی در این مرحله کدام است و بالانس اقتصادی آنها چیست؟

تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

خالص سازی خوراک یا عدم آن

اگر ناخالصی همراه خوراک ماده بی اثر نباشد (یعنی روی واکنش اثر دارد) و مقدار آن قابل توجه است حتماً خوراک را خالص سازی می کنیم تا حدی که به فرآیند آسیب نرساند.

اگر ناخالصی همراه خوراک در فاز گاز (و ماده بی اثر) باشد، حدس اولیه این است که خوراک را خالص سازی نکنیم. چون فاز گاز حجیم است و فرآیند روی آن هزینه زیادی دارد.

اگر ناخالصی همراه خوراک در فاز مایع بوده و نیز این ناخالصی یک محصول جانبی یا بخشی از مقدار مجاز محصول اصلی باشد، بهتر است خوراک را از بخش جداسازی وارد کنیم. چون حتماً در بخش جداسازی سیستمی برای جداکردن این ناخالصی وجود دارد.

اگر ناخالصی همراه خوراک مقدار زیادی دارد، خوراک را باید قبل از ورود به فرآیند تا مقدار مناسبی خالص کنیم (معمولاً ۹۷-۹۸ درصد خلوص کافی است).



تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

خالص سازی خوراک یا عدم آن

اگر ناخالصی همراه خوراک با یکی از واکنشگرها تشکیل آزنوتروپ دهد، خوراک را خالص سازی نکنیم. چون یکی از روش های جداسازی مخلوط آزنوتروپ، واکنش با ماده دیگر است، بنابراین بعد از واکنش خوراک، ناخالصی خود به خود از واکنشگر جدا می شود.

اگر ناخالصی همراه خوراک ماده بی اثر باشد، ولی جداکردن آن از محصول راحت تر از جداسازی آن از ماده اولیه باشد، خوراک را خالص سازی نمی کنیم.

اگر ناخالصی همراه خوراک مسموم کننده کاتالیست باشد، خالص سازی انجام می شود.

تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

بازیافت و برگشت، یا خارج کردن محصول جانبی از فرآیند

متغیرهای طراحی و بالانس اقتصادی



واکنش تعادلی



هزینه چرخاندن دی فنیل در سیستم و افزایش حجم تجهیزات ، بالانس اقتصادی قواعد تجربی

اگر محصول جانبی برگشت پذیر در فاز گاز باشد، علاوه بر اینکه هزینه کمپرسور برای برگشت آن خیلی زیاد است، حجم زیادی اشغال کرده و نیاز به تجهیزات بزرگتر است. در این موارد به خصوص وقتی ثابت تعادل (K_{eq}) خیلی زیاد است، محصول جانبی را برگشت نمی دهیم. اما اگر محصول جانبی در فاز مایع باشد، فقط نیاز به پمپ داریم که در این مرحله هزینه ای برای آن در نظر نمی گیریم.

اگر نقاط جوش محصول جانبی و مواد اولیه به هم نزدیک باشند، بهتر است محصول جانبی را به همراه مواد اولیه به راکتور برگردانیم.



تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

بازیافت و برگشت، یا خارج کردن محصول جانبی از فرآیند

برای داشتن جریان گازی **Purge-Recycle**، یک شرط لازم و یک شرط کافی نیاز است.

شرط لازم این است که یک واکنشگر سبک داشته باشیم. شرط کافی وجود یک ناخالصی سبک یا یک محصول جانبی سبک است. یک جزء سبک را به صورت جزئی که نقطه جوش آن پایین تر از نقطه جوش پروپیلن (-48°C ، -55°F) است، تعریف می کنیم، یعنی موادی که سبک تر از پروپیلن هستند. علت انتخاب پروپیلن به عنوان مبنا این است که مواد سبک تر از پروپیلن را نمی توان بوسیله آب خنک کن مایع کرد و نیاز به سیکل های تبرید و فشارهای بالا است.

بعضی واکنشگر ها را بازیافت نکنیم؟

اگر مواد اولیه گران باشند حتماً بازیافت کرده و برمی گردانیم.

آب یا هوا به مراتب ارزان تر از مواد دیگر هستند.

در واکنش های احتراق، برای اطمینان از تبدیل کامل سوخت از هوای اضافه استفاده می شود. ورود هوای اضافه باعث افزایش هزینه های دمنده و هزینه های پیش گرمایش و سرمایش می شود

مقدار بهینه



تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

تعیین تعداد جریان های خروجی فرآیند

فهرست تمام مواد فرآیند خروجی راکتور

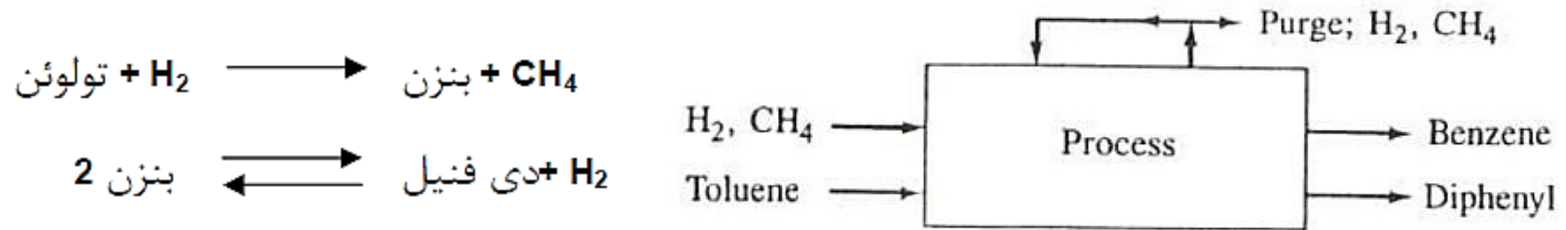
به ترتیب نقطه جوش آنها در جدولی تهیه کنیم.

مقصد هر یک از مواد را تعیین کرده و اجزایی که دارای مقصد یکسانی هستند را در یک گروه قرار دهیم.

تعداد گروه هایی که به این ترتیب تشکیل می شوند (بدون در نظر گرفتن جریان های برگشتی) برابر با تعداد جریان های محصول خواهند بود.

جداسازی دو جریان و سپس مخلوط کردن آنها هیچ مزیتی ندارد.

تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان



Component	Boiling Point (°C)	Destination code
<u>H2</u>	-253	Recycle and Purge
<u>CH4</u>	-161	Recycle and Purge
Benzene	80	Primary Product
Toluene	111	Recycle
Diphenyl	253	Byproduct (fuel)

جریان گاز برگشتی و purge

تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

ضرب در ۸۱۵۰ خرید مواد اولیه - فروش محصولات = EP

$$\text{فروش محصولات} = \{(P_B \times C_B) + (P_D \times C_D) + (P_G \times y_{CH4} \times H_{vCH4} + P_G \times y_{H2} \times H_{vH2}) \times C_e\}$$

$$\text{خرید مواد اولیه} = \{F_G \times C_G + F_{FT} \times C_T\}$$

P_B (mol/hr) : مقدار بنزن تولید C_B (\$/mol) : قیمت بنزن

P_D (mol/hr) : مقدار دی فنیل تولیدی در خروجی فرآیند C_D (\$/mol) : قیمت دی فنیل

P_G (mol/hr) : دبی مولی جریان purge H_{vCH4} و H_{vH2} (Btu/mol) : ارزش سوختی متان و هیدروژن

C_e (\$/106Btu) : ارزش انرژی

F_G (mol/hr) : جریان خوراک هیدروژن

F_{FT} (mol/hr) : جریان خوراک تولوئن

C_T و C_G (\$/mol) : قیمت هیدروژن و تولوئن



تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

متغیرهای طراحی و بالانس اقتصادی آنها

برای انجام موازنه های مواد و سپس تعیین هزینه های جریان لازم است متغیرهای طراحی یا درجه آزادی سیستم تعیین شود.

مقادیر بهینه این متغیرهای طراحی

مهمترین متغیرهای طراحی در فرآیند عبارتند از:

- درصد تبدیل واکنشگر محدود کننده در راکتور

- نسبت مولی واکنشگرها

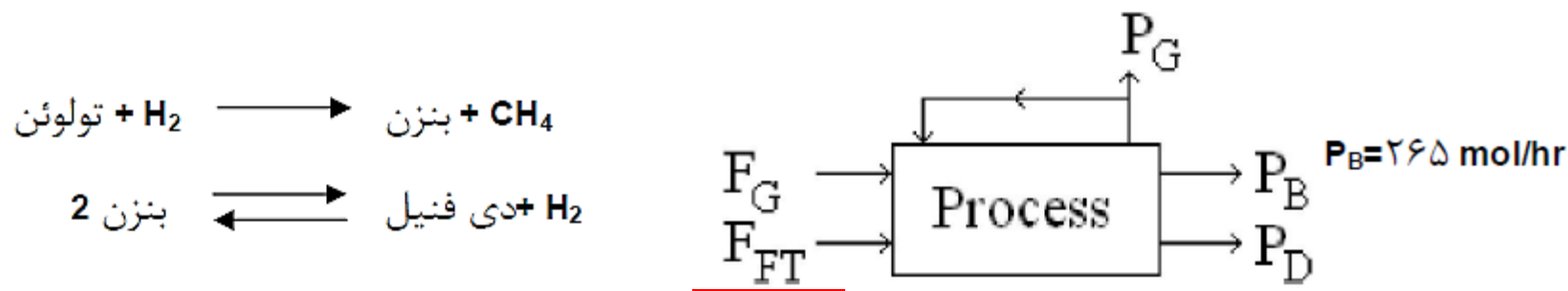
- دما و (یا) فشار راکتور

- غلظت واکنشگر سبک در جریان **purge-recycle**



تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

موازنه های مواد



$$\text{درصد تبدیل} = \frac{\text{مولهای تولوئن تبدیل شده}}{\text{مولهای تولوئن ورودی به راکتور}} = x$$

$$\text{گزینش پذیری} = \frac{\text{مولهای بنزن تولید شده}}{\text{مولهای تولوئن تبدیل شده}} = S = \frac{P_B}{F_{FT}} \quad \Rightarrow \quad F_{FT} = \frac{P_B}{S}$$

$$\frac{1}{2} F_{FT} (1 - S) = P_D \quad \Rightarrow \quad P_D = \frac{P_B}{S} \frac{(1 - S)}{2}$$



تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان



موازنه هیدروژن:

(هیدروژن تولیدی در راکتور) - (هیدروژن مصرفی در راکتور) + (هیدروژن درون purge) = هیدروژن ورودی به راکتور

$$\text{جریان هیدروژن خوراک} \longrightarrow F_G y_{FH} = P_G y_{FH} + \frac{P_B}{S} - \frac{P_B (1 - S)}{2}$$

موازنه متان:

به ازای یک مول تولوئن مصرفی، یک مول متان تولید می شود.

$$F_G (1 - y_{PH}) = F_G (1 - y_{FH}) + \frac{P_B}{S}$$

$$P_G = F_G - \frac{P_B (1 + S)}{S} \frac{1}{2} \frac{1}{y_{FH}} \quad F_G = \frac{P_B \left[1 + \frac{(1 - y_{PH})}{y_{FH}} \right] \frac{(1 + S)}{2}}{S (y_{FH} - y_{PH})}$$

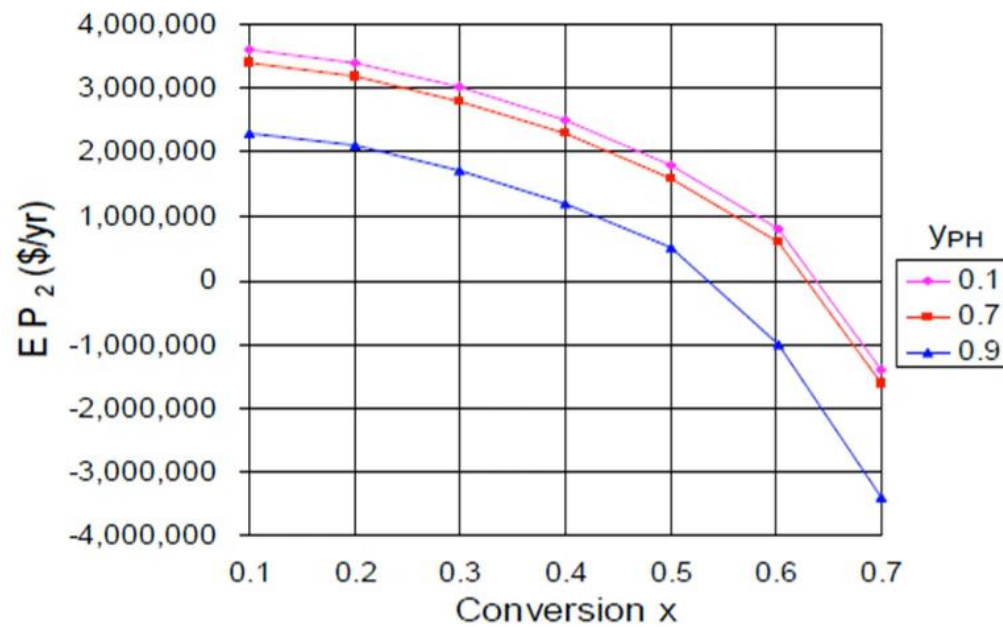
تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

-پتانسیل اقتصادی در مرحله دوم طراحی مفهومی

هزینه مواد اولیه - قیمت محصولات جانبی + قیمت محصولات EP_2

$$EP_2 = \{(P_B \times C_B) + (P_D \times C_D) + (P_G \times y_{CH_4} \times H_{vCH_4} + P_G \times y_{H_2} \times H_{vH_2}) \times C_e\} - \{F_G \times C_G + F_{FT} \times C_T\}$$

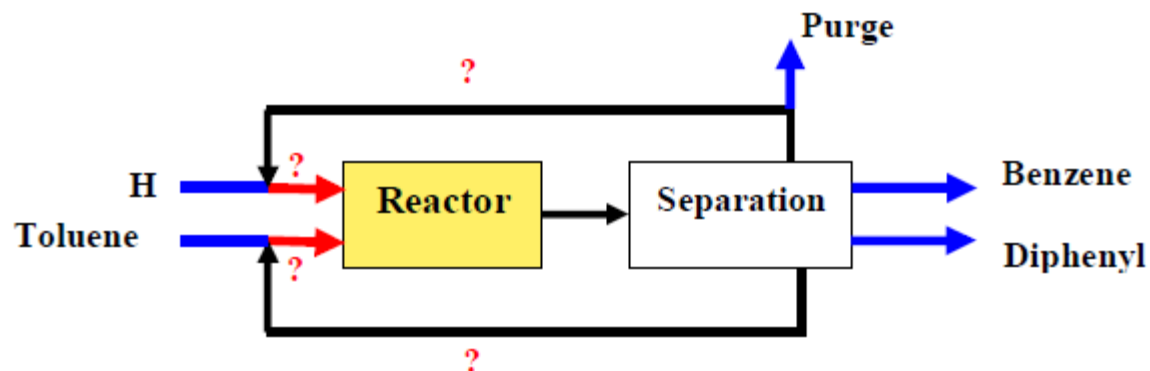
$$S = 1 - \frac{0.0036}{(1 - x)^{1.544}}$$





تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

طراحی مرحله جریان برگشتی (Recycle Structure) - بخش واکنش





تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

تصمیم گیری ساختار جریان های برگشتی

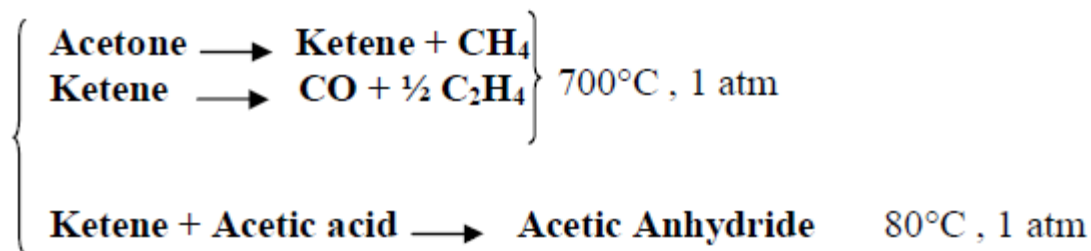
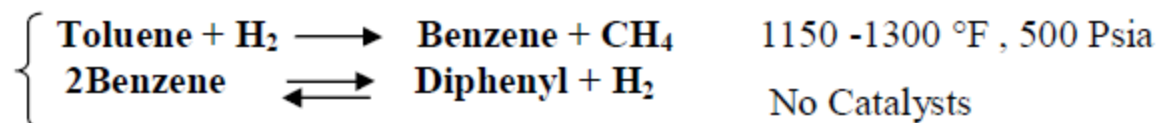
- ۱- چند سیستم راکتور نیاز داریم؟
- ۲- چه تعداد جریان برگشتی لازم است؟
- ۳- آیا لازم است یکی از واکنشگرها به صورت اضافی (بیش از مقدار استوکیومتری مورد نیاز) در ورودی راکتور وارد شود؟
- ۴- آیا به کمپرسور گازی نیاز است؟ اگر لازم است، هزینه های آن چگونه محاسبه می شود؟
- ۵- آیا راکتور باید به صورت آدیاباتیک کار کند یا خیر؟ (چه برنامه حرارتی برای راکتور داریم؟)
- ۶- اگر با یک واکنش تعادلی روبرو هستیم، آیا لازم است درجه تبدیل تعادلی را جابه جا کنیم یا خیر؟
- ۷- هزینه های راکتور را چگونه محاسبه می کنیم؟



تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

پاسخ سؤال اول: چند سیستم راکتور؟

اگر تمام واکنش ها در یک دما و فشار و با یک نوع کاتالیست انجام شوند، تنها به یک سیستم راکتور نیاز است.



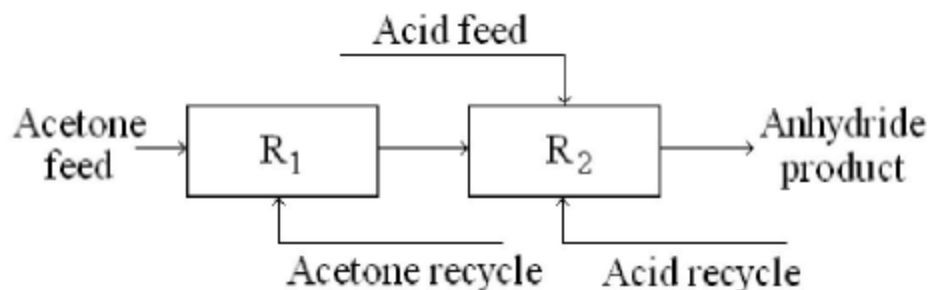
در فرآیند تولید انیدرید استیک به دو سیستم راکتور نیاز داریم.



تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

پاسخ سؤال دوم: چند جریان برگشتی؟

تعداد جریان های برگشتی، به تعداد راکتورهای مورد نیاز بستگی دارد.



برای تعیین تعداد جریان های برگشتی، باید تمام اجزایی که از راکتور(ها) خارج می شوند را به ترتیب نقاط جوش آنها مرتب کرده و شماره راکتور را نیز به عنوان کد مقصد برای هر جریان برگشتی در نظر بگیریم. سپس دسته بندی اجزاء را به این صورت انجام می دهیم که اجزاء برگشتی که نقاط جوش نزدیک به هم دارند و مقصد آنها هم یک راکتور است، در یک گروه قرار می گیرند. بنابراین تعداد گروه ها برابر با تعداد جریان های برگشتی است.

همچنین بین جریان های برگشتی گاز و مایع تفاوت قائل می شویم.

منظور از جریان گازی جریانی است که اجزاء آن نقطه جوش پایین تر از پروپیلن دارند



تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

مثال ۱:

تعداد جریان های برگشتی اجزاء زیر را که مقصد آنها مشخص بوده و بر حسب نقطه جوش مرتب شده اند، تعیین کنید.

- A. Waste byproduct
- B. Waste byproduct
- C. Reactant – recycle to R_1
- D. Fuel byproduct
- E. Fuel byproduct

- F. Primary product
- G. Reactant – recycle to R_2
- H. Reactant – recycle to R_2
- I. Reactant – recycle to R_1
- J. Valuable byproduct

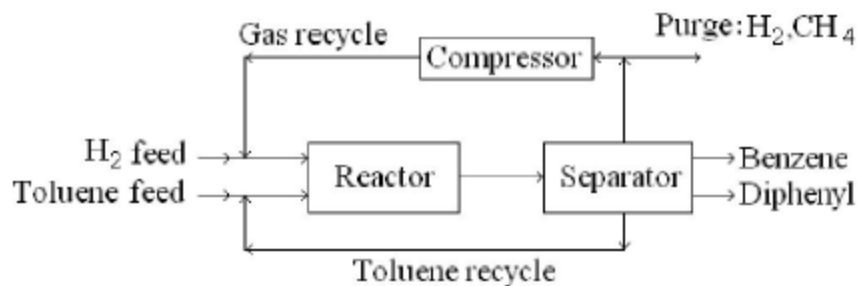
چهار جریان محصول (A+B، D+E، F و J)

سه جریان برگشتی (C، G+H و I)

تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

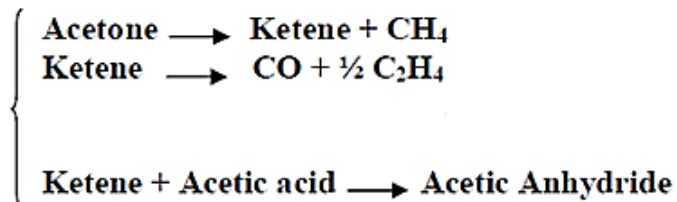
مثال ۲: فرآیند HDA

ترکیب	نقطه جوش (°C)	جریان
H ₂	-۲۵۳	Recycle + Purge (gas)
CH ₄	-۱۶۱	Recycle + Purge (gas)
بنزن	۸۰	Primary Product
تولون	۱۱۱	Reactant – Recycle (liquid)
دی فنیل	۲۵۳	Fuel byproduct

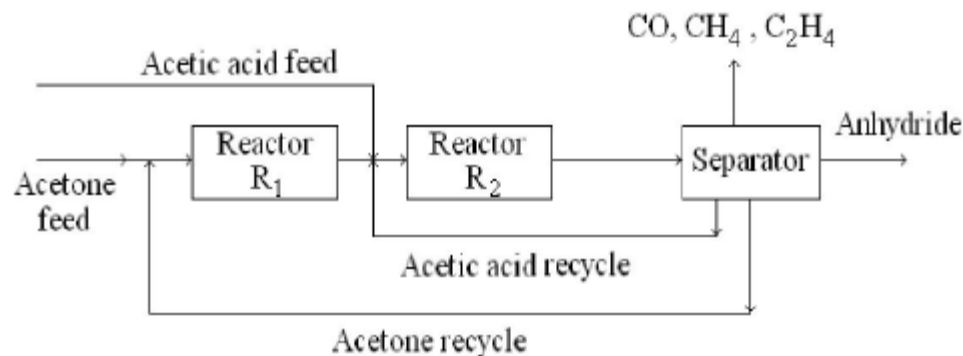


تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

مثال ۳: فرآیند تولید استیک انیدرید



جریان	نقطه جوش (°F)	ترکیب
Fuel byproduct	-۳۱۲/۶	CO
Fuel byproduct	-۱۶۱	CH ₄
Fuel byproduct	-۱۵۴/۸	C ₂ H ₄
Unstable reactant – completely converted	-۴۲/۱	کتن
Reactant – recycle to R ₁ – liquid	۱۳۳/۲	استن
Reactant – recycle to R ₂ – liquid	۲۴۴/۳	استیک اسید
Primary product	۲۸۱/۹	استیک انیدرید



تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

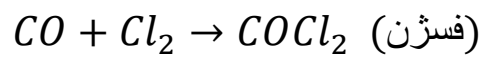
پاسخ سؤال سوم: آیا واکنشگری را اضافه می گیریم؟

در چهار مورد مشخص بهتر است یکی از واکنشگرها به مقدار اضافی وارد راکتور شود؛
برخی مواقع برای شیفیت دادن توزیع محصولات لازم است یک واکنشگر به صورت اضافه بکار رود.



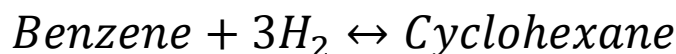
بکار بردن یک جزء به صورت اضافی می تواند موجب تبدیل کامل جزء دیگر شود.

فرآیند تولید فسژن (ماده واسطه برای تولید دی ایزوسیانات).



عاری از Cl_2

استفاده از یک جزء به صورت اضافی می تواند باعث جابه جا شدن تبدیل تعادلی شود.



در برخی موارد برای جلوگیری از برخی مشکلات عملیاتی مانند تشکیل کک، واکنشگرها را اضافی می گیریم.

تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

نیاز به کمپرسور گازی یا عدم نیاز به آن؟ هزینه کمپرسور؟

کمپرسور ها در فرآیند شامل دو نوع هزینه می شوند: هزینه های سرمایه ای و هزینه های عملیاتی
نوع هزینه به حجم گاز و توان تولیدی کمپرسور (بر حسب اسب بخار hp) بستگی دارند.

معادله برای محاسبه توان تولیدی کمپرسور تک مرحله ای (بر حسب hp) برای بردن گازی با حجم Q_{in} از P_{in} به P_{out}

$$hp = \left(\frac{3.03 \times 10^{-5}}{\gamma} \right) P_{in} Q_{in} \left[\left(\frac{P_{out}}{P_{in}} \right)^2 - 1 \right]$$

در این معادله $Q_{in} = \text{ft}^3/\text{min}$ ، $P_{in} = \text{lb}_f/\text{ft}^2$ و $\gamma = (C_p/C_v - 1)/(C_p/C_v)$ می باشند. C_p و C_v ظرفیت های حرارتی

بر حسب $\text{Btu/mol} \cdot ^\circ\text{F}$ بوده و دمای خروجی از یک مرحله تراکم برابر است با:

$$\frac{T_{out}}{T_{in}} = \left(\frac{P_{out}}{P_{in}} \right)^\gamma$$

دما و فشار بر حسب واحدهای مطلق هستند.

تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

$$\frac{T_{out}}{T_{in}} = \left(\frac{P_{out}}{P_{in}} \right)^{\gamma} \quad \gamma = (C_p/C_v - 1)/(C_p/C_v)$$

مقادیر گاما

0.4	گازهای تک اتمی
0.29	گازهای دو اتمی
0.23	گازهای پیچیده تر (CH_4, CO_2)
R/C_p	سایر گازهای

تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

در طراحی های اولیه بازده کمپرسور را ۹۰٪ در نظر گرفته و نیز برای تبدیل انرژی ورودی به کار محوری یک بازدهی ۹۰٪ برای قسمت محرکه در نظر می گیریم. بنابراین بازدهی که در محاسبه هزینه های سرمایه ای کمپرسور بکار می رود، برابر است با:

$$\frac{hp}{0.9} = bhp$$

بازدهی که در محاسبه هزینه های عملیاتی کمپرسور بکار می رود، عبارتست از:

$$\frac{bhp}{0.9} = \text{میزان انرژی مصرفی}$$

$$hp = \left(\frac{3.03 \times 10^{-5}}{\gamma} \right) P_{in} Q_{in} \left[\left(\frac{P_{out}}{P_{in}} \right)^2 - 1 \right]$$

هر چه دبی گاز ورودی بیشتر و تراکم پذیری گاز کمتر باشد، هزینه کمپرسور بیشتر می شود.

تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

کمپرسورهای چند مرحله ای

یک قاعده سرانگشتی برای بکارگیری یک کمپرسور این است که نسبت P_{out}/P_{in} هرگز نباید بیشتر از ۴ باشد چون اگر فشار گاز خروجی کمپرسور خیلی بالا رود، دما به شدت افزایش یافته و باعث افت شدید بازده می شود. اگر فشار گاز خروجی کمپرسور بیش از ۴ برابر فشار ورودی آن باشد، از کمپرسورهای چند مرحله ای استفاده می شود. استفاده از کمپرسورهای چند مرحله ای عملی متداول است. با توجه به اینکه دمای گاز خروجی از هر مرحله زیاد است، در بین مراحل دمای گاز توسط کولر تا دمای آب خنک کننده (۱۰۰ درجه فارنهایت) خنک شده و مایعات آن توسط ظروف تبخیر ناگهانی گرفته می شود تا قطرات مایع به پره های چرخان کمپرسور آسیب نرسانند. سپس گاز به مرحله بعدی کمپرسور فرستاده می شود.

کار لازم برای یک کمپرسور سه مرحله ای با سیستم خنک کننده داخلی برابر است با:

$$Work = MRT_{in} \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^\gamma + \left(\frac{P_3}{P_2} \right)^\gamma + \left(\frac{P_4}{P_3} \right)^\gamma - 1 \right]$$

M = وزن مولکولی

R = ثابت گازها

تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

$$Work = MRT_{in} \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^\gamma + \left(\frac{P_3}{P_2} \right)^\gamma + \left(\frac{P_4}{P_3} \right)^\gamma - 1 \right]$$

$$\frac{\partial work}{\partial P_2} = \frac{\partial work}{\partial P_3} = 0 \quad \frac{P_2}{P_1} = \frac{P_3}{P_2} = \frac{P_4}{P_3}$$

در یک کمپرسور گازی، باید نسبت های تراکم در تمامی مراحل یکسان باشد.

نباید کمتر از ۴ باشند. در غیر این صورت راندمان پایین می آید.

$$\frac{P_2}{P_1}, \frac{P_3}{P_2}, \frac{P_4}{P_3}$$

هزینه های کمپرسور:

هزینه سرمایه ای:

$$\frac{hp}{0.9} = bhp$$

سپس با استفاده از رابطه گاتری یا برخی روابط معادل آن، می توان هزینه نصب شده انواع کمپرسور را محاسبه کرد:

$$\text{هزینه نصب شده} = \left(\frac{M\&S}{280} \right) (517.5)(bhp)^{0.82} (2.11 + F_c)$$

که F_c در رابطه E.2-4 کتاب داده شده و M&S ضریب تورم مارشال و سوئیفت است.

با ضرب کردن هزینه نصب شده در ضریب CCF، هزینه نصب شده را به هزینه سالانه تبدیل می کنیم.



تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

هزینه عملیاتی:

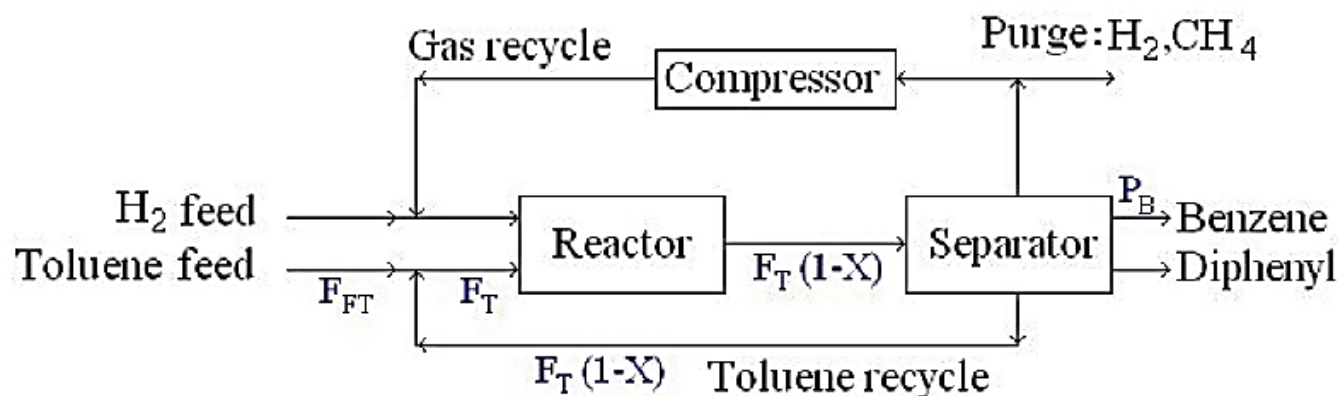
$$\text{میزان انرژی مصرفی} = \frac{bhp}{0.9}$$

با در نظر گرفتن (hr/yr) ۸۱۵۰ می توان هزینه عملیاتی را محاسبه کرد.

کل هزینه سالانه کمپرسور:

هزینه عملیاتی سالانه + هزینه سرمایه ای سالانه = هزینه کل سالانه

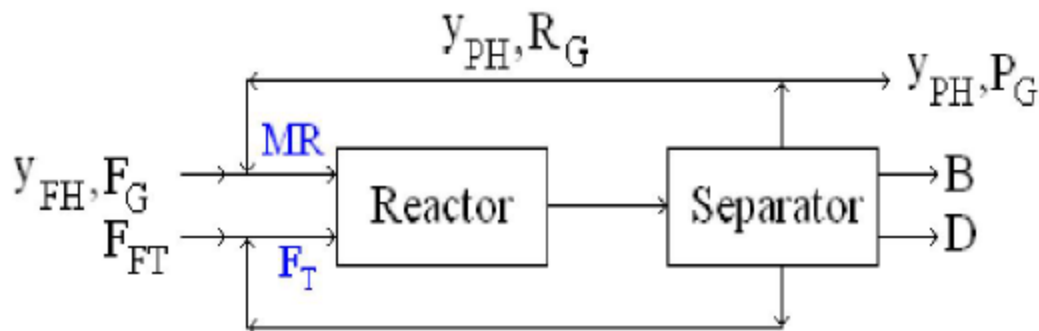
تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان واکنشگر محدودکننده



با فرض بازیافت کامل در سیستم جداسازی درصد تبدیل تولوئن در راکتور x جریان تولوئن ورودی به راکتور F_T جریان تولوئن خروجی از راکتور برابر با $F_T(1-x)$

$$F_T = F_{FT} + F_T(1-x) \quad F_T = \frac{F_{FT}}{x} = \frac{P_B / S}{x}$$

تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان



$F_T MR$ = هیدروژن در خوراک تازه + هیدروژن در جریان برگشتی = هیدروژن ورودی به راکتور

$$y_{FH} F_G + y_{PH} R_G = MR \left(\frac{F_{FT}}{X} \right)$$

$$R_G = \frac{P_B}{S y_{PH}} \left[\frac{MR}{X} - \frac{y_{FH} [(1+S) + y_{PH} (1-S)]}{2(y_{FH} - y_{PH})} \right]$$

نسبت مولی هیدروژن به تولوئن در ورودی راکتور برابر با MR

متغیرهای طراحی x ، y_{PH} و MR هستند که با مشخص شدن آنها، جریان گازی R_G محاسبه می شود.

تصمیم گیری در مورد ساختار ورودی-خروجی نمودار جریان

هیچ قاعده تجربی برای انتخاب x در مورد واکنش های پیچیده وجود ندارد. به همین ترتیب هیچ قاعده تجربی برای انتخاب ترکیب درصد جریان **purge** (y_{PH}) یا نسبت مولی (**MR**) وجود ندارد. یک حدس اولیه قابل قبول در مورد میزان تبدیل واکنش های منفرد، $x = 0.96$ یا $x_{eq} = 0.98$ می باشد.

محصولات جانبی برگشت پذیر

اگر محصول جانبی تولیدی در یک واکنش برگشت پذیر را بازگردانیم و اجازه دهیم تا مقدار آن به حد تعادلی برسد، مانند دی فنیل در فرآیند **HDA**، می توان شدت جریان برگشتی با استفاده از رابطه تعادلی در خروجی راکتور محاسبه کرد:

$$K_{eq} = \frac{(Diphenyl)(H_2)}{(Benzene)^2}$$

با توجه به اینکه شدت جریان های H_2 و بنزن با استفاده از واکنش اول و محاسبات جریان **Purge** تعیین شده اند، می توان از این رابطه تعادلی برای محاسبه شدت جریان دی فنیل در خروجی راکتور استفاده کرد.



سیستم حرارتی راکتور

بهترین نوع راکتورها، راکتورهای آدیاباتیک هستند، چون نیاز به سیستم گرمایش یا سرمایش ندارند.

در این راکتورها اگر واکنش گرمازا باشد محصولات گرمتر از مواد اولیه بوده و اگر واکنش گرماگیر باشد؛ محصولات سردتر از مواد اولیه هستند.

باید توجه شود که دماها از محدوده دمایی مجاز خارج نشوند.

برخی مواقع در راکتورهای آدیاباتیک برای خارج نشدن از محدوده مجاز دمایی، از مواد افزودنی استفاده می شود و بدون آنکه در واکنش شرکت کنند، گرما را می گیرند و به آنها حامل گرما گفته می شود.

بار حرارتی راکتور:

در واکنش های منفرد، معمولاً تمام خوراک تازه واکنشگر محدودکننده تبدیل می شود. بنابراین می توان گفت:

(شدت جریان خوراک تازه) $\times$ (حرارت واکنش) = بار حرارتی راکتور

در مورد واکنش های پیچیده، میزان پیشرفت واکنش بستگی به متغیرهای طراحی (درصد تبدیل، نسبت مولی واکنشگرها، دما و یا فشار) دارد.

سیستم حرارتی راکتور

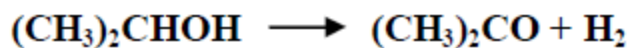
به عنوان مثال در فرایند HDA، بار حرارتی راکتور را در حالتیکه $x = 0.75$ (در این صورت $S = 0.9694$)،
 $P_B = 265$ و در نتیجه $F_{FT} = P_B/S = 273 \text{ (mol/hr)}$ است، محاسبه می کنیم:

با صرفنظر از واکنش دوم خواهیم داشت:

$$Q_R = \Delta H_R F_{FT} = (-21530)(273) = -5873 \times 10^6 \text{ (Btu/hr)}$$

در رابطه بالا، ΔH_R حرارت واکنش در 1200°F و 500 psia بوده و حرارت توسط واکنش گرمازا آزاد می شود.

مثال دیگر، فرآیند تولید استن از دی هیدروژناسون ایزوپروپانل (IPA) است:



در این فرآیند برای تولید $51/3 \text{ (mol/hr)}$ استن، $51/3 \text{ (mol/hr)}$ ایزوپروپانل مورد نیاز است. حرارت واکنش در 570°F و 1 atm ، 25800 (Btu/mol) است. بنابراین بار حرارتی راکتور برابر است با:

$$Q_R = \Delta H_R F_{IPA} = (25800)(51/3) = 1324 \times 10^6 \text{ (Btu/hr)}$$

این مقدار حرارت در واکنش گرماگیر مصرف می شود.



سیستم حرارتی راکتور

تغییر دمای آدیاباتیک:

حال با فرض اینکه راکتور آدیاباتیک است، می خواهیم تغییر دمای آدیاباتیک و دمای خروجی راکتور را محاسبه کنیم. هنگامی که بار حرارتی راکتور (Q_R) و شدت جریان عبوری از آن را (F) به صورت تابعی از متغیرهای طراحی تعیین کردیم، می توان تغییر دمای آدیاباتیک را از معادله زیر تعیین کرد:

$$Q_R = FC_p (T_{R,in} - T_{R,out})$$

به عنوان مثال در فرآیند HDA، شدت جریان ها و ظرفیت های حرارتی جریان ورودی به راکتور در حالتی که $x = 0.75$ و $y_{PH} = 0.4$ می باشند، در جدول زیر داده شده است:

Stream	Flow, (mol/hr)	Cp, (Btu/ mol °F)
Make up gas	496	$0.95 (7) + 0.05 (10.1) = 7.16$
Recycle gas	3371	$0.4 (7) + 0.6 (10.1) = 8.86$
Toluene feed	273	48.7
Toluene recycle	91	48.7



سیستم حرارتی راکتور

تغییر دمای آدیاباتیک:

دمای ورودی راکتور $T_{R,in} = 1150^{\circ}\text{F}$ است و بار حرارتی راکتور را $Q_R = -5/873 \times 10^6 \text{ (Btu/hr)}$ قبلاً محاسبه کردیم. بنابراین خواهیم داشت:

$$Q_R = -5/873 \times 10^6 = [(273 + 91)48/7 + 496(7/16) + 3371(8/86)] (T_{R,out} - T_{R,in})$$

$$T_{R,out} = 1150 + 115 = 1265 (^{\circ}\text{F})$$

این دما در محدوده مجاز دمایی راکتور یعنی $1100-1300^{\circ}\text{F}$ است. پس در این شرایط می توان از راکتور آدیاباتیک استفاده کرد. همچنین تأثیرپذیری محاسبات از مقادیر C_p یا شدت جریان ها خیلی زیاد نیست.

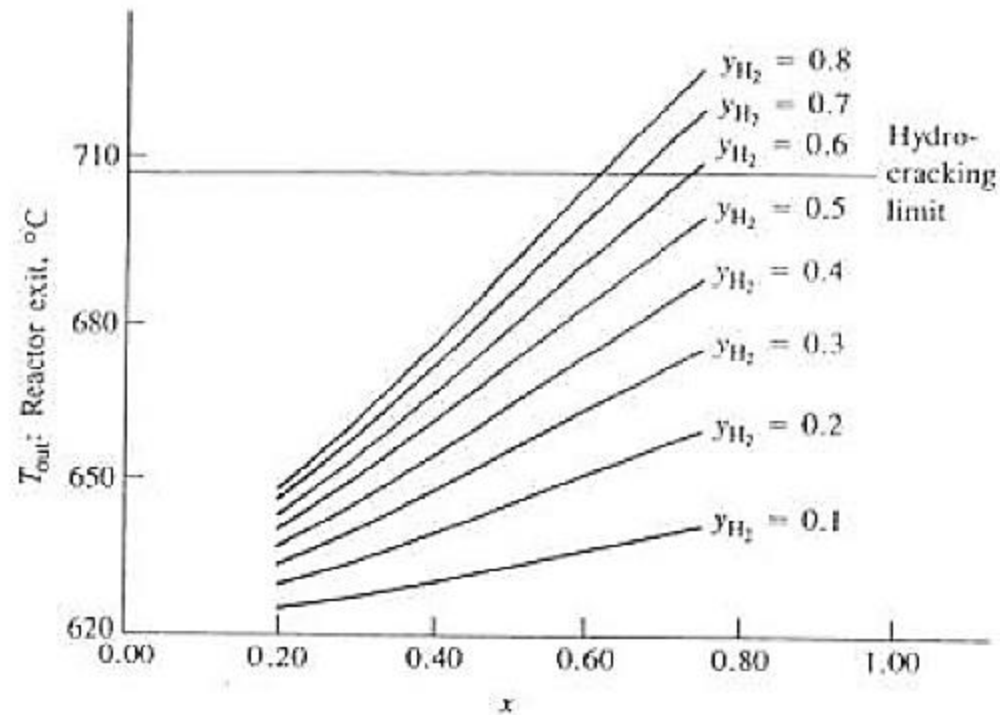
دمای خروجی راکتور را برای یک مقدار مشخص متغیرهای طراحی $x = 0/75$ و $y_{PH} = 0/4$

مقادیر Q_R و FC_p بر حسب متغیرهای طراحی نوشته می شوند.



سیستم حرارتی راکتور

تغییر دمای آدیاباتیک:





سیستم حرارتی راکتور تغییر دمای آدیاباتیک:

مثال دوم، فرآیند IPA است که قبلاً مورد بررسی قرار داده ایم (تولید $51/3 \text{ (mol/hr)}$ استن مورد نظر است).



اگر خوراک ورودی به فرآیند مخلوط آزنوتروپ $\text{IPA-H}_2\text{O}$ که 22 (mol/hr) آب همراه با خوراک وارد می شود. درمیزان تبدیل $X = 0/96$ ، شدت جریان برگشتی ایزوپروپانل $2/1 \text{ (mol/hr)}$ و شدت جریان برگشتی آب $0/9 \text{ (mol/hr)}$ خواهد بود. یعنی:

$$(51.3 / 0.7) \times 0.3 = 22 \text{ mol/hr H}_2\text{O} \quad 51.3 \times 0.04 = 2.1 \text{ mol/hr IPA (recycle)}$$

$$(2.1 / 0.7) \times 0.3 = 0.9 \text{ mol/hr H}_2\text{O (recycle)}$$

اگر دمای ورودی راکتور 572°F باشد، تغییر دمای آدیاباتیک برابر است با:

$$Q_R = 1/324 \times 10^6 = [(51/3 + 22) + (2/1 + 0/9)] (22) (572 - T_{R,out}) \quad T_{R,out} = 572 - 788 = -216 (^\circ\text{F})$$

این یک نتیجه غیر قابل قبول است. بنابراین به جای استفاده از یک راکتور آدیاباتیک، از راکتور ایزوترمال

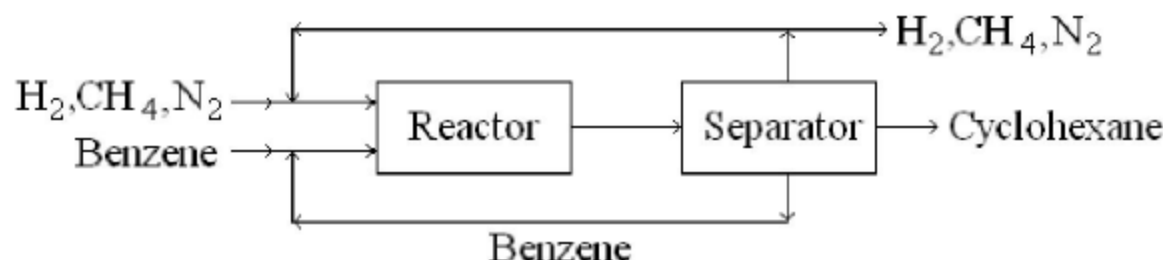
استفاده می کنیم تا با تأمین حرارت مورد نیاز واکنش، به شرایط عملیات همدم دست یابیم.

سیستم حرارتی راکتور

آیا می خواهیم میزان تبدیل تعادلی را جابه جا کنیم؟ چگونه؟
در بسیاری از موارد مطلوب است واکنش تعادلی را جابه جا کنیم.
واکنش تولید سیکلوهگزان:

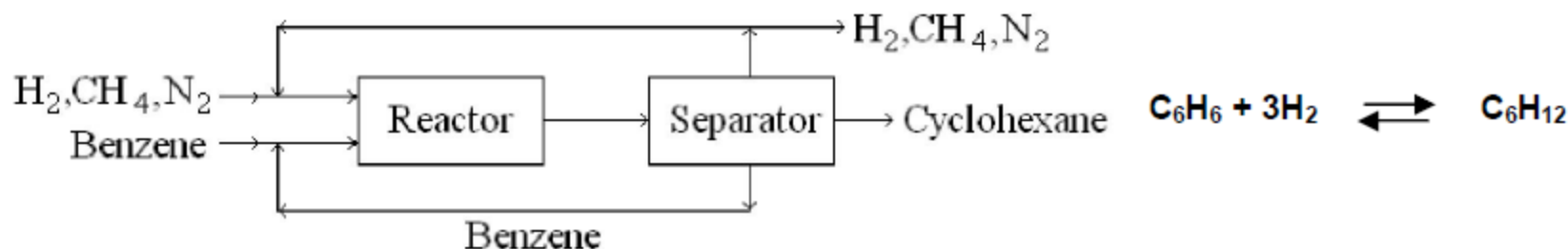


فرض کنیم (mol/hr) ۱۰۰ سیکلوهگزان با خلوص ۹۹/۹ درصد تولید شود و یک جریان خوراک بنزن خالص و جریان جبرانی هیدروژن حاوی ۹۷/۵٪ H_2 ، ۲٪ CH_4 ، ۵/۰٪ N_2 در دست است



سیستم حرارتی راکتور

آیا می خواهیم میزان تبدیل تعادلی را جابه جا کنیم؟ چگونه؟



موازنه های کلی:

اگر هیچ اتلافی را در نظر نگیریم (بازیابی ۱۰۰٪)، داریم:

$P_c = 100$ تولید سیکلوهگزان:

$F_{FB} = P_c = 100$ خوراک تازه بنزن: $F_E = \text{H}_2$ اضافی خورانده شده به خوراک

H_2 کل خوراک $= 3P_c + F_E = 0.975 F_G$ ترکیب درصد H_2 در جریان Purge: $y_{PH} = \frac{F_E}{F_E + 0.025 F_G}$

شدت جریان گاز جبرانی: $F_G = 3P_c \left(\frac{1 - y_{PH}}{0.975 - y_{PH}} \right)$ شدت جریان Purge: $P_G = F_E + 0.025 F_G$

سیستم حرارتی راکتور

موازنه های برگشتی:

$$F_B = \frac{F_{FB}}{X} = \frac{P_C}{X} : \text{بنزن خورانده شده به راکتور}$$

فرض کنید نسبت مولی H_2 به بنزن MR باشد پس:

$$0.975F_G + y_{PH}R_G = MR\left(\frac{P_C}{X}\right) \Rightarrow R_G = \frac{1}{y_{PH}}\left(\frac{MR P_C}{X} - 0.975F_G\right)$$

شدت جریان های خروجی از راکتور:

$$P_C = \text{سیکلو هگزان}$$

$$\text{بنزن} = \frac{P_C}{X} - P_C = \frac{P_C(1-X)}{X} \quad \text{هیدروژن} = MR \text{ FB} - 3PC = \left(\frac{MR}{X} - 3\right)P_C$$

$$\text{شدت جریان کلی} = P_C \left[\frac{1}{X} + \left(\frac{MR}{X} - 3\right) \frac{1}{y_{PH}} \right] = \frac{1-y_{PH}}{y_{PH}} \left(\frac{MR}{X} - 3\right)P_C + 0.025F_G = \text{مواد بی اثر}$$

سیستم حرارتی راکتور

رابطه تعادلی:

$$K_{eq} = \frac{f_C}{f_B f_H^3} = \frac{v_C y_C}{P_{tot}^3 v_B v_H^3 y_B y_H^3}$$

در رابطه بالا، K_{eq} ثابت تعادل، f_i فوگاسیته و v_i ضریب فوگاسیته است.

$$v_H = 1 \quad \frac{v_C}{v_B} = 1.13$$

$$y_C = \frac{P_c}{P_c \left(\frac{1}{x} + \left(\frac{MR}{x} - 3 \right) \right)} - \frac{1}{\frac{1}{x} + \left(\frac{MR}{x} - 3 \right) \frac{1}{y_{PH}}}$$

$$y_B = \frac{P_c(1-x)/x}{P_c \left(\frac{1}{x} + \left(\frac{MR}{x} - 3 \right) \right)} = \frac{(1-x)/x}{\frac{1}{x} + \left(\frac{MR}{x} - 3 \right) \frac{1}{y_{PH}}}$$

$$y_H = \frac{P_c \left(\frac{MR}{x} - 3 \right)}{P_c \left(\frac{1}{x} + \left(\frac{MR}{x} - 3 \right) \right)} = \frac{\left(\frac{MR}{x} - 3 \right)}{\frac{1}{x} + \left(\frac{MR}{x} - 3 \right) \frac{1}{y_{PH}}}$$

$$\text{شدت جریان کلی} = P_c \left[\frac{1}{x} + \left(\frac{MR}{x} - 3 \right) \frac{1}{y_{PH}} \right]$$

سیستم حرارتی راکتور

با جاگذاری مقادیر در رابطه x_{eq} خواهیم داشت:

$$1.13 \quad P_{tot}^3 K_{eq} = \left(\frac{x_{eq}}{1 - x_{eq}} \right) \left[\frac{1 + MR - 3x_{eq}}{(MR - 3x_{eq}) y_{PH}} \right]^3$$

این رابطه، یک رابطه ضمنی بر حسب متغیرهای طراحی است که نشان می دهد چه عواملی بر x_{eq} مؤثر هستند. به منظور کاهش میزان بنزن در محصول و جلوگیری از مشکل جداسازی بنزن و سیکلوهگزان، هدف ما افزایش تبدیل تعادلی و نزدیک کردن آن به واحد (۱ $\rightarrow x_{eq}$) است. عوامل مؤثر در تغییر تبدیل تعادلی شامل فشار، دما، MR و y_{PH} می باشند.

با افزایش فشار راکتور (P_{tot}).

میزان تبدیل تعادلی افزایش نسبت مولی هیدروژن به بنزن در ورودی راکتور (MR) افزایش داد
کاهش دمای راکتور (واکنش گرمازا است)

سیستم حرارتی راکتور

در رابطه ضمنی تبدیل تعادلی بر حسب متغیرهای طراحی، اگر x_{eq} را به سمت ۱ میل دهیم به رابطه تقریبی و ساده زیر می‌رسیم:

$$X_{eq} \approx 1 - \frac{1}{1.13 P_{tot}^3 K_{eq}} \left[\frac{MR - 2}{(MR - 3)y_{PH}} \right]^3$$

در رابطه صریح بالا، هر چه ترم دوم کوچکتر باشد، تبدیل تعادلی بیشتر می‌شود (به ۱ نزدیک می‌شود). از این مدل ساده برای استفاده در مطالعات بهینه‌سازی اولیه می‌توان استفاده کرد.

رقیق‌کننده‌ها

دما، فشار و نسبت مولی همگی می‌توانند برای جابه‌جا کردن میزان تبدیل تعادلی مورد استفاده قرار گیرند. ولی در برخی موارد یک جزء خارجی اضافه شده که باعث جابه‌جا شدن میزان تبدیل تعادلی می‌شود. به این مواد، رقیق‌کننده گفته می‌شود.

از این مواد برای جذب گرمای حاصل از واکنش گرمازا استفاده می‌شود تا دمای راکتور خارج از محدوده مجاز دمایی قرار نگیرد.

گرمای واکنش از رابطه $Q = FC_p \Delta T$ به دست می‌آید. در این رابطه Q مقدار ثابتی است



سیستم حرارتی راکتور

ویژگی های این مواد باید به گونه ای باشد که ظرفیت حرارتی بالایی داشته و روی واکنش تأثیری نداشته باشند. جداسازی آنها از مخلوط واکنش مشکلی ایجاد نکند.

در مورد سیستم هیدروکربن ها معمولاً از بخار آب به عنوان رقیق کننده استفاده می شود. چون معمولاً مخلوط های آب- هیدروکربن امتزاج ناپذیرند و جداسازی آنها به راحتی صورت می گیرد.

اضافه کردن رقیق کننده باعث افزایش حجم راکتور و صرف هزینه های آن نیز می شود.

هزینه های راکتور

قانون سرانگشتی $L/D \leq 6$

مقادیر طول (L) و قطر (D) راکتور

هر چه فشار راکتور زیادتر باشد، نسبت L/D بیشتر می شود تا مقاومت راکتور بیشتر شود در **storage tank** ها نسبت L/D کمتر از یک است. یعنی قطر خیلی زیاد است و بنابراین با توجه به

رابطه $V = (\pi/4)D^2L$ ، حجم زیاد است در حالیکه فضای زیادی را اشغال نمی کند.

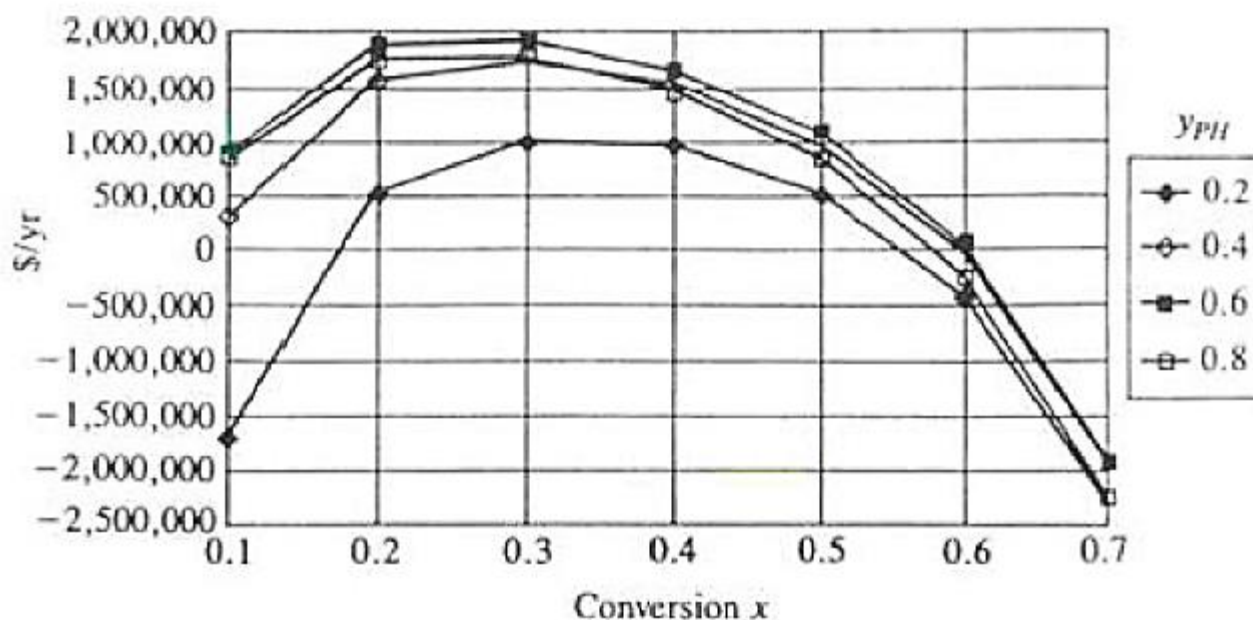
اما در برج های تقطیر و راکتورها نسبت L/D بیشتر از یک است.

معمولاً برای اینکه قدرت پمپ کردن مواد و پایداری بیشتری برای تجهیزات داشته باشیم، از ارتفاعات زیاد تجهیزات پرهیز می کنیم.

ارزیابی اقتصادی در مرحله ساختار جریان های برگشتی

هزینه برگشت اجزا - هزینه راکتور - خرید مواد اولیه - فروش محصولات = EP_3

متغیرهای طراحی x و y_{PH}



$x=0.2-0.4$ و y_{PH} حدود 0.6



سیستم جداسازی

بخش جداسازی فرآیند (با صرفنظر از فرآیندهای شامل فازهای جامد) در سه مرحله جداگانه طراحی می شود:

ساختار عمومی سیستم جداسازی

سیستم بازیابی بخارات

سیستم بازیابی مایعات

طراحی ساختار کلی بخش جداسازی

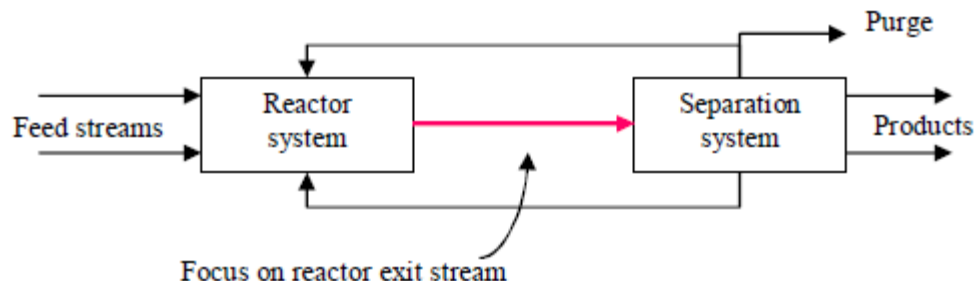
کاملاً مایع

جریان خروجی از راکتور ممکن است مخلوطی از مایع و گاز

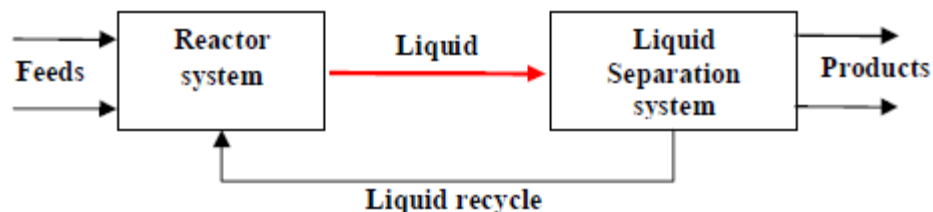
کاملاً گازی

تا آنجایی که امکان دارد از حجم گازها کم شده و به فاز مایع اضافه می شود.

سیستم جداسازی

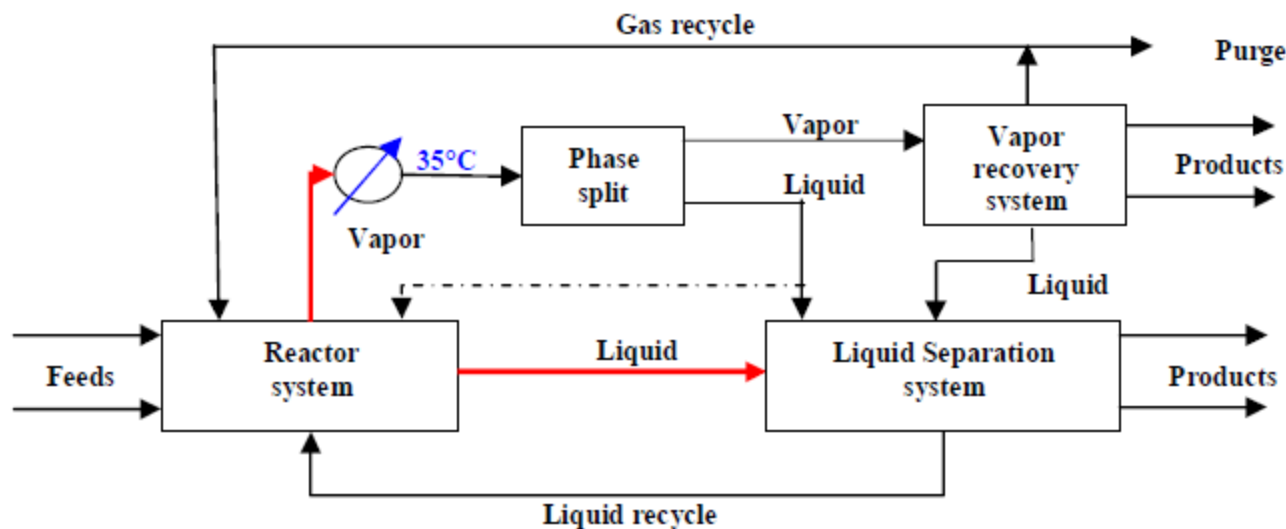


اگر جریان خروجی از راکتور در فاز مایع باشد، یک حالت ایده آل است و فقط نیاز به سیستم جداسازی مایع داریم. این سیستم ممکن است شامل ستون های تقطیر، واحدهای استخراج و غیره باشد، ولی معمولاً فاقد هر گونه برج جذب گاز، واحدهای جذب سطحی گاز و غیره است.



اگر جریان خروجی از راکتور یک مخلوط دو فازی باشد، ترجیح می دهیم که از خود راکتور بعنوان یک بخش جداسازی استفاده کنیم (یا اینکه از یک flash drum بعد از راکتور استفاده شود).

سیستم جداسازی



سعی می کنیم جریان گازی خروجی راکتور را با آب خنک کن سرد کرده و به مایع تبدیل کنیم.

اگر مایع به دست آمده از **flash** عمدتاً حاوی اجزا واکنشگر باشد (نه محصولات)، آنها را به راکتور برمی

گردانیم (معادل یک چگالنده برگشتی).

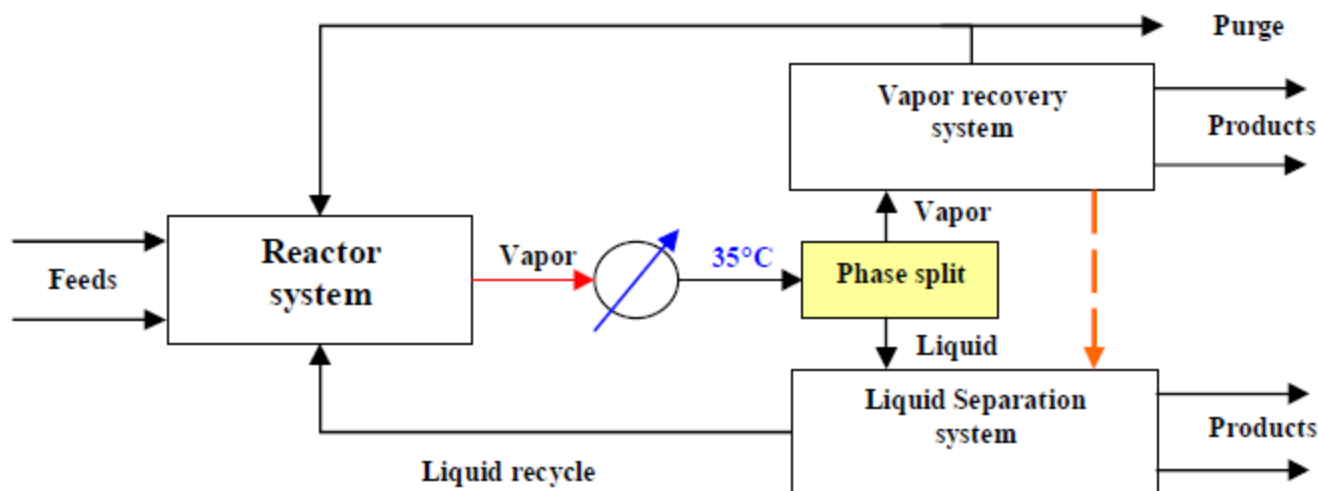
اگر این جریان مایع خروجی **flash** عمدتاً حاوی محصولات باشد، آن را به به سیستم بازیابی مایع می فرستیم.

گاز خروجی **flash** هم معمولاً به سیستم بازیابی گاز فرستاده می شود.

اگر جریان خروجی راکتور حاوی مقادیر اندکی گاز باشد، غالباً آن را مستقیم به سیستم جداسازی مایع می فرستیم.

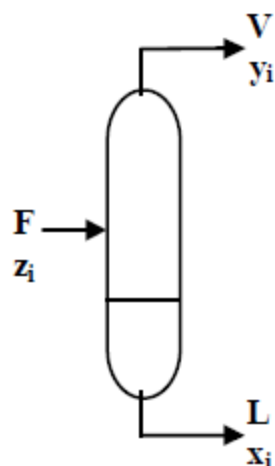
سیستم جداسازی

اگر جریان خروجی راکتور کاملاً در فاز گاز باشد، آن را توسط آب خنک کننده تا 100°F خنک کرده تا به یک سیستم جداسازی فاز برسیم یا اینکه جریان کاملاً به مایع تبدیل شود. همچنین احتمال اینکه جریان گازی خروجی از راکتور را مستقیماً به سیستم بازیابی گاز بفرستیم را نیز در نظر گرفته و بررسی می‌کنیم.



سیستم جداسازی

محاسبات تبخیر ناگهانی



$$F = V + L$$

موازنه جرم کلی:

$$F z_i = V y_i + L x_i$$

موازنه جرم جزئی:

$$y_i = K_i x_i$$

رابطه تعادل:

$$y_i = \frac{z_i}{\frac{V}{F} + (1 - \frac{V}{F})(\frac{1}{K_i})} \quad \text{if } K_i \gg 1 \Rightarrow V y_i = F z_i$$

یعنی در حالت $K_i \gg 1$ ، هر چه از جزء i در خوراک داشته باشیم، وارد فاز بخار می شود.

$$x_i = \frac{z_i}{(K_i - 1)\frac{V}{F} + 1} \quad \text{if } K_i \ll 1 \Rightarrow L x_i = F z_i$$

یعنی در حالت $K_i \ll 1$ ، هر چه از جزء i در خوراک داشته باشیم، وارد فاز مایع می شود.

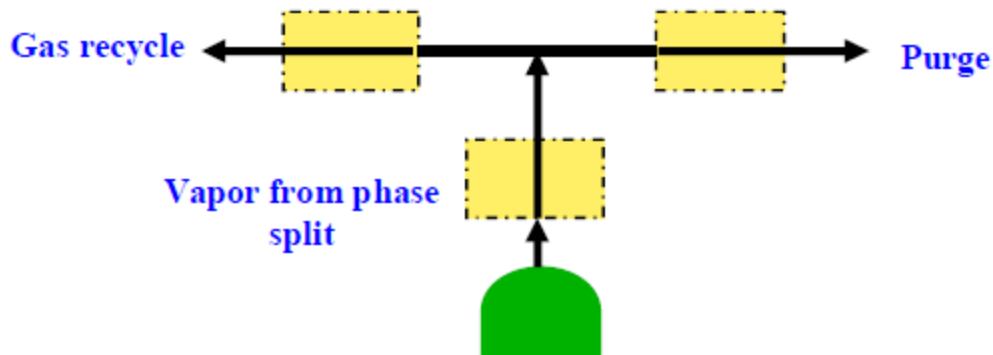


سیستم جداسازی

سیستم بازیابی گاز

بهترین مکان

ارزان ترین نوع سیستم بازیابی گاز



۱- روی جریان purge

۲- روی جریان برگشتی

۳- روی جریان بخار خروجی از flash

۴- هیچکدام، یعنی نیازی به سیستم بازیافت بخار نداریم.

سیستم جداسازی

سیستم بازیابی گاز

معمول ترین تکنیک های سیستم بازیابی گاز عبارتند از:

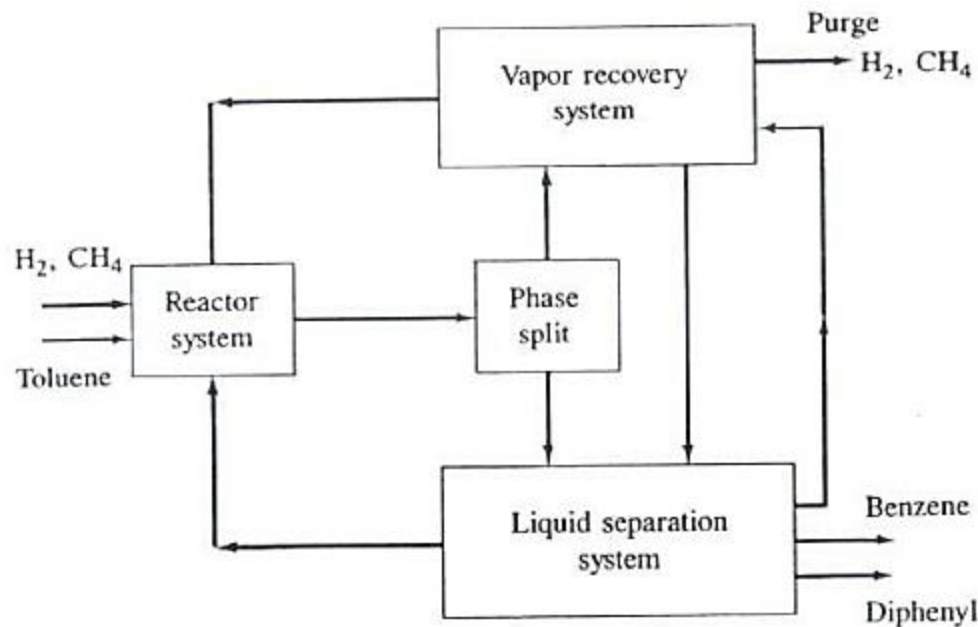
چگالش فشار بالا یا دما پایین یا هر دو

جذب

جذب سطحی

فرآیند جداسازی با غشایی

سیستم های واکنش





سیستم جداسازی

LIQUID SEPARATION SYSTEM

1. How should light ends be removed if they might contaminate the product?
2. What should be the destination of the light ends?
3. Do we recycle components that form azeotropes with the reactants, or do we split the azeotropes?
4. What separations can be made by distillation?
5. What sequence of columns do we use?
6. How should we accomplish separations if distillation is not feasible?

Light Ends

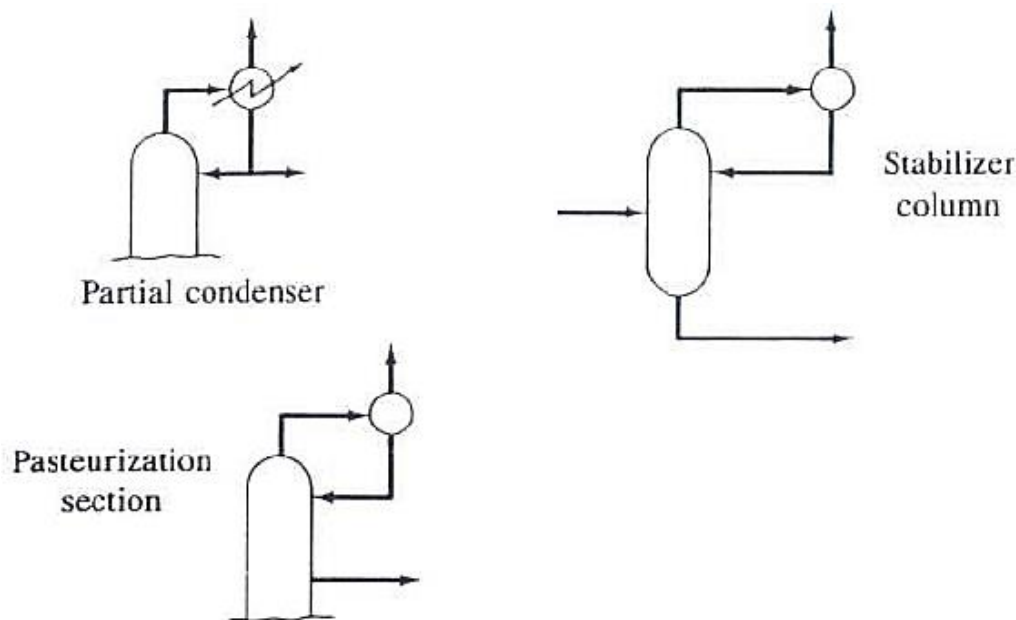
Some light ends will be dissolved in the liquid leaving the phase splitters and normally some will be dissolved in the liquid streams leaving the vapor recovery systems. If these light ends might contaminate the product, they must be removed.

سیستم جداسازی

ALTERNATIVES FOR LIGHT-ENDS REMOVAL. The choices we have for removing light ends are these:

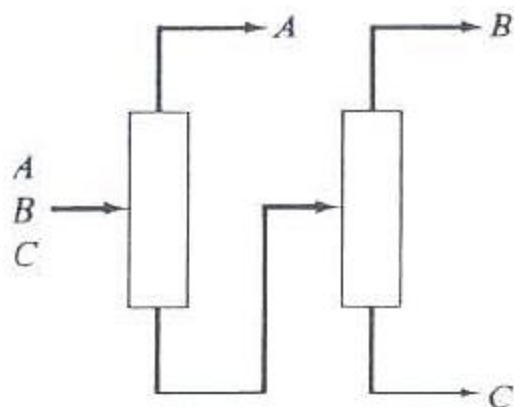
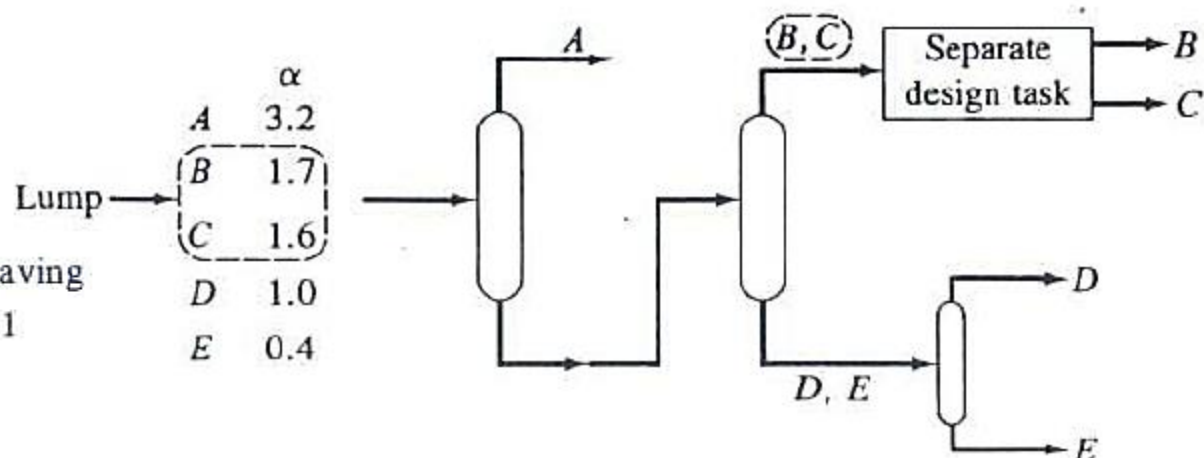
1. Drop the pressure or increase the temperature of a stream, and remove the light ends in a phase splitter.
2. Use a partial condenser on the product column.
3. Use a pasteurization section on the product column.
4. Use a stabilizer column before the product column.

Cost

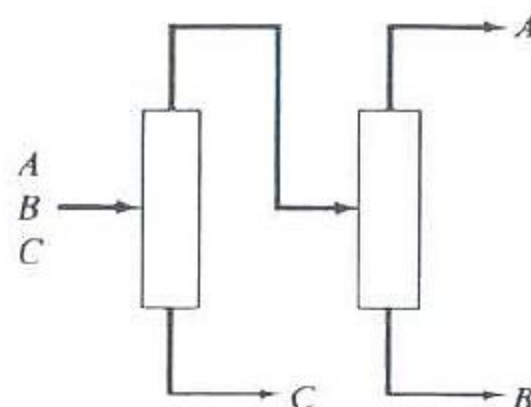


سیستم جداسازی

two neighboring components having
a relative volatility of less than 1.1



Direct



Indirect