

آموزش جامع شبیه سازی
فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار:

HYSYS



مدرس : مهدی رازی فر



مجتمع فنی عالی نوین پارسیان

اردیبهشت ۸۹



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

HYSYS

جلسه اول

- تعریف مدل سازی و شبیه سازی فرآیندها
- آشنایی با قابلیت های نرم افزار HYSYS
- معرفی محیط های اصلی و داخلی کار با نرم افزار HYSYS
- انتخاب روش ترمودینامیکی مناسب برای شبیه سازی فرآیندهای مختلف
- آشنایی با ساختار های مختلف Fluid Pkg
- آشنایی با طریقه ساختن فهرست مواد و تعیین معادلات ترمودینامیکی

مدل سازی و شبیه سازی فرآیند

– مقدمه

شبیه سازی یا مدل سازی ریاضی در واقع تبدیل کیفیت های فیزیکی و رابطه متقابل این کیفیت ها به کمیت های عددی و روابط ریاضی است . بدین ترتیب یک مدل ریاضی شامل متغیر ها و مجموعه معادلات وابسته به آنهاست که می تواند تأثیر متقابل این متغیر ها را ، همانطور که در دنیای واقعی اتفاق می افتد نشان دهد . از این رو یک مدل ریاضی وسیله بسیار مناسبی در دست تحلیل گری است که با توسل به آن می تواند رفتار یک سیستم را پیش از اعمال واقعی تغییرات پیش بینی کند . این خاصیت بخصوص در مورد سیستم هایی که امکان اعمال واقعی تغییرات در آنها محدود است ، بسیار مفید و کار آمد است . یکی از مثال های مشخص این نوع سیستم ها فرآیند های شیمیایی است . در این مورد بدلیل تعداد زیاد متغیر های عملیاتی و مخارج و مخاطرات زیاد تجربه کردن تغییر در هر یک از این متغیر ها ، وجود یک مدل ریاضی که بتواند امکان انجام تجربیات مختلف را به سادگی در اختیار تحلیل گر قرار دهد ، بسیار ارزشمند و قابل توجه است . بدین جهت شبیه سازی فرآیند ها همیشه مورد توجه بوده و فعالیت های گسترده ای در این مورد صورت گرفته است . از یک نظر شبیه سازی فرآیند ها در واقع اعمال معادلات موازنه جرم و انرژی به همراه شرایط تعادل فاز ها در یک سیستم است که معمولاً جهت سهولت کار به حالت پایای سیستم بسنده می شود. در این حالت با اعمال شرایط تعادل ترمو دینامیکی مجموعه معادلاتی بوجود خواهد آمد که در کنار معادلات متداول موازنه جرم و انرژی مجموعه معادلات همزمانی را تشکیل می دهند که در واقع به مدل ریاضی فرآیند تعبیر می شود. مدل ها غالباً به سه دسته تئوری ، نیمه تجربی و تجربی تقسیم می شوند . مدل های تئوری به طور کامل بر اساس قوانین تئوری استوارند مانند راکتور همزن دار که در صنعت کاربرد کمتری را دارد . مدل های نیمه تجربی بر پایه روابط تئوری و با استفاده از

نتایج اصلاحات تجربی بوجود می آیند. معادلات حالت از این دسته اند. مدل های تجربی صرفاً بر اساس روابط تجربی شکل گرفته اند. با اینکه محدود کردن شرایط تعادل به تعادل فاز ها و حذف واکنش های شیمیایی به میزان زیادی از پیچیدگی این مجموعه معادلات کلی می کاهد، با این همه حل این معادلات تنها با توسل به روش های پیچیده محاسبات عددی و بهره جویی از امکانات محاسبات کامپیوتری امکان پذیر است. بر نامه های شبیه سازی فرآیند در واقع بسته های نرم افزاری هستند که تشکیل و حل این معادلات را مقدور می سازند به عبارت دیگر شبیه سازی عبارت است از بکار گیری مدل ها و ایجاد ارتباط بین آنها برای توصیف عملی و علمی شرایط و حالات یک سیستم و تعیین خروجی های آن با توجه به داده های ورودی، لذا تکرار شبیه سازی در حالات و شرایط مختلف ورودی می تواند ما را در طراحی فرآیند یاری کند. آنچه مسلم است این دقت و میزان انحراف از نتایج تجربی است که ضامن اعتبار و اهمیت یک مدل یا یک شبیه ساز است. مهمترین موارد کاربرد شبیه سازها در بررسی عملکرد، رفع تنگناها و مشکلات فرآیندی، ایجاد تغییرات در شرایط عملیاتی و پیش بینی نتایج حاصل از آن می باشد در بعضی موارد می توان از شبیه سازها برای انجام و بررسی آزمایشات پیچیده که تکرار آنها در عمل مستلزم وقت و هزینه بسیار زیاد است سود برد. از دیگر موارد کاربرد شبیه سازی، افزایش مقیاس واحد های آزمایشگاهی می باشد که موجب حذف مرحله ساختن واحد نیمه صنعتی می گردد. از این روست که در سال های اخیر شبیه سازهای بسیاری در غالب بسته های نرم افزاری تهیه و به بازار عرضه شده اند. به کمک این نرم افزارها می توان حتی واحد های پیچیده ای چون پالایشگاه ها را به منظور طراحی، توسعه، بهبود عملیات و رفع تنگناها به راحتی در مدت زمان، بسیار کوتاهی شبیه سازی و بهینه سازی نمود. در این میان از نرم افزارهایی چون HYSYS, PRO/II, ASPEN, CHEMSHARE, HYSIM و HEXTRAN می توان نام برد که در دنیا کاربرد وسیعی دارند. مقایسه قابلیت های هر یک از نرم افزارهای

موجود و انتخاب نرم افزار مناسب ، به میزان وسعت اطلاعات کتابخانه ای و میزان دقت و فراوانی داده های ترموفیزیکی موجود در آن وابسته می باشد.

به طور کلی در شبیه سازی یک فرآیند شیمیایی مهمترین قسمت انتخاب مدل های خواص فیزیکی برای پیش بینی خواص فیزیکی و ترمودینامیکی سیستم است . زیرا خواص فیزیکی در محاسبات مربوط به تمامی مدل های توصیف کننده سیستم دخالت دارند و هر نوع خطای احتمالی در انتخاب یک مدل مناسب برای هر خاصیت فیزیکی موجب بروز خطا در نتایج شبیه سازی کل سیستم خواهد شد . در این میان مهمترین خواص مورد نیاز برای انجام محاسبات اصلی بر اساس یک معادله حالت بدست می آید . این خواص شامل حجم مولی ، آنتالپی ، انرژی آزاد گیبس و ضرایب فوگاسیته برای کلیه مواد موجود در فرآیند می گردند . به همین خاطر انتخاب یک معادله حالت مناسب برای توصیف رفتار ترمودینامیکی مواد موجود در فرآیند قسمت عمده ای از یک شبیه سازی را تشکیل می دهد. HYSYS دارای تعداد زیادی مدل های خواص فیزیکی است که هر کدام قادر به پیش بینی خواص یک سری از سیستم های مواد در شرایط عملیاتی مختلف می باشد . استفاده کننده با توجه به نوع و شرایط خاص مسئله خود باید یک یا تعدادی از این معادلات را انتخاب کند . به علاوه روش های خاصی جهت محاسبه بعضی از خواص نیز قابل انتخاب هستند .

– مدل سازی فرآیند

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

- شبیه سازی فرآیند

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

کاربرد های یک نرم افزار جامع شبیه سازی در مهندسی فرآیند

۱- مطالعه و بررسی گزینه های مختلف خط تولید از نظر افزایش ظرفیت واحد با هدف طراحی و ساخت واحد

۲- جلوگیری از اشتباهات پر خرج در طراحی و ساخت واحد

۳- استفاده از اطلاعات حاصل از شبیه سازی در طراحی دستگاه ها ، تجهیزات مکانیکی ، پایپینگ ، ابزار دقیق ، سیستم های برقی و سازه و ساختمان و قابلیت اتصال نرم افزارهای شبیه سازی به نرم افزارهای طراحی این سیستم ها و انتقال اطلاعات به آنها.

۴- پیش بینی عملکرد فرآیند در شرایط مختلف عملیاتی و تعیین نقطه بهینه عملکرد فرآیند از لحاظ کاهش هزینه های عملیاتی (مصرف آب ، انرژی و ...) ، تعیین حداکثر ظرفیت های تولید فرآیند ، بررسی صحت عملکرد های سیستم های کنترل موجود و تنظیم مجدد آنها و ...

۵- تبادل اطلاعات با نرم افزارهای دیگر به صورت دو طرفه ، توانایی دست ورزی در اطلاعات کتابخانه ای ، افزودن مدل های دلخواه کاربر و اجرای برنامه طبق روش دلخواه کاربر.

معرفی نرم افزار HYSYS

نرم افزار HYSYS به دلیل اینکه تمامی فرآیندهای نفت ، گاز و پتروشیمی و بسیاری از فرآیندهای موجود در صنایع تولیدی را تحت پوشش قرار می دهد و همچنین توانایی مدلسازی آن برای حالت های پویای (دینامیک) فرآیندها بسیار بالاست ، ساده و سریع می باشد ، لذا به عنوان یکی از نرم افزارهای جامع و پرکاربرد در زمینه مهندسی فرآیند مطرح است.

توانایی های نرم افزار HYSYS

- با HYSYS می توان عملیات مجتمع را به سرعت بهبود بخشید و از درستی کارکرد دستگاه ها اطمینان حاصل کرد. برای مثال در تشخیص نقص دستگاه ها مانند میزان جرم گرفتگی مبدل ها و پدیده طغیان در برج های تقطیر می توان از آن استفاده کرد.
- در این نرم افزار مجموعه بسیار جامعی از داده های کتابخانه ای از قبیل خواص مواد خالص ، معادلات حالات مختلف ، معادلات ضریب اکتیویته برای سیستم های ایده آل و غیر ایده آل وجود دارد.
- یک کتابخانه جامع ترکیبات خالص در HYSYS وجود دارد که قابلیت افزودن ترکیبات اختصاصی با استفاده از داده های شخصی و یا تهیه ترکیباتی با استفاده از گروه های UNIFAC را دارد. همچنین این نرم افزار قادر است تا برش های مختلف نفتی را بر اساس داده های تقطیر ASTM استاندارد به وجود آورد.
- توانایی انجام محاسبات سودمندی نظیر شرایط تشکیل هیدرات ، خواص نفتی و محاسبات اندازه یابی دستگاه ها (Sizing) را داراست.
- در HYSYS عملیات واحد های متعدد و گوناگونی مانند انواع مبدل های حرارتی ، تجهیزات دوار مانند پمپ ، کمپرسور ، جداکننده ها ، برج های تقطیر ، راکتورها ، عملیات جداسازی جامدات و عملیات منطقی موجود است. به علاوه عملیات واحد خاص را نیز می توان از طریق برنامه نویسی به این نرم افزار اضافه کرد.
- کلیه واکنش های شیمیایی مورد نیاز برای یک فرآیند یک بار نوشته شده و در طول برنامه هر جا که مورد نیاز باشند مورد استفاده قرار می گیرند.
- این امکان در HYSYS وجود دارد که یک برج تقطیر پیچیده را در یک نمودار جریان فرعی به صورت جداگانه حل کرده و سپس محاسبات را در نمودار جریان اصلی ادامه داد.
- براحتی می توان نتایج محاسبات را به نرم افزار های عمومی نظیر EXCEL و WORD منتقل کرد.
- PFD فرآیند را می توان با فرمت DXF برای استفاده در سایر برنامه ها تهیه کرد.

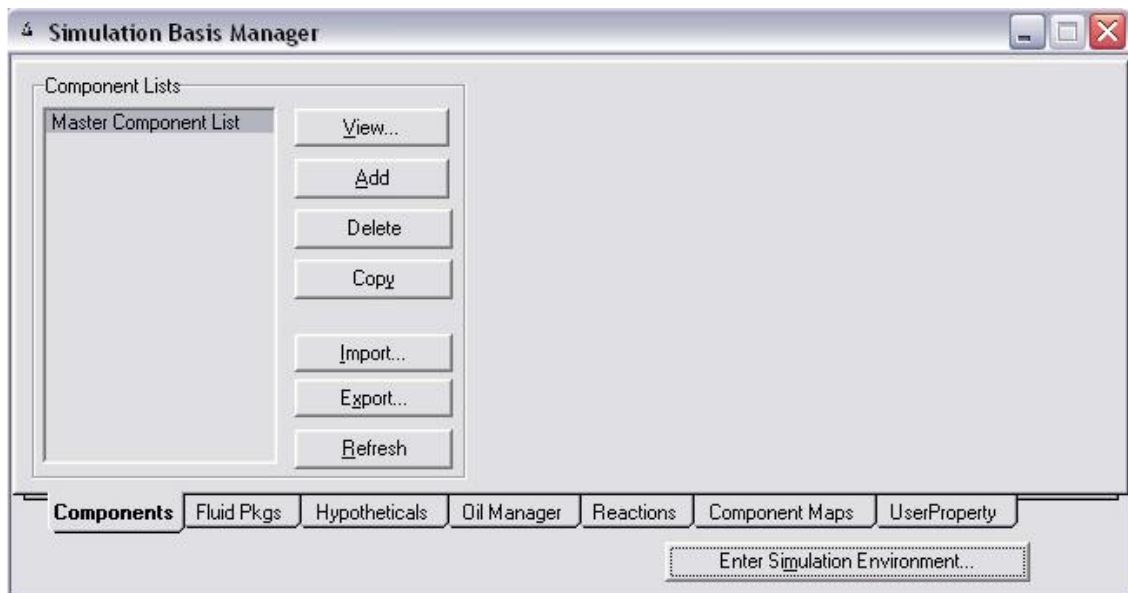
روش حل معادلات در HYSYS

حل دسته معادلات ریاضی (جبری ، دیفرانسیلی ، خطی یا غیر خطی) حاصل از موازنه های جرم و انرژی مربوط به مدلسازی تجهیزات مختلف فرآیندی همراه با معادلات ترمودینامیکی و سایر معادلات دیگر به روش حل همزمان (Equation Oriented or Simultaneous) صورت می گیرد. این نرم افزار جزو معدود نرم افزار هایی است که علاوه بر انجام محاسبات forward محاسبات backward را هم انجام می دهد. یعنی یک واحد را بدون داشتن اطلاعات ورودی و با داشتن اطلاعات خروجی می توان شبیه سازی کرد.

محیط های اصلی HYSYS

- محیط BASIS :

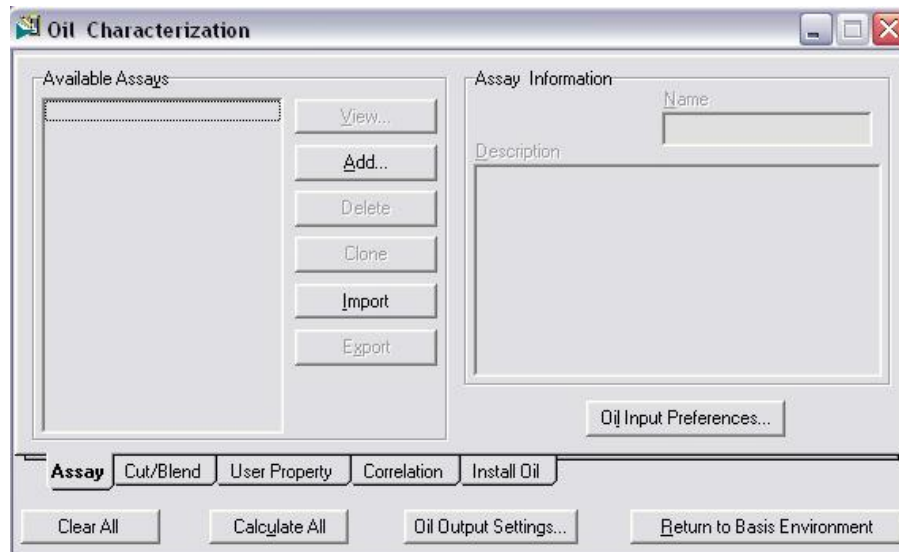
در ابتدای شروع شبیه سازی هر فرآیند کار را با محیط BASIS شروع می کنیم. در این قسمت معادله حالت ، مواد مورد استفاده و نوع واکنش های شیمیایی موجود در فرآیند مشخص می شود.



- محیط OIL CHARACTERIZATION :

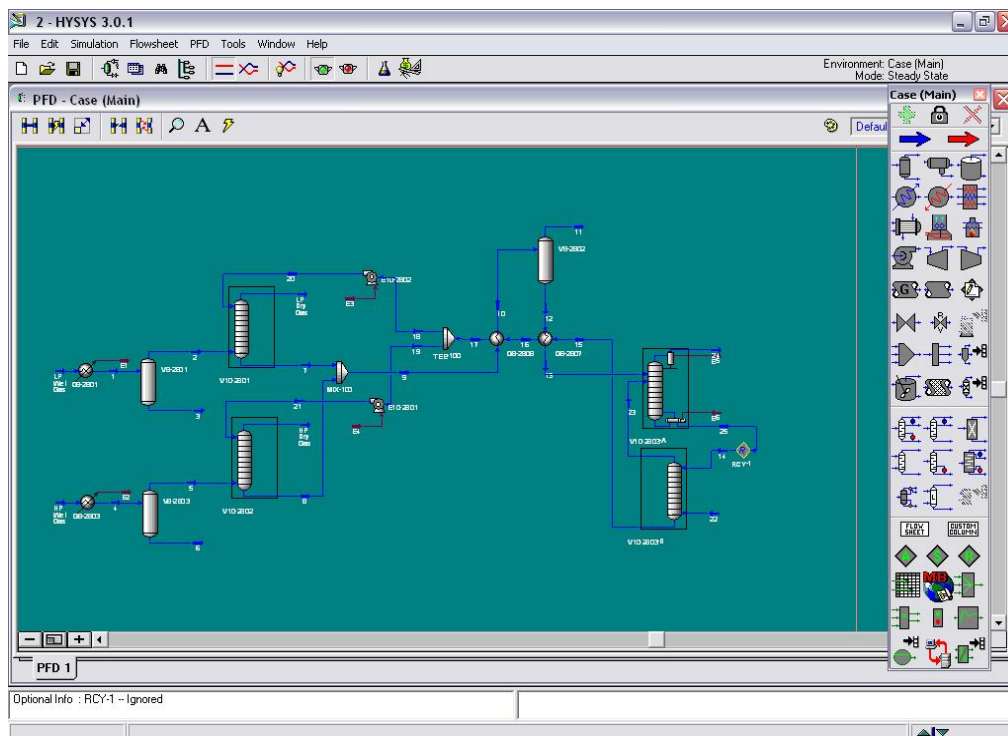
در این محیط اجزاء فرضی برش های مختلف نفتی از قبیل ویسکوزیته ، دانسیته ، دمای نقطه جوش و ... را بوجود می آوریم. نرم افزار HYSYS بر اساس خواص ذکر شده برای یک برش نفتی ، توانایی

تخمین خواص دیگر برش از قبیل ظرفیت حرارتی ، فشار بخار ، خواص بحرانی و کلیه خواص مورد نیاز دیگر را دارا می باشد.



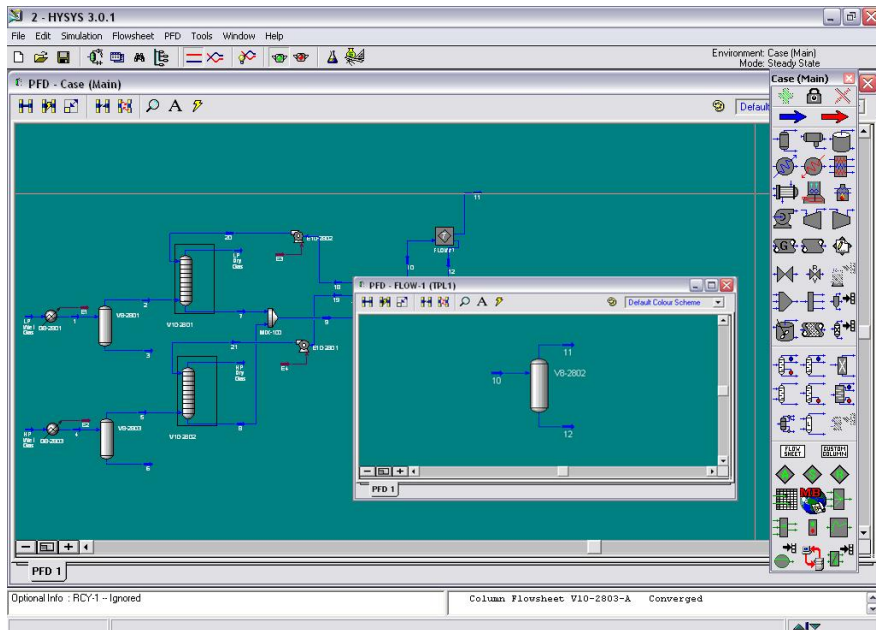
- محیط MAIN FLOW SHEET :

این محیط ، محیط اصلی طراحی می باشد که در این محیط به تعریف واحد های عملیاتی ، خطوط جریان و خطوط انرژی می پردازیم. هر MAIN FLOW SHEET می تواند شامل چندین SUB FLOW SHEET باشد.



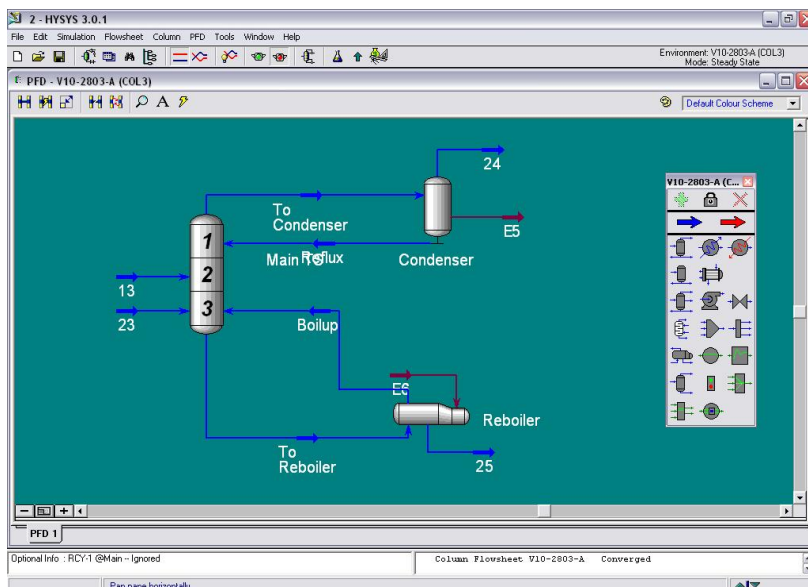
- محیط SUB FLOW SHEET :

از این محیط برای فرآیند های چند قسمتی استفاده می شود. به عنوان مثال اگر فرآیند ما شامل یک فرآیند اصلی برای تولید یک محصول خاص باشد و همچنین شامل تعدادی محصول غیر اصلی باشد که در چند فرآیند جانبی بدست می آیند ، استفاده می گردد.



- محیط COLUMN :

این محیط یک SUB FLOW SHEET مخصوص طراحی برج هاست. تمام تغییرات داخلی در برج ها در محیط اختصاصی برج صورت می گیرد.



عناصر داخلی HYSYS :

- PFD : تصویر فرآیند را نشان می دهد
- WORK BOOK : اطلاعات کلی خطوط و واحد های عملیاتی را نشان می دهد.

Name	LP Wet Gas	HP Wet Gas	1	2	3
Vapour Fraction	0.9992	0.9999	0.9886	1.0000	0.0000
Temperature [F]	135.0	135.0	100.7	100.7	100.7
Pressure [psia]	151.0	585.0	149.0	149.0	149.0
Molar Flow [lbmole/hr]	3513	9900	3513	3473	40.16
Mass Flow [lb/hr]	1.006e+005	1.904e+005	1.006e+005	9.985e+004	723.4
Liquid Volume Flow [barrel/day]	1.705e+004	3.954e+004	1.705e+004	1.700e+004	49.64
Heat Flow [Btu/hr]	-1.359e+008	-3.342e+008	-1.383e+008	-1.334e+008	-4.910e+006

Name	4	5	6	20	LP Dry Gas
Vapour Fraction	0.9960	1.0000	0.0000	0.0000	1.0000
Temperature [F]	80.07	80.07	80.07	149.5	114.9
Pressure [psia]	583.0	583.0	583.0	148.0	148.0
Molar Flow [lbmole/hr]	9900	9860	39.81	72.30	3449
Mass Flow [lb/hr]	1.904e+005	1.897e+005	717.2	1.074e+004	9.941e+004
Liquid Volume Flow [barrel/day]	3.954e+004	3.949e+004	49.21	652.0	1.696e+004

Material Streams | Compositions | Energy Streams | Unit Ops

FeederBlock_LP Wet Gas
G8-2801

Include Sub-Flowsheets
 Show Name Only
Number of Hidden Objects: 0

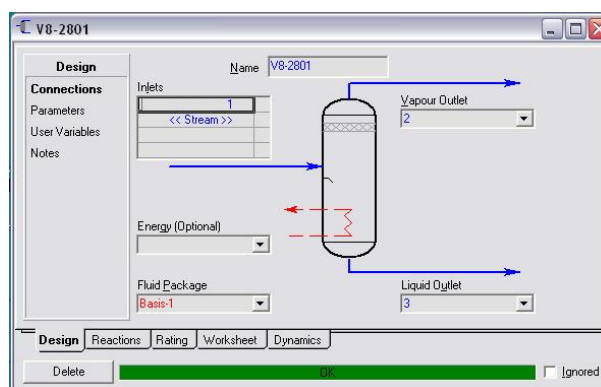
- PROPERTY VIEW پنجره چند صفحه ای جهت ورود اطلاعات مربوط به هر خط جریان یا واحد عملیاتی استفاده می شود.

Stream Name	7
Vapour / Phase Fraction	0.00000
Temperature [F]	107.83
Pressure [psia]	148.00
Molar Flow [lbmole/hr]	95.905
Mass Flow [lb/hr]	11182
Std Ideal Liq Vol Flow [barrel/day]	685.51
Molar Enthalpy [Btu/lbmole]	-2.846e+005
Molar Entropy [Btu/lbmole-F]	33.346
Heat Flow [Btu/hr]	-2.7295e+07
Liq Vol Flow @Std Cond [barrel/day]	683.47
Fluid Package	Basis-1

Worksheet | Attachments | Dynamics

Delete | Define from Other Stream...

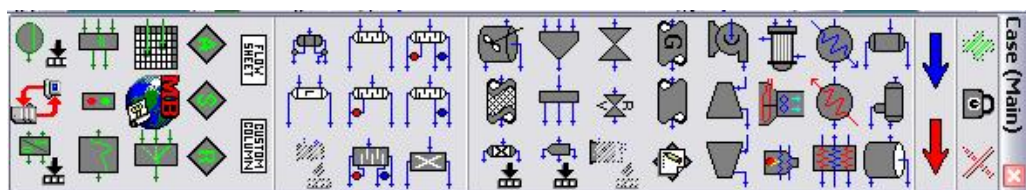
مربوط به خط جریان







مربوط به واحد عملیاتی

- OBJECT PALETTE : تخته شناور که با استفاده از آن می توان تجهیزات و خطوط مورد نیاز را

نصب کرد. که با کلید F4 فعال می شود.



معرفی آیکن ها

توضیحات	آیکن
جهت نمایش عنصر داخلی PFD استفاده می شود.	
جهت نمایش عنصر داخلی WORK BOOK استفاده می شود.	
جهت پیدا کردن تجهیزات و عناصر داخلی HYSYS بکار می رود.	
جهت برگشت به صفحه BASIS MANAGER استفاده می گردد.	

انتخاب روش ترمودینامیکی مناسب (PROPERTY PACKAGE)

انتخاب روش ترمودینامیکی مناسب یکی از مهمترین پارامترها در موفقیت شبیه سازی فرآیند است. روش های ترمودینامیکی موجود در HYSYS امکان تعیین خواص مخلوط های از محدوده سیستم های هیدروکربن های سبک تا سیستم های مخلوط های پیچیده برش های نفتی و سیستم های شیمیایی به شدت غیر ایده آل را فراهم می کنند. معادلات ترمودینامیکی می بایست قادر باشند تا خواص ترمودینامیکی و انتقالی سیستم را محاسبه کنند. خواص ترمودینامیکی عبارتند از:

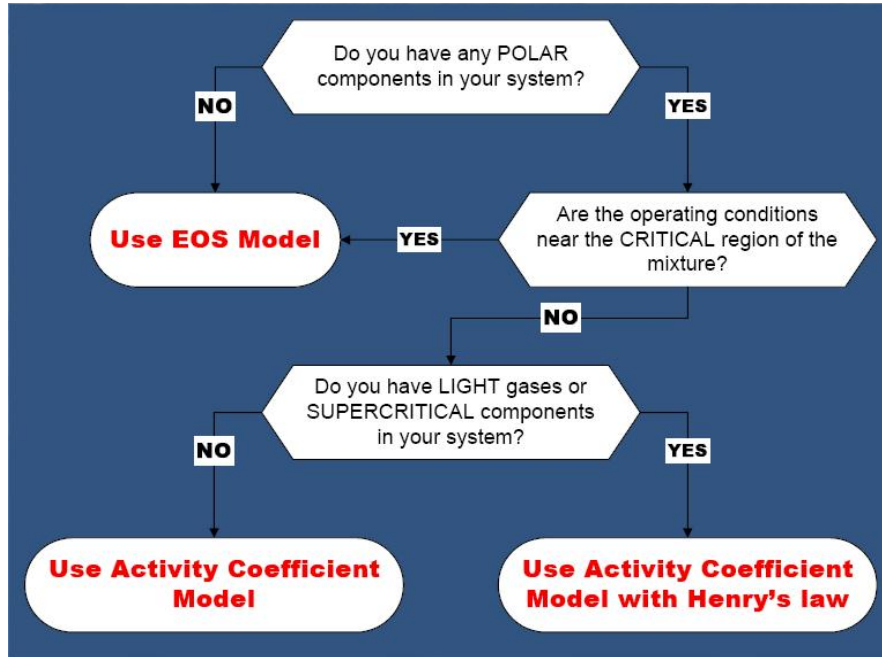
- ❖ ضریب فوگاسیته
- ❖ آنتالپی
- ❖ آنتروپی
- ❖ انرژی آزاد گیبس
- ❖ حجم

و خواص انتقالی عبارتند از:

- ❖ ویسکوزیته
- ❖ ضریب هدایت حرارتی
- ❖ ضریب نفوذ
- ❖ کشش سطحی

در HYSYS مدل های ترمودینامیکی مورد نظر در (PROPERTY PACKAGE) به شش صورت معادلات حالت ، معادلات مدل های اکتیویته (فعالیت) ، مدل های Chao Seader ، مدل های فشار بخار و مدل های متفرقه دسته بندی می شوند.

- معادلات حالت برای ترکیبات هیدروکربنی در بازه وسیعی از شرایط عملیاتی مناسب می باشند اما کاربرد آنها محدود به سیستم های غیر قطبی یا مواد مختصر قطبی است.
- برای سیستم های شیمیایی غیر ایده آل یا قطبی بهتر است از سیستم ترمودینامیکی دو گانه استفاده گردد. در این حالت یک معادله حالت برای پیش بینی ضرایب فوگاسیته فاز بخار (معمولاً سیستم IDEAL GAS ، یا معادلات حالت PR , RK , SRK) و یک مدل ضریب فعالیت برای فاز مایع انتخاب می شود.
- مدل های اکتیویته برای محدوده فشار های معمولی و برای مواقعی استفاده می شوند که رفتار سیستم به تغییرات فشار وابستگی زیادی را نشان دهد. در این حالت انتخاب این مدل ها برای شبیه سازی باید با دقت و احتیاط زیادی انجام شود و تنظیم پارامترهای این مدل ها باید بر اساس نمونه های مشاهده شده از داده های تجربی انجام شود و لذا این مدل ها را نمی توان برای شرایط عملیاتی آزمایش نشده استفاده کرد. برای سیستم هایی که فشار یا دمای عملیاتی بالاتر از دما یا فشار بحرانی یک یا چند جزء باشد بهتر است حتی در صورت وجود مواد قطبی از معادلات حالت اصلاح شده از جمله PRSV (PR اصلاح شده) که قوانین اختلاط در آن لحاظ شده استفاده کرد. شکل (۱) ، طریقه انتخاب روش ترمودینامیکی مناسب و جدول (۱) مقایسه کاربردی مدل های اکتیویته و معادلات حالت را نشان می دهد.



شکل (۱) : طریقه انتخاب روش ترمودینامیکی مناسب

جدول (۱) : مقایسه کاربردی مدل های اکتیویته و معادلات حالت

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

در این قسمت به یک مثال کاربردی در رابطه با استفاده معادلات حالت و اکتیویته در محاسبه ثابت

تعادل ترمودینامیکی محلول ها اشاره می شود:

محاسبه K با استفاده از معادلات حالت (EOS) :

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

محاسبه K با استفاده از معادلات اکتیویته :

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

در جدول (۲) به معرفی معادلات حالت و مدل های اکتیویته موجود در HYSYS اشاره شده است.

جدول (۲) : معادلات حالت و اکتیویته

معادله حالت	موارد استفاده
PR (Peng Robinson)	در مورد سیستم های آلی با پیچیدگی های زیاد ، در بازه های گسترده دمایی و فشاری ($P < 15000 \text{ psia}$, $T > -271 \text{ }^\circ\text{C}$) و حالت های یک ، دو و سه فازی قابل استفاده می باشد و پاسخ های دقیق تری را نسبت به سایر مدل ها در فاز گازی و تعادلات VLE می دهد.
Kabadi Danner	برای تعادل سیستم های آب-هیدروکربن (بخصوص در غلظت های پایین) انتخاب مناسبی است.
Lee Kesler Plocker	برای ترکیبات و مخلوط های غیر قطبی مناسب است.
SRK	نتایج آن مشابه معادله PR است ولی بازه عملیاتی آن بسیار محدودتر ($P < 5000 \text{ psia}$, $T > -143 \text{ }^\circ\text{C}$) می باشد و برای سیستم های غیر ایده آل مناسب نیست.
Sour PR	ترکیب مدل PR و مدل اسیدی Wilson's Api-Sour است که برای سیستم های آبی - اسیدی استفاده می شود.
Sour SRK	مشابه مدل Sour PR است ولی بازه عملیاتی آن محدودتر است.
Zud Kevitch Joffe	مدل تغییر یافته RK است که برای تعادل های بخار- مایع سیستم های هیدروکربنی و سیستم های شامل هیدروژن مناسب است.
مدل اکتیویته	موارد استفاده
Chein Null	به شما این امکان را می دهد که برای هر جفت از ترکیبات ، از بهترین مدل اکتیویته استفاده کنید.
Extended NRTL	در حالتی که نقطه جوش های دو ترکیب اختلاف زیادی باهم دارند و یا به حل همزمان معادلات VLE و LLE نیاز است و اختلاف زیادی بین دماهای نقطه جوش و غلظت وجود دارد ، مورد استفاده قرار می گیرد.
General NRTL	کاربرد آن همانند مدل Extended NRTL است لیکن امکان انتخاب ساختار معادله A و T را نیز به وجود می آورد.
Margules	معادله ای کاملاً تجربی بوده و برای تخمین سریع خواص (بخصوص در محاسبات پایداری) کاربرد دارد.
NRTL	برای نمایش رفتار فازی LLE ، VLE و VLLE مناسب می باشد.
UNIQUAC	کاربرد آن مشابه مدل NRTL بوده و تنها فرق آن استفاده از روش های پیچیده آماری برای محاسبات است.
Van Laar	این معادله برای بسیاری از سیستم ها ، بخصوص سیستم هایی که انحرافات مثبت و منفی زیادی از قانون راولت نشان می دهند ، مناسب است. لیکن به دلیل اینکه قادر به پیش بینی حالت ماکزیمم و مینیمم برای ضریب فعالیت نیست ، برای سیستم های شامل هیدروکربن های هالوژنه و الکل ها مناسب نمی باشد.
Wilson	برای سیستم های چند جزئی مناسب بوده و لکن نمی تواند برای سیستم های با دو فاز مایع استفاده گردد.

- مدل های Chao Seader

مدل قدیمی و شبه تجربی بوده و تنها اطلاعات تعادلی حاصل از آنها مورد استفاده HYSYS قرار می گیرد. این مدل برای هیدروکربن های سنگین در فشارهای پایین تر از 1500 psig و حدود دمایی 5000- فارنهایت استفاده می شود. مدل GraySon Streed نیز برای سیستم هایی که همزمان شامل هیدروکربن های سنگین و ترکیبهای پر هیدروژن می باشند ، توصیه می گردد.

- مدل های فشار بخار

مدل های فشار بخار می توانند برای مخلوط های ایده آل در فشارهای پایین استفاده شوند. مخلوط های ایده آل شامل سیستم های هیدروکربنی و مخلوط هایی نظیر کتون ها و الکل ها می باشند که در آنها رفتار فاز مایع نسبتاً ایده آل است. این مدل ها همچنین برای حدس اولیه سیستم های غیر ایده آل نیز بکار برده می شوند.

مدل فشار بخار	موارد استفاده
Antoine	برای سیستم های ایده آل فشار پایین کاربرد دارد.
Braun K10	برای سیستم های هیدروکربنی سنگین در فشار پایین کاربرد داشته و K-Value آن در نقطه جوش نرمال و فشار 10 psia محاسبه می شود.
Esso K	همانند مدل Braun K10 کاربرد داشته و فقط روش تخمین K-Value آن متفاوت است.

- مدل های متفرقه

مدل هایی که بر هیچکدام از گروه های بالا منطبق نباشند ، در این گروه جای می گیرند.

مدل های متفرقه	موارد استفاده
Amine	برای شبیه سازی واحد های جذب و دفع CO ₂ با آمین از این مدل استفاده می شود که شامل مدل های لی - متر و کنت - آیزنبرگ می باشد.
ASME Steam	فقط برای ترکیب H ₂ O کاربرد دارد و از جدول بخار ASME 1967 استفاده می کند.
NBS Steam	فقط برای آب استفاده شده و از جدول بخار NBS 1984 استفاده می کند.
MBWR	مدل تغییر یافته معادله B/W/R می باشد. این معادله حالت ۳۲ ترمی ، تنها برای مواد مشخص و در بازه عملیاتی معینی کاربرد دارد.

جداول زیر با توجه به نوع اطلاعات موجود و محدوده دما و فشار ، نوع معادله حالت مناسب برای شبیه سازی را ارائه می دهند.

جدول (۳) : مدل های اکتیویته مناسب برای حالت های مختلف محلول ها

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

- عموماً در مورد سیستم های آلی ، با پیچیدگی های زیبا ، معادله Peng-Robinson اصلاح شده توسط Hysys پاسخ های دقیق تر و پایدارتری نسبت به بقیه مدل ها در فاز گاز و تعادلات VLE می دهد.
- در مورد مواد الکترولیتی روش Electrolyte که ترکیبی از مدل های بروملی و ENRTL می باشد بهترین گزینه است. در این حالت جهت فاز گاز ، استفاده از SRK ارجحیت دارد.

جدول (۴): مدل های اکتیویته مناسب برای انجام محاسبات فاز بخار با مدل های ضریب اکتیویته

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

جدول (۵): معادله حالت پیشنهاد شده برای فرآیند های مختلف

نوع فرآیند

معادله حالت پیشنهاد شده

TEG Dehydration	PR
Sour Water	PR, Sour PR
Cryogenic Gas Processing	PR, PRSV
Air Separation	PR, PRSV
Atm Crude Towers	PR, PR Options, GS
Vacuum Towers	PR, PR Options, GS (<10 mm Hg), Braun K10, Esso K
Ethylene Towers	Lee Kesler Plocker
High H2 Systems	PR, ZJ or GS (see T/P limits)
Reservoir Systems	PR, PR Options
Steam Systems	Steam Package, CS or GS
Hydrate Inhibition	PR
Chemical systems	Activity Models, PRSV
HF Alkylation	PRSV, NRTL (Contact Hyprotech)
TEG Dehydration with Aromatics	PR (Contact Hyprotech)
Hydrocarbon systems where H2O solubility in HC is important	Kabadi Danner
Systems with select gases and light hydrocarbons	MBWR



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

HYSYS

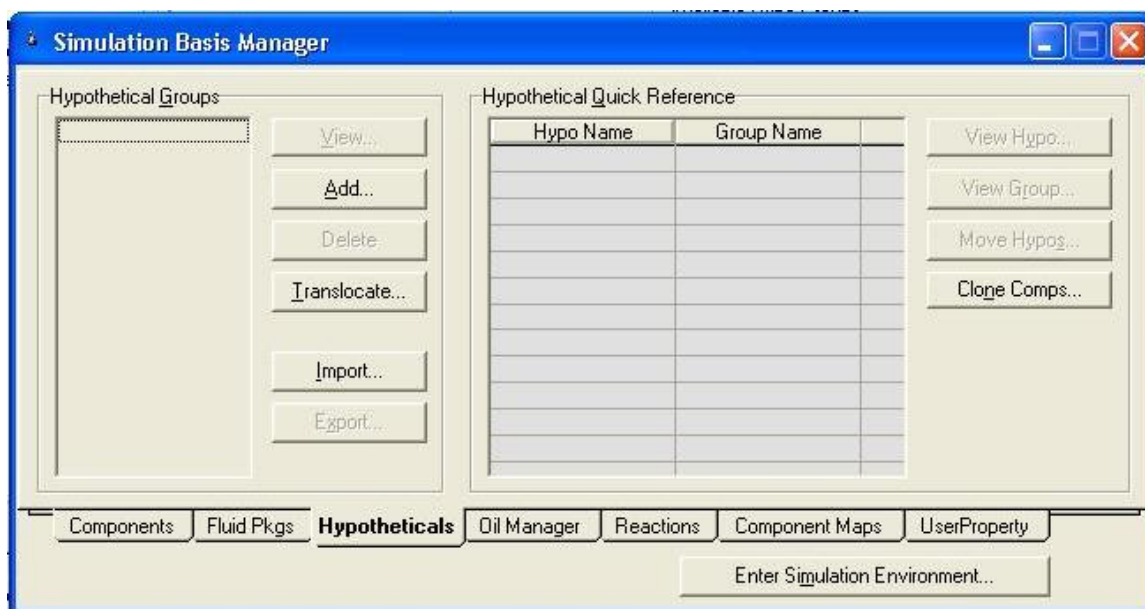
جلسه دوم

- روش ساختن ترکیبات جدید در HYSYS
- آشنایی با ابزارها و محیط شبیه سازی HYSYS و کار در محیط PFD
- شبیه سازی پمپ ها
- شبیه سازی کمپرسور ها
-

روش ساختن ترکیبات جدید در HYSYS

جهت ساختن ترکیبات جدید در HYSYS باید مطابق مسیر زیر وارد بخش Hypothetical شد:

Simulation Basis Manager \ Add Component \ Hypothetical \ Hypo Manager



در این صفحه دو ستون وجود دارد:

- **Hypothetical Groups**

در این قسمت گروه های فرضی ساخته شده لیست می شوند.

- **Hypothetical Quick References**

در این جدول تمام مواد فرضی ایجاد شده را به همراه گروه های مربوطه نشان می دهد.

برای ایجاد یک ترکیب جدید دکمه Add را کلیک کرده و وارد صفحه Tabular Hypothetical Input می شویم. در این صفحه می توانیم نام گروه را عوض کرده و خانواده هر گروه جدید را مشخص نماییم. اگر دو مشخصه از سه مشخصه جرم مولکولی، دانسیته و نقطه جوش نرمال را وارد نماییم HYSYS قادر خواهد بود خواص تقریبی ترکیب جدید را محاسبه نماید. اگر ترکیب جدید از جنس جامد باشد گزینه Add Solid و در غیر این صورت گزینه Add Hypo را انتخاب می نماییم.

اگر اطلاعات مربوط به ساختار ترکیب جدید را هم وارد نماییم با این کار دقت خواص تخمینی HYSYS بالاتر می رود. جهت تعریف ساختار مولکولی گزینه UNIFAC را انتخاب می کنیم.

با انتخاب گزینه Clone Library Components می توان هر یک از ترکیبات بانک اطلاعاتی HYSYS را به یک ترکیب فرضی تبدیل کنیم که پس از تبدیل شدن با علامت * مشخص می شود. در صورتیکه گزینه Replace all instances را انتخاب نماییم ماده ای که مورد تبدیل قرار می گیرد در کلیه Component lists ها با ترکیب فرضی جدید جایگزین می شود.

تمرین ۱:

ترکیبی مشابه با اتانول (C_2H_5OH) بسازید بطوریکه دارای نقطه جوش $172/85$ درجه فارنهایت و چگالی $0/789$ باشد. دما و فشار بحرانی را در دو حالت زیر مقایسه نمایید.

الف) با در نظر گرفتن ساختار مولکولی

ب) بدون در نظر گرفتن ساختار مولکولی

حالت	الف	ب
TC		
PC		

تمرین ۲:

متانی بسازید که جرم مولکولی آن ۱۷ باشد.

تعیین ضرایب اثر متقابل برای معادلات حالت و مدل های اکتیویته

جهت تعیین ضرایب اثر متقابل برای معادلات حالت و مدل های اکتیویته در HYSYS باید مطابق مسیر

زیر وارد بخش Binary Coefficients شد:

Fluid Package \ Binary Coefficients

اگر معادله ترمودینامیکی انتخاب شده از جنس معادله حالت باشد جهت تخمین ضرایب دوتایی نامعلوم دو گزینه زیر قابل انتخاب خواهد بود:

- Estimate HC-HC / Set none HC-HC to 0

با انتخاب این حالت ضرایب دوتایی نامعلوم بین ترکیبات هیدروکربنی محاسبه شده و ضرایب دوتایی بین ترکیبات غیر هیدروکربنی برابر صفر قرار داده می شود.

- Set all to 0

با انتخاب این گزینه کلیه ضرایب دوتایی نامعلوم برابر صفر قرار داده می شود.

و اگر معادله ترمودینامیکی انتخاب شده از جنس معادله فعالیت باشد جهت تخمین ضرایب دوتایی نامعلوم سه گزینه زیر قابل انتخاب خواهد بود:

- UNIFAC VLE

با انتخاب این حالت ضرایب دوتایی نامعلوم برای حالت تعادل بخار مایع از طریق محاسبات آماری روش UNIFAC محاسبه می شود.

- UNIFAC LLE

با انتخاب این حالت ضرایب دوتایی نامعلوم برای حالت تعادل مایع-مایع از طریق محاسبات آماری روش UNIFAC محاسبه می شود.

- Immiscible

با انتخاب این حالت ضرایب دوتایی نامعلوم بین ترکیبات مخلوط نشدنی محاسبه می شود.

پس از انتخاب یکی از روش های سه گانه جهت تخمین ضرایب دوتایی نامعلوم از گزینه **Un Known Only** و برای تخمین کلیه ضرایب دوتایی از گزینه **All Binaries** استفاده می کنیم.

محاسبه نقطه شبنم و نقطه حباب

جهت محاسبه نقطه شبنم و نقطه حباب در نرم افزار HYSYS به طریقه زیر عمل می نمایم:

محاسبه نقطه شبنم:

$$VF = 1, P = P \Rightarrow T = T_{Dew}$$

$$VF = 0, P = P \Rightarrow T = T_{Bubble}$$

تمرین ۳

ترکیب های زیر را در جریان خوراک 1 FEED با ترکیب درصد های مولی وارد کرده و سپس نرمال هپتان را با نرمال هپتان جدید با جرم مولکولی ۱۱۱ و دانسیته ۷۴۵/۳۸ جایگزین کرده و نقاط شبنم و حباب را برای این ترکیب جدید در فشار ۷۵۰۰ kpa بدست بیاورید. مقدار VF برای این جریان در فشار ۷۵۰۰ kpa و دمای ۱۰ درجه سانتیگراد چقدر است؟

FEED1	
N2	0.005
H2S	0.014
CO2	0.0204
C1	0.5636
C2	0.2582
C3	0.0144
iC4	0.0041
nC4	0.0075
iC5	0.0038
nC5	0.0037
C6	0.006
C7	0.0993
sum	1

DP @ 7500 kpa	
BP @ 7500 kpa	
VF @ 10 C , 7500 kpa	

نکات مهم مربوط به کار با Toolbar اصلی و اختصاصی PFD

۱. ایجاد PFD جدید (شکستن یک PFD به PFD های کوچکتر)

جهت ایجاد یک PFD جدید از منوی PFD گزینه Add PFD را انتخاب می کنیم. با انتخاب Check Box کپی برداری Clone From Existing PFD می توان از فهرست PFD to Clone یک PFD را برای کپی برداری انتخاب کنیم. جهت تغییر نام یا حذف یک PFD روی عنوان آن در پایین صفحه کلیک راست نموده و یکی از دو گزینه تغییر نام یا حذف را انتخاب می نماییم.

۲. Hide کردن اجزای یک PFD

جهت مخفی نمودن اجزاء صفحه PFD پس از انتخاب قسمت مورد نظر روی آن کلیک راست نموده و گزینه HIDE را انتخاب می نماییم. جهت برگشت به حالت قبل از منوی PFD گزینه Show Hidden Objects را انتخاب کرده و تغییرات لازم را اجرا می کنیم.

۳. نمایش جدول هر جریان در صفحه PFD

با کلیک راست روی شاخه جریان گزینه Show Table را انتخاب می نماییم. با دو بار کلیک روی جدول جریان صفحه تنظیمات جدول باز خواهد شد که می توان تغییرات لازم را در آن از نظر نوع اطلاعات مورد نظر برای نمایش اعمال کرد.

۴. نمایش Work Book کلیه جریان های Flow Sheet در صفحه PFD

با کلیک راست روی منطقه آزاد PFD و انتخاب گزینه Add Work Table جدول Work Book مربوط به مشخصات کلیه جریان های موجود در صفحه PFD نمایش داده خواهد شد.

۵. جایگزین کردن اسم جریان با یکی از مشخصه های آن

با کلیک راست روی منطقه آزاد PFD و انتخاب گزینه Choose Label Variable پنجره ای باز خواهد شد که می توان در آن تنظیم کرد تا کلیه جریان ها به جای نام خود با یکی از مشخصه های آن نمایش داده شوند.

۶. تقسیم Flow Sheet به چند قسمت (۲ یا ۴ قسمت)

با انتقال نشانگر ماوس به گوشه سمت راست پایین صفحه می توان صفحه Flow Sheet را به دو یا ۴ قسمت تقسیم نمود.

۷. عوض کردن Fluid Package در صفحه Flow Sheet

جهت تعویض معادله ترمودینامیکی (Fluid Package) شاخه جریان یا واحد عملیاتی ، روی شاخه جریان یا واحد عملیاتی مورد نظر کلیک راست کرده و گزینه Change Fluid Package را انتخاب می کنیم. در این صورت پنجره ای باز خواهد شد که در آن علاوه بر تعویض معادله ترمودینامیکی می بایست Transfer Basis را هم تعیین نماییم. در تعیین Transfer Basis چهار گزینه PH , VF-P VF-T , PT قابل انتخاب و انتقال خواهند بود. در صورت انتخاب هر کدام از این گزینه های چهارگانه دو خاصیت موجود مستقیماً به جریان بعد از Cutter انتقال پیدا کرده و خاصیت های دیگر از روی معادله ترمودینامیکی جدید محاسبه می شوند.

۸. جستجوی سریع یک Object در داخل یک PDF پیچیده و شلوغ

در فضای خالی صفحه PFD کلیک راست نموده و گزینه Select Object را انتخاب می کنیم. پس از انتخاب Object مورد نظر ، Object انتخابی در صفحه PFD چشمک می زند.

۹. ساختن SUB FLOWSHEET

در صفحه PFD قسمت مورد نظر از فرآیند را انتخاب کرده و روی آن کلیک راست می کنیم. و از مسیر Cut / Paste Objects ، گزینه Combine into Sub-Flowsheet را انتخاب می کنیم. در این صورت یک بلاک در صفحه PFD ایجاد خواهد شد که محتوی آن قسمت از فرآیند انتخاب شده می باشد. برای برگشت به حالت قبل روی بلاک کلیک راست کرده و از مسیر قبلی گزینه Move Contents to Owner Flowsheet را انتخاب می کنیم.

۱۰. پنهان کردن و نشان دادن Object ها

با کلیک راست کردن روی هر کدام از تجهیزات فرآیندی یا شاخه های جریان یا قسمتی از فرآیند انتخاب شده ، و انتخاب گزینه Hide ، Object مورد نظر پنهان خواهد شد. برای آشکار کردن Object های پنهان شده از منوی PFD گزینه Show Hidden Object را انتخاب می کنیم.

پمپ ها

برای انتقال سیالات غیر تراکم پذیر و افزایش فشار آنها بکار برده می شوند. با فرض معلوم بودن دو پارامتر از پارامترهای زیر HYSYS بقیه مجهول ها را محاسبه می کند.

- فشار خروجی یا افت فشار
- راندمان پمپ
- انرژی پمپ

راندمان پمپ $= Power_{real} / Power_{actual}$

$$Power_{actual} = Heat Flow_{Out} - Heat Flow_{in}$$

با انتخاب یا انتخاب نکردن گزینه on پمپ فعال یا غیر فعال خواهد شد. اگر این گزینه غیر فعال باشد جریان ورودی عیناً از خروجی پمپ خارج خواهد شد و اگر در این حالت برای دو جریان ورودی و خروجی دو فشار مختلف وارد کرده باشیم نرم افزار پیغام خطا خواهد داد.

از مهمترین نمودارهای پمپ ها ، نمودار Performance یک پمپ است. در این منحنی هد پمپ بر حسب دبی در سرعت پروانه های مختلف پمپ رسم شده است. اغلب همراه با منحنی Performance منحنی بازده وجود دارد که کاربر را در انتخاب بهترین پمپ برای آن محدوده دبی و هد ، هدایت می کند. در HYSYS برای تعیین منحنی مشخصه پمپ از گزینه Curve استفاده می شود. با فعال بودن گزینه Activate Curves ، HYSYS افزایش فشار را برای شدت جریان داده شده محاسبه می کند. برای تعیین منحنی مشخصه پمپ می بایست ضرایب معادله درجه چهارمی را که معمولاً برای هر پمپی

ارائه می شود وارد کرد. در این حالت برای جلوگیری از بروز خطا ، افت فشار یا فشار جریان خروجی پمپ را نباید داده باشیم.

کمپرسور

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

انبساط دهنده Expander

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

در HYSYS دو نوع کمپرسور مورد استفاده از نظر Centrifugal یا Reciprocating (رفت و برگشتی) بودن باید انتخاب شود. از دو بازدهی آدیاباتیک و پلی تروپیک تنها یکی باید وارد شود. HYSYS دیگری را خود محاسبه می کند.

بازدهی پلی تروپیک برابر است با :

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

که در آن n ضریب پلی تروپیک است. و بازده آدیاباتیک برابر خواهد بود با :

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

که در آن h_{out}^S آنتالپی مولی جریان خروجی با فرض فشردگی آیزنتروپیک است.

در صورت عدم استفاده از منحنی مشخصه جهت حل کمپرسور ، چهار مورد از ۵ مورد زیر باید وارد شوند.

- دمای ورودی
- فشار ورودی
- دمای خروجی
- فشار خروجی
- بازده

هنگامی که برای سرعت های مختلف گردش کمپرسور ، منحنی های متفاوتی را ارائه می دهیم ، سرعت نیز به عنوان یک متغیر وابسته در مسئله ما وارد می شود. با تعیین سرعت متناظر هر منحنی ، HYSYS متناسب با سرعت داده شده منحنی مناسب را درون یابی کرده و مسئله را حل می کند.

در صورت استفاده از منحنی علاوه بر ترکیب و دمای جریان ورودی حداقل یکی از اطلاعات زیر باید معین شوند:

- فشار و دبی ورودی
- فشار ورودی و خروجی
- فشار ورودی و شدت جریان انرژی
- فشار ورودی و بازده

تمرین ۴

با استفاده از مدل منحنی تغییرات بازده آدیاباتیک برای کمپرسور سانتریفیوژ (جدول ۲) شبیه سازی زیر را با انتخاب معادله حالت مناسب برای خوراک با مشخصات جدول ۱ انجام دهید.

FEED 2	
T	69 °C
P	120 kpa
Molar Flow	500 kgmole/hr
H2O	0.2375
H2S	0.0757
CO2	0.0607
C1	0.04
C2	0.1072
C3	0.2522
i-C4	0.0765
n-C4	0.1502

جدول ۱

Flow (m3/hr)	Head (m)	% Efficiency
7812	7680	69.2
8388	7575	75
8964	7841	72.48
9504	7347	72.58
10080	7153	73.08
10620	6717	72.46
11196	5858	69.39
11484	4957	62.91

جدول ۲

مطلوب است اطلاعات جدول زیر برای خروجی کمپرسور :

Adiabatic Head (m)	
Adiabatic Efficiency	
Duty (KW)	



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

HYSYS

جلسه سوم

- گزارش گیری از شبیه سازی
- آشنایی با تجهیزات انتقال حرارت در HYSYS
- شبیه سازی کولرها /
- شبیه سازی مبدل های حرارتی
-

تهیه گزارش از کار شبیه سازی

در HYSYS عمل پرینت به سه صورت زیر انجام می شود:

۱. با استفاده از منوی File و انتخاب گزینه Print

۲. کلیک راست بر روی نوار عنوان پنجره های مشخصات و انتخاب گزینه Print Data Sheet

۳. با استفاده از منوی Tools و انتخاب گزینه Report Manager

در HYSYS تهیه پرینت از PDF به دو صورت زیر انجام می شود:

۱. با استفاده از منوی File و انتخاب گزینه Print

۲. کلیک راست بر روی فضای خالی PDF و انتخاب گزینه Print PDF

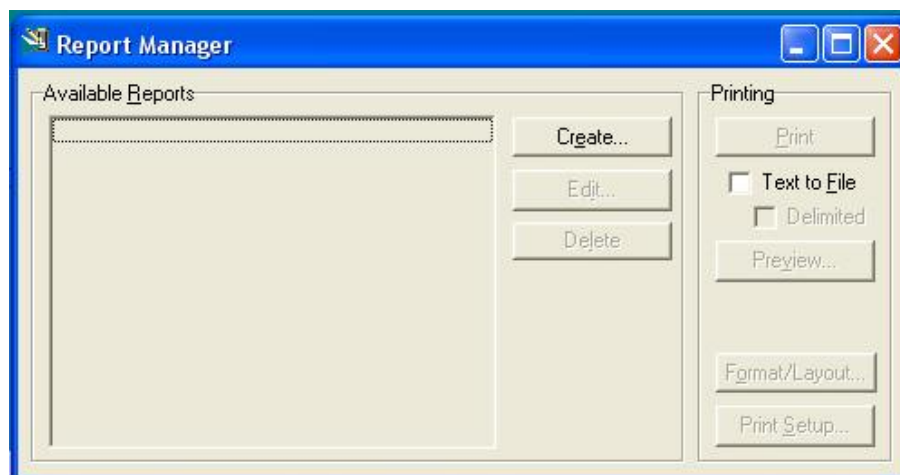
در HYSYS تهیه پرینت از نمودارها به صورت زیر انجام می شود:

۱. کلیک راست بر روی نمودار و انتخاب گزینه Print Plot

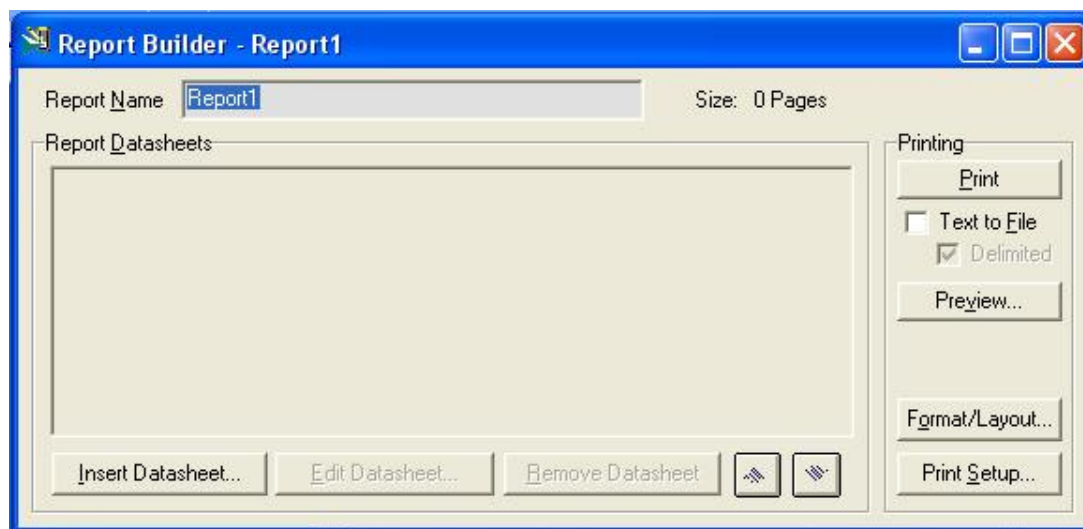
در تمامی موارد بالا با انتخاب گزینه Print Setup می توان در پنجره مربوطه کلیه مشخصه های پرینت و پرینتر را تنظیم کرد.

تهیه گزارش

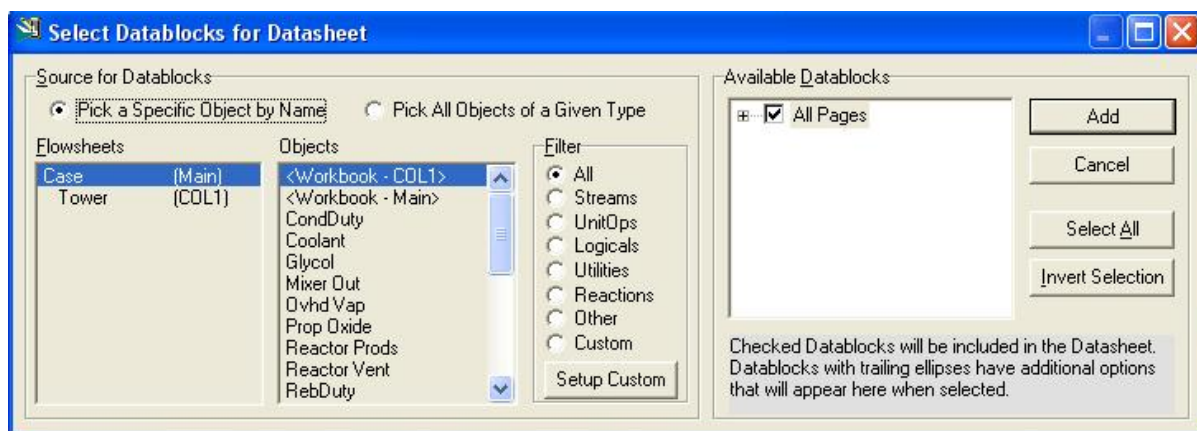
با استفاده از قابلیت تهیه گزارش در HYSYS می توان اجزاء مختلف شبیه سازی را انتخاب کرده و گزارش مورد نظر را تهیه کرد. بدین منظور باید از منوی Tools ، گزینه Report را انتخاب کرد. با این کار وارد پنجره Report Manager می شویم.



در قسمت Available Report کلیه گزارش هایی که قبلاً تهیه شده اند لیست می شوند. برای ایجاد یک گزارش با زدن دکمه Create در پنجره Report Manager وارد پنجره Report Builder می شویم.



در این پنجره جهت تهیه گزارش برای انتخاب لایه ها و آیتم های مختلف از طریق فشردن کلید Insert Datasheet وارد پنجره Select Datablocks for Datasheet می شویم:



برای اضافه کردن هر آیتم به فهرست Report باید دوباره به پنجره Report Builder برگشته و عملیات قبلی را تکرار کرد.

اگر بخواهیم به جای آرم Hyprotech آرم شرکت مورد نظر ما در گزارش چاپ شود، باید از طریق آدرس زیر اقدام کرد:

Tools \ Preferences \ Reports \ Company info

تجهیزات انتقال حرارت

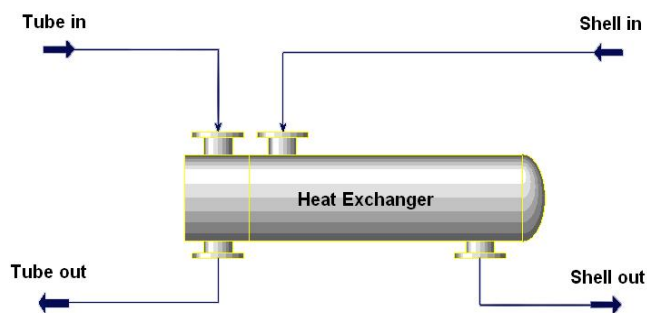
در نرم افزار HYSYS تجهیزات انتقال حرارت به دو دسته زیر تقسیم می شوند:

- دسته اول شامل Heater و Cooler می شوند که هدف در آن برآورد میزان انرژی لازم برای تغییر دمای جریان های مهم فرآیندی است و ساختار مبدل مورد بحث قرار نمی گیرد.
- دسته دوم شامل مبدل های فرآیندی ، مبدل های هوایی و کوره ها می شوند که برای شبیه سازی های دقیق تر مورد استفاده واقع می شوند.

۱. Heater / Cooler

در Heater جریان ورودی به واحد تا حد معینی گرم شده و سپس از واحد خارج می گردد و در Cooler عکس این عمل اتفاق می افتد. تفاوت انرژی بین دو جریان ورودی و خروجی توسط یک جریان مستقل انرژی تأمین می گردد. تنها پارامتر های مورد نیاز برای این واحد ها افت فشار سیستم و شار حرارتی می باشد. استفاده از علامت منفی برای شار حرارتی Heater باعث می شود که عملکرد آن مشابه Cooler شود.

۲. مبدل حرارتی (Heat Exchanger)



مبدل های حرارتی دارای دو جریان فرآیندی سرد و گرم می باشند که در اثر تبادل حرارت بین دو فاز جریان گرم و جریان سرد ، آنتالپی سیال گرم کاهش و در مقابل آنتالپی جریان سرد افزایش می یابد. موازنه انرژی برای مبدل های حرارتی به صورت زیر می باشد :

$$BE = [M_{Cold} (H_{Out} - H_{In})_{Cold} - Q_{Leak}] - [M_{Hot} (H_{Out} - H_{In})_{Hot} - Q_{Loss}]$$

که معمولاً در مبدل ها BE (Balance Error) برابر صفر در نظر گرفته می شود.

Q_{loss} : انرژی هدر رفته در سیستم گرم که منجر به کاهش دما می شود.

Q_{leak} : انرژی هدر رفته در سیستم سرد که منجر به افزایش دما می شود.

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

شار حرارتی مبدل نیز به شکل مقابل محاسبه می شود:

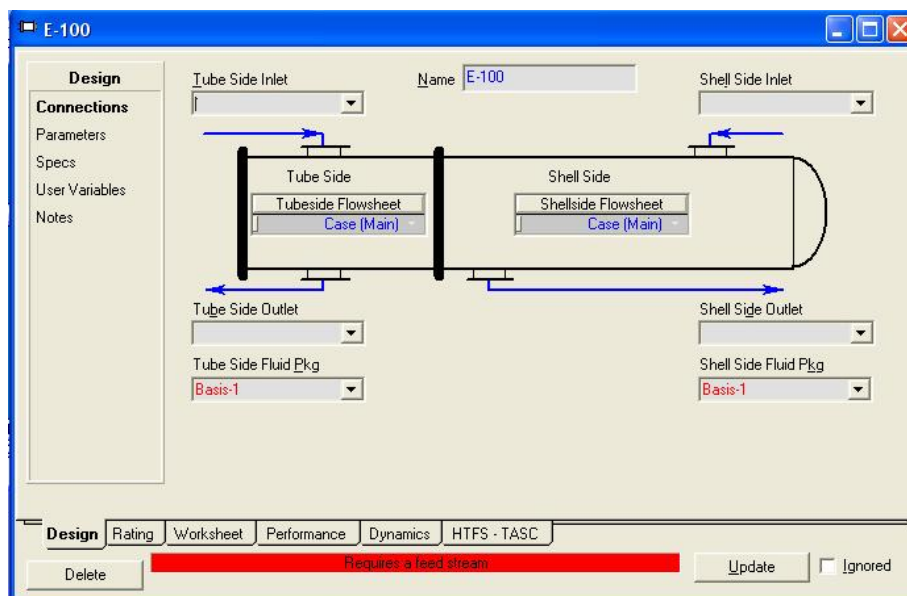
U : ضریب انتقال حرارت کلی

A : سطح متوسط کل برای انتقال حرارت

ΔT_{LM} : میانگین لگاریتمی اختلاف دما

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

اتصال جریان های ورودی و خروجی و تعیین نوع معادله ترمودینامیکی مناسب برای سیال سمت پوسته و لوله در صفحه Connections معین می شوند و تعیین افت فشار سمت لوله و پوسته و انتخاب روش انجام محاسبات ، در صفحه Parameters مشخص می گردد.



روش های انجام محاسبات در مبدل های حرارتی

در HYSYS محاسبات مبدل ها کلاً به دو صورت Design و Rating صورت می پذیرد. در حالت Design با معلوم بودن اطلاعات ورودی و خروجی مبدل سطح انتقال حرارت محاسبه می شود. ولی در حالت Rating خروجی های مبدلی را که اطلاعات طراحی آن موجود است ، با توجه به تغییرات در

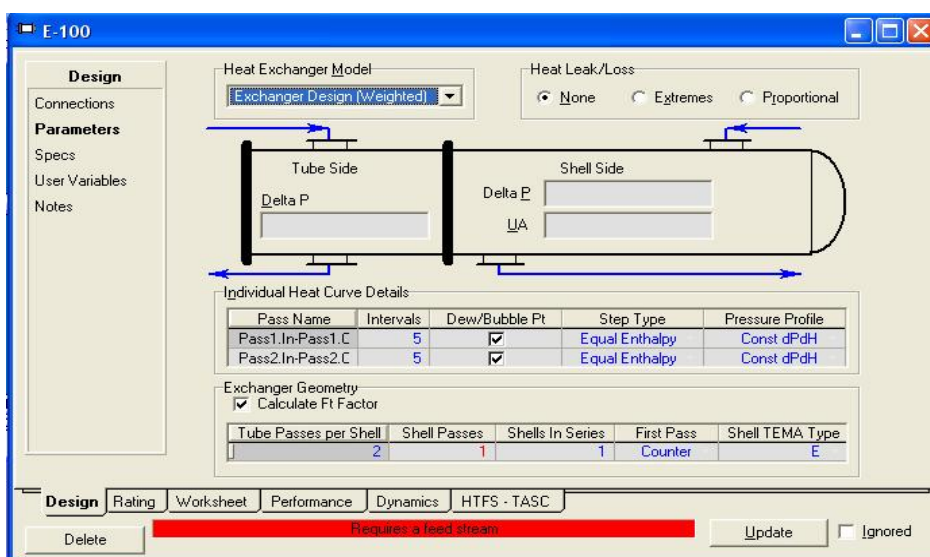
مشخصات جریان های ورودی و/یا جریان های خروجی و تغییر مشخصات هندسه و ژئومتری مبدل بررسی می کنیم.

یادآوری

- **Design** : به طراحی یک مبدل حرارتی جدید که شامل طراحی مکانیکی و طراحی حرارتی می شود Design اطلاق می شود.
- **Rating** : به بررسی اینکه یک مبدل از پیش ساخته شده برای یک کاربرد جدید مناسب است یا نه Rating اطلاق می شود.
- **Simulation** : به محاسبه نتایج خروجی جریان ها از روی اطلاعات جریان ورودی و سطح انتقال حرارت معلوم Simulation اطلاق می شود.

۱. روش Exchanger Design-Weighted

این مدل یک مدل بسیار خوب برای مسائل با منحنی حرارتی غیر خطی نظیر مسائلی با تغییر فاز در قسمت پوسته یا لوله یا هر دو می باشد. در این روش منحنی حرارتی مبدل به تعدادی بازه (interval) شکسته می شود و در هر بازه ضرایب LMTD و UA برای همان بازه محاسبه شده و استفاده می شود و برای محاسبه UA کل مبدل ، UA در تمامی این بازه ها جمع می شوند.



در این روش با افزایش تعداد بازه ها دقت انجام محاسبات بالاتر می رود. این روش فقط برای مبدل های ناهمسو و متقابل استفاده می گردد و بیشتر در مبدل های حرارتی دارای تغییر فاز مورد استفاده قرار می گیرد. از معایب این مدل اینست که اثر شکل هندسی مبدل روی محاسبه ضریب تصحیح F_t در نظر گرفته نشده است. در این مدل امکان تعریف ضریب تصحیح F_t و اتلاف حرارتی به صورت تجربی موجود می باشد.

قسمت **Heat Leak (Loss of cold side duty to leakage) / Heat Loss (Loss of hot side duty to leakage)**

این بخش برای تعیین تلفات حرارتی از مبدل به کار می رود. با انتخاب گزینه None نرم افزار از تلفات حرارتی بخش سرد و گرم صرف نظر می کند. با انتخاب گزینه Extremes تلفات حرارتی تنها در قسمت هایی که بالاترین دما و پایین ترین دما را دارند در نظر گرفته می شود و از تلفات حرارتی در سایر بخش های سیستم صرف نظر می گردد. با انتخاب گزینه Proportional در کلیه بازه های حرارتی و دمایی در نظر گرفته شده برای منحنی حرارتی مبدل ، تلفات حرارتی جداگانه محاسبه و اعمال می شود. منحنی حرارتی مبدل در قسمت Performance / Plot قابل ملاحظه می باشد.

قسمت **Individual Heat Curve Details**

این بخش شامل قسمت های زیر می باشد که عبارتند از :

- در قسمت Interval تعداد بازه هایی که باید در منحنی حرارتی در نظر گرفته شوند تعیین می گردد.
- در قسمت Dew / Bubble Point معین می کند که آیا منحنی حرارتی باید شامل نقاط حباب و شبنم باشد یا نه؟
- در قسمت Step Type نحوه رسم بازه ها به یکی از سه صورت بازه های دمایی مساوی (Equal Temperature) ، بازه های آنتالپی مساوی (Equal Enthalpy) و یا به صورت اتوماتیک با کمترین خطا (Auto Intervals) (حداقل تعداد بازه ها با بیشترین هم خوانی با منحنی) ، معین می شوند.

• در قسمت Pressure Profile نوع تغییرات فشاری را که می بایست توسط نرم افزار حین محاسبات سعی و خطا استفاده گردد ، انتخاب می شود :

- **Constant dP , dH** : در این حالت dP و dH حین محاسبات ثابت فرض می شوند.
- **Constant dP , dUA** : در این حالت dP و dUA حین محاسبات ثابت فرض می شوند.
- **Constant dP , dA** : در این حالت dP و dA حین محاسبات ثابت فرض می شوند.
- **Inlet Pressure** : در این حالت فشار حین محاسبات ثابت و برابر فشار ورودی فرض می شود.
- **Outlet Pressure** : در این حالت فشار حین محاسبات ثابت و برابر فشار خروجی فرض می شود.

۲. حالت Exchanger Design-End Point

در این حالت برای مبدل فقط یک LMTD و یک UA با توجه به شرایط ورودی ها و خروجی های مبدل محاسبه می شوند. از این روش برای حل مسائل ساده که مدل منحنی حرارتی آن برای هر دو قسمت پوسته و لوله خطی فرض می شود و تغییر فازی وجود ندارد و می توان مقدار CP را نسبتاً ثابت فرض کرد استفاده می گردد.

۳. حالت Steady State Rating

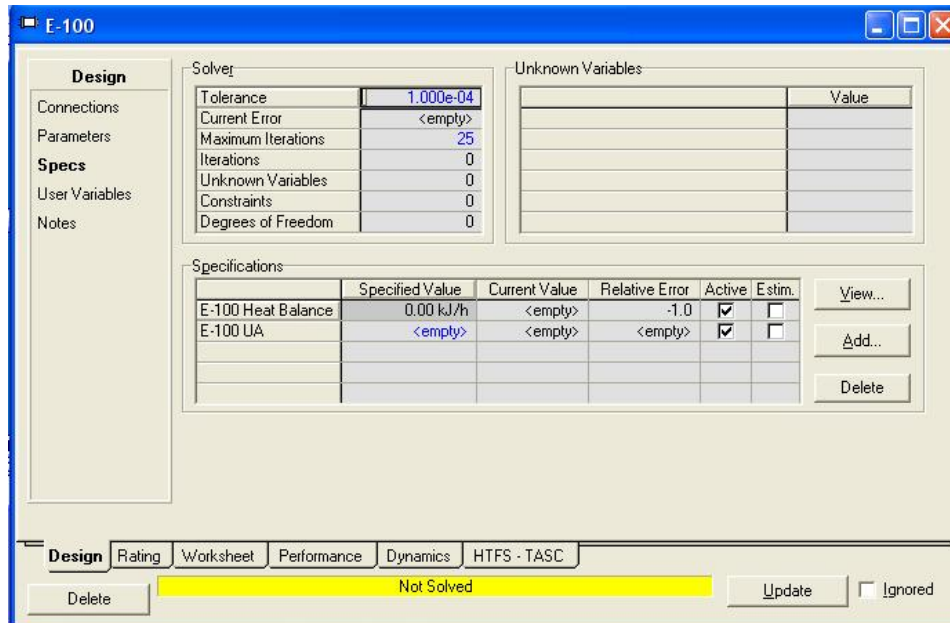
این حالت دقیقاً مشابه حالت End Point است با این تفاوت که در این حالت پارامتر UA با در نظر گرفتن ساختار دقیق مبدل که در قسمت Sizing وارد شده است ، محاسبه می گردد. از این روش برای حل مسائل ساده که مدل منحنی حرارتی مبدل خطی یا نزدیک به خط باشد استفاده می گردد.

۴. حالت Dynamic Rating

از این حالت در شبیه سازی دینامیکی مبدل ها استفاده می شود.

صفحه مشخصات Spec

در صورتیکه اطلاعات ورودی مسئله کمتر از تعداد متغیر ها باشد ، بایستی با تعریف معادلات اضافی (Specs) درجه آزادی سیستم را به صفر رساند.



در قسمت Unknown Variable متغیر های مجهول و مقادیر محاسبه شده آنها نمایش داده شده است. در قسمت Solver تنظیمات اساسی جهت حل مسئله قرار دارد:

- **Tolerance** : میزان خطای مجاز محاسبات را نشان می دهد.
- **Current Error** : خطای هر بار محاسبه HYSYS را نشان می دهد که اگر مقدار آن در طول محاسبات کمتر از مقدار Tolerance شد محاسبات متوقف می شود.
- **Iteration** : تعداد دفعات محاسبات را نشان می دهد.
- **Degree of Freedom** : درجه آزادی سیستم را نشان می دهد که اگر غیر صفر بود باید با تعریف شرایط جدید در Spec آنرا برابر صفر کرد. لازم به ذکر است که شرط لازم برای حل شدن مبدل اینست که درجه آزادی برابر صفر شود ولی شرط کافی نیست که در اینصورت برای حل مبدل باید اطلاعات دیگری وارد شود.

نکته

اگر مقدار درجه آزادی سیستم مثبت شود به این مفهوم است که به همان تعداد Spec برای حل سیستم نیاز داریم و اگر مقدار آن منفی شود به این معنی است که به همان تعداد از Spec های غیر لازم باید از سیستم حذف شود. در قسمت Specification مشخصات سیستم و معادلات اضافه تعریف شده به سیستم به همراه مقادیر آنها و خطای محاسباتی آنها نشان داده می شود. در صورتیکه گزینه Active برای یکی از مشخصه های Spec فعال شود HYSYS محاسبات را تا همگرایی به مقدار تعیین شده در ستون

Specified Value ادامه می دهد. هر مشخصه Active یک درجه از درجه های آزادی سیستم را می کاهد و در صورتیکه گزینه Estimate برای یک مشخصه Spec فعال شود، این مقدار تنها به عنوان یک تخمین اولیه در محاسبات استفاده می شود که بعد از همگرایی محاسبات مقدار جدید جایگزین آن می شود و انتخاب آن اثری بر روی درجه آزادی سیستم ندارد. HYSYS به صورت Default همیشه بالانس حرارتی را به عنوان یک Spec برابر صفر در نظر می گیرد. با فشردن هر کدام از دکمه های View یا Add در قسمت Specification پنجره ExchSpec باز می شود که اطلاعات مربوط به مشخصه انتخاب شده و یا مشخصه جدیدی که قصد اضافه کردن آنرا داریم، نمایش می دهد. این مشخصه ها عبارتند از:

- **Temperature**: دمای هر کدام از جریان های متصل به مبدل
- **Delta Temp**: اختلاف دمای بین دو جریان ورودی یا خروجی متصل به مبدل
- **Min Approach**: حداقل اختلاف دمای بین دو جریان سرد و گرم در یک بخش از مبدل
- **UA**: حاصلضرب سطح در ضریب انتقال حرارت
- **Duty**: توان حرارتی کل مبدل که برابر است با:

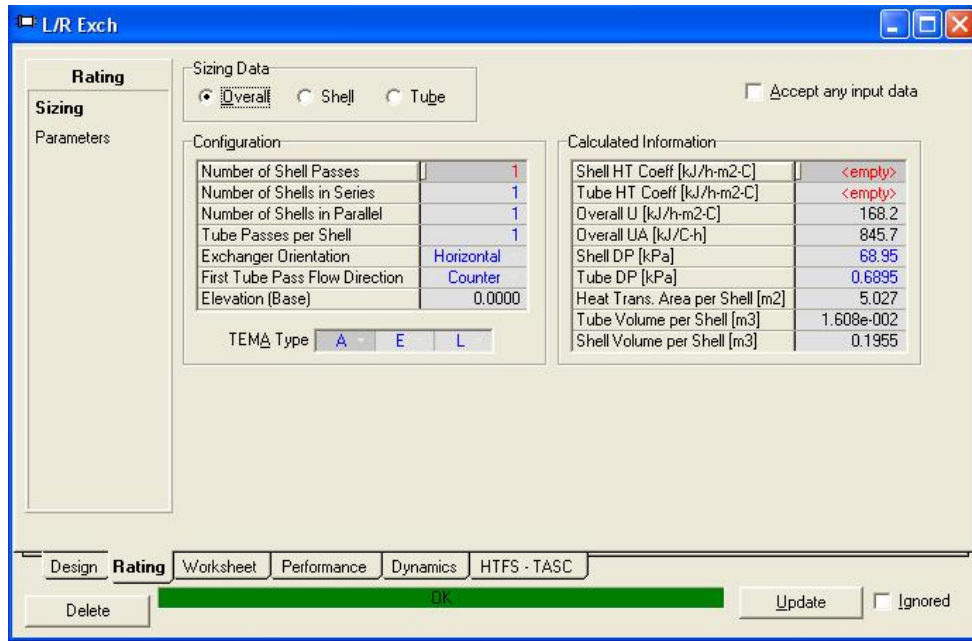
$$Duty = [M_{Cold} (H_{Out} - H_{In})_{Cold}] + [M_{Hot} (H_{In} - H_{Out})] \pm [Q_{Leak} - Q_{Loss}]$$

در صورتی می توان این مشخصه را انتخاب کرد که در صفحه پارامترها حالت Proportional یا Extreme برای Heat Leak/Loss انتخاب شده باشد.

- **Duty Relation**: نسبت شارهای گرمایی
- **Flow**: شدت جریان جرمی، مولی و یا دبی حجمی هر کدام از جریان های متصل به مبدل
- **Flow Ratio**: نسبت بین شدت جریان های ورودی و خروجی
- **Length**: طول فیزیکی

صفحه Rating

در این صفحه می توان اطلاعات مربوط به طراحی مبدل حرارتی موجود را وارد کرد. همانطور که در شکل صفحه بعد ملاحظه می شود این پنجره شامل دو قسمت Sizing و Parameter می باشد.



قسمت Sizing

در این پنجره سه گزینه Overall ، Shell و Tube برای ورود اطلاعات طراحی مبدل وجود دارند. با انتخاب گزینه Overall در قسمت Configuration گزینه های زیر وجود دارند:

- **Number of Shell Passes** : در این حالت یکی از حالات صفر تا هفت پاس پوسته یا مدل مبدل با جریان متقابل با فاکتور تصحیح $F_t=1$ را انتخاب می کنیم. هنگامی که تعداد پاس های پوسته مشخص شود ، HYSYS ضریب تصحیح F_t را برای مبدل با جریان متقابل محاسبه می کند. اگر F_t کمتر از 0.8 شود ، عملکرد مبدل در سطح انتقال حرارت مناسب نبوده است و در این صورت باید تعداد پاس ها را افزایش داده یا اختلاف دمای بیشتری به کار ببرید.
- **Number of Shells in Series** : در این گزینه تعداد پوسته در هر سری را مشخص می کند.
- **Number of Shells in Parallel** : در این گزینه تعداد پوسته در هر خط موازی را مشخص می کنید.
- **Tube Passes per Shell** : در این گزینه تعداد پاس های لوله در هر پوسته را وارد می کنیم. معمولاً این مقدار برابر $2n$ است که n تعداد پوسته هاست.
- **Exchanger Orientation** : در این گزینه وضعیت مبدل را از نظر افقی ، عمودی یا زاویه دار بودن وارد می کنید. این پارامتر در حالت دینامیک کاربرد دارد.
- **First Tube Pass Flow Direction** : در این گزینه مشخص می کنید که خوراک لوله در جهت همسو با خوراک پوسته یا در جهت مخالف خوراک پوسته وارد شود.

• **Elevation**: در این گزینه ارتفاع مبدل از سطح زمین را مشخص می کنید. این پارامتر در حالت دینامیک کاربرد دارد.

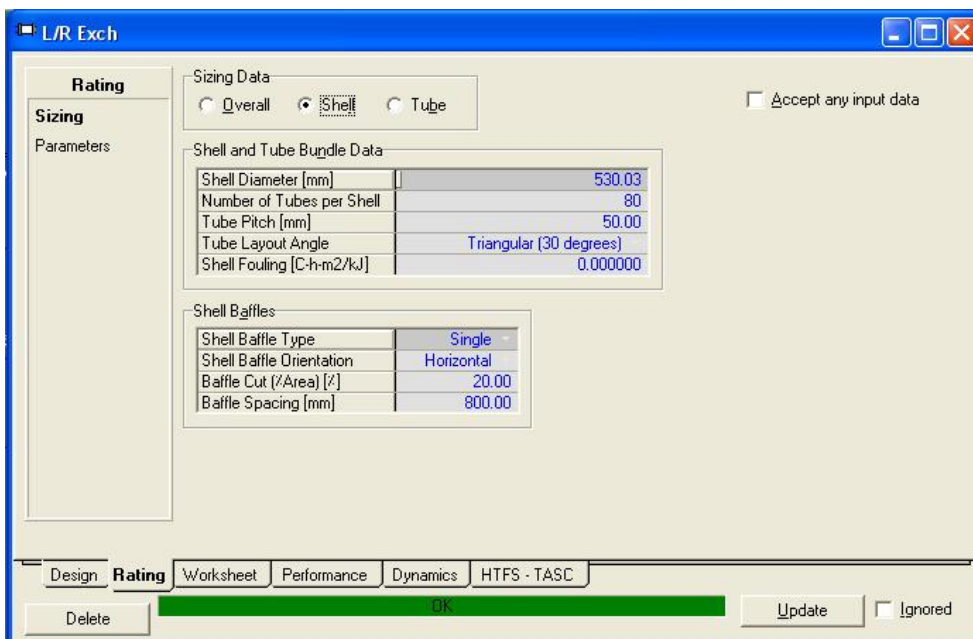
در کادرهای TEMA Type سه لیست وجود دارند که شکل مبدل حرارتی را توسط آنها می توانیم مشخص کنیم. در لیست اول مبدل هایی از نوع هد ثابت پایانی در جلو است. دومین لیست شامل انواع پوسته و لیست سوم شامل مبدل هایی از نوع هد پایانی عقبی است.

در قسمت **Calculated Information** می توانید داده های محاسباتی زیر را وارد نمایید:

۱. ضریب انتقال حرارت پوسته
۲. ضریب انتقال حرارت لوله
۳. ضریب انتقال حرارت کلی **U**
۴. ضریب **UA**
۵. افت فشار پوسته
۶. افت فشار لوله
۷. سطح انتقال حرارت پوسته
۸. حجم لوله در پوسته
۹. حجم پوسته

لازم به ذکر است که اگر مقادیر افت فشار در لوله و پوسته را در بخش **Parameters** در زبان **Design** وارد کرده باشید در این جا همان مقادیر در کادرهای مربوطه قرار خواهند گرفت.

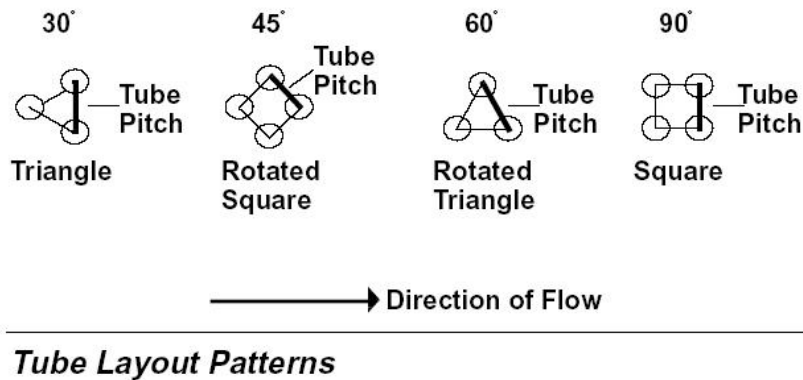
با انتخاب گزینه **Shell** در قسمت **Shell and Tube Bundle Data** گزینه های زیر وجود دارند:



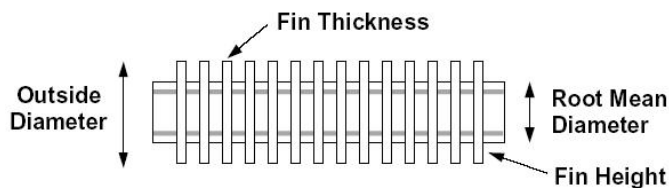
Shell and Tube Bundle Data	
Shell Diameter (mm)	530.03
Number of Tubes per Shell	80
Tube Pitch (mm)	50.00
Tube Layout Angle	Triangular (30 degrees)
Shell Fouling [C-h-m2/kJ]	0.000000

Shell Baffles	
Shell Baffle Type	Single
Shell Baffle Orientation	Horizontal
Baffle Cut (%Area) [%]	20.00
Baffle Spacing (mm)	800.00

- **Shell Diameter** : در این کادر می توان قطر پوسته را جایگزین مقدار پیش فرض HYSYS قرار داد.
- **Number of Tubes per Shell** : در این کادر می توان تعداد لوله ها در پوسته را جایگزین مقدار پیش فرض HYSYS قرار داد.
- **Tube Pitch** : در این کادر می توان کوتاه ترین فاصله بین مرکز دو لوله مجاور را جایگزین مقدار پیش فرض HYSYS قرار داد.
- **Tube Layout Angle** : در این کادر الگوی قرار گرفتن لوله ها در پوسته تعیین می شود.
- **Shell Fouling** : ضریب گرفتگی پوسته (Shell Fouling) با در نظر گرفتن ضریب انتقال حرارت کلی و UA به دست می آید و می توان مقدار مد نظر را جایگزین مقدار پیش فرض HYSYS قرار داد.

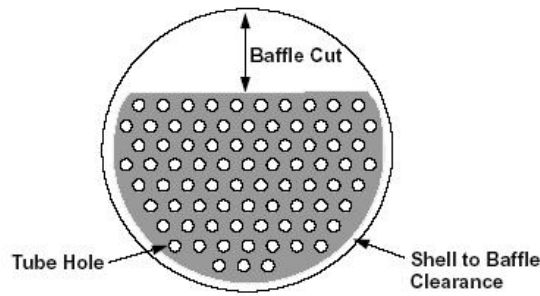


در قسمت Shell Baffle گزینه های زیر موجودند:

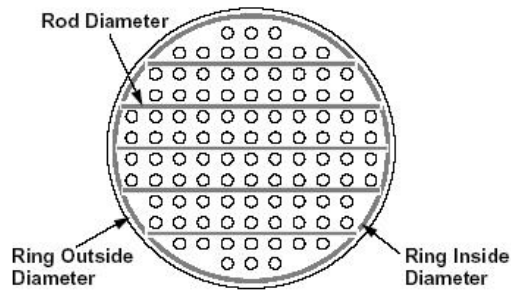


Fin Dimensions

- **Shell Baffle Type** : از لیست بازشوی این کادر می توان یک نوع Baffle برای پوسته انتخاب نماییم.
- **Shell Baffle Orientation** : از لیست بازشوی این کادر می توان بافل های درون دیواره پوسته را که به صورت افقی یا عمودی ردیف شده اند را انتخاب کرد.
- **Baffle Cut** : در این کادر درصد سطح تقاطع بافل با سطح پوسته را وارد می کنیم.
- **Baffle Spacing** : در این کادر فاصله قرار گرفتن بافل ها را مشخص می کنیم.

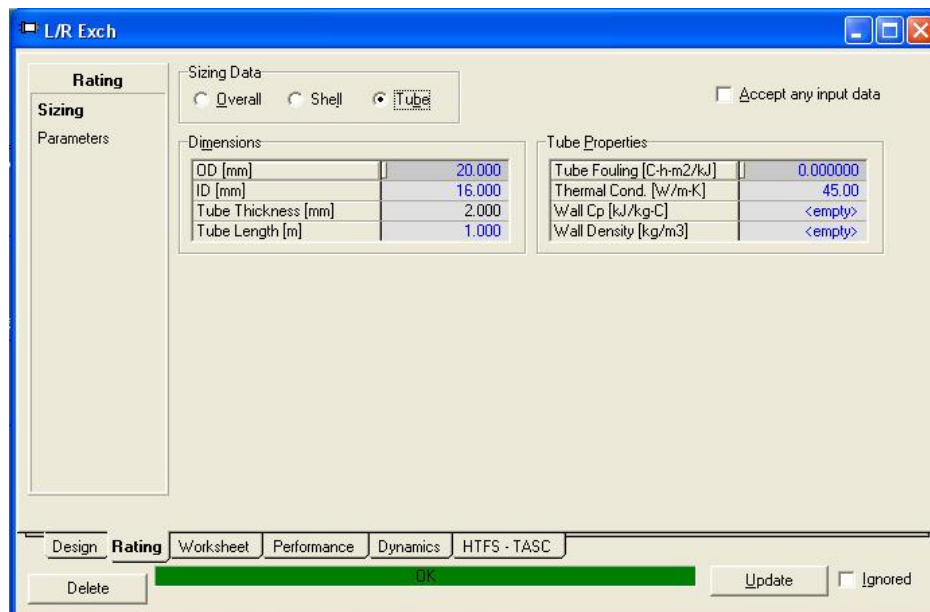


Dimensions for Segmental Baffles



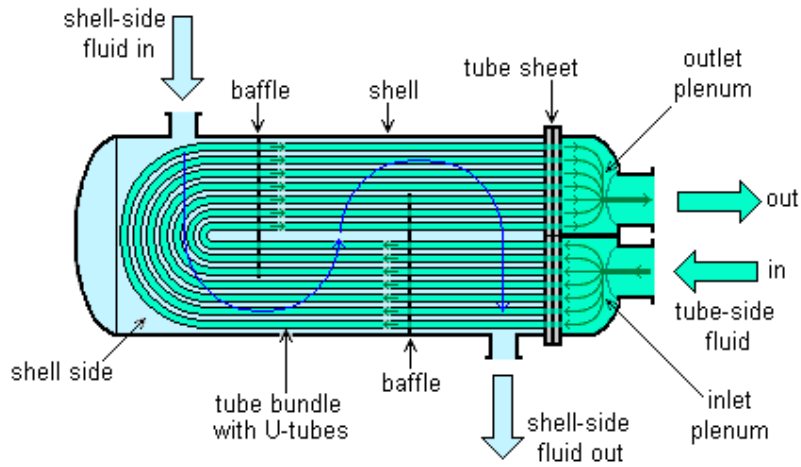
Dimensions for Rod Baffles

با انتخاب گزینه Tube در قسمت Dimensions گزینه های زیر وجود دارند:

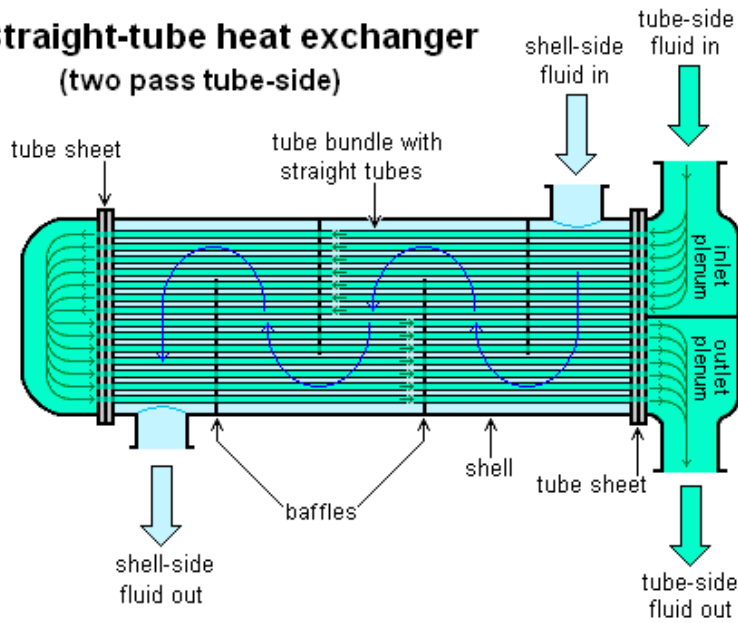


- رسانایی حرارتی
- Cp
- دانسیته
- قطر خارجی لوله
- قطر داخلی لوله
- ضخامت لوله
- طول لوله
- گرفتگی لوله (Tube Fouling)

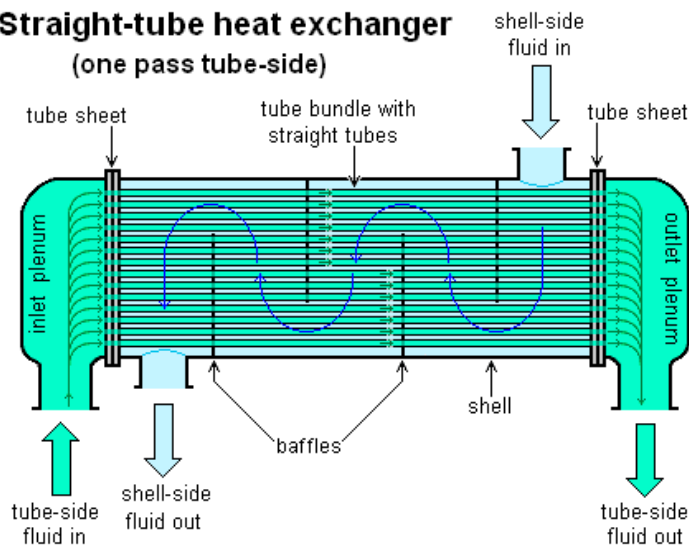
U-tube heat exchanger



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



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



صفحه Performance

در این صفحه نتایج محاسبات مبدل به صورت جدولی و نموداری ارائه می شود. تعریف برخی از اطلاعات موجود در این صفحه به شرح زیر است:

- **LMTD**: برای حاصلضرب مقدار تصحیح نشده LMTD در فاکتور تصحیح F_t است. که در حالت Weighted مقدار LMTD تصحیح نشده برابر با LMTD موثر است.
- **UA Curvature Error**: معمولاً LMTD با فرض Cp ثابت محاسبه شده ولی می تواند با فرض Cp خطی با دما نیز محاسبه شود. در این حالت خطای منحنی UA به تفاوت بین این دو مقدار مربوط می شود.
- **Hot Pinch Temperature**: دمای جریان گرم در نقطه حداقل اختلاف دما
- **Cold Pinch Temperature**: دمای جریان سرد در نقطه حداقل اختلاف دما
- **F_t Factor**: فاکتور تصحیح LMTD که تابعی از تعداد پاس پوسته و لوله و اختلاف دما می باشد.
- **Uncorrected LMTD**: تنها در حالت End Point استفاده می شود و به صورت زیر تعریف می گردد:

$$\Delta T_{LM} = \frac{[T_{Hot,Out} - T_{Cold,In}] - [T_{Hot,In} - T_{Cold,Out}]}{\ln\left(\frac{T_{Hot,Out} - T_{Cold,In}}{T_{Hot,In} - T_{Cold,Out}}\right)}$$

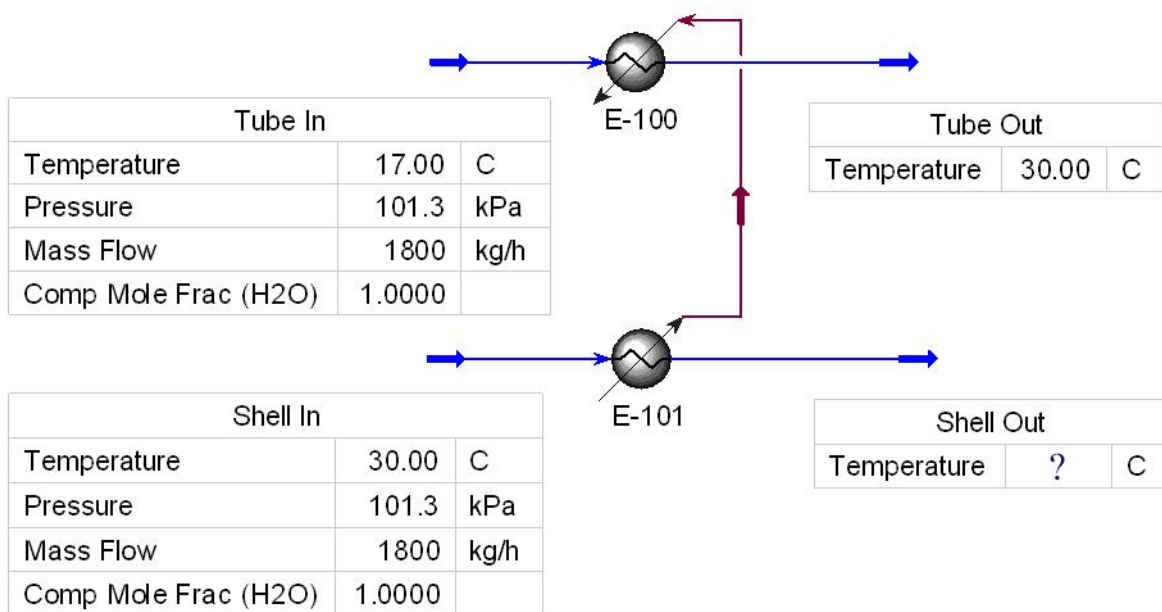
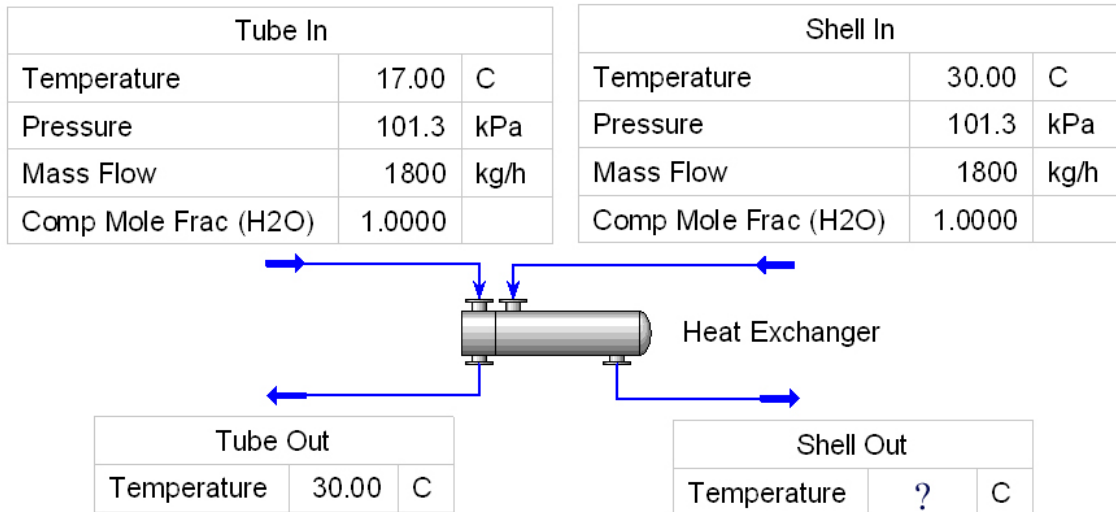
در قسمت Plots و Tables منحنی حرارتی مبدل برای جریان های سرد و گرم به صورت نموداری و جدولی تهیه می شوند.

صفحه HTFS-TASK

در صورتی که نرم افزارهای طراحی حرارتی مکانیکی هندسی مبدل TASK یا STX بر روی کامپیوتر نصب باشد، در این صورت می توان توسط این گزینه به اطلاعات طراحی نرم افزارهای فوق توسط HYSYS لینک شد.

تمرین ۱:

دمای جریان خروجی پوسته و شار حرارتی کل را در دو حالت زیر بررسی نمایید. کلیه اختلاف فشارها را در سیستم برابر صفر در نظر بگیرید.



تمرین ۲:

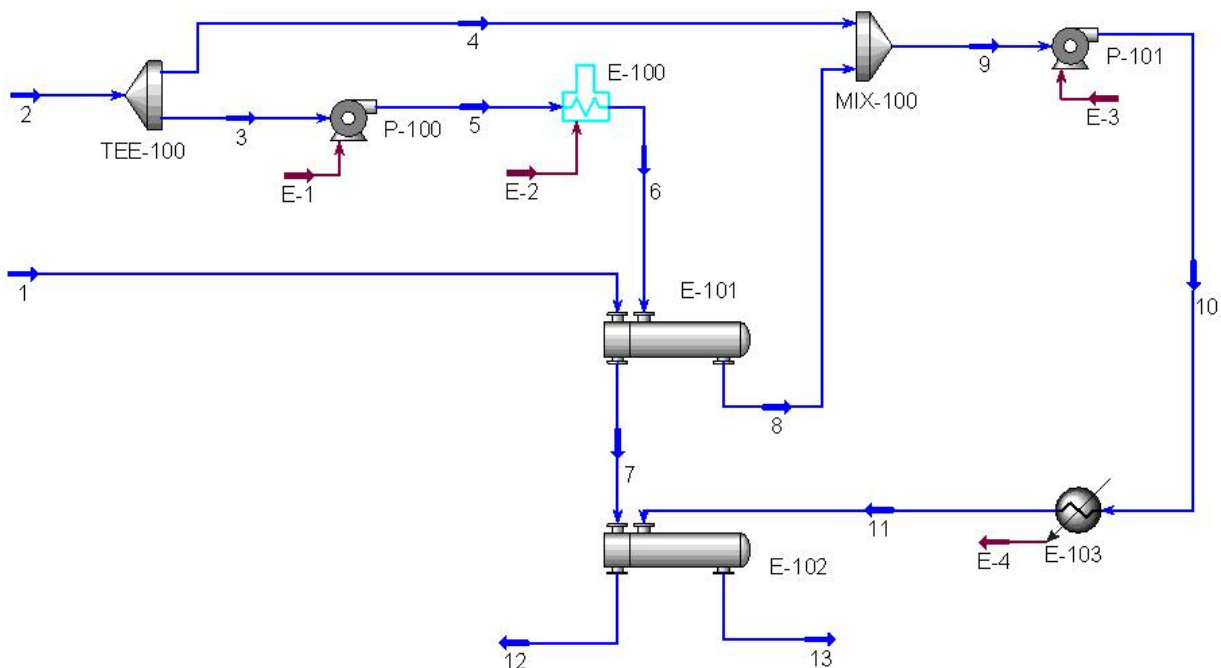
یک سیستم حرارتی مطابق با چرخه ایده آل رانکین عمل می نماید. کندانسور مخلوط بخار و مایع با ۹۳٪ جرمی بخار را در ۷۶ C گرفته و آب اشباع تولید می کند. بویلر در شرایط ایزوبار عمل می نماید. فشار خروجی پمپ ۷۰۰۰ kpa و بازده آن ۱۰۰٪ است. توربین ایده آل و نیروی تولیدی آن ۱۰ MW است.

مطلوبست :

- رسم PFD فرآیند
- Condenser Duty
- جریان آب اشباع
- Pump Duty

تمرین ۳:

شبکه حرارتی زیر را با توجه به Datasheet مربوطه شبیه سازی نمایید. مطلوبست محاسبه بارهای حرارتی مبدل ها و پمپ ها.





Material Streams							Fluid Pkg:	All
Name	2	4	3	5	6			
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000	
Temperature (C)	10.00 *	10.00	10.00	10.00	10.02		30.00 *	
Pressure (kPa)	199.4 *	199.4	199.4	199.4	493.6 *		493.6	
Molar Flow (kgmole/h)	1532 *	1141		390.8 *	390.8		390.8	
Mass Flow (kg/h)	2.760e+004	2.056e+004		7040	7040		7040	
Liquid Volume Flow (m3/h)	27.65	20.60		7.055	7.055		7.055	
Heat Flow (kJ/h)	-4.390e+008	-3.270e+008		-1.120e+008	-1.120e+008		-1.114e+008	
Name	8	1	7	12	13			
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000	
Temperature (C)	58.60	75.00 *		57.00 *	45.00 *		39.76	
Pressure (kPa)	493.6	103.0 *		103.0	103.0		346.5	
Molar Flow (kgmole/h)	390.8	356.7 *		356.7	356.7		1532	
Mass Flow (kg/h)	7040	4.758e+004		4.758e+004	4.758e+004		2.760e+004	
Liquid Volume Flow (m3/h)	7.055	33.04		33.04	33.04		27.65	
Heat Flow (kJ/h)	-1.105e+008	-6.105e+007		-6.192e+007	-6.249e+007		-4.355e+008	
Name	11	10	9					
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000					
Temperature (C)	35.00 *	22.43	22.42					
Pressure (kPa)	346.5	346.5 *	199.4					
Molar Flow (kgmole/h)	1532	1532	1532					
Mass Flow (kg/h)	2.760e+004	2.760e+004	2.760e+004					
Liquid Volume Flow (m3/h)	27.65	27.65	27.65					
Heat Flow (kJ/h)	-4.360e+008	-4.375e+008	-4.375e+008					
Compositions							Fluid Pkg:	All
Name	2	4	3	5	6			
Comp Mole Frac (11-CIC2)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000	
Comp Mole Frac (1-ci2-CC2=)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000	
Comp Mole Frac (Chloroform)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000	
Comp Mole Frac (CC4)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000	
Comp Mole Frac (112-CIC2)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000	
Comp Mole Frac (1112CIC2)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000	
Comp Mole Frac (H2O)	1.0000 *	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000		1.0000	
Name	8	1	7	12	13			
Comp Mole Frac (11-CIC2)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000	
Comp Mole Frac (1-ci2-CC2=)	0.0000	0.0002 *	0.0002	0.0002	0.0002		0.0000	
Comp Mole Frac (Chloroform)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000	
Comp Mole Frac (CC4)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000	
Comp Mole Frac (112-CIC2)	0.0000	0.9997 *	0.9997	0.9997	0.9997		0.0000	
Comp Mole Frac (1112CIC2)	0.0000	0.0001 *	0.0001	0.0001	0.0001		0.0000	
Comp Mole Frac (H2O)	1.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000		1.0000	
Name	11	10	9					
Comp Mole Frac (11-CIC2)	0.0000	0.0000	0.0000					
Comp Mole Frac (1-ci2-CC2=)	0.0000	0.0000	0.0000					
Comp Mole Frac (Chloroform)	0.0000	0.0000	0.0000					
Comp Mole Frac (CC4)	0.0000	0.0000	0.0000					
Comp Mole Frac (112-CIC2)	0.0000	0.0000	0.0000					
Comp Mole Frac (1112CIC2)	0.0000	0.0000	0.0000					
Comp Mole Frac (H2O)	1.0000	1.0000	1.0000					

تمرین ۴:

در یک مبدل حرارتی آب-آب مشخصات جریان های ورودی پوسته و لوله به شرح زیر است:

Stream	Tube In	Shell In
Temperature [F]	120	90
Pressure [Psia]	100	100
Molar Flow [lbmole/hr]	5000	4000
Comp Mole Frac [H ₂ O]	1	1

با انتخاب معادله حالت ASME Steam و با در نظر گرفتن مقادیر افت فشار سمت پوسته و لوله برابر با ۵ psi مبدل حرارتی مذکور را به روش Weighted شبیه سازی نمایید. تلفات حرارتی مبدل را در حالت Extremes در نظر بگیرید. در قسمت Spec دمای جریان خروجی لوله را برابر ۱۰۰ درجه فارنهایت ، UA

را برابر $2500000 \frac{Btu}{F-hr}$ و اتلاف حرارتی از سمت پوسته را برابر $1000000 \frac{Btu}{hr}$ تعریف نمایید.

مطلوبست رسم منحنی UA در برابر دما در دو حالت زیر:

- تعداد بازه ها برای پوسته و لوله برابر ۵ باشد.
- تعداد بازه ها برای پوسته و لوله برابر ۱۵ باشد.

نتایج را در دو حالت مقایسه نمایید.



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

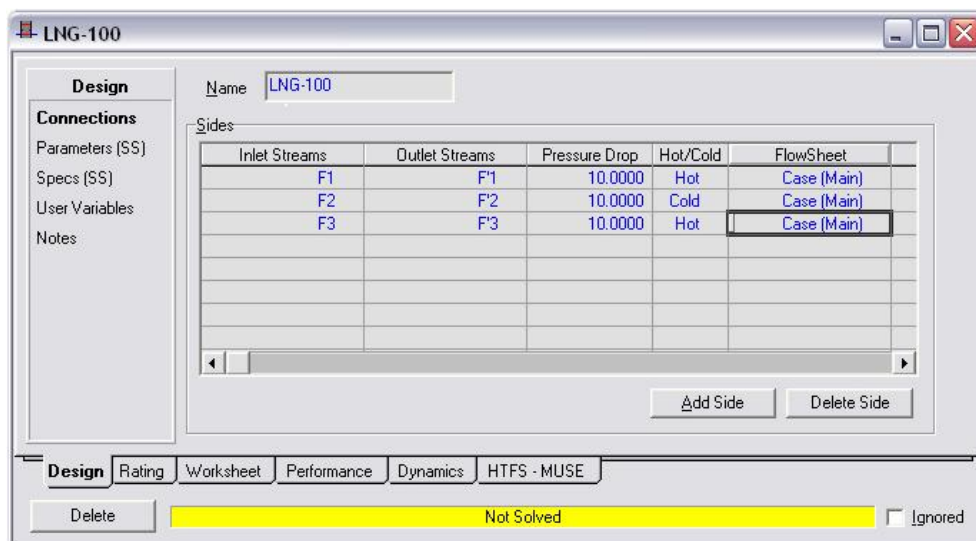
HYSYS

جلسه چهارم

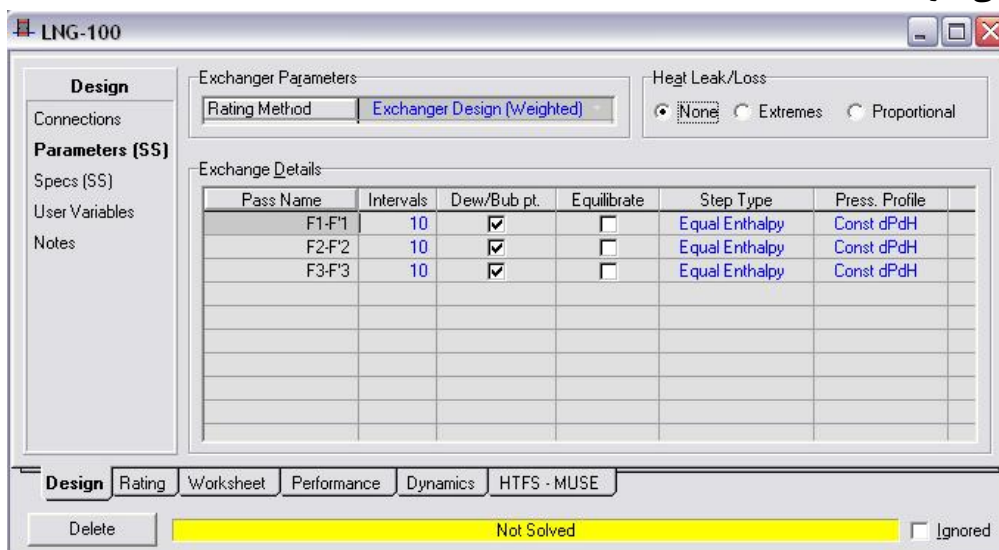
- شبیه سازی مبدل های حرارتی چند جریانى LNG
- شبیه سازی کولر های هوایی
- شبیه سازی کوره
- آشنایی با بهینه سازی فرآیند ها با حل یک مثال نمونه از بهینه سازی مبدل های حرارتی
-

۳- مبدل حرارتی چند جریانی (LNG)

مبدل های حرارتی LNG (Liquid Natural Gas) مبدل هایی شبیه مبدل های حرارتی ساده هستند با این تفاوت که انتقال حرارت در آن بین چندین فاز حرارتی سرد و گرم صورت می پذیرد. روش حل این مبدل ها به دو صورت Weighted و Rating می باشد. لازم به ذکر است که اگر بیش از دو جریان وارد سیستم شود تنها روش Weighted قابل انتخاب هست. شکل زیر صفحه اتصالات این مبدل ها را نشان می دهد که شامل اطلاعات مربوط به جریان های سرد و گرم ورودی و خروجی و افت فشار هر کدام از این جریان ها می باشد. لازم به ذکر است که جریان های سرد و گرم در خلاف جهت هم هستند.

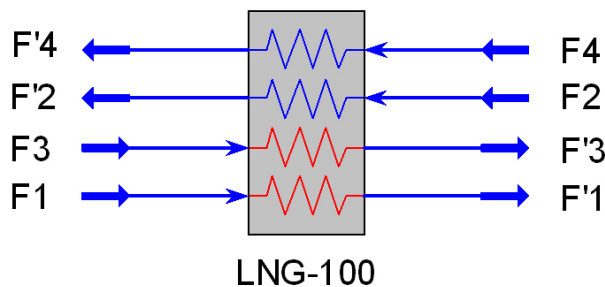


صفحه بعدی صفحه تعیین پارامترهای حل مبدل می باشد که شبیه صفحه پارامترهای مبدل های حرارتی ساده است که در آن روش حل مبدل ، انتخاب نوع اتلاف حرارتی مبدل و تنظیمات مربوط به حل آن انجام می شود:



تمرین ۱:

با توجه به اطلاعات موجود مبدل LNG زیر را شبیه سازی نمایید. واحد ها همگی در سیستم SI می باشند.



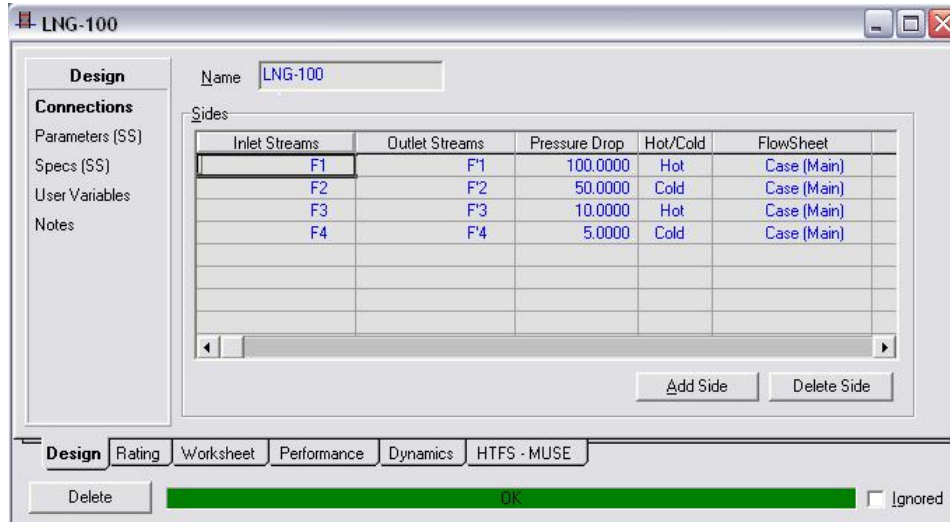
PP : P-R

F3	
Vapour Fraction	-
Temperature	30.00
Pressure	5000
Molar Flow	50.00
Comp Mole Frac (Methane)	0.9500
Comp Mole Frac (Ethane)	0.0500
Comp Mole Frac (Propane)	0.0000
Comp Mole Frac (i-Butane)	0.0000
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0000
Comp Mole Frac (i-Pentane)	0.0000
Comp Mole Frac (n-Pentane)	0.0000

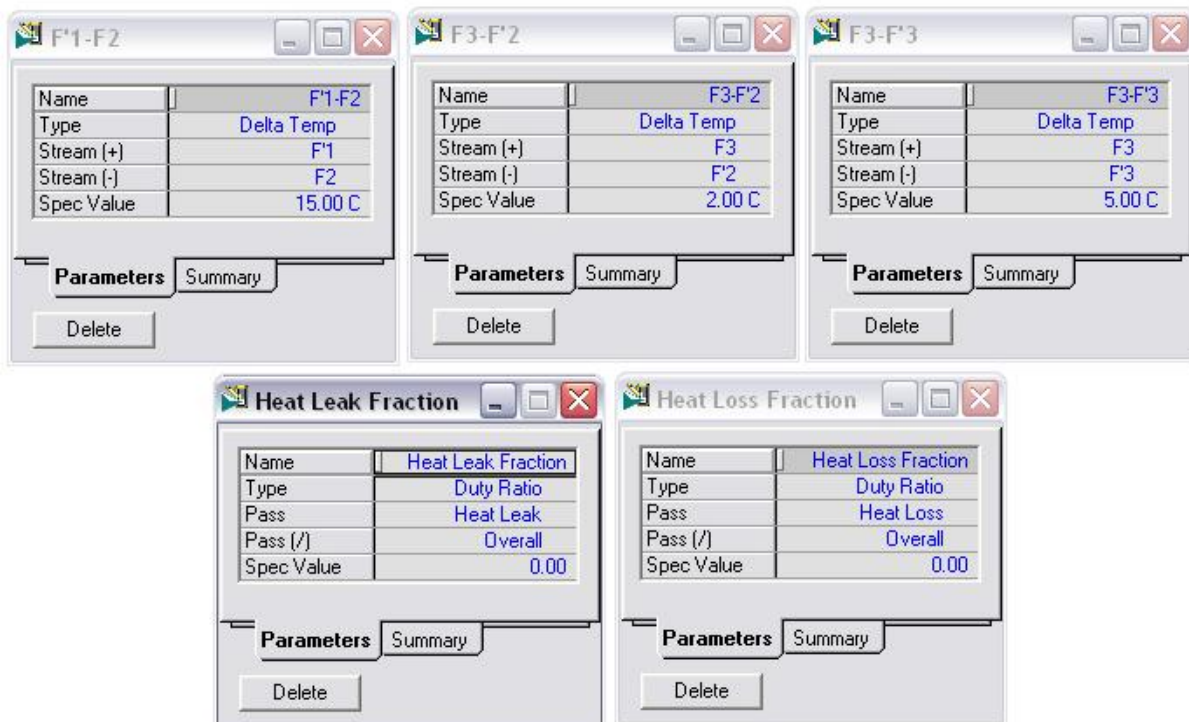
F1	
Vapour Fraction	-
Temperature	20.00
Pressure	500.0
Molar Flow	1000
Comp Mole Frac (Methane)	0.5386
Comp Mole Frac (Ethane)	0.1538
Comp Mass Frac (Propane)	0.1078
Comp Mole Frac (i-Butane)	0.0692
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0615
Comp Mole Frac (i-Pentane)	0.0538
Comp Mole Frac (n-Pentane)	0.0462

F2	
Vapour Fraction	1.0000
Temperature	-
Pressure	2000
Molar Flow	75.00
Comp Mole Frac (Methane)	0.9500
Comp Mole Frac (Ethane)	0.0500
Comp Mole Frac (Propane)	0.0000
Comp Mole Frac (i-Butane)	0.0000
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0000
Comp Mole Frac (i-Pentane)	0.0000
Comp Mole Frac (n-Pentane)	0.0000

F4	
Vapour Fraction	0.0000
Temperature	-
Pressure	250.0
Molar Flow	-
Comp Mole Frac (Methane)	0.0200
Comp Mole Frac (Ethane)	0.9800
Comp Mole Frac (Propane)	0.0000
Comp Mole Frac (i-Butane)	0.0000
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0000
Comp Mole Frac (i-Pentane)	0.0000
Comp Mole Frac (n-Pentane)	0.0000



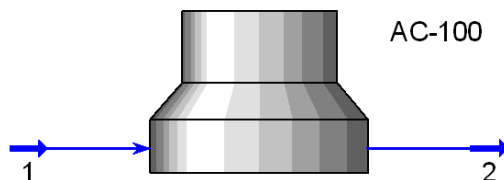
برای در نظر گرفتن اثرات اتلاف حرارتی گزینه Extremes را فعال کنید. تعداد بازه ها (Interval) را برای هر چهار پاس برابر ۲۰ در نظر بگیرید. جهت صفر کردن درجه آزادی ، جزء حجمی فاز بخار جریان F4 را برابر یک و Spec های زیر را وارد نمایید.



چه خطایی را برای حل مشاهده می نمایید؟ خطای حاصل را به صورت نموداری نشان دهید.
چه راه حلی را برای رفع این خطا پیشنهاد می کنید؟

تمرین ۲ :

با توجه به اطلاعات موجود مبدل Air Cooler زیر را شبیه سازی نمایید.



PP : NRTL

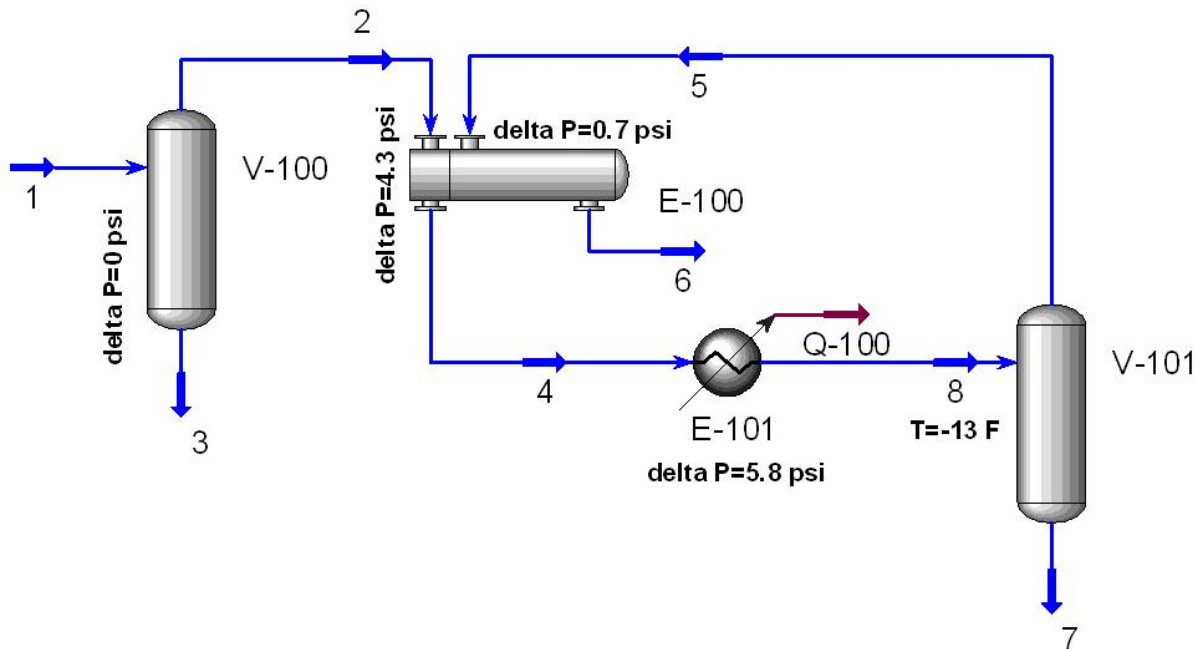
1		
Temperature	100.0	F
Pressure	16.00	psia
Molar Flow	2200	lbmole/hr
Comp Mole Frac (Ethanol)	0.5000	
Comp Mole Frac (1-Pentanol)	0.5000	

پارامتر های طراحی:

مبدل از نوع یک گذر با دو ردیف لوله و با یک فن می باشد که با سرعت 45 rpm می چرخد. افت فشار مبدل 1.2 psi ، دمای هوای ورودی به مبدل 77 F و دمای هوای خروجی از مبدل برابر 86 F است. مطلوبست دبی هوای گذرنده از مبدل؟
 با همین شرایط برای اینکه دمای هوای خروجی از مبدل 90 F شود حداقل دبی جریان ورودی به لوله های مبدل چقدر باید باشد؟

تمرین ۳ :

بهترین مدل برای حل مبدل با مشخصات زیر کدام است؟



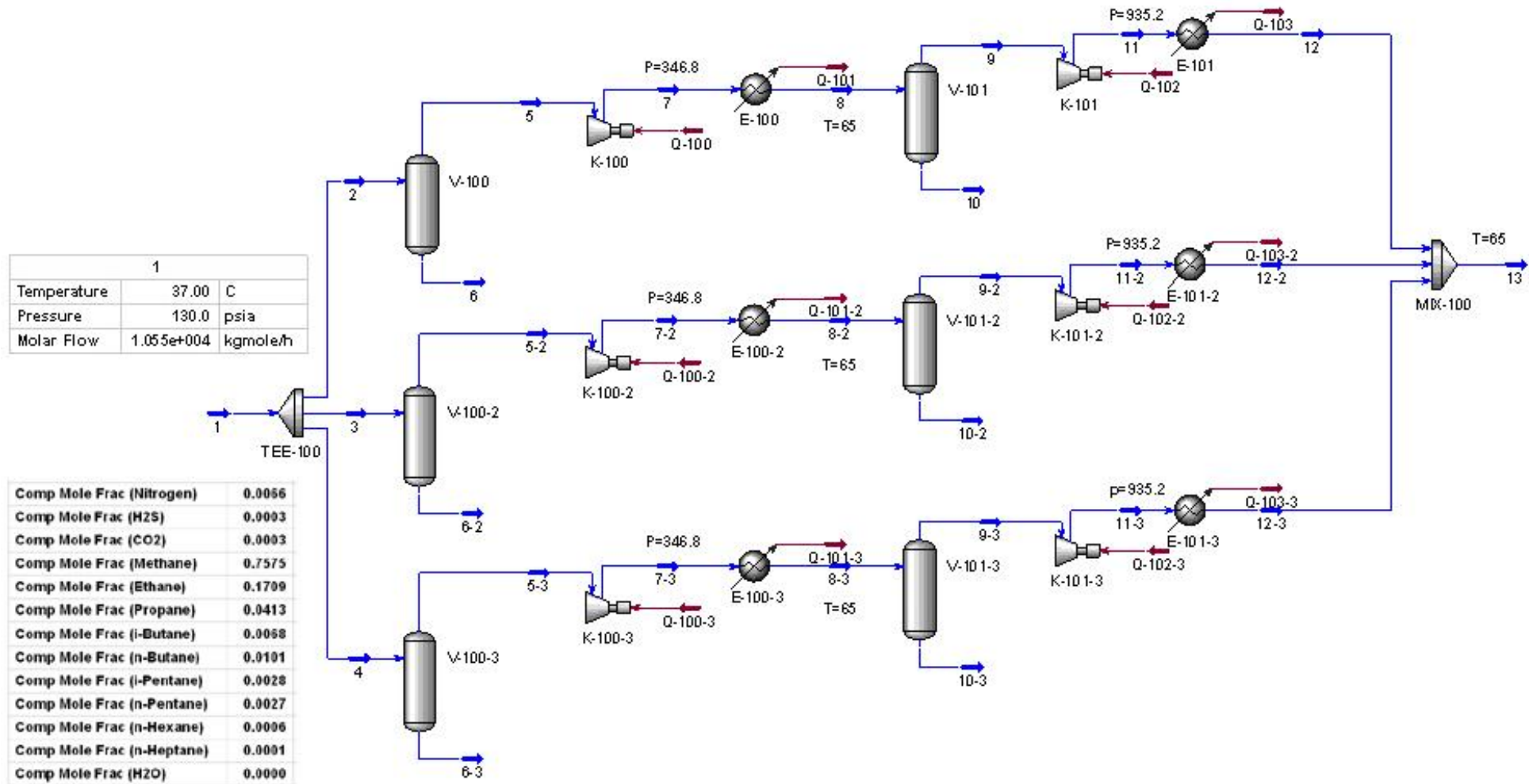
مشخصات جریان ۱ عبارتست از :

1	
Temperature	59.00 F
Pressure	942.7 psia
Molar Flow	3307 lbmole/hr
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0066
Comp Mole Frac (H2S)	0.0003
Comp Mole Frac (CO2)	0.0003
Comp Mole Frac (Methane)	0.7575
Comp Mole Frac (Ethane)	0.1709
Comp Mole Frac (Propane)	0.0413
Comp Mole Frac (i-Butane)	0.0068
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0101
Comp Mole Frac (i-Pentane)	0.0028
Comp Mole Frac (n-Pentane)	0.0027
Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0006
Comp Mole Frac (n-Heptane)	0.0001
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000



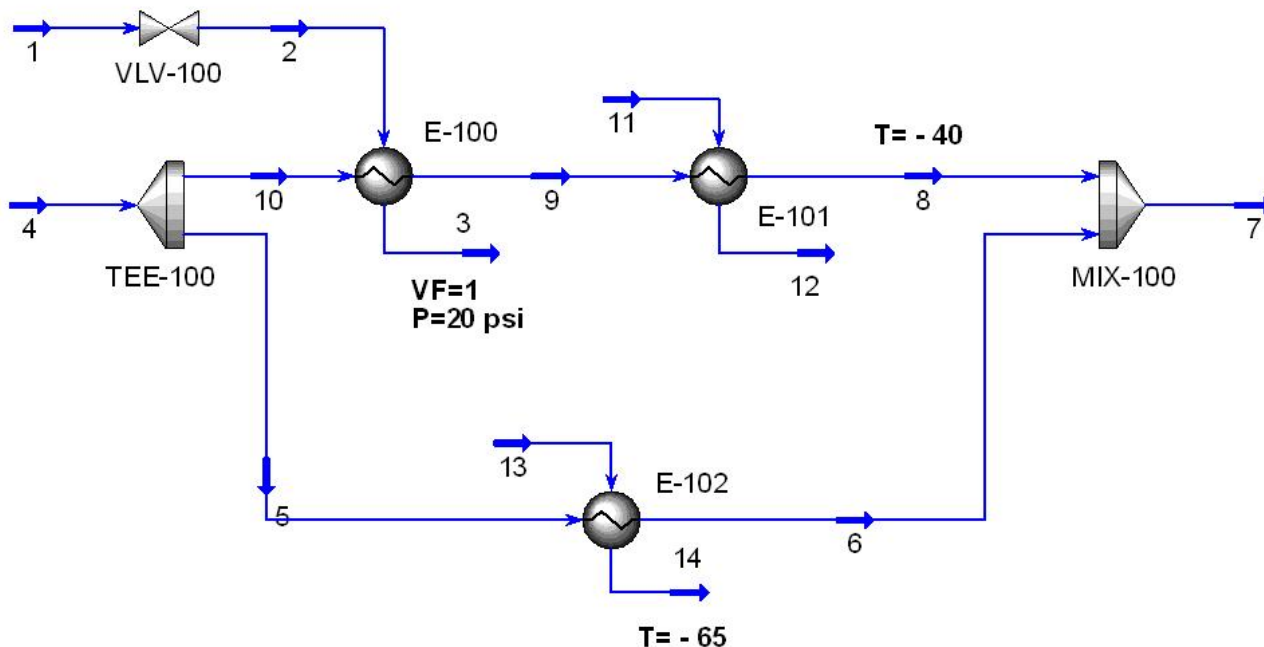
تمرین ۴ :

با توجه به اطلاعات موجود فرآیند زیر را شبیه سازی نمایید.



تمرین ۵ :

الف : با توجه به اطلاعات موجود شبکه مبدل های زیر را شبیه سازی نمایید. واحد ها همگی در سیستم انگلیسی می باشند.



1	
Temperature	120.0
Pressure	350.0
Molar Flow	-
Comp Mole Frac (Methane)	0.0000
Comp Mole Frac (Ethane)	0.0000
Comp Mole Frac (Propane)	1.0000
Comp Mole Frac (i-Butane)	0.0000
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0000

13	
Temperature	-142.0
Pressure	250.0
Molar Flow	1542
Comp Mole Frac (Methane)	0.9073
Comp Mole Frac (Ethane)	0.0927
Comp Mole Frac (Propane)	0.0000
Comp Mole Frac (i-Butane)	0.0000
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0000

4	
Temperature	20.00
Pressure	1000
Molar Flow	2745
Comp Mole Frac (Methane)	0.7515
Comp Mole Frac (Ethane)	0.2004
Comp Mole Frac (Propane)	0.0401
Comp Mole Frac (i-Butane)	0.0040
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0040

11	
Temperature	—
Pressure	251.0
Molar Flow	1640
Comp Mole Frac (Methane)	0.2828
Comp Mole Frac (Ethane)	0.2930
Comp Mole Frac (Propane)	0.1414
Comp Mole Frac (i-Butane)	0.1313
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.1515

	مبدل 100	مبدل 101	مبدل 102
افت فشار سمت لوله	5 psi	5 psi	10 psi
افت فشار سمت پوسته	1 psi	5 psi	10 psi
UA	5.00e04 Btu/F-hr	3.50e04 Btu/F-hr	4.00e04 Btu/F-hr
اتلاف حرارتی	None	None	None
روش حل مبدل	Weighted	Weighted	Weighted
تعداد بازه ها در سمت لوله	10	10	10
تعداد بازه ها در سمت پوسته	10	10	10
نقطه حباب/نقطه شبنم	active	Inactive	Inactive

حال خانه های خالی در جدول زیر را برای جریان های ۱، ۱۰ و ۱۱ وارد کنید.

جریان	10	11	1
Molar Flow		---	---
T	---		---
Molar Flow	---	---	

ب : با استفاده از Optimizer بهترین توزیع جریان را برای حداقل کردن مقدار UA کل بدست آورید. (راهنمایی : جهت این کار هر سه UA را از مبدل ها حذف کرده و مقادیر جدول بالا را برای جریان های ۱، ۱۰ و ۱۱ وارد کنید.)

تابع هدف عبارت است از:

$$F=UA_{100}+UA_{101}+UA_{102}$$

متغیر بهینه شونده :

Stream 10 : Molar Flow

قید ها :

$$UA_{100} > 0$$

$$UA_{101} > 0$$

$$UA_{102} > 0$$

مقدار UA کل قبل از بهینه سازی چقدر است؟

مقدار UA کل بعد از بهینه سازی چقدر است؟

مقدار دبی جریان ۱۰ بعد از بهینه سازی چقدر است؟

راهنمایی:

جهت ورود به قسمت بهینه سازی دکمه F5 را فشار دهید.



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

HYSYS

جلسه پنجم

- آشنایی با انواع مختلف واکنش های قابل تعریف در HYSYS
- شبیه سازی راکتور های شیمیایی
-

شبیه سازی راکتورها در HYSYS

۱- واکنش های شیمیایی

فرآیندهایی که دارای واکنش های شیمیایی هستند دارای سینتیک معینی می باشند. لازمه یک شبیه سازی موفق اطلاع دقیق از سینتیک واکنش ها در آن فرآیند می باشد. گاهی در برخی فرآیند ها هم اطلاعی از سینتیک واکنش ها در دسترس نیست. بسته به نوع اطلاعاتی که از سینتیک واکنش ها در اختیار ما قرار دارد ، در HYSYS امکان تعریف چندین نوع واکنش از قبیل واکنش های استوکیومتری ، تعادلی ، تبدیلی و کاتالیستی وجود دارد که می توان از آنها استفاده کرد. از واکنش های تعریف شده نهایتاً می توان در راکتور ها ، جدا کننده های دو فازی و سه فازی و انواع برج های تقطیر استفاده کرد. برای تعریف کلیه واکنش های ممکن در یک فرآیند از پنجره SBM گزینه Reaction manager را انتخاب می کنیم. در این قسمت با فشردن دکمه Add Rxn انواع واکنش های زیر نمایش داده خواهند شد.



لازم به ذکر است که در هر نوع راکتوری حق استفاده از همه انواع واکنش های بالا را نخواهیم داشت. مثلاً در یک راکتور از نوع Conversion فقط می توان از واکنش Conversion استفاده کرد و یا در یک راکتور Plug تنها می توان از واکنش های نوع Kinetic ، Heterogeneous Catalyst و Simple Rate استفاده کرد. در زیر به توضیح هر کدام از این واکنش ها خواهیم پرداخت.

- واکنش تبدیلی Conversion

در این نوع واکنش ، باید استوکیومتری تمام واکنش ها داده شود . همچنین میزان درصد تبدیل و پیشرفت واکنش به عنوان تابعی از دما به سیستم معرفی می گردد. در این مدل باید میزان تبدیل کل واکنش نسبت به واکنشگر محدود کننده را که به صورت یک چند جمله ای درجه دوم است ، بر حسب دما وارد کرد. برای وارد کردن یک درصد تبدیل معین لازم است تا فقط مقدار C_0 وارد شود.

Conversion Reaction: Rxn-9

Stoichiometry Info

Component	Mole Weight	Stoich Coeff
Ammonia	17.030	-1.000
Oxygen	32.000	-0.750
Nitrogen	28.013	0.500
H2O	18.015	1.500
Add Comp		

Balance Error: 0.00000
Reaction Heat (25 C): -3.2e+05 kJ/kgmole

Stoichiometry Basis

Delete Name Rxn-9 Ready

Conversion Reaction: Rxn-9

Basis

Base Component	Ammonia
Rxn Phase	Overall
Co	0.5000
C1	<empty>
C2	<empty>

Conversion (%) = Co + C1*T + C2*T^2
(T in Kelvin)

Stoichiometry Basis

Delete Name Rxn-9 Ready

- واکنش تعادلی Equilibrium

در این نوع واکنش باید استوکیومتری تمام واکنش ها به آن داده شود. همچنین فرض می شود که واکنش تا رسیدن به تعادل ترمودینامیکی پیش می رود. برای یک واکنش تعادلی ثابت تعادل از رابطه زیر بدست می آید:

$$K = \prod_{j=1}^{N_c} ([C]_j)^{\nu_j}$$

که در آن C غلظت ترکیبات واکنشگر و واکنش دهنده و N_c تعداد ترکیبات و ν_j ضریب استوکیومتری ترکیب jام می باشد.



ثابت تعادل واکنش را می توان به چهار روش زیر در HYSYS محاسبه کرد :

۱- به صورت تابعی از دما با پارامتر های مشخص :

$$\ln(K_{eq}) = a + b$$

$$a = A + \frac{B}{T} + C \cdot \ln(T) + D \cdot T$$

$$b = E \cdot T^2 + F \cdot T^3 + G \cdot T^4 + H \cdot T^5$$

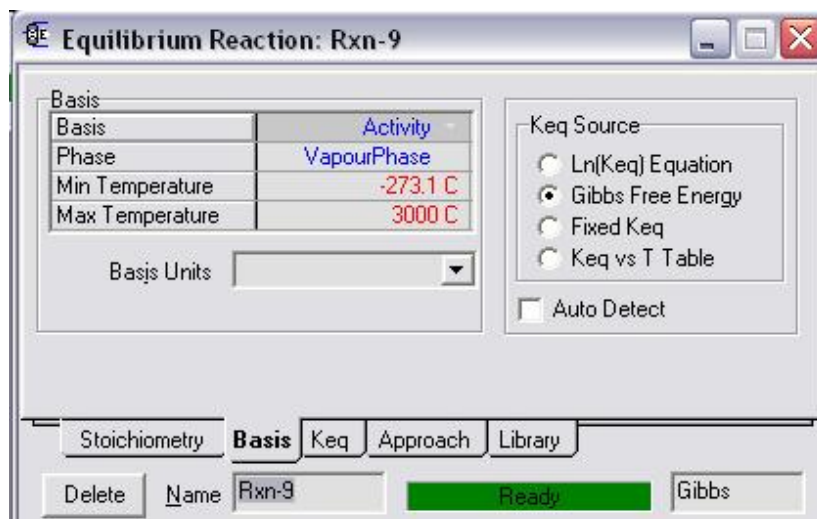
۲- محاسبه از روی انرژی آزاد گیبس :

$$\ln(K_{eq}) = -\frac{\Delta G^0}{RT}$$

۳- به صورت عدد ثابت و مستقل از دما که توسط کاربر وارد می شود.

۴- ورود اطلاعات به صورت جدول ثابت تعادل بر حسب دما

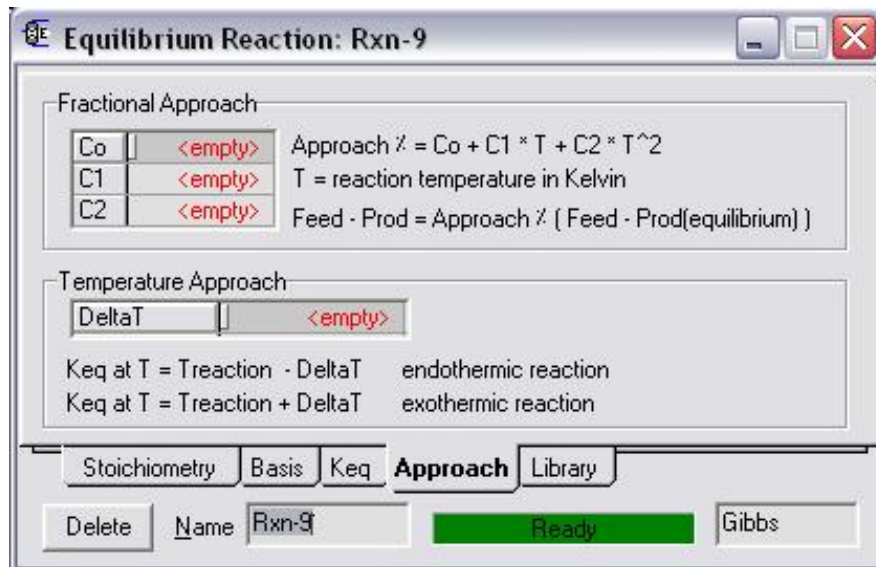
طریقه انتخاب این چهار روش در پنجره Basis موجود است. اگر هیچ داده ای برای ثابت تعادل ترمودینامیکی موجود نباشد گزینه Gibbs Free Energy را انتخاب می کنیم.



رسیدن به تعادل کامل ترمودینامیکی برای واکنش ها عملاً غیر ممکن است . مثلاً ممکن است در عمل بتوان به ۹۰٪ تبدیل تعادلی رسید. برای لحاظ کردن این مورد در محاسبات از گزینه Approach در پنجره بالا استفاده می گردد. دو روش برای بیان این موضوع وجود دارد .

۱- Temperature Approach

۲- Fractional Approach



همانطور که در شکل بالا هم ملاحظه می شود در حالت Temperature Approach ثابت تعادل واکنش (بسته به گرمازا و گرماگیر بودن واکنش) در دمایی کمتر و یا بالاتر از دمای واکنش محاسبه می شود که به صورت اختلاف دما ΔT وارد سیستم می شود. (در سیستم گرمازا اگر به سیستم گرما دهیم درجه تبدیل پایین می آید و در سیستم گرماگیر اگر از سیستم گرما بگیریم درجه تبدیل پایین می آید) ولی در حالت Fractional Approach به نرم افزار گفته می شود که درصد تبدیل نهایی چه درصدی از تبدیل تعادلی باشد؟ این درصد تبدیل را می توان به صورت تابعی از دما وارد کرد.

$$X_i = Approach \% \cdot X_{ieq}$$

$$OR \quad \left(\frac{C_i - C_{i0}}{C_{i0}} \right) = Approach \% \cdot \left(\frac{C_{ieq} - C_{i0}}{C_{i0}} \right)$$

$$OR \quad (C_i - C_{i0}) = Approach \% \cdot (C_{ieq} - C_{i0})$$

$$OR \quad Feed - Prod = Approach \% \cdot (Feed - Prod_{eq})$$

گزینه بعدی در این پنجره صفحه Library است که در آن فهرستی از واکنش های تعادلی معمول تعبیه شده است که ثابت های تعادلی آن بر حسب دما در جدولی داده شده است. برای اضافه کردن هر کدام از این واکنش ها باید به صورت مستقل این واکنش ها را انتخاب کرد.

واکنش Heterogeneous Catalyst -

از این نوع واکنش ها بیشتر در راکتور های Plug و CSTR استفاده می شود. این واکنش ها دارای سینتیکی مشابه با واکنش های کاتالیستی (بستر ثابت و یا سیال) هستند. این واکنش ها معمولاً دارای سه ترم سینتیک (ترم سرعتی)، پتانسیل (ترم نیروی محرکه) و جذب (ترم مقاومتی) می باشند. دلیل وجود این ترم ها وجود مکانیزم جذب و واکنش در روی کاتالیست می باشد.

$$-r = \frac{(kinetic\ term)(potential\ term)}{(absorption\ term)}$$

معادله کلی واکنش که در بر دارنده ترم های بالا باشد به صورت زیر است که در HYSYS هم این معادله استفاده می شود:

$$aA + bB + \dots \xrightleftharpoons[k']{k} rR + sS + \dots$$

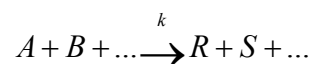
$$r = \frac{k \prod_{i=1}^{reactant} f(Basis)_i^{v_i} - k' \prod_{j=1}^{products} f'(Basis)_j^{v_j}}{\left[1 + \sum_{k=1}^N \left(K_k \prod_{g=1}^N f(Basis)_g^{\gamma_g} \right) \right]^n}$$

$$k = A \cdot \exp\{-E / RT\} \times T^m$$

$$k' = A' \cdot \exp\{-E' / RT\} \times T^{m'} \quad (\text{for revers reaction})$$

$$K_k = A_k \cdot \exp\{-E_k / RT\}, \quad k = (1, \dots, n)$$

که در این معادلات توابع f, f', \dots معرف ترم های غلظت، فشار و ... واکنشگر ها و محصولات می باشند. N تعداد کل واکنشگر ها و محصولات، n توان مخرج و K ترم جذب واکنش می باشد. برای واکنش های یکطرفه معادله واکنش به صورت زیر خواهد بود:



$$r = \frac{k \prod_{i=1}^{reactant} f(Basis)_i^{v_i}}{\left[1 + \sum_{k=1}^N \left(K_k \prod_{g=1}^N f(Basis)_g^{\gamma_g} \right) \right]^n}$$

در HYSYS ترمهای صورت و مخرج این معادله در دو صفحه مجزا به ترتیب تحت نام های Numerator و Denominator وارد سیستم می شوند.



مثلاً واکنش با سینتیک زیر به صورت ذیل وارد سیستم می شود:

$$r_1 = \frac{31.44e^{(-31763/RT)} \cdot P_{DEE}}{1 + 1.2185 \times 10^{-6} e^{(41060/RT)} \cdot P_{ETOH} + 5.295 \times 10^{-6} e^{(33010/RT)} \cdot P_{DEE} + 3.573 \times 10^{-5} e^{(26200/RT)} \cdot P_{H_2O}}$$

Heterogeneous Catalytic Reaction: Rxn-1

Component	Mole Wt.	Stoich Coeff
Ethanol	46.070	0.000
H2O	18.015	1.000
Ethylene	28.054	2.000
diE-Ether	74.123	-1.000
*Add Comp**		

Balance Error: 0.00000
Reaction Heat (25 C): 1.2e+05 kJ/kgmole

Stoichiometry Basis Numerator Denominator

Delete Name Rxn-1 Not Ready Kinetics Help

Heterogeneous Catalytic Reaction: Rxn-1

Basis

Basis	Partial Pres
Base Component	diE-Ether
Rxn Phase	VapourPhase
Min. Temperature	-273.1 C
Max Temperature	3000 C

Basis Units: kPa
Rate Units: kgmole/m3-s

Stoichiometry Basis Numerator Denominator

Delete Name Rxn-1 Not Ready Kinetics Help

Heterogeneous Catalytic Reaction: Rxn-1

Forward Reaction

A	3.1440e+01
E	31763
ك	<empty>

Reverse Reaction

A'	<empty>
E'	<empty>
ك'	<empty>

Components	Forward Order	Reverse Order
Ethanol	0.0000	0.0000
H2O	0.0000	0.0000
Ethylene	0.0000	0.0000
diE-Ether	1.000	0.0000
<empty>		

Stoichiometry Basis Numerator Denominator

Delete Name Rxn-1 Ready Kinetics Help

Heterogeneous Catalytic Reaction: Rxn-1

Component Exponents

A	E [kJ/kgmole]	Ethanol	H2O	Ethylene	diE-Ether	Denominator Exponent
1.2185e-06	-41060	1.0000	0.00000	0.00000	0.00000	0.1
5.2950e-06	-33010	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1
3.5730e-05	-26200	0.00000	1.0000	0.00000	0.00000	0.1
<empty>	<empty>	<empty>	<empty>	<empty>	<empty>	<empty>

Denominator Exponent: 1

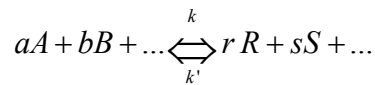
Delete Row

Stoichiometry Basis Numerator Denominator

Delete Name Rxn-1 Ready Kinetics Help

– واکنش سینتیکی Kinetic

در این مدل با فرض واکنش دو طرفه زیر

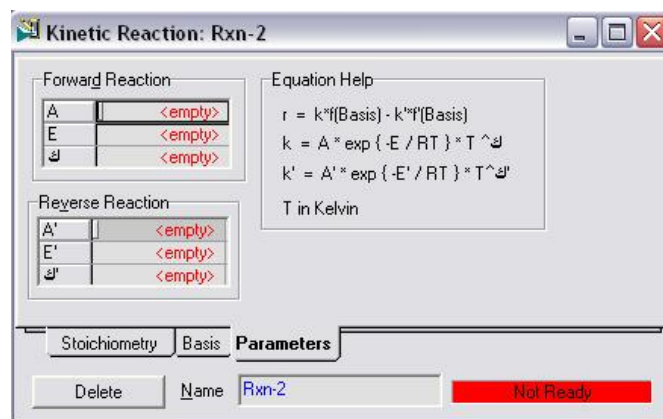


سینتیک واکنش به صورت کلی مطابق رابطه زیر نوشته می شود که از قانون power law تبعیت می کند :

$$r_A = k \cdot f(\text{Basis}) - k' \cdot f'(\text{Basis})$$

$$k = AT^B \exp(-E/RT) , \quad k' = A'T^{B'} \exp(-E'/RT)$$

که برای واکنش های رفت و برگشت ترم های سینتیکی مربوطه به صورت مجزا وارد سیستم می شوند. همچنین استوکیومتری واکنش باید تماماً به سیستم وارد شود.

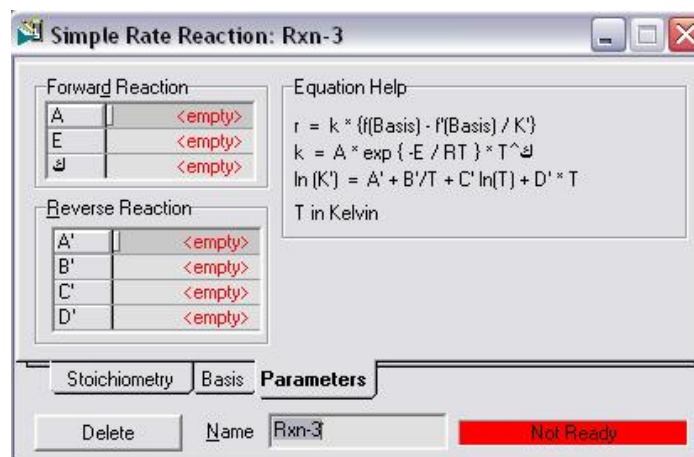


– واکنش Simple Rate

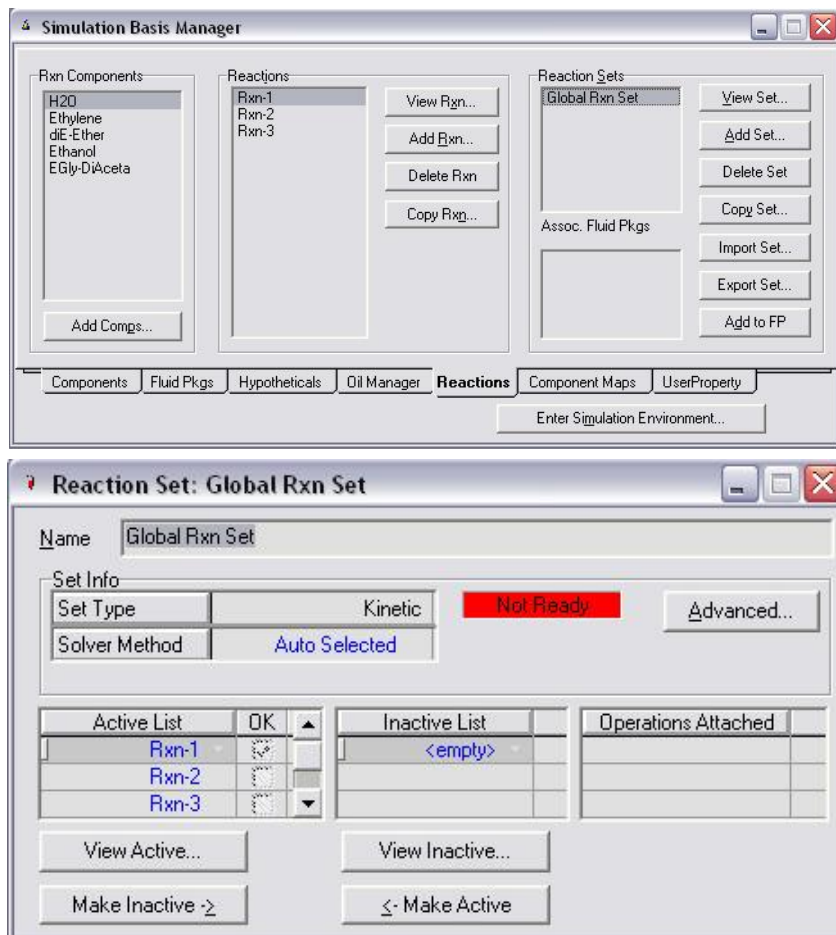
واکنش Simple بسیار شبیه واکنش Kinetic است با این تفاوت که در این نوع واکنش به جای وارد کردن ثابت واکنش برگشتی ، لازم است تا ثابت تعادل سینتیکی وارد سیستم شود.

$$k = AT^B \exp(-E/RT)$$

$$\ln(K') = A' + \frac{B'}{T} + C' \cdot \ln(T) + D' \cdot T$$



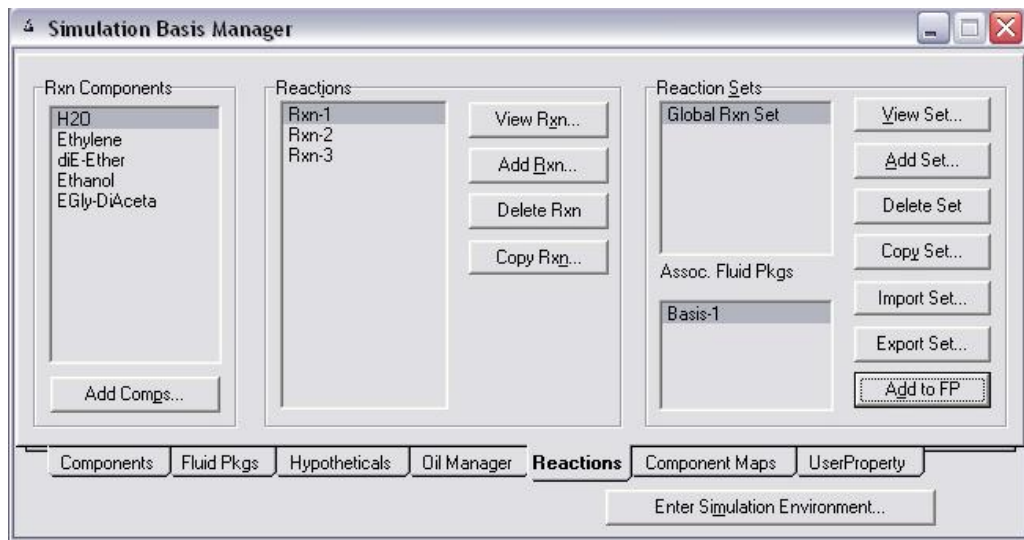
پس از معرفی واکنش ها به سیستم روش حل معادلات واکنش بایست انتخاب شود. در قسمت Reaction Set روی بسته واکنشهای تعریف شده کلیک می کنیم.



در این صفحه می توان هر کدام از مجموعه واکنش های دسته انتخاب شده را فعال یا غیر فعال نمود. برای انتخاب روش حل گزینه Solver Method را انتخاب می کنیم. در این قسمت می توان یکی از روش های حل زیر را انتخاب کرد.

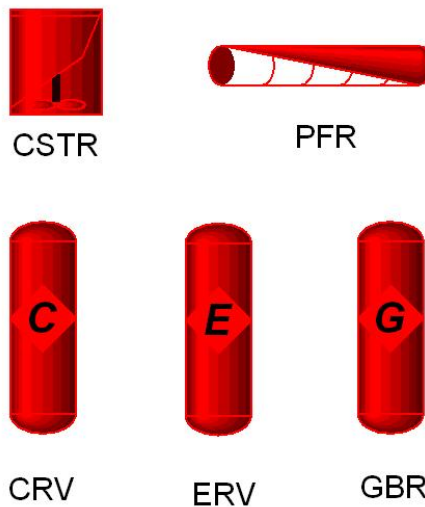
- گزینه Newton Method : در این روش با استفاده از مشتق تابع سرعت و یک حدس اولیه معادله سرعت حل می شود.
- گزینه Rate Iterated : نوعی روش نیوتن است که فرض می کند عناصر قطر ماتریس ژاکوبین برابر صفر باشد. در مواقعی که بر هم کنش اندکی بین واکنش ها موجود باشد از این مدل حل استفاده می شود.
- گزینه Rate Integrated : این روش از معادله سرعت انتگرال می گیرد. این روش دقیق ولی کند می باشد.
- گزینه Auto Selecte : با انتخاب این گزینه معادله ابتدا از روش نیوتن حل می شود که در صورت عدم موفقیت از روش دوم و نهایتاً از روش آخری حل می کند.

پس از همه این مراحل و تنظیمات لازم دسته معادلات واکنش انتخاب شده باید به صفحه FP انتقال پیدا کند که جهت این کار از دکمه Add to FP استفاده می کنیم.



۲- راکتور های شیمیایی

در نرم افزار HYSYS ۵ نوع راکتور شیمیایی وجود دارند که عبارتند از :



- راکتور CSTR (Continues Stirred Tank Reactor)
- راکتور PFR (Plug Flow Reactor)
- راکتور Conversion
- راکتور Equilibrium
- راکتور Gibbs

باید توجه داشت که در راکتور های PFR و CSTR بر خلاف راکتور های دیگر که محاسبات ترمودینامیکی است ، محاسبات از نوع سینتیکی است. هرگاه برای ما Sizing مهم باشد از این دو نوع راکتور بایست استفاده گردد و اگر برای ما انجام واکنش و رسیدن به تبدیل مورد نظر مهم باشد می توان از راکتورهای دیگر هم استفاده کرد. تفاوت راکتور های PFR و CSTR تفاوت در نوع رژیم جریان آنها می باشد.

باید توجه داشت که برای هر کدام از این ۵ نوع راکتور هر واکنشی را نمی توان تعریف کرد.

- در راکتور های PFR و CSTR انواع واکنش هایی را که دارای سینتیک هستند می توان استفاده کرد.

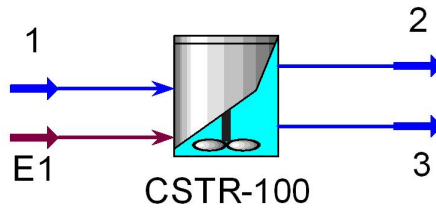
- از راکتور های Conversion تنها برای واکنش های تبدیلی می توان استفاده نمود.

- از راکتورهای Equilibrium تنها جهت انجام واکنش های تعادلی استفاده می شود.

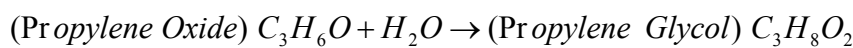
- از راکتور Gibbs برای واکنش هایی استفاده می شود که در آن استوکیومتری واکنش مشخص نیست. برای واکنش هایی که استوکیومتری آن معلوم باشد نیز استفاده می گردد.

تمرین ۱:

با استفاده از اطلاعات موجود راکتور CSTR زیر را شبیه سازی نمایید.



واکنش زیر در هر دو فاز مایع سبک و سنگین در راکتور اتفاق می افتد:



$$-r_{(C_3H_8O_2)} = 1.7 \times 10^{13} \exp(-75362(kJ/kgmol)/RT) \times C_{(C_3H_6O)}$$

که در آن غلظت ها بر واحد $\frac{lb\ mol}{ft^3}$ و سرعت واکنش بر مبنای $\frac{lb\ mol}{ft^3 \cdot hr}$ است. واکنش نسبت به اکسید پروپیلن از درجه اول می باشد.

PP: UNIQUAC

مشخصات خوراک :

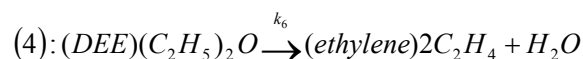
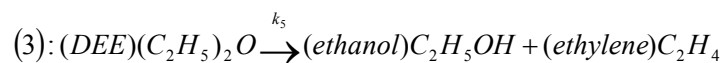
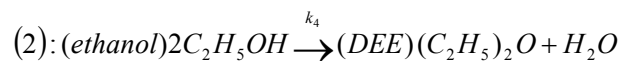
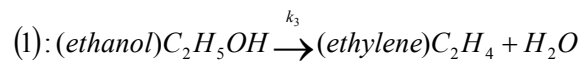
1		
Temperature	75.00	F
Pressure	19.70	psia
Molar Flow	760.6	lbmole/hr
Comp Mole Frac (12C3Oxide)	0.1972	
Comp Mole Frac (H2O)	0.8028	
Comp Mole Frac (12-C3diol)	0.0000	

- انتقال حرارت به صورت Cooling می باشد.
- افت فشار راکتور : 3 Psi
- حجم راکتور : 280 ft³
- ارتفاع مایع در راکتور : 75%
- دمای جریان خروجی از راکتور : 120 °F
- راکتور به صورت استوانه ای و افقی است.

مطلوبست نمایش درصد تبدیل اکسید پروپیلن ؟

تمرین ۲:

با استفاده از اطلاعات موجود راکتور آدیباتیک PFR زیر را شبیه سازی نمایید.
 سنتز دی اتیل اتر از اتانول روش غیر مستقیم تولید این ماده نامیده می شود. راکتور از نوع آدیباتیک پلاگ است و واکنش های زیر در فاز گاز در آن انجام می شود:



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

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

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

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

PP:UNIQUAC

مشخصات خوراک:

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

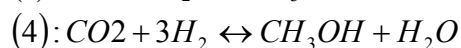
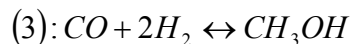
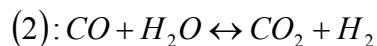
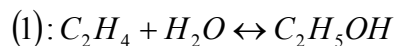
- ضرایب تداخل مواد را از مدل UNIFAC VLE تخمین بزنید.
- برای محاسبه افت فشار از رابطه ارگام استفاده کنید.
- راکتور را به حجم ۵۰ متر مکعب با طول ۶/۶۲۵ متر با تعداد یک لوله و کسر خالی بستر ۰/۴۵ در نظر بگیرید.
- قطر کاتالیست ها را برابر ۰/۰۲ متر، ضریب کرویت برابر ۱، دانسیته ذرات برابر 990 kg/m^3 و ظرفیت حرارتی را 400 kJ/kg-C در نظر بگیرید.

مطلوبست رسم منحنی تغییرات دما در طول راکتور

مطلوبست رسم تغییرات غلظت واکنشگرها و محصولات در طول راکتور

تمرین ۳ :

سنتز متانول در یک راکتور بستر ثابت مد نظر می باشد. فرض بر اینست که طول راکتور به حد کافی دراز است و واکنش ها را می توان تعادلی در نظر گرفت. واکنش ها عبارتند از :



PP: PRSV

- واکنش ها همگی در فاز گازی انجام می شوند.
- برای واکنش یک رابطه تعادلی به صورت زیر است:

$$\ln(K_{eq}) = \frac{5308.7}{T} - 1.376 \ln(T) + 2.0785 \times 10^{-3} T - 0.2683 \times 10^{-6} T^2 - 7.125$$

- پارامتر های تعادلی سه واکنش دیگر را می توانید از زیر صفحه Library در قسمت Add Reaction انتخاب نمایید.
- مشخصات خوراک :

1		
Temperature	126.9	C
Pressure	8000	kPa
Molar Flow	100.0	kgmole/h
Comp Mole Frac (CO)	0.2000	
Comp Mole Frac (CO2)	0.0500	
Comp Mole Frac (H2O)	0.0100	
Comp Mole Frac (Ethanol)	0.0010	
Comp Mole Frac (Ethylene)	0.0010	
Comp Mole Frac (Methane)	0.2850	
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.4500	
Comp Mole Frac (Methanol)	0.0030	

- دمای خروجی راکتور را ۲۴۵ درجه سانتیگراد انتخاب کنید.
- نوع انتقال حرارت را Cooling انتخاب نمایید.

مطلوبست درصد تبدیل و پیشرفت واکنش ها

مطلوبست مشخصات جریان خروجی

جریان دیگری مشابه با مشخصات جریان خوراک ۱ تعریف کرده و آنرا وارد راکتور گیبس نمایید. دمای جریان خروجی از راکتور را برابر ۲۴۵ درجه سانتیگراد قرار دهید. در قسمت Reaction با انتخاب دو حالت Gibbs Reaction Only و Specify Equilibrium Reactions به صورت جداگانه مشخصات جریان های خروجی راکتور گیبس را با مشخصات جریان خروجی راکتور تعادلی مقایسه نموده و نتیجه گیری نمایید.

تمرین ۴:

واکنش های احتراق زیر را در نظر بگیرید:

- (1): $CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$
 (2): $C_2H_6 + 3.5O_2 \rightarrow 2CO_2 + 3H_2O$
 (3): $C_3H_8 + 5O_2 \rightarrow 3CO_2 + 4H_2O$
 (4): $n-C_4H_{10} + 6.5O_2 \rightarrow 4CO_2 + 5H_2O$
 (5): $iso-C_4H_{10} + 6.5O_2 \rightarrow 4CO_2 + 5H_2O$

PP: PR

همه واکنش ها در فاز گازی هستند. وقوع واکنش های بالا را در جریان خوراک با مشخصات زیر در یک راکتور مناسب شبیه سازی نمایید.

Composition		
	Fuel	Air
Comp Mole Frac (Methane)	0.918367	0
Comp Mole Frac (Ethane)	0.020408	0
Comp Mole Frac (Propane)	0.020408	0
Comp Mole Frac (i-Butane)	0.020408	0
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.020408	0
Comp Mole Frac (Oxygen)	0	0.21
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0	0.79
Comp Mole Frac (CO ₂)	0	0
Comp Mole Frac (H ₂ O)	0	0

Material Stream		
	Fuel	Air
Temperature (C)	25	25
Pressure (kpa)	150	150
Molar Flow kgmole/hr	1933	1386

مطلوبست مشخصات جریان خروجی راکتور و درصد تبدیل و درجه پیشرفت واکنش ها



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

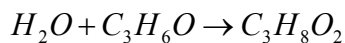
HYSYS

جلسه ششم

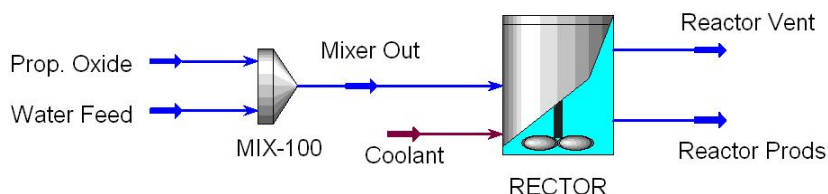
- آشنایی با مفهوم Case Study همراه با حل یک مثال نمونه برای راکتور ها
- آشنایی با انواع مختلف برج ها و محیط شبیه سازی برج ها در HYSYS
-

تمرین ۱:

واحد تولید پروپیلن گلایکول از پروپیلن اکساید را با اطلاعات داده شده زیر شبیه سازی نمایید.



$$r_{C_3H_8O_2} = k \cdot C_{H_2O} \cdot C_{C_3H_6O} \quad , \quad k = 1.7 \times 10^{13} e^{(-75362/RT)}$$


PP : UNIQUAC

جهت تخمین ضرایب دو تایی نامعلوم از معادله UNIFAC-VLE استفاده نمایید.

مشخصات جریان های خوراک عبارتند از (همه واحد ها در سیستم آحاد SI می باشند):

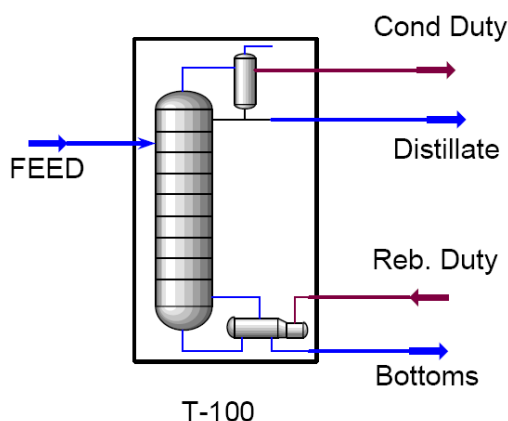
Prop. Oxide			Water Feed		
Temperature	23.89	C	Temperature	23.89	C
Pressure	111.5	kPa	Pressure	111.5	kPa
Molar Flow	68.04	kgmole/h	Molar Flow	277.0	kgmole/h
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000		Comp Mole Frac (H2O)	1.0000	
Comp Mole Frac (12-C3diol)	0.0000		Comp Mole Frac (12-C3diol)	0.0000	
Comp Mole Frac (12C3Oxide)	1.0000		Comp Mole Frac (12C3Oxide)	0.0000	

- واکنش را برای هر دو فاز مایع در نظر بگیرید.
- افت فشار راکتور را برابر صفر در نظر بگیرید. حجم راکتور برابر ۷/۹۲۹ متر مکعب است که ۸۵٪ آن فاز مایع است.
- دمای جریان خروجی راکتور را ۶۰ درجه سانتیگراد در نظر بگیرید.

مطلوبست تعیین حداکثر دمای راکتور برای اینکه میزان تولید محصول به حداکثر برسد. میزان این حداکثری بر پایه مقدار محصول اکسید پروپیلن تولیدی در مایع منهای مقدار آن در بخار خروجی از راکتور می باشد. در دو حالت مطالعه موردی (Case Study) و بهینه سازی (Optimization) این مسئله را بررسی نمایید. محدوده تغییرات دمای راکتور (۵-۱۴۰) درجه سانتیگراد است.

تمرین ۲:

برج تقطیر با ۱۶ مرحله تعادلی را برای جداسازی مخلوط آب و متانول شبیه سازی نمایید. خوراک در سینی ۱۱ ام وارد برج می شود. فشار کندانسور را برابر ۴/۹ بار، فشار ریویلر را برابر ۵/۲ بار و افت فشار کندانسور را برابر ۰/۱ بار در نظر بگیرید. دماهای تخمینی کندانسور و ریویلر را به ترتیب برابر ۱۲۰ و ۱۶۰ درجه سانتیگراد در نظر بگیرید.



FEED		
Temperature	25.00	C
Pressure	520.0	kPa
Molar Flow	2700	kgmole/h
Comp Mole Frac (H2O)	0.5000	
Comp Mole Frac (Methanol)	0.5000	

PP : NRTL-SRK

اطلاعات زیر را به صورت Spec برای صفر کردن درجه آزادی وارد نمایید :

Reflux Ratio : 1.2 (mass)
Distillate Rate : 45000 kg/hr

- مطلوب است درصد خلوص متانول در بالا و پایین برج ؟
- نمودار توزیع غلظت و توزیع دمایی را در طول برج رسم نمایید.
- دو Spec بالا را با Spec های زیر جایگزین کرده و مقادیر Reflux Ratio و Distillate Rate جدید را با حالت قبل مقایسه نمایید.

Methanol mole fraction in Condenser Stage : 0.96
Methanol mole fraction in Reboiler Stage : 0.02

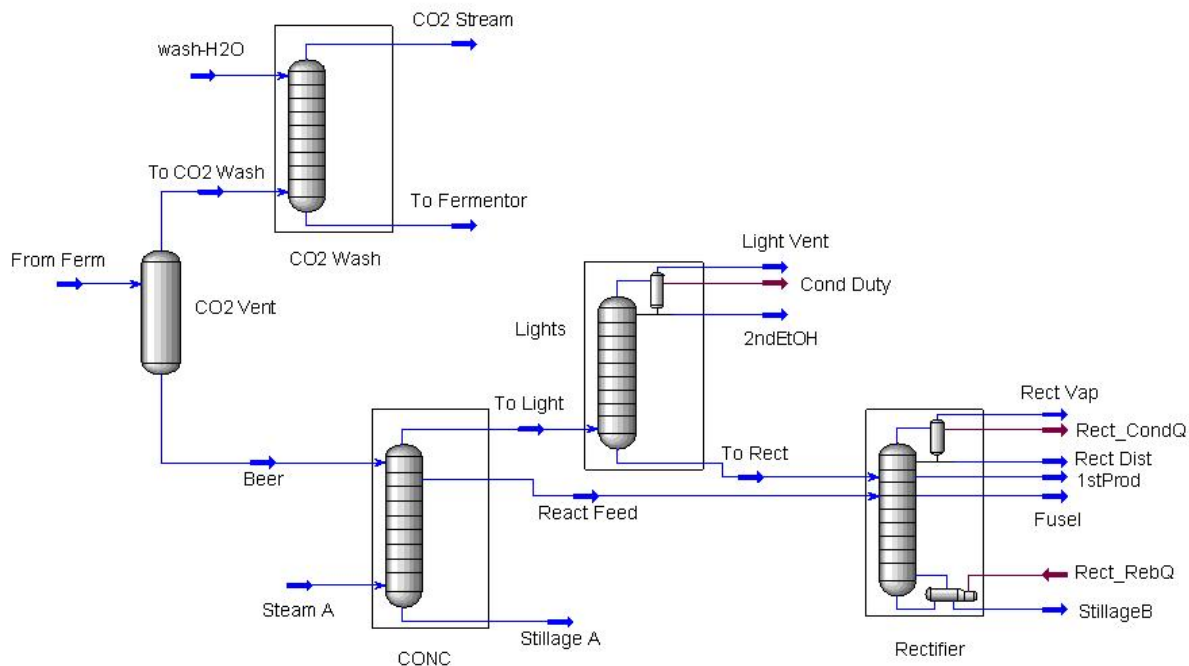
جریان جانبی Side1 را با دبی جرمی 21000 kg/hr از سینی ۵ ام برج خارج نموده و مقادیر جدید Distillate Rate و Reflux Ratio را گزارش نموده و نتیجه گیری نمایید.

تمرین ۳ :

فرآیند تهیه اتانول را با توجه به مشخصات جریان ها و ستونهای زیر شبیه سازی نمایید.

شرح فرآیند:

خروجی فرآیند فرماتاسیون اتانول که مشخصات آن در جدول مربوط به این جریان ملاحظه می شود ، ابتدا وارد ظرف (CO2 Vent) می شود تا جریان گاز حاوی CO2 از جریان محصولات مایع جدا شود. جریان گاز خروجی از این ظرف به دلیل اینکه مقداری از اتانول را همراه خود دارد ، جهت بازیافت اتانول وارد ستون (CO2-Wash) شده و در نهایت اتانول بازیافتی وارد فرمانتور می شود. جریان غنی از اتانول محصول فرمانتور هم که از پایین ظرف (CO2 Vent) خارج می گردد به برج تغلیظ (Concentrator) وارد شده و به صورت ناهمسو با جریان بخار داغ تماس پیدا می کند. محصول اصلی که شامل محصول آرتوتروپیک اتانول است از سینی ششم این برج خارج می شود و بخارات بالایی این برج هم که بیشتر شامل CO2 و متانول باقیمانده است وارد برج خالص سازی (Light) می شود. محصول انتهایی برج (Light) و محصول خروجی از میانه برج (Concentrator) جهت تغلیظ محصول اتانول وارد برج تقطیر (Rectifier) می شوند. نهایتاً محصول اتانول از سینی دوم این برج و محصول الکل های سنگین تحت عنوان (Fusel Oil) از سینی بیستم این برج استحصال می شوند.



PP : NRTL

جهت تخمین ضرایب دو تایی نامعلوم از معادله UNIFAC-VLE استفاده نمایید.

مشخصات جریان های خوراک عبارتند از (همه واحد ها در سیستم آحاد SI می باشند) :

FromFerm	
Temperature	30.00
Pressure	102.0
Molar Flow	2400
Comp Mole Frac (Ethanol)	0.026914
Comp Mole Frac (Methanol)	0.000027
Comp Mole Frac (1-Propanol)	0.000009
Comp Mole Frac (2-Propanol)	0.000009
Comp Mole Frac (1-Butanol)	0.000007
Comp Mole Frac (3-M-1-C4ol)	0.000021
Comp Mole Frac (2-Pentanol)	0.000005
Comp Mole Frac (AceticAcid)	0.000003
Comp Mole Frac (CO2)	0.026582
Comp Mole Frac (H2O)	0.946415
Comp Mole Frac (Glycerol)	0.000007

wash-H2O	
Temperature	25.00
Pressure	101.3
Molar Flow	130.0
Comp Mole Frac (H2O)	1.0000

Steam A	
Temperature	140.0
Pressure	101.3
Molar Flow	610.6
Comp Mole Frac (H2O)	1.0000

- ستون CO2 Wash دارای ۱۰ مرحله است. فشار در طول ستون ثابت و برابر با 101.325 kpa می باشد.
- ستون Conc. دارای ۱۷ مرحله است و محصول جانبی این برج از سینی ۶ ام و در فاز بخار خارج می شود. فشار در طول ستون ثابت و برابر با 101.325 kpa می باشد. دماهای تخمینی برج را برابر ۹۰ درجه سانتیگراد در بالای برج و ۱۱۰ درجه سانتیگراد در پایین برج در نظر بگیرید. اطلاعات زیر را به صورت Spec برای صفر کردن درجه آزادی وارد نمایید :

Comp. Recovery : 0.95 molar recovery of Ethanol in Rect_Feed

- ستون Lights دارای ۵ مرحله است. فشار در طول ستون ثابت و برابر با 101.325 kpa می باشد. اطلاعات زیر را به صورت Spec برای صفر کردن درجه آزادی وارد نمایید :

Comp. Recovery : 0.88 mass fraction of Ethanol in condenser liquid.
Draw Rate : 1.6 kgmole/hr molar draw of Light_Vent

- ستون Rect. دارای ۲۹ مرحله است. خوراک های ورودی برج Rect_Feed و To_Rect به ترتیب از سینی های ۱۹ ام و ۲۲ ام وارد برج می شوند. جریان های جانبی خروجی برج 1stProd و Fusel نیز به ترتیب از سینی های ۲ ام و ۲۰ ام خارج می شوند. فشار در طول ستون ثابت و برابر با 101.325 kpa می باشد. دماهای تخمینی برج را برابر ۷۹ درجه سانتیگراد در بالای برج و ۱۰۰ درجه سانتیگراد در پایین برج در نظر بگیرید. اطلاعات زیر را به صورت Spec برای صفر کردن درجه آزادی وارد نمایید :

Comp. Frac : 0.95 mass fraction of Ethanol in stage 2 liquid.
Draw Rate : 0.1 kgmole/hr molar draw of Rect_Vap
Draw Rate : 2 kg/hr mass draw of Rect_Dist
Draw Rate : 3 kg/hr mass draw of Fusel
Reflux Ratio : 7100 molar reflux of condenser

لازم است تا در صفحه Parameter و زیر صفحه Solver در قسمت Damping Factor خانه مربوط به Azeotropic انتخاب شده و این پارامتر در حالت adaptive تنظیم شود.

مطلوبست رسم و تحلیل نمودار توزیع ترکیبات اتانول ، ۱- پروپانول و آب در طول برج ؟
مطلوبست مقدار جزء جرمی اتانول در جریان 1stProd ؟



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

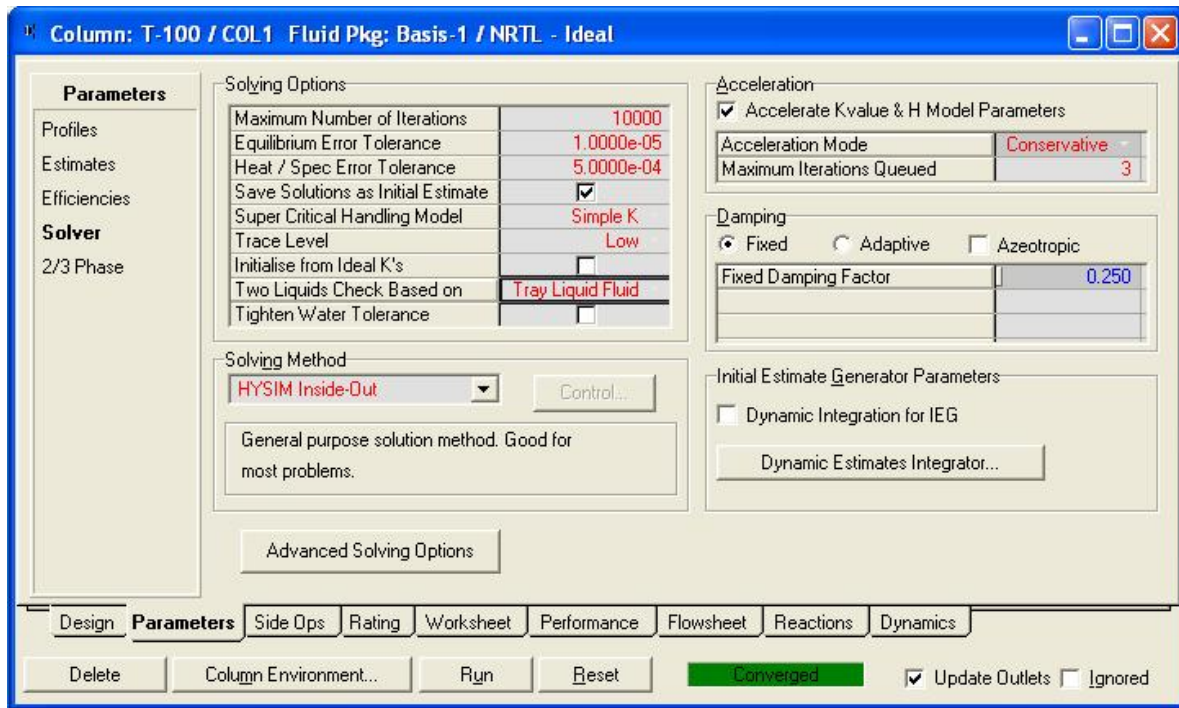
HYSYS

جلسه هفتم

- تنظیم پارامترهای حل برج ها
- شبیه سازی برج تقطیر Short Cut
- شبیه سازی برج های تقطیر همراه با آزنوتروپ
- Case Study و بهینه سازی اقتصادی برج های تقطیر
-

تنظیم پارامترهای حل برج های تقطیر

برای تنظیم پارامترهای حل برج های تقطیر باید از زیر صفحه Parameters گزینه Solver را انتخاب کرد.



Solving Options

- **Super Critical Handling Model**

اگر یک یا چند مرحله از ستون تقطیر در بالاتر از نقطه بحرانی یک یا چند ترکیب کار کند در این صورت Superctical Phase Behavior اتفاق می افتد. اگر HYSYS در طی محاسبات خود با این مشکل مواجه شود پیغامی در این زمینه در پنجره Trace ظاهر می شود. در این صورت HYSYS از معادلات حالت و اکتیویته برای ناحیه فوق بحرانی نمی تواند استفاده کند و بدین منظور سه انتخاب زیر وجود خواهند داشت :

مدل	شرح
Simple K	این مدل ، مدل پیش فرض HYSYS می باشد. HYSYS مقادیر K ترکیبات را بر اساس مدل فشار بخار محاسبه می کند. با استفاده از این روش مقادیر K های محاسباتی ایده آل هستند.
Decrease Pressure	موقعیکه شرایط فوق بحرانی پیش می آید ، HYSYS فشار کل سینی های برج را با یک فاکتور تخمین داخلی کاهش می دهد . این فاکتور به تدریج تا زمانیکه هیچ گونه شرایط فوق بحرانی بر روی هر کدام از سینی های برج وجود نداشته باشد ، ادامه پیدا می کند. پس از این مرحله فشار برج مجدداً تا فشار مورد نظر به تدریج افزایش می یابد. اگر در حین افزایش فشار برج مجدداً شرایط فوق بحرانی اتفاق افتاد ، یک بار دیگر فشار کاهش پیدا کرده و مراحل بالا تکرار می شود.
Adjacent Tray	موقعیکه شرایط فوق بحرانی برای یکی از سینی های برج پیش می آید ، HYSYS نزدیکترین سینی به بالای این سینی را که دارای شرایط فوق بحرانی نیست ، جستجو می کند. سپس شرایط غیر بحرانی این سینی برای محاسبات فازی سینی با شرایط بحرانی جایگزین می شود.

• Trace Level

این گزینه سطح نمایش جزئیات مربوط به پیغام پنجره Trace را در سه حالت کم ، متوسط و زیاد تعیین می کند.

• Initialize from idial K's

با انتخاب این گزینه HYSYS برای حل برج از مقادیر K های ایده آل محاسبه شده توسط رابطه های فشار بخار مورد استفاده در HYSIM استفاده می کند. به صورت پیش فرض این گزینه غیر فعال است و HYSYS از تخمین های موجود برای K ترکیبات استفاده می کند.

• Two Liquid Check Based on

گزینه های زیر در این قسمت قابل انتخاب هستند:

- No 2 Liq Check :

با انتخاب این گزینه برج قادر به بررسی دو فاز مایع نیست.

- Tray Liquid Fluid :

در این حالت محاسبات براساس ترکیبات مایع در برج صورت می گیرد.

- Tray Total Fluid :

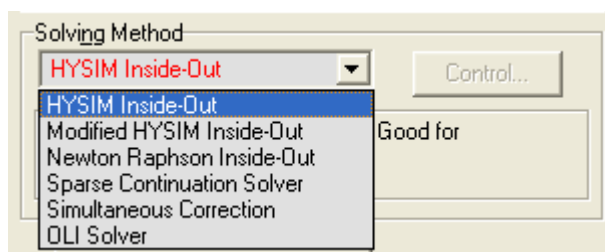
در این حالت محاسبات بر اساس ترکیبات کلی سیال موجود در برج صورت می گیرد.

- **Tighten Water Tolerance**

با انتخاب این گزینه ، HYSYS به منظور حل دقیق برج های همراه با آب ، توزیع خطای موازنه آب را روی خطای موازنه کلی افزایش می دهد. در حالت پیش فرض این گزینه غیر فعال است.

Solving Methods

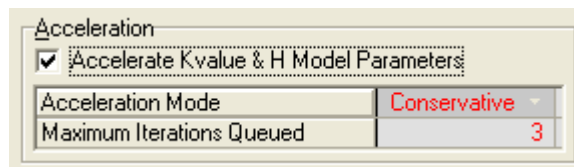
HYSYS برای حل برج ها از روش های زیر استفاده می کند که توضیحات مربوط به هرکدام از این روش ها در جدول زیر ملاحظه می گردد.



روش حل	توضیحات
HYSYM Inside-Out	یک روش عمومی است که برای اکثر مسائل مناسب است.
Modified HYSYM Inside -Out	یک روش عمومی است که اجازه می دهد از Heat , tee , mixer و Exchanger در محیط Sub-Flowsheet برج ها استفاده کنیم.
Newton Raphson Inside-Out	یک روش عمومی است که اجازه می دهد از واکنش های سینتیکی در فاز مایع در محیط Sub-Flowsheet برج استفاده کنیم.
Sparse Continuation Solver	این روش حل محاسبات ۲ فاز مایع در روی یک سینی را پشتیبانی می کند و برای حل سیستم های شیمیایی به شدت غیر ایده آل و ستون های تقطیر همراه با واکنش شیمیایی به کار برده می شود.
Simulation Correction	یک روش همزمان با استفاده از روش های dogleg است که برای سیستم های شیمیایی خوب است. این روش برای ستون های تقطیر همراه با واکنش های شیمیایی هم به کار برده می شود.
OLI Solver	این روش فقط برای ستون های تقطیر همراه با سیستم های الکترولیتی کاربرد دارد.

Acceleration

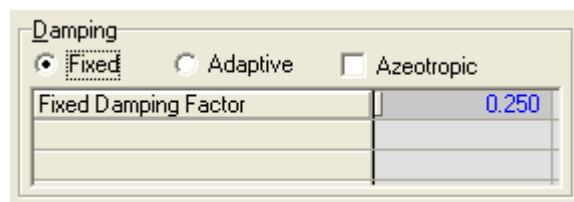
زمانی که گزینه Accelerate K value & H Model Parameters فعال می شود ، دو گزینه دیگر Acceleration Mode و Maximum Iteration Queued نیز فعال می شوند که مربوط به یک برنامه Acceleration تحت عنوان Dominant Eigenvalue Method (DEM) می شود.



برنامه DEM یک برنامه حل عددی می باشد که میزان همگرایی حل برج به روش Simple K و محاسبات پارامترهای آنتالپی را شتاب می بخشد. این روش به طور مستقل برای هر مرحله برج بکار برده می شود. زمانی که مشاهده می شود خطای تعادلی در طول محاسبات همگرایی به آرامی کاهش می یابد ، توصیه می شود این گزینه فعال شود. انتخاب این پارامتر به افزایش سرعت همگرایی کمک می کند. شایان ذکر است که گزینه Accelerate K value & H Model Parameters برای برج های دارای آزئوتروپ ، به دلیل جلوگیری از همگرایی برج ، نباید انتخاب شود.

Damping Factor

Damping Factor در برج های جداسازی ، اندازه گام حلقه بیرونی محاسبات برج را برای هر مرحله از محاسبات مدل های ترمودینامیکی حلقه های درونی ، کنترل می کند. برای اکثر برج های جداسازی مربوط به هیدروکربن ها ، مقدار پیش فرض آن برابر یک است که منجر به یک تعدیل گام کامل می گردد. زمانی که خطاهای مربوط به Spec های تعیین شده و خطاهای مربوط به موازنه های حرارتی خیلی کوچک می شوند ولی خطاهای مربوط به محاسبات تعادلی برج به سمت واگرایی پیش می روند و یا دچار نوسانات زیادی می شوند ، همگرایی برج تقطیر به کندی پیش می رود. در این حالت جهت افزایش محاسبات همگرایی برج تقطیر و کاهش نوسانات ، پیشنهاد می شود تا مقدار Damping Factor بین ۰/۹-۰/۳ تنظیم گردد.



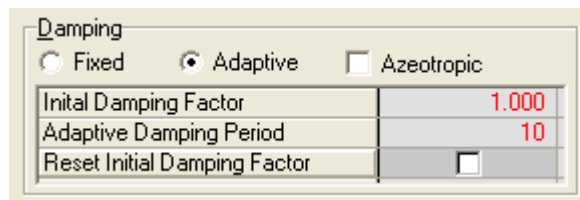
فعال کردن گزینه Adaptive این امکان را به شما می دهد تا HYSYS خود به طور اتوماتیک این پارامتر را تنظیم کند. اگر باز هم همگرایی در برج اتفاق نیافتاد ، در این صورت باید دامنه Tolerance محاسبات را زیاد کرد.

برخی از انواع برج ها فقط با یک Damping Factor معین به همگرایی می رسند . در جدول زیر به برخی از این موارد اشاره شده است:

Damping Factor	نوع برج
۱	کلیه برج های هیدروکربنی از Demethanizer ها تا Debutanizer ها و واحد های تقطیر نفت خام.
۱	برج های غیر هیدروکربنی که شامل جداسازی هوا و دفع نیتروژن می شوند.
۱	اکثر برج های پتروشیمیایی که شامل برج های اسپلیتر اتیلن و پروپیلن می شوند و همچنین برج های BTX
۱	برج های جذب آمین
۰/۲۵ الی ۰/۵	برج های بازیافت آمین ها ، برج های استریپر TEG و استریپرهای آب ترش
۰/۲۵ الی ۰/۵	برج های شیمیایی به شدت غیر ایده آل بدون آزنوتروپ
۰/۵ الی ۱	برج های شیمیایی به شدت غیر ایده آل همراه با آزنوتروپ

برای برج های آزنوتروپ لازم است تا همراه با ورود مقدار مثبت Damping Factor گزینه Azeotrope فعال شود و یا مقدار Damping Factor به صورت منفی وارد شود که در این صورت به طور اتوماتیک گزینه Azeotrope فعال می گردد.

در صورت فعال کردن گزینه Adaptive سه گزینه Initial Damping Factor ، Adaptive Damping Period و Reset Initial Damping Factor فعال می شوند.



- **Adaptive Damping Factor**

نقطه شروع تغییرات Damping را معین می کند.

- **Adaptive Damping Period**

مقدار پیشفرض آن برابر ۱۰ است. در این حالت بعد از هر ۱۰ مرحله تکرار ، HYSYS میزان دفعات افزایش خطا ها را در برابر کاهش خطاها برای آخرین ۱۰ مرحله ارزیابی می کند. اگر میزان افزایش خطا ها بیشتر از مقدار تلورانس تعریف شده باشد ، بیانگر این است که همگرایی به کندی صورت می گیرد ، بنابراین Damping Factor بعدی از حاصلضرب ۰/۷ در Damping Factor جاری محاسبه و بکار برده می شود. بعد از ۱۰ مرحله تکرار بعدی ، همین روال دوباره تا بیشترین میزان کاهش Damping Factor تکرار می شود . متناوباً اگر در آخرین مرحله با افزایش خطا مواجه بودیم ، Damping Factor برای حصول به همگرایی سریع ، افزایش می یابد.

- **Reset Initial Damping Factor**

اگر این گزینه فعال شود ، مقدار جاری Damping Factor برای حل بعدی برج به کار برده می شود و اگر غیر فعال شود ، مقدار اولیه آن مورد استفاده قرار می گیرد.

محیط Sub-flowsheet در برج های تقطیر

Sub-flowsheet در برج های تقطیر شامل یک سری از شاخه های جریان و تعدادی از تجهیزات و همه اطلاعات مربوط به جریان های اتصالی در صفحه main flowsheet می باشد. در صفحه main flowsheet برج به صورت یک برج منفرد با چندین جریان خوراک و چندین جریان محصول به نظر می رسد. Sub-flowsheet در برج های تقطیر دارای مزایای زیر است:

- **استفاده از معادلات ترمودینامیکی مختلف**

نرم افزار HYSYS این امکان را به کاربر می دهد تا در محیط Sub-flowsheet ، یک معادله ترمودینامیکی مشخص را برای یک برج انتخاب کند. این قابلیت برای حالتیکه ممکن است برای حل ستون برج یک معادله ترمودینامیکی دیگر بهتر باشد، مفید است. همچنین برای حالتیکه ستون برج همه ترکیبات موجود در main flowsheet را استفاده نکند این قابلیت وجود دارد که با کاهش تعداد ترکیبات در ستون تقطیر سرعت همگرایی حل برج را افزایش داد.

- **منحصر کردن حل کننده برج (Isolation of Column Solver)**

محیط Sub-flowsheet برج این اجازه را به کاربر می دهد تا روی برج تمرکز کرده و کلیه تغییرات مورد نظر خود را بر روی برج اعمال کند بدون اینکه کل تجهیزات موجود در main flowsheet نیاز به حل مجدد داشته باشند.

• امکان ایجاد Custom Template ها در محیط Sub-flowsheet

علاوه بر ساختار های مختلف موجود از برج های پیش فرض در قسمت Custom Template ها، کاربر قادر است تا ساختار های مختلفی از برج های پیچیده را با ترکیب تجهیزات مختلف موجود در محیط Sub-flowsheet ایجاد کرده و در قسمت Custom Template ذخیره نماید. برای مثال کاربر قادر است کندانسور استاندارد موجود در برج ها را با یک مبدل حرارتی در محیط Sub-flowsheet جایگزین نماید و یا ریویلر کتل استاندارد برج تقطیر را با مبدل ترموسیفون جایگزین نماید.

• توانایی در حل همزمان برج های پیچیده (چندین برج متصل به هم)

محیط Sub-flowsheet برج از یک حل کننده همزمان (Simultaneous Solver) استفاده می کند. لذا کلیه عملیات ها در محیط Sub-flowsheet به صورت همزمان حل شوند. این قابلیت به کاربر این اجازه را می دهد تا چندین برج متصل به هم را در این محیط بدون نیاز به استفاده از لاجیک های Recycle حل کند.

برج های تقطیر Short Cut

طراحی برج های تقطیر کار دشواری است. بدست آوردن تعداد سینی های مورد نیاز و میزان جریان برگشتی از پارامترهای مهم طراحی برج هاست. از برج های تقطیر Short Cut برای طراحی اولیه برج های تقطیر در HYSYS استفاده می شود. ورودی های اولیه طراحی این برج مشخصات خوراک ورودی، میزان حدسی Light Key در محصول پایین برج و میزان حدسی Heavy Key در محصول بالای برج، فشارهای کندانسور و ریویلر و مقدار حدسی Reflux Ratio می باشند. نتایج حاصل از حل برج های Short Cut به شرح ذیل است که از آنها می توان به عنوان ورودی های شبیه سازی برج تقطیر واقعی استفاده کرد.

- تعداد سینی های مینیمم
- تعداد سینی های واقعی
- محل سینی خوراک
- دمای کندانسور
- دمای ریویلر
- میزان دبی بخار در بخش Rectifier
- میزان دبی مایع در بخش Rectifier
- میزان دبی بخار در بخش Stripping
- میزان دبی مایع در بخش Stripping
- بار حرارتی کندانسور
- بار حرارتی ریویلر

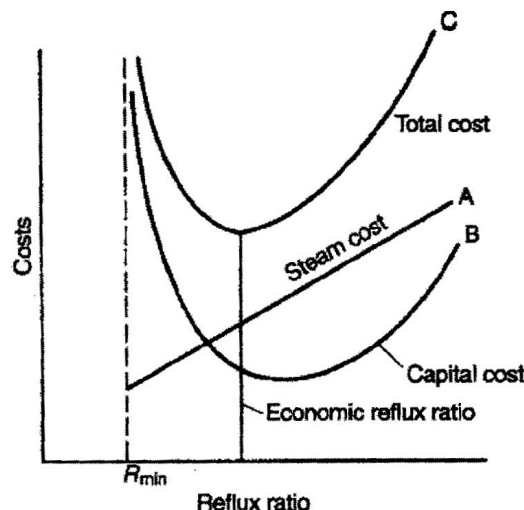
یکی از پارامترهای مهم در برج های تقطیر میزان جریان برگشتی $\left(R = \frac{L}{D}\right)$ می باشد. در روش Short Cut برای محاسبه مینیمم جریان برگشتی برای مخلوط های ایده آل که ضریب فراریت نسبی در آن تقریباً ثابت بماند، از رابطه Underwood استفاده می شود. در حالتیکه مینیمم جریان برگشتی وجود داشته باشد تعداد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

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

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

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

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



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

تمرین ۱:

برج تقطیری را به منظور جداسازی اتیلن از مخلوط گازی با ترکیب درصد نشان داده شده در جریان خوراک طراحی نمایید به طوری که ۹۵ درصد بازیافت اتیلن از خوراک داشته باشیم و درصد اتیلن محصول خروجی بالای برج ۹۹ درصد مولی باشد. مشخصات خوراک این برج عبارتست از:

FEED		
Temperature	-20.69	F
Pressure	261.1	psia
Molar Flow	100.0	lbmole/hr
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0001	
Comp Mole Frac (Methane)	0.0016	
Comp Mole Frac (Ethane)	0.2400	
Comp Mole Frac (Ethylene)	0.7575	
Comp Mole Frac (Propene)	0.0008	

فاز محصول : بخار

میزان حدسی Light Key در محصول پایین برج : ۱۵ درصد مولی اتیلن

میزان حدسی Heavy Key در محصول بالای برج : ۰/۸ درصد مولی اتان

فشارهای کندانسور : ۲۵۸/۱۶۷ psi

فشار ریویلر : ۲۶۳/۹۶۹ psi

مقدار حدسی Reflux Ratio : ۳

مقادیر محاسبه شده زیر را گزارش کنید :

- تعداد سینی های واقعی :
- محل سینی خوراک :
- دمای کندانسور :
- دمای ریویلر :

○ نمودار تغییرات نسبت جریان برگشتی برج Short Cut را در برابر تغییرات تعداد سینی های برج ترسیم نمایید.

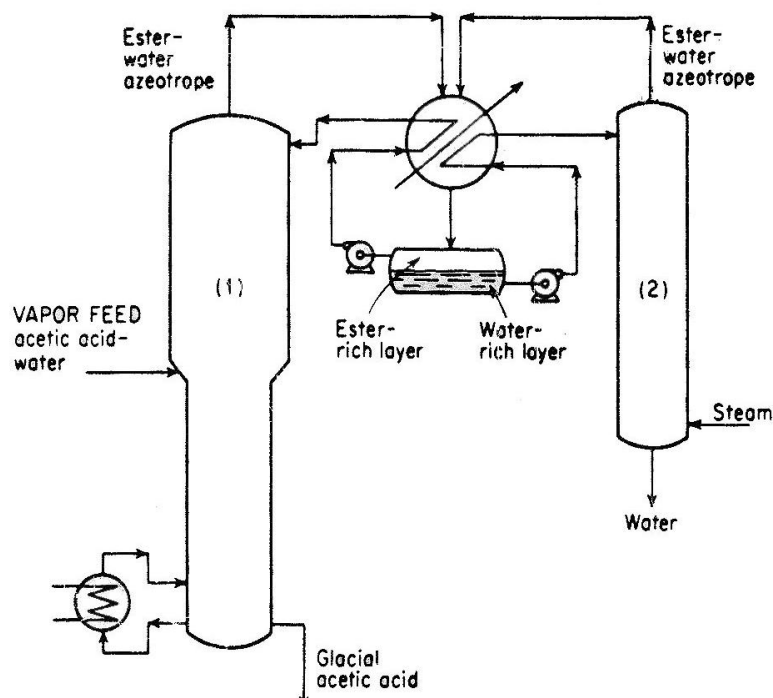
○ با توجه به اطلاعات موجود برج تقطیر واقعی را شبیه سازی نموده و نتایج خروجی های حاصل از این دو برج را مقایسه کنید.

تقطیر آزنوتروپی

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

مثالی از تقطیر آزنوتروپی مطابق شکل مربوط به جداسازی آزنوتروپی محلول اسید استیک-آب می باشد که در آن از بوتیل استات به عنوان شکننده آزنوتروپ استفاده می شود. علی رغم اختلاف نقطه جوش بالای آب و اسید استیک، به علت فراریت نسبی کم اجزاء جداسازی آنها به روش تقطیر معمولی هزینه زیادی در بر دارد. در نتیجه اگر مقدار کافی بوتیل استات برای تشکیل آزنوتروپ با تمام آب موجود در خوراک به بالای ستون تقطیر اضافه شود، محلول آزنوتروپ به راحتی از اسید استیک که نقطه

جوش بالایی دارد جدا می گردد. محلول آزنوتروپ پس از سرد شدن وارد دکانتور می شود تا دو فاز مایع غیر قابل انحلال از هم جدا شوند. فاز دوم (سنگین تر) به عنوان جریان برگشتی و منبع شکننده به بالای برج باز گردانده می شود و فاز اول هم که حاوی یک مقدار شکننده می باشد جهت جداسازی وارد ستون جداکننده کوچک دوم می شود.



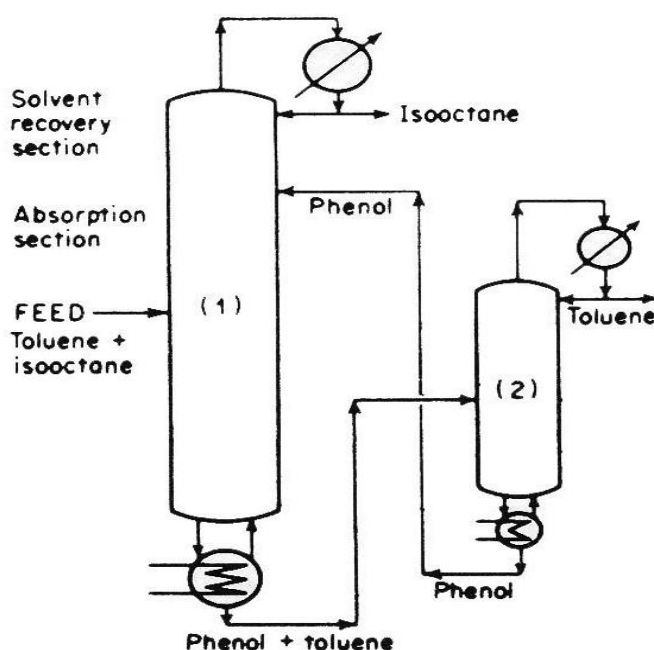
در برخی موارد آزنوتروپ جدیدی که تشکیل می شود دارای هر سه جزء می باشد. آب گیری از مخلوط آب-تانول توسط بنزن مثالی از این نوع می باشد. در این حالت هم محصول آزنوتروپ بالای برج به دو لایه مایع تفکیک می شود که یکی غنی از بنزن بوده و به عنوان جریان برگشتی به بالای ستون بازگردانده می شود و دیگری غنی از آب بوده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

تقطیر استخراجی

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

مثالی از تقطیر استخراجی، استفاده از حلال فنل در جداسازی تولوئن و ایزواکتان است. جداسازی تولوئن از هیدروکربن های پارافینی به علت فراریت نسبی کم یا وجود آزنوتروپ خیلی مشکل و یا غیر ممکن است. اگر ایزواکتان را به عنوان حلال پارافینی در نظر بگیریم، در حضور فنل فراریت نسبی ایزو

اکتان بالا می رود و مطابق شکل ایزواکتان به صورت محصول مقطر از بالای برج گرفته می شود و تولوئن و فنل از پایین برج خارج شده و در برج دیگری تقطیر می شود. این جداسازی به راحتی انجام می شود و فنل دوباره به برج باز می گردد.

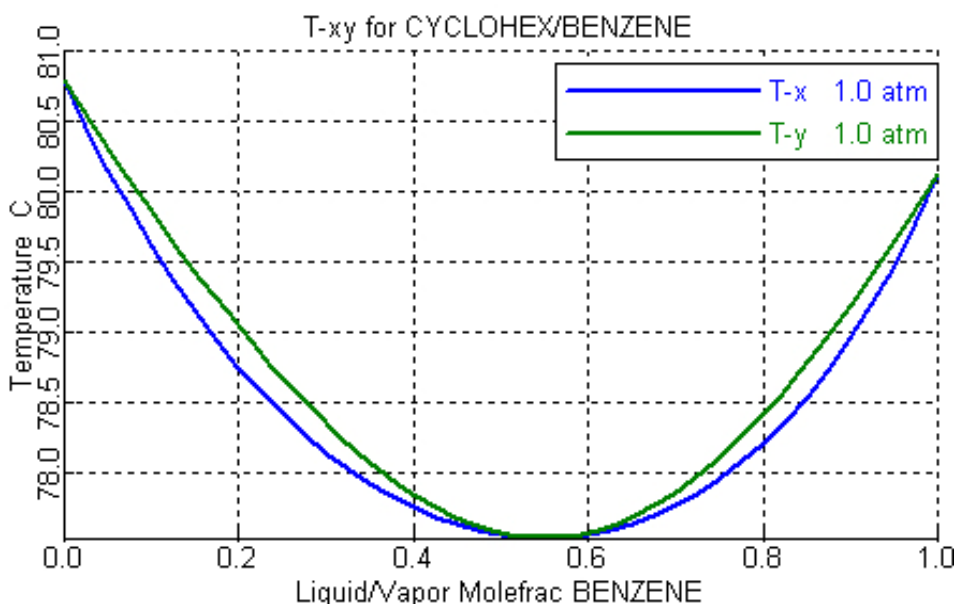


مقایسه تقطیر آزنوتروپی و تقطیر استخراجی

معمولاً افزودن یک ماده خارجی مانند شکننده یا حلال به یک فرآیند نامطلوب است. چرا که هیچوقت کاملاً از سیستم خارج نمی شود و ایجاد ناخالصی در محصول می کند. مقداری اتلاف هم (حدود ۱/۰٪ شدت جریان حلال) وجود دارد که اجتناب ناپذیر است. از طرفی هم هزینه بازیابی حلال می تواند زیاد باشد. بنابراین از این فرآیندها زمانی استفاده می شود که هزینه های آن در مقایسه با تقطیر معمولی کمتر باشد. از نظر مقایسه ای به دو دلیل معمولاً تقطیر استخراجی مناسبتر از تقطیر آزنوتروپی است: اولاً قدرت انتخاب حلال برای تقطیر استخراجی بیشتر از قدرت انتخاب شکننده در تقطیر آزنوتروپی است. به دلیل اینکه در تقطیر استخراجی انتخاب حلال به تشکیل آزنوتروپ بستگی ندارد. ثانیاً میزان تبخیر و فراریت حلال در تقطیر استخراجی بسیار کمتر از تقطیر آزنوتروپی است.

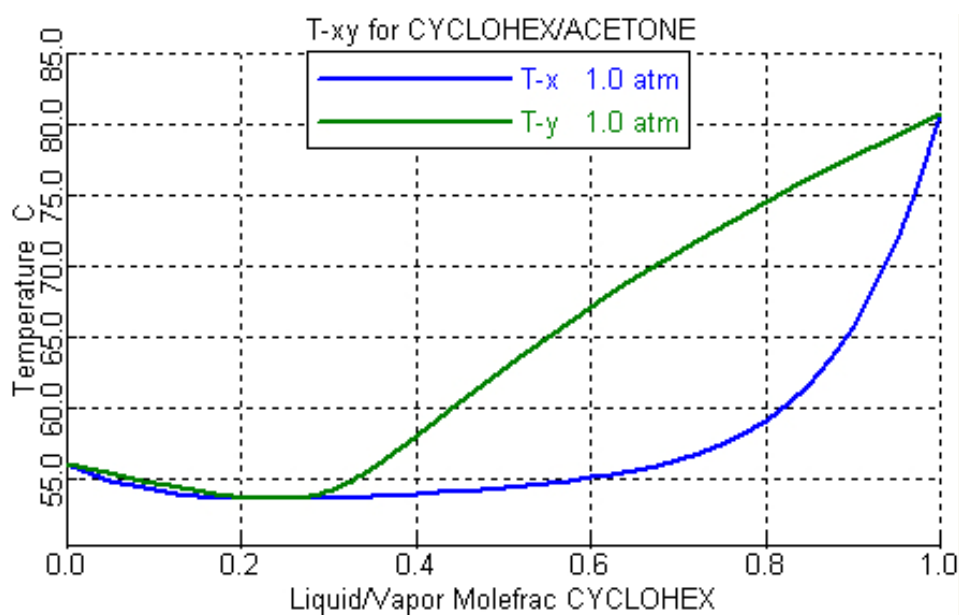
تمرین ۲:

مخلوط بنزن و سیکلو هگزان دارای نقطه آزنوتروپ زیر است :

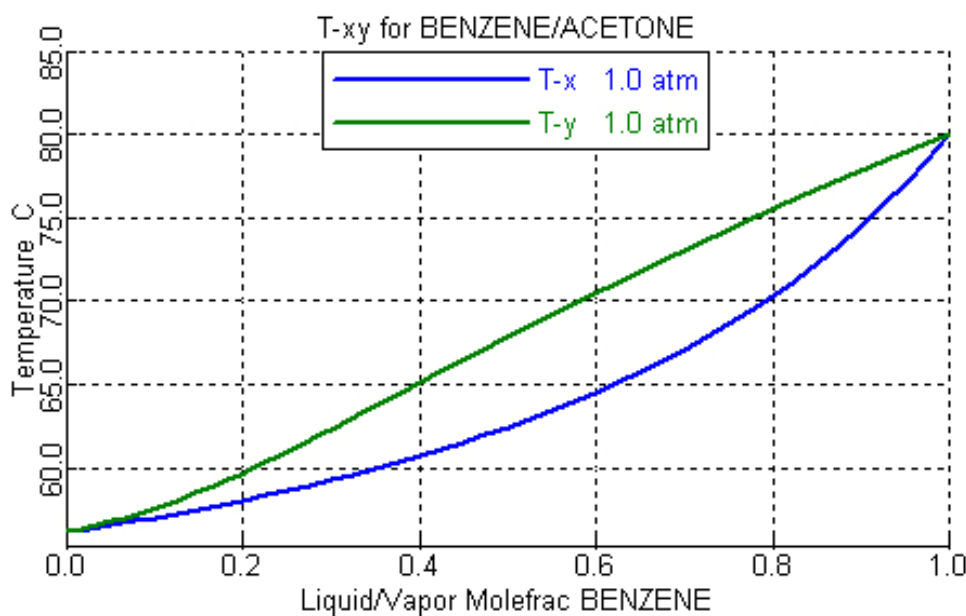


برای جداسازی بنزن و سیکلو هگزان از تقطیر آزنوتروپی استفاده می شود که برای شکستن نقطه آزنوتروپ آن از حلال استن استفاده می شود.

مخلوط استن و سیکلو هگزان مطابق شکل زیر دارای نقطه آزنوتروپ ۰/۶۸۸ استن و ۰/۳۱۲ سیکلو هگزان (درصدهای جرمی) است :

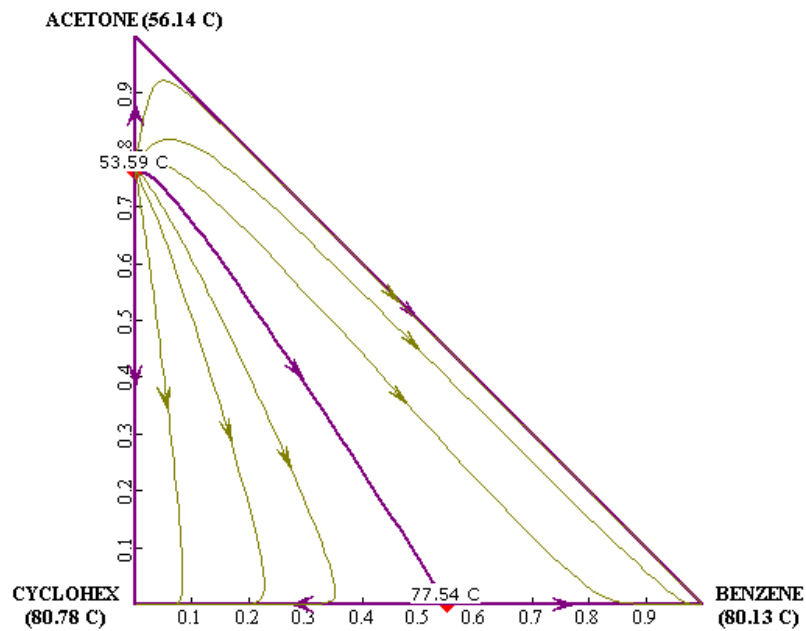


منحنی تقطیر مخلوط استن و بنزن هم به صورت زیر است :

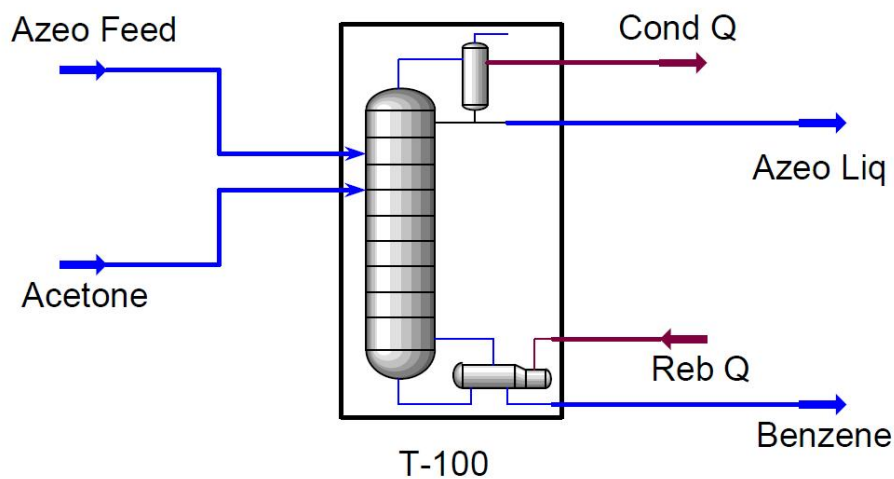


همانطور که از منحنی های بالا ملاحظه می شود، استن با سیکلو هگزان نقطه آزنوتروپی با دمای جوش پایینتر از آزنوتروپ بنزن و سیکلو هگزان تشکیل می دهد و از طرف دیگر با توجه به منحنی تقطیر بنزن و استن فراریت استن بالاتر از فراریت بنزن است و به راحتی از بنزن جدا می شود.

منحنی تقطیر سه جزئی سیستم بنزن-استن-سیکلو هگزان به صورت شکل زیر می باشد:



در نتیجه در سیستم تقطیر آزنوتروپی بنزن به صورت نسبتاً خالص از پایین برج خارج می گردد و مخلوط سیکلو هگزان با استن از بالای برج خارج می شود.



مطلوبست شبیه سازی فرآیند فوق با اطلاعات داده شده زیر:

PP: UNIQUAC

مشخصات جریان های خوراک عبارتند از:

AZE0 FEED		
Temperature	77.00	C
Pressure	101.3	kPa
Mass Flow	85.00	kg/h
Master Comp Mass Frac (Benzene)	0.5180	
Master Comp Mass Frac (Cyclohexane)	0.4820	

ACETONE		
Temperature	55.00	C
Pressure	101.3	kPa
Mass Flow	95.00	kg/h

در تقطیر آزنوتروپی بالا با توجه به نمودار تعادلی سیستم استن سیکلوهگزان و دی و ترکیب درصدهای داده شده برای خوراک Azeo Feed حداقل دی لازم برای استن چقدر است؟

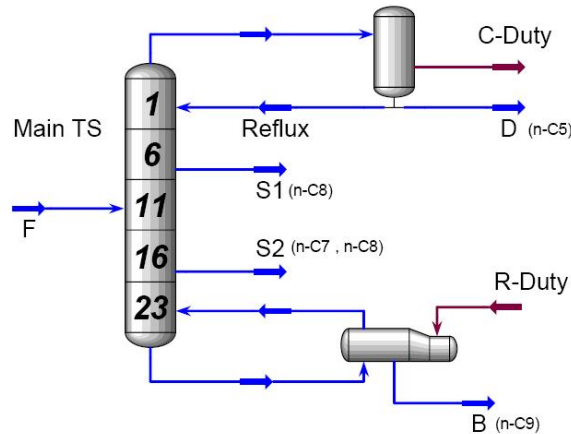
مشخصات برج تقطیر T-100 :

FP	VLE-UNIQUAC
نوع کندانسور	کلی
تعداد کل سینی ها	۲۸
سینی خوراک Azeo Feed	۶
سینی خوراک Acetone	۲۱
فشار کندانسور (Kpa)	۹۵
فشار ریویلر (Kpa)	۱۰۱/۳
تخمین دمای کندانسور (C)	۵۵
تخمین دمای ریویلر (C)	۸۰
بازیافت استن در کندانسور	٪۹۹/۸
بازیافت بنزن در ریویلر	٪۹۹/۸
Damping Factor	-۰/۵

راهنمایی: روش حل برج تقطیر را در حالت Sparse Continuation قرار دهید. این روش برای موارد فوق العاده غیر ایده آل و سایر موارد سخت برای همگرا شدن برج تقطیر بکار می رود.

تمرین ۳ :

برج تقطیر با ۲۳ مرحله تعادلی برای جداسازی ترکیبات خوراک F با مشخصات جدول زیر را شبیه سازی نمایید. فشار کندانسور را برابر ۲۰ پوند ، فشار ریپویلر را برابر ۲۶ پوند و افت فشار کندانسور را برابر صفر پوند در نظر بگیرید. شدت جریان مایع خروجی از کندانسور را برابر $200 \frac{lb}{hr}$ و نسبت شدت جریان برگشتی جرمی را برابر ۵ در نظر بگیرید. جریان های جانبی S_1 و S_2 هر دو در فاز مایع و دارای دبی جریان های $\frac{lbmole}{hr}$ ۲ می باشند.



F		
Temperature	118.4	F
Pressure	24.95	psia
Mass Flow	940.0	lb/hr
Comp Mass Flow (n-Pentane)	220.0000	lb/hr
Comp Mass Flow (n-Hexane)	110.0000	lb/hr
Comp Mass Flow (n-Heptane)	160.0000	lb/hr
Comp Mass Flow (n-Octane)	50.0000	lb/hr
Comp Mass Flow (n-Nonane)	400.0000	lb/hr

PP : Chao-Seader

- نمودار توزیع غلظت را در طول برج رسم نمایید.
- نمودار تغییرات تابع هدف زیر را بر اساس تغییرات جریان برگشتی و تغییرات جریان جانبی S_1 در محدوده ذکر شده رسم نمایید.

$$\text{Maximize } D_{C5} + S1_{C6} + S2_{C7} + S2_{C8} + B_{C9} \quad 5 \langle RR \langle 10 \quad , \quad 1 \langle S1 \langle 4$$

- حد مجاز افزایش میزان نسبت جریان برگشتی برای جداسازی بهتر ، برای تابع هدف بالا با شرایط زیر را بدست آورید. نمودار توزیع غلظت و میزان جریان برگشتی را در این حالت با حالت قبلی مقایسه و نتیجه گیری نمایید.

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

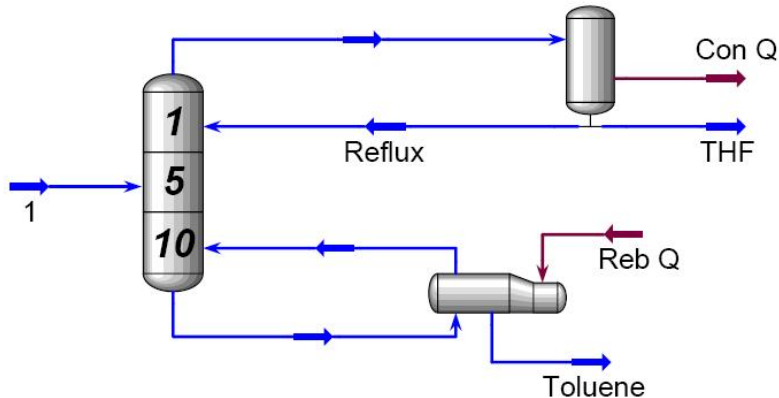
Constraints :

$$\begin{aligned} 0.1 \langle \frac{D}{F} \langle 0.7 & \quad 0.1 \langle \frac{S2}{F} \langle 0.7 \\ 0.1 \langle \frac{S1}{F} \langle 0.7 & \quad 0.05 \langle \frac{B}{F} \end{aligned}$$

(برای بهینه سازی تابع هدف از روش SQP استفاده نمایید.)

تمرین ۴:

برج تقطیر با ۱۰ مرحله تعادلی برای جداسازی ترکیبات خوراک ۱ با مشخصات جدول زیر را شبیه سازی نمایید. فشار کندانسور را برابر 10^3 kPa ، فشار ریبویلر را برابر 10^7 kPa و افت فشار کندانسور را برابر صفر پوند در نظر بگیرید. شدت جریان مایع خروجی از کندانسور را برابر $1500 \frac{\text{kg}}{\text{hr}}$ و مقدار جریان برگشتی را برابر ۲ در نظر بگیرید.



PP : Wilson-SRK

جهت تخمین ضرایب دو تایی نامعلوم از معادله UNIFAC-VLE استفاده نمایید.
مشخصات جریان خوراک عبارت است از :

1		
Temperature	10.00	C
Pressure	140.0	kPa
Molar Flow	45.00	kgmole/h
Comp Mass Frac (TetraHyFuran)	0.4400	
Comp Mass Frac (Toluene)	0.5600	

دو Spec جدید زیر را وارد کرده و Spec های دیگر را غیر فعال نمایید.

Comp. Frac. Spec : 0.95 molar fraction of Toluene in Reboiler Stage.
Comp. Frac. Spec : 0.95 molar fraction of THF in Condenser Stage.

مطلوبست بهینه سازی تابع هدف زیر (سود فرآیند) برای رسیدن به بالاترین میزان خلوص محصولات در بالا و پایین برج؟

$$F = (THF \text{ Flow} \times THF \text{ Value} + Toluene \text{ Flow} \times Toluene \text{ Value}) - (Feed \text{ Flow} \times Feed \text{ Value}) - (\text{Reb. Heat Flow} \times \text{Heating Cost} + \text{Con. Heat Flow} \times \text{Cooling Cost}) / 3600$$

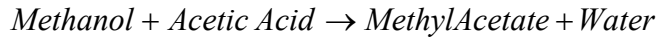
Feed Cost	0.05 \$/kg	THF Price	0.2739 \$/kg
Heating Cost	0.737 \$/kWh	Toluene Price	0.1444 \$/kg
Cooling Cost	0.471 \$/kWh		

مطلوبست ترسیم نمودار تغییر تابع سود بر حسب تغییر در خلوص محصولات بالا و پایین برج؟
(دامنه خلوص محصولات را بین ۰/۸۸ تا ۰/۹۹ با گام های ۰/۰۵ در نظر بگیرید.)

مجتمع فنی عالی نوین پارسیان - مدرس: مهدی رازی فر

تمرین ۵:

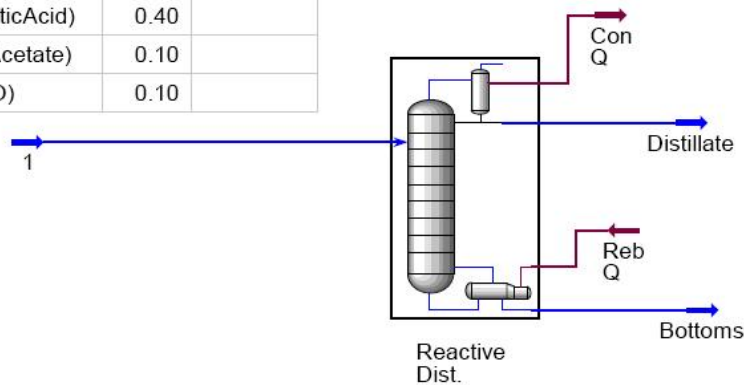
برج تقطیر واکنشی با ۱۵ مرحله تعادلی برای جداسازی متیل استات حاصل از واکنش متانول و اسید استیک از ترکیبات خوراک Feed با مشخصات جدول زیر را شبیه سازی نمایید.



$$k = 10^5 \exp(-23000(Kj / Kgmole) / RT) \cdot C_{Meth} \cdot C_{AceticAcid}$$

خوراک در سینی ۶ وارد برج می شود و واکنش در سینی های ۱۰-۵ اتفاق می افتد. فشار کندانسور را برابر ۹۰ kpa ، فشار ریبولر را برابر ۹۷ kpa و افت فشار کندانسور را برابر صفر در نظر بگیرید. شدت جریان مایع خروجی از کندانسور را برابر $20 \frac{kgmole}{hr}$ و مقدار جریان برگشتی را برابر ۵ در نظر بگیرید.

1		
Temperature	75.00	C
Pressure	101.3	kPa
Molar Flow	45.00	kgmole/h
Comp Mole Frac (Methanol)	0.40	
Comp Mole Frac (AceticAcid)	0.40	
Comp Mole Frac (M-Acetate)	0.10	
Comp Mole Frac (H2O)	0.10	



ترکیب درصد متیل استات در محصول خروجی چقدر است؟

راهنمایی: روش حل برج تقطیر را در حالت Sparse Continuation قرار دهید. این روش برای موارد فوق العاده غیر ایده آل و سایر موارد سخت برای همگرا شدن برج تقطیر بکار می رود.



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

HYSYS

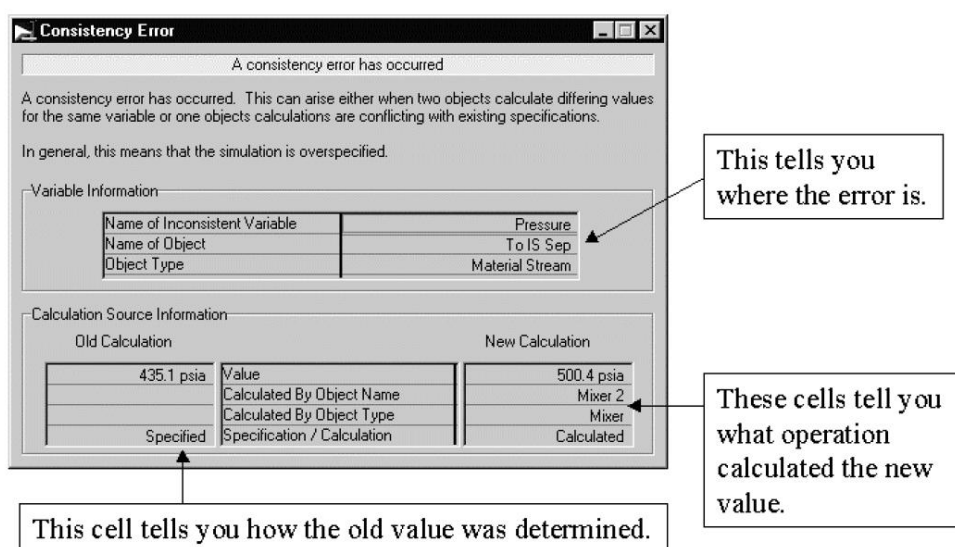
جلسه هشتم

- انواع خطاهای متداول در شبیه سازی و طریقه رفع آنها
- انواع خطاهای متداول در برج ها و طریقه رفع آنها

انواع خطاهای متداول در شبیه سازی و طریقه رفع آنها

در این فصل به بررسی برخی از خطاهای متداول در شبیه سازی که باعث عدم حل شبیه سازی می شود به همراه روش رفع این خطاها اشاره می شود. هدف از این فصل توانمند ساختن کاربر جهت رفع این خطاهاست.

۱- همواره دقت نمایید تا حل کننده (Solver) در حالت Hold نباشد. زمانیکه خطای سازگاری در سیستم رخ بدهد حل کننده خود بخود در این حالت قرار می گیرد. با فشار دادن دکمه سبز واقع در نوار ابزار حل کننده در حالت active قرار می گیرد. خطای سازگاری (Consistency error) مشابه شکل زیر است:



Consistency Error

A consistency error has occurred

A consistency error has occurred. This can arise either when two objects calculate differing values for the same variable or one objects calculations are conflicting with existing specifications.

In general, this means that the simulation is overspecified.

Variable Information

Name of Inconsistent Variable	Pressure
Name of Object	To IS Sep
Object Type	Material Stream

Calculation Source Information

Old Calculation		New Calculation	
435.1 psia	Value	500.4 psia	Value
	Calculated By Object Name	Mixer 2	Calculated By Object Name
	Calculated By Object Type	Mixer	Calculated By Object Type
Specified	Specification / Calculation	Calculated	Specification / Calculation

This tells you where the error is.

These cells tell you what operation calculated the new value.

This cell tells you how the old value was determined.

۲- سعی کنید با دقت تمام تمام خطاهای سازگاری را که حین حل در برنامه رخ داده مطالعه نمایید. این کار کاربر را در پیدا کردن ریشه خطا و رفع آن کمک خواهد کرد.

۳- معمولاً رفع خطا در یک شبیه سازی در مسیر جریان فرآیندی است. برای مثال همیشه جریان های خوراک در سمت چپ وارد می شوند و جریان های محصولات در سمت راست قرار دارند. بنابراین اگر جریان های بالادستی رفع خطا شوند عملکرد جریان های پایین دستی عاری از خطا خواهد بود.

۴- از ابزار work book در Hysys می توان به سرعت پارامترهای شبیه سازی را که توسط کاربر وارد شده و دارای رنگ آبی هستند در جهت رفع خطا تغییر داد. ضمناً باید توجه داشت که حل کننده برنامه در حالت Hold نباشد.

۵- اطمینان حاصل کنید که اطلاعات همه جریان های مورد نیاز (تمام جریان های خوراک ورودی به برج، و معمولاً تمام جریان های خوراک فرآیند) کاملاً وارد برنامه شده باشند.

۶- موقع وقوع خطا از پنجره های Status windows و Trace windows کمک گرفته و به تمام پیام های آبی و قرمز آن توجه ویژه نمایید.

۷- کنترل نمایید تا هیچ جریان و تجهیز مخفی (Hide) و یا غیر فعال (Ignored) نباشد. تجهیزات غیر فعال حل نخواهند شد و تجهیزات مخفی می توانند روی عملکرد تجهیزات دیگر تأثیر بگذارند و منجر به بروز خطا در نتایج شبیه سازی شوند.

۸- زمانیکه از لاجیک Adjust استفاده می شود موارد ذیل را باید مد نظر داشت:

- اطمینان حاصل نمایید که مقادیر طول گام و میزان خطا یا تلورانس منطقی باشند.
- از مقادیر ماکزیمم و مینیمم برای محدود کردن دامنه محاسبات استفاده نمایید.
- مقدار Adjust Variable باید توسط کاربر وارد شده باشد.

انواع خطاهای متداول در برج ها و طریقه رفع آنها

در شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی، برج ها به خاطر اینکه عملیات آنها در مقایسه با عملیات سایر تجهیزات دیگر پیچیده تر است، از کلیدی ترین تجهیزات عملیاتی می باشند. به همین خاطر جداگانه به بررسی موارد رفع خطا در آنها پرداخته می شود:

۱- درجه آزادی در حل کننده Hysys نقش بسیار مهمی را بازی می کند و البته در عملیات برج ها این نقش بسیار محسوس است. وضعیت درجه آزادی در صفحه monitor برج قابل کنترل است و مقدار آن قبل از حل برج می بایست برابر با صفر باشد. تعداد مشخصه های (Spec) فعال در برج بستگی به وضعیت و ساختار برج دارد و با استفاده از فرمول زیر قابل محاسبه است:

$$\text{تعداد جریان های جانبی} + \text{تعداد مبدل های حرارتی جانبی} = \text{تعداد spec های فعال} \\ \text{تعداد استریپر های جانبی} + \text{تعداد pump around ها} +$$

در فرمول بالا کندانسور و ریویولر به منزله مبدل های جانبی محسوب می شوند. البته لازم به ذکر است که کلیه استریپر ها و pump around ها به خاطر جریان های جانبی خروجی از برج دو بار محسوب می شوند.

۲- زمانیکه spec های تعریف شده در برج را فعال می کنید اطمینان حاصل نمایید که spec های مرتبط با همدیگر را انتخاب نکنید. برای مثال در یک برج تقطیر به همراه کندانسور و ریویولر reboiler duty و Over head rate را به عنوان spec های فعال انتخاب نکنید. به خاطر اینکه مقادیر این دو مشخصه به هم مرتبطند. بنابراین انتخاب فعال هر دوی این مشخصه ها به احتمال زیاد باعث ایجاد خطا در حل برج می شود. بهتر است مقادیر Spec های فعال در برج تقطیر را بین بالای برج و پایین برج انتخاب کنیم. برای مثال Overhead vapor rate, Condenser Temperature و Reflux ratio را به عنوان مشخصه های فعال برج انتخاب نکنیم. به خاطر اینکه هر سه مشخصه به

بالای برج مربوط می شوند. برای مثال بهتر است $Overhead\ vapor\ rate$, $Reflux\ ratio$ و $Bottom\ draw\ rate$ انتخاب می شدند.

۳- یکی دیگر از اشتباهات متداول کاربران Hysys در شبیه سازی برج های تقطیر اینست که تمامی جریان های خروجی برج تقطیر را به عنوان مشخصه های فعال برج انتخاب می کنند. مشکل اینجاست که در اینصورت تمامی جریان های محصول تثبیت شده اند و برنامه هیچ گونه انعطاف پذیری برای حل برج ندارد. در این حالت بهتر است مقدار جریان های محصول را در حالت تخمین (Estimate) قرار داده و به جای جریان های محصول مشخصه های دیگر برج را در حالت فعال (Active) قرار دهیم.

۴- تخمین های دمایی در اکثر برج ها مورد نیاز نیستند. به هر حال اگر مقدار آنها در برج وارد شود همگرایی برج سریعتر اتفاق می افتد. باید توجه داشت که تخمین های دمایی فقط برای مراحل بالایی و پایینی برج وارد شوند. در صورتی که برج شامل کندانسور باشد می توان تخمین دمایی مرحله ۲ را هم وارد برنامه کرد.

۵- گاهی از جریان بخار برای تأمین انرژی در پایین برج استفاده می شود. در اینصورت باید برای دفع آب اضافی از سیستم یک جریان جانبی آب خروجی از بالای برج در نظر گرفت.

۶- قبل از حل برج می بایست تمامی جریان های ورودی به برج کاملاً تعریف شده باشند. در برج ها نباید هیچ مشخصه ای در جریان های خروجی تعریف شود. بلکه مشخصه ها باید در صفحه $monitor$ برج به صورت $Spec$ تعریف شوند.

۷- زمانیکه تمام اطلاعات مورد نیاز برج وارد برنامه شد و برج شروع به حل شد هیچ تضمینی وجود ندارد که برنامه به سمت همگرایی پیش برود. معمولاً پیدا کردن دلیل عدم همگرایی حل برج کار دشواری است. در این قسمت به بررسی ۵ وضعیت عدم همگرایی برج که امکان دارد اتفاق بیافتد اشاره می شود که به کاربر کمک می کند ریشه حل مشکل را پیدا کند:

• **وضعیت ۱: برج همزمان با شروع عملیات حل از ادامه حل باز می ماند:**

✓ ممکن است یک مخلوط بخار- مایع در شرایط برج امکان پذیر نباشد. بنابراین نقطه حباب و شبم تمامی جریان های خوراک ورودی به برج را در فشار برج چک کنید و مطمئن شوید که مخلوط بخار مایع امکان پذیر است.

✓ موازنه جرمی دور برج برقرار نباشد. در این حالت چک کنید که مقادیر تخمین های جریان محصول برابر با مجموع جریان های خوراک نیست و یا بزرگتر از آنست.

✓ برای ماده ای که در جریان خوراک موجود نیست مشخصه تعریف شده باشد.

- ✓ برج های بدون کندانسور باید دارای جریان خوراک مایع در بالای برج باشند. و برج های بدون ریویولر باید دارای جریان خوراک بخار در پایین برج باشند.
- **وضعیت ۲: خطای Heat & Spec باعث عدم همگرایی شود:**
 - ✓ برج ممکن است قادر نباشد مشخصه های خلوص مورد نظر را برآورد کند. در این حالت باید تعداد مراحل برج را زیاد کرد.
- **وضعیت ۳: خطای Heat & Spec نوسان کند و باعث عدم همگرایی شود:**
 - ✓ اگر نقطه حباب ترکیبی در برج با نقطه حباب ترکیب یا ترکیبات دیگر برج مشابه باشد، مشخصه آن ترکیب را در برج تغییر دهید.
 - ✓ این نوع خطا می تواند از تشکیل آب در برج نیز حاصل شود. در اینصورت با اضافه کردن یک شاخه جانبی جریان آب برج حل می شود. معمولاً این شاخه جریان آب در کندانسور و یا در هر مرحله دیگر برج می تواند اضافه شود.
- **وضعیت ۴: خطای Equilibrium باعث عدم همگرایی شود:**
 - ✓ چک کنید که دمای محاسبه شده برای مرحله بالای برج خیلی سرد نباشد. وگرنه یک جریان جانبی آب ممکن است مورد نیاز باشد.
 - ✓ چک کنید که موازنه مواد دور برج برقرار باشد. اطمینان حاصل نمایید مشخصه های شما مانع از حل برج نشود.
- **وضعیت ۵: خطای Equilibrium نوسان کند و باعث عدم همگرایی شود:**
 - ✓ این حالت بیشتر در برج های غیر ایده آل رخ می دهد. در این مورد همگرایی با تغییر **damping factor** به عددی مابین ۰/۶-۰/۴ اتفاق می افتد. گزینه دیگر تنظیم **damping factor** در حالت **Adaptive** است که به برنامه این امکان را می دهد که مقدار **damping factor** را تا زمان همگرایی برج تنظیم نماید.



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

HYSYS

جلسه نهم

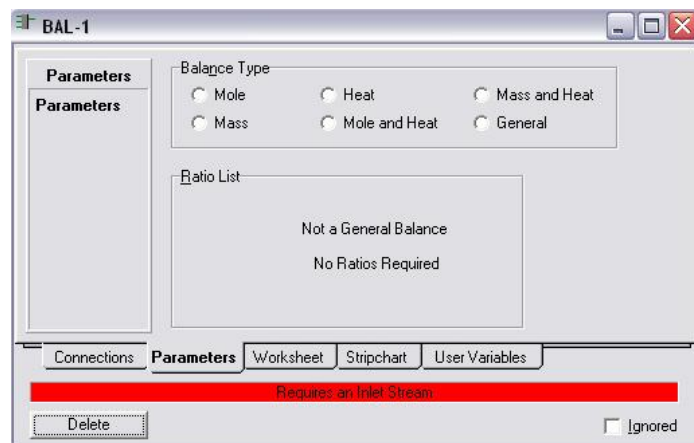
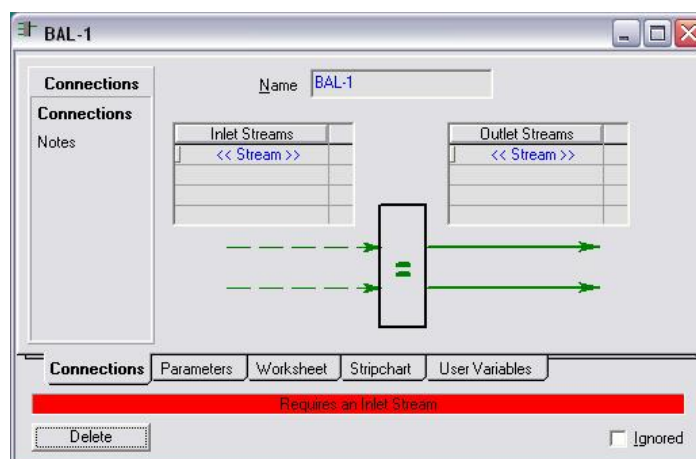
- آشنایی با ادوات منطقی در HYSYS

- Adjust
- Set
- Recycle
- Balances

-

لاجیک Balances

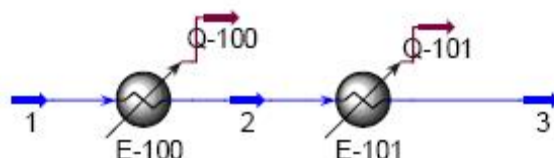
لاجیک Balances، وسیله ای برای بستن موازنه جرم و انرژی برای کلیه جریان های ورودی و خروجی یک حجم کنترل معین می باشد که توسط آن می توان میزان جریان جرمی و انرژی اضافی و یا نقصانی را محاسبه کرد. بدین صورت که جریان های ورودی و خروجی به حجم کنترل را به لاجیک Balance وصل کرده و جریان ورودی و یا خروجی اضافی را به آن وارد می کنیم که درجه آزادی لازم را برای انجام محاسبات مجهولات داشته باشد. لاجیک Balances به پنج فرم مولی (mole)، جرمی (mass)، حرارتی (heat)، مولی و حرارتی (mole and heat) و موازنه عمومی (general) در HYSYS موجود است. لاجیک Balances قادر است تا محاسبات را به دو صورت مستقیم forward و معکوس backward انجام دهد. در حالت General این لاجیک قابلیت بسیار گسترده ای را در حل مسائل (n معادله n مجهولی) داراست و قادر به حل مستقل معادلات جرم و انرژی می باشد. در این حالت علاوه بر حل جریان و ترکیبات مجهول، می توان نسبت خاصی بین ترکیبات در شاخه جریان اعمال کرد. نسبت ترکیبات می تواند بر اساس مولی، جرمی یا حجمی معین شود.



مجتمع فنی عالی نوین پارسیان - مدرس: مهدی رازی فر

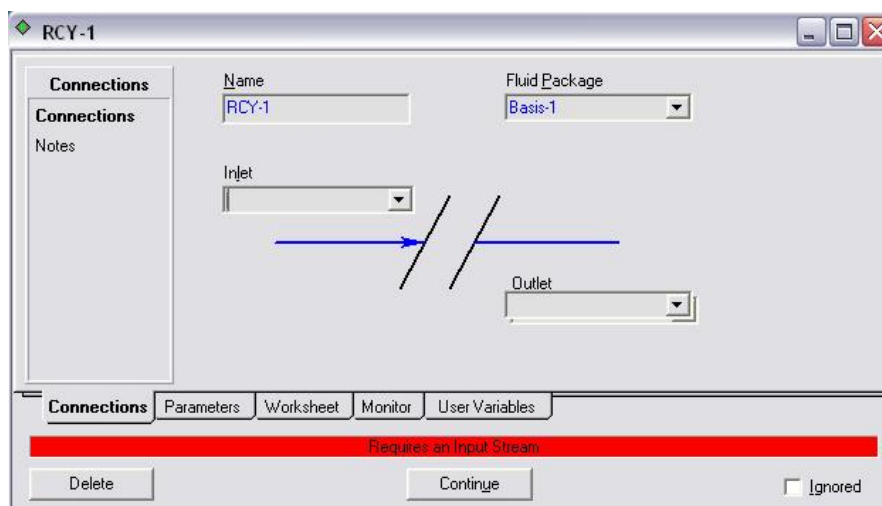
تمرین ۱:

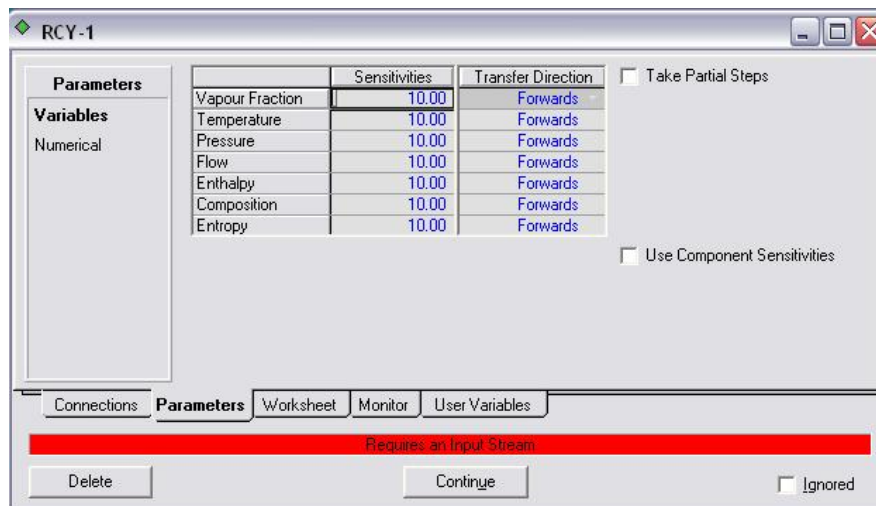
جریان ۱ حاوی آب بوده و دما و فشار آن به ترتیب ۹۰ درجه سانتیگراد و ۲۵۰ کیلو پاسکال می باشد. اگر جریان های انرژی Q-100 و Q-101 به ترتیب ۱۰۰۰۰ و ۲۵۰۰ کیلو ژول بر ساعت، دمای جریان ۳، ۱۰، ۱۰ درجه سانتیگراد و افت فشار های هر دو مبدل ۵ کیلو پاسکال باشند مطلوبست محاسبه دبی جریان ورودی و دمای جریان ۲؟



لاجیک Recycle

یکی از توانایی های مهم نرم افزار HYSYS شبیه سازی واحد های عملیاتی همراه با جریان برگشتی است. جریان برگشتی به جریانی اطلاق می شود که از پایین دست فرآیند به بالادست فرآیند منتقل می شود. از نظر منطق محاسباتی، واحد Recycle یک بلوک تئوری در جریان فرآیند ایجاد می کند که جریان ورودی به این بلوک Calculated و جریان خروجی از آن Assumed نامیده می شود. لازم به ذکر است که کلیه اطلاعات ورودی برای جریان Assumed به عنوان حدس اولیه جهت شروع شبیه سازی در نظر گرفته می شود تا شبیه سازی فلوشیت تا پایین دست فرآیند انجام شده و جریان Calculated محاسبه شود. سپس مقادیر جریان های Assumed و Calculated مقایسه می شوند. بر اساس تفاوت بین این دو مقدار، بالاتر از تلورانس تعریف شده، نرم افزار مقدار مربوط به جریان Calculated را جایگزین مقدار Assumed می کند و فرآیند محاسبات تا جاییکه اختلاف این دو مقدار در حد تلورانس تعریف شده باشد ادامه می دهد.

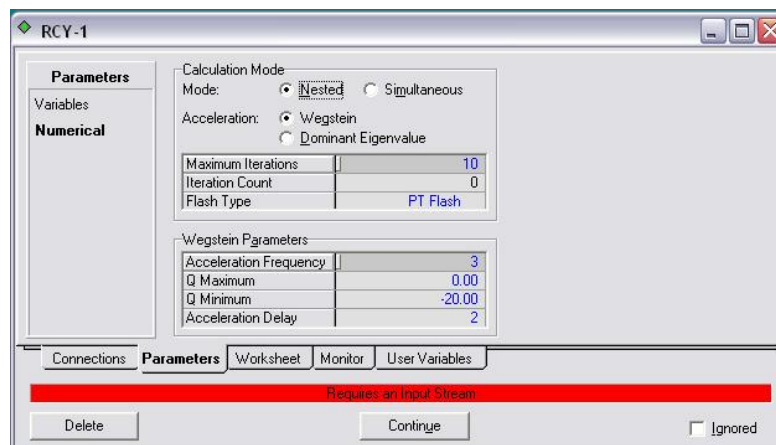




در زیر صفحه Parameters قسمت Variables از کاربر میزان تولرانس همگرایی پارامترهای مختلف به صورت ضریبی (Sensitivities) از تولرانس داخلی HYSYS خواسته می شود. مقدار پیش فرض این ضریب برای تمام گزینه ها ۱۰ است و هرچه مقدار آن کمتر باشد دقت محاسبات بالا می رود. تولورانس داخلی HYSYS برای گزینه های مختلف در جدول زیر آورده شده است :

متغیر	تولورانس داخلی
جزء حجمی	۰/۰۱
ترکیبات	۰/۰۱
دما	۰/۰۱
فشار	۰/۰۱
دبی	۰/۰۰۱
آنتالپی	۱

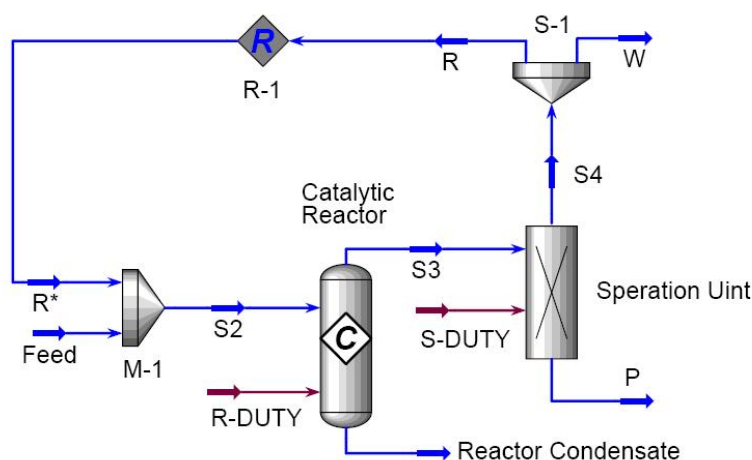
مثلاً هرگاه ضریب Sensitivities برای فشار ۱۰ باشد طبق جدول بالا تولرانس حل فشار برابر $10 \times 0/01$ خواهد شد.



در زیر صفحه Parameters قسمت Numerical روش های حل جریان برگشتی انتخاب می شوند. ابتدا بایستی Mode جریان برگشتی انتخاب شود. در حالتی که فلوشیت ما دارای یک لاجیک Recycle باشد و یا اینکه دارای چند لاجیک Recycle غیر متصل به هم باشند از روش Nested و در حالتیکه فلوشیت ما دارای چندین لاجیک Recycle متصل به هم باشند از حالت Simultaneous استفاده می کنیم. در بخش Acceleration هم دو گزینه قابل انتخاب است. از گزینه Wegstein زمانی استفاده می شود که تداخل متغیر های تسریع شده صرفنظر شود و در حالت Dominant Eigenvalue این تداخل ها منظور می شوند. از زیر صفحه Parameters قسمت Monitor نیز برای ذخیره، جدول بندی و رسم خواص فیزیکی در طی مراحل تکرار استفاده می شود.

تمرین ۲:

در فرآیند زیر اتیلن کلراید در فاز گازی در یک راکتور کاتالیستی تولید می شود. ابتدا ترکیبات مواد اولیه وارد راکتور شده و بعد از واکنش $Ethylene + HCl \rightarrow C_2H_5Cl$ وارد فرآیند جداسازی می شود. مقداری از گازهای واکنش نداده بعد از جداسازی دوباره برگشت داده شده و با خوراک تازه مخلوط و وارد راکتور می شود. از جریان W هم به عنوان جریان Purge گازی استفاده می شود.



PP: Peng Robinson

- واکنش از نوع تبدیلی و بر اساس ۹۰٪ تبدیل اتیلن صورت می گیرد.
- مشخصات خوراک و حدس اولیه برای جریان برگشتی به شرح جداول زیر می باشند:

Feed		
Temperature	25.00	C
Pressure	101.3	kPa
Molar Flow	100.0	kgmole/h
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0200	
Comp Mole Frac (Ethylene)	0.4800	
Comp Mole Frac (HCl)	0.5000	
Comp Mole Frac (CIC2)	0.0000	

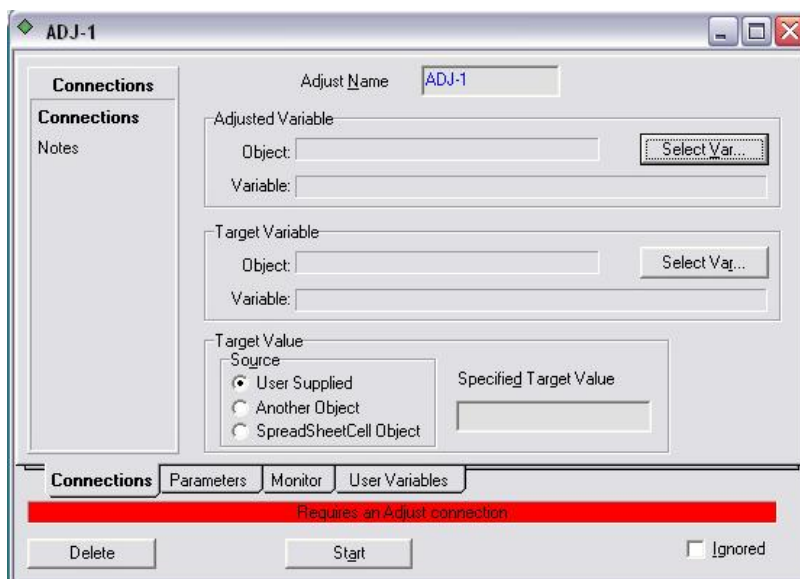
R*		
Temperature	25.00	C
Pressure	150.0	kPa
Molar Flow	25.00	kgmole/h
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.3333	
Comp Mole Frac (Ethylene)	0.3333	
Comp Mole Frac (HCl)	0.3333	
Comp Mole Frac (CIC2)	0.0000	

- افت فشار راکتور را برابر صفر و دمای جریان خروجی از بالای راکتور را برابر ۲۵ درجه سانتیگراد در نظر بگیرید.
- برای اینکه به جزئیات مرحله جداسازی پرداخته نشود از یک Component Splitter استفاده می کنیم که در این واحد کل جریان اتیلن کلراید از پایین و بقیه تماماً از بالا خارج می شوند که فشار و دما برای جریان های خروجی ۱۰۱/۳ کیلو پاسکال و ۲۵ درجه سانتیگراد می باشند.
- میزان جریان برگشتی ۷۰٪ خروجی Splitter می باشد.

لاجیک تنظیم Adjust

لاجیک تنظیم Adjust به کاربر این امکان را می دهد تا متغیر عملیاتی (Target Variable) را ، به عنوان متغیر وابسته ، با کمک متغیر دیگر فرآیند (Adjusted Variable) ، به عنوان متغیر مستقل ، در مقدار معینی تنظیم نماید. کاربرد مهم این لاجیک در اینست که به ما امکان تنظیم پارامترهایی را که تنظیم آنها به طور مستقیم توسط خود solver امکان پذیر نیست و یا امکان حل به صورت معکوس (Back Calculation) وجود ندارد ، می دهد.

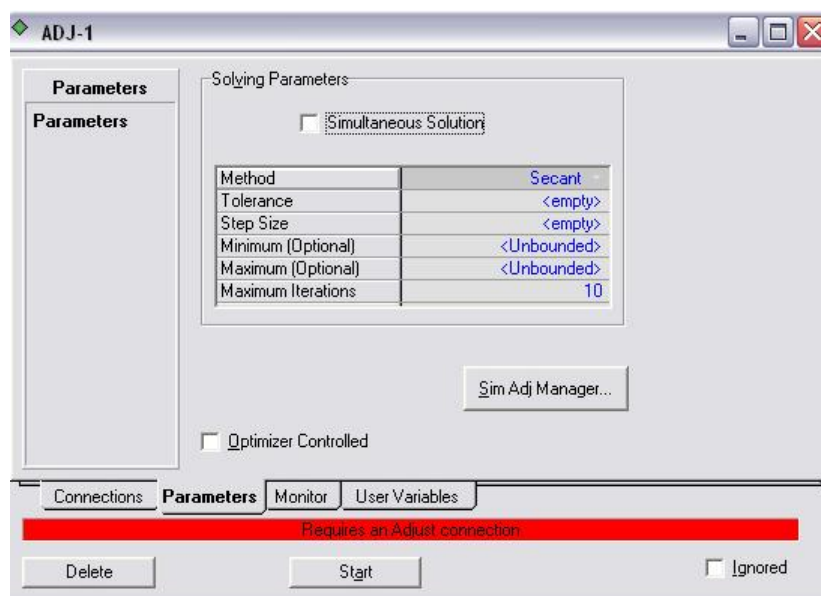
برای انتخاب متغیر های Target و Adjusted با زدن کلید های Select Variable برای هر کدام از متغیر ها می توان این کار را انجام داد.



مقدار Target Value را به سه صورت می توان وارد سیستم کرد. از گزینه اول (User Supplied) برای وارد کردن مستقیم مقدار مطلوب و از گزینه دوم برای معرفی مقدار عددی جریانی از فلوشیت به اضافه منهای عدد ثابت (off set) و از گزینه سوم برای معرفی مقدار عددی یک گزینه از سل های Spreadsheet به اضافه منهای عدد ثابت (off set) استفاده می شود.

لازم به ذکر است که حلقه های Adjust می توانند به صورت انفرادی یا همزمان حل شوند. اگر حلقه به صورت انفرادی حل شود شما امکان انتخاب روش های Secant (کند ولی با دقت) و Broyden (سریع ولی غیر قابل اطمینان) را دارید. در حالت حل همزمان فقط می توان از روش حل چند متغیره Broyden استفاده کرد.

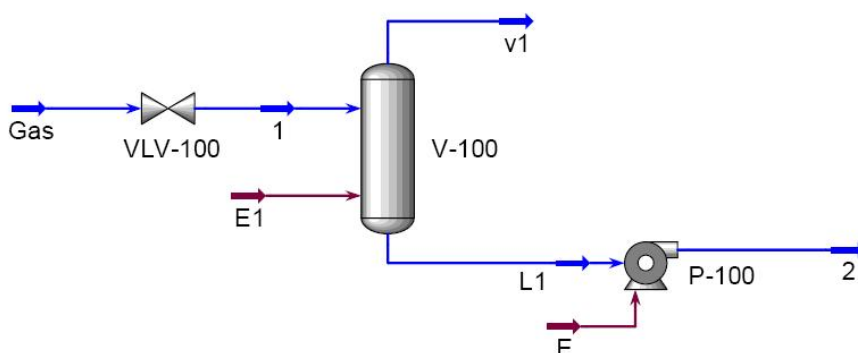
از گزینه های Minimum/Maximum برای انتخاب حدود بالا و پایین برای متغیر مستقل استفاده می شود که باعث محدود شدن متغیر مستقل می گردد که گاهی باعث تسریع حل مسئله و گاهی عدم حل مسئله می شوند.



گزینه Sim. Adj. Manager هم به کاربر این امکان را می دهد تا کلیه لاجیک های Adjust را مونیتور کرده و تغییر دهد.

تمرین ۳:

یک ترکیب گازی وارد یک فلاش درام شده و گازهای آن خارج می گردند. هدف محاسبه بار حرارتی گرفته شده از فلاش درام است به نحوی که دبی گاز خروجی بالای فلاش درام در مقدار معینی تنظیم شود.



PP: Sour SR

- مشخصات جریان خوراک عبارت است از :

Gas		
Temperature	20.00	C
Pressure	7000	kPa
Molar Flow	1245	kgmole/h
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0011	
Comp Mole Frac (CO2)	0.0280	
Comp Mole Frac (Methane)	0.5896	
Comp Mole Frac (Ethane)	0.0267	
Comp Mole Frac (Propane)	0.0271	
Comp Mole Frac (i-Butane)	0.0018	
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.1018	
Comp Mole Frac (i-Pentane)	0.1018	
Comp Mole Frac (n-Pentane)	0.1018	
Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0122	
Comp Mole Frac (n-Heptane)	0.0049	
Comp Mole Frac (H2O)	0.0034	

- افت فشار شیر ۱۵ بار و افت فشار مخزن فلاش درام ۱۰ بار است.

- فشار جریان خروجی ۲ را برابر ۵۵ بار تنظیم نمایید.

اگر مقدار بار حرارتی جدا کننده برابر ۷۰۰۰۰ کیلو ژول بر ساعت دبی جریان خروجی از بالای جدا کننده چقدر خواهد بود؟

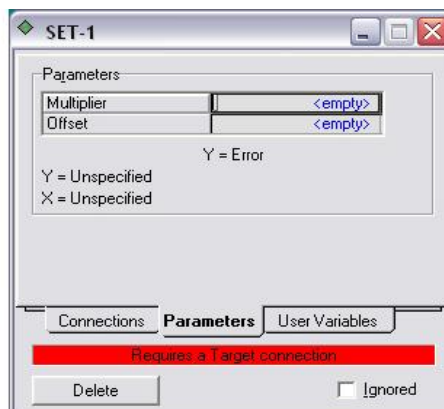
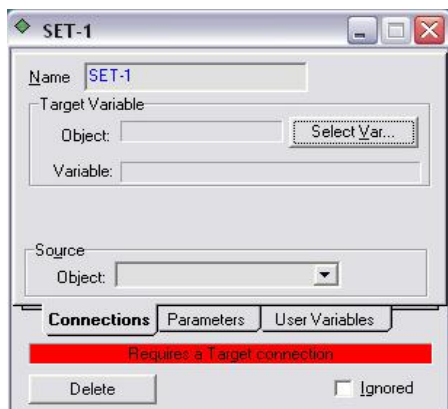
برای اینکه میزان دبی بالای فلاش درام برابر ۷۲۰ کیلو مول بر ساعت باشد، بار حرارتی فلاش درام چقدر باید باشد؟ (تعداد تکرارها را برابر ۲۰۰ و بار حرارتی ماکزیمم را برابر ۳,۰۰۰,۰۰۰ کیلو ژول بر ساعت در نظر بگیرید)

لاجیک Set

از این لاجیک برای تنظیم متغیری از فرآیند به صورت تابعی از متغیر دیگر استفاده می شود. این تابع به صورت رابطه خطی زیر می باشد :

$$Y_{Target} = K \times X_{Source} + B$$

که بیانگر ارتباط بین متغیر وابسته (Target) و متغیر مستقل (Source) است.

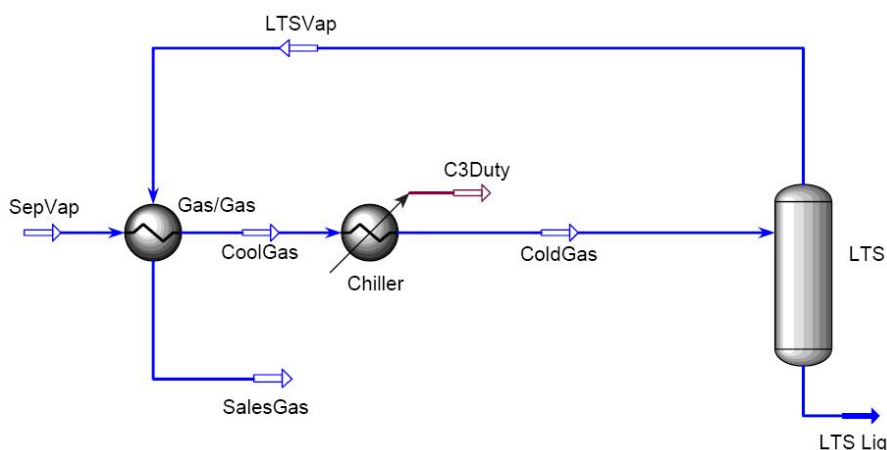


تمرین ۴ :

در همان مثال قبلی به جای اینکه فشار جریان خروجی ۲ را به شکل دستی وارد نمایید از یک Set استفاده نمایید و فشار خروجی پمپ را بر اساس فشار جریان ۱ وارد نمایید.

تمرین ۵ :

فاز بخار خروجی از یک فلاش درام طی دو مرحله وارد مبدل های سرمایشی می شود و دوباره از یک فلاش درام عبور داده می شود تا فاز مایع و بخار آن جدا گردند. فاز بخار فلاش درام دومی برای سرمایش اولیه جریان بخار فلاش درام اولیه مورد استفاده قرار می گیرد. بخار برگشتی از فلاش درام دومی به عنوان سوخت به بازار عرضه می شود و نباید به قدری از گازهای سنگین عاری شود که ارزش حرارتی آن کاهش یابد. برای حل این مشکل بهتر است عملیات سرمایش در مبدل نهایی کمتر شود. اما یک محدودیت دیگر نیز برای انتقال این گاز به مصرف کننده توسط کمپرسور وجود دارد که با افزایش هیدروکربن های سنگین امکان دوفازی شدن در کمپرسور و مسیر وجود دارد. برای بدترین حالت پیشنهاد شده نقطه شبنم در فشار ۵۵/۲ بار باید حداکثر ۱۲/۲- درجه سانتیگراد گردد.



PP: Peng Robinson

مشخصات خوراک :

SepVap		
Temperature	15.55	C
Pressure	4137	kPa
Molar Flow	447.1	kgmole/h
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0145	
Comp Mole Frac (CO2)	0.0063	
Comp Mole Frac (Methane)	0.6576	
Comp Mole Frac (Ethane)	0.1846	
Comp Mole Frac (Propane)	0.0877	
Comp Mole Frac (i-Butane)	0.0272	
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0222	

- افت فشار فلاش درام را برابر صفر در نظر بگیرید.
- کلیه افت فشارها برای پوسته و لوله مبدل حرارتی گاز/گاز و برای چیلر برابر با ۶۸/۹۵ کیلو پاسکال می باشند.
- اختلاف دمای جریان گرم ورودی لوله با دمای جریان گرم خروجی از پوسته را برابر ۵/۶ درجه سانتیگراد در نظر بگیرید.
- از مدل END POINT برای حل مبدل استفاده نمایید.
- دمای جریان خروجی از چیلر را برابر ۱۰- درجه سانتیگراد وارد نمایید.

دمای جریان خروجی از چیلر را با استفاده از لاجیک های **Adjust** و **Balances** به گونه ای تنظیم نمایید که نقطه شبنم برای جریان **Sale Gas** در فشار ۵۵/۲ بار حداکثر ۱۲/۲- درجه سانتیگراد گردد.



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

HYSYS

جلسه دهم

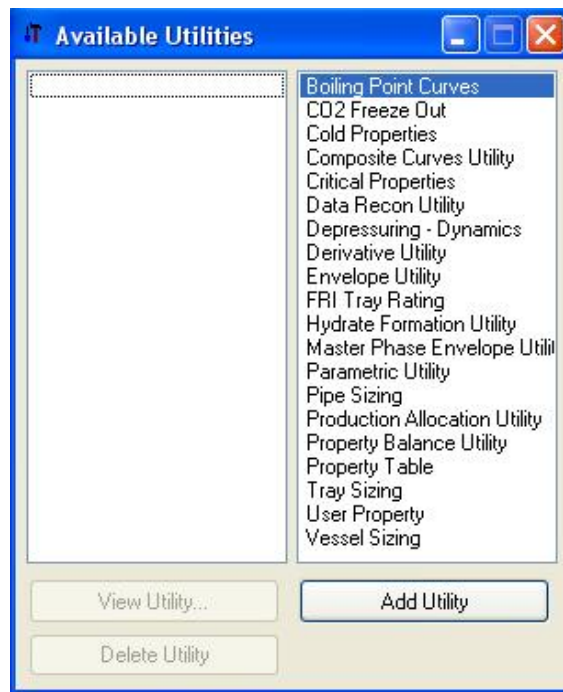
- استفاده از امکانات کمکی در Utility
- Boiling Point Curves
- Cold Property
- Critical Property
- Dynamic Depressurizing
- Envelope
- Pipe Sizing
- Tray Sizing Utility
- Vessel Sizing
- تمرین ها

استفاده از امکانات کمکی در UTILITY

در این فصل با کاربرد امکانات زیر در مجموعه موجود در UTILITY آشنا خواهیم شد.

Boiling Point Curves
 Cold Property
 Critical Property
 Depressurizing-Dynamics
 Envelope
 Pipe Sizing
 Utility Tray Sizing
 Vesel Sizing

برای استفاده از UTILITY به منوی Tools رفته و در آن گزینه UTILITY را انتخاب می کنیم.



۱- Boiling Point Curves

از این گزینه برای محاسبات مربوط به مشخصه های معمول برای برش های نفتی از قبیل TBP ، ASTM (D1160) ، ASTM (D86) ، ASTM (D2887) ، خواص بحرانی ، ضریب اسنتریک و دانسیته مایع برش های نفتی و خواص جریان سرد از قبیل عدد اکتان ، اندیس ستان ، فشار بخار رایید ، ویسکوزیته استاندارد در دماهای ۳۷/۸ و ۹۸/۹ درجه سانتیگراد ، نقطه ریزش ، نقطه اشتعال ، نسبت پارافین : نفتن : آروماتیک (P:N:A) و RI استفاده می شود. در زیر به طور اجمالی به تعریف برخی از این کمیت های نام برده شده اشاره می شود.

مقدمه

فرآورده های عمده پالایشگاهی که از طریق اختلاط برش های میانی برج تقطیر نفت خام برای رسیدن به انواع فرآورده های با مشخصات قابل قبول بدست می آیند ، عبارتند از : بنزین ، سوخت جت ، نفتا و سوخت دیزل. برای حصول اطمینان از اینکه جریان های اختلاطی دارای مشخصات مورد نظر خواهند بود از معیارهای عدد اکتان ، عدد ستان ، فشار بخار رایید ، نقطه جوش ، چگالی نسبی و ... استفاده می شود.

عدد اکتان :

عدد اکتان معیار تشخیص نوع و جنس بنزین است. اگر هیدروکربور های سازنده بنزین از هیدروکربورهای پارافینی بدون شاخه یا کم شاخه تشکیل شده باشد ، احتراق آن با انفجار توأم خواهد بود و اگر از هیدرو کربورهای شاخه دار تشکیل شده باشد عمل احتراق به طور ملایم تری انجام شده و احتمال انفجار کمتر خواهد بود. این آرام سوزی بنزین به وسیله عدد اکتان نشان داده می شود که برای اندازه گیری آن از دو هیدروکربور خالص نرمال هپتان که به شدت منفجر می شود (اندیس اکتان صفر) و ایزو اکتان یعنی ۲-۲-۴-تری متیل پنتان که کم منفجر شونده است (عدد اکتان ۱۰۰) کمک گرفته می شود. جهت بالا بردن عدد اکتان بنزین ها از اختلاط موادی از قبیل الکل ها ، ستن ها و برخی آمین های آروماتیکی که خاصیت ضد انفجاری دارند استفاده می شود.

عدد ستان :

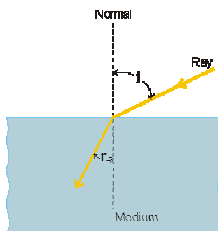
عدد ستان معیار تشخیص نوع و جنس نفت گاز است. اندیس ستان بالا مربوط به سوختی می گردد که پس از به حالت پودر در آمدن در محفظه احتراق سریعاً مشتعل شود. معمولاً اندیس ستان بالای ۵۰ مناسب است که در شرایط سرما برای اشتعال خود بخودی نفت گاز مساعد است. اندازه گیری عدد ستان به کمک دو هیدروکربور نرمال ستان یا نرمال هگزادکان (اندیس ستان ۱۰۰) و آلفا متیل نفتالین که به سختی شعله ور می شود (اندیس ستان صفر) انجام می شود.

فشار بخار رایید (RVP)

این آزمون معرف فشار بخار گاز های حل شده یا مایع شده در برش ها می باشد. این فشار بخار باید در درجه حرارت معین و در حالتی که فاز بخار به حالت اشباع رسیده و در تعادل با فاز مایع قرار گرفته باشد اندازه گیری شود. نتایج حاصل از این آزمون به طور غیر مستقیم معرف مقدار مواد خیلی سبک موجود در برش نفتی است که شناخت آن از نظر ایمنی در هنگام نقل و انتقال ، مقدار افت در مخازن و قابلیت تبخیر شوندگی حائز اهمیت است. مثلاً طبق استاندارد فشار بخار رایید بنزین در $100^{\circ}F$ 10 psi است. RVP مورد نظر بنزین از اختلاط نرمال بوتان حاصل می شود.

(RI) Refractive Index

RI معیار اندازه گیری اندیس ویسکوزیته روغن ها است که بر اساس درجه انکسار نور گذرنده از روغن توسط منشور مربوطه اندازه گیری می شود. و مقدار آن عبارت است از نسبت سرعت نور در هوا به سرعت نور گذرنده از روغن و یا به عبارت دیگر نسبت زاویه تابش به سطح روغن به زاویه گذرنده از داخل روغن.



True Boiling Point (TBP)

عبارت است از میانگین درجه حرارت های مربوط به ابتدا و انتهای تقطیر هر برش نفتی (تقطیر ناپیوسته با جریان برگشتی بالا در فشار اتمسفریک یا خلأ)

ASTM (D86)

عبارت است از میانگین درجه حرارت های مربوط به ابتدا و انتهای تقطیر هر برش نفتی (تقطیر ناپیوسته بدون جریان برگشتی در فشار خلأ) برای مواد نفتی سنگین

ASTM (D1160)

عبارت است از میانگین درجه حرارت های مربوط به ابتدا و انتهای تقطیر هر برش نفتی (تقطیر ناپیوسته با جریان برگشتی بالا در فشار اتمسفریک) برای مواد نفتی میانی و سبک

۲- Cold Properties

مشخصات مربوط به این UTILITY عیناً در Boiling Point Curve هم وجود دارد.

تمرین ۱

جریانی با اطلاعات زیر ایجاد نموده و مشخصات مربوط به جریان سرد آنرا گزارش نمایید.

Test		
Temperature	50.00	C
Pressure	100.0	kPa
Molar Flow	11.56	kgmole/h
Comp Mole Frac (n-Pentane)	0.1667	
Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.1667	
Comp Mole Frac (n-Heptane)	0.1667	
Comp Mole Frac (n-Octane)	0.1667	
Comp Mole Frac (n-Nonane)	0.1667	
Comp Mole Frac (n-C11)	0.0000	
Comp Mole Frac (n-C12)	0.0000	
Comp Mole Frac (n-C13)	0.0000	
Comp Mole Frac (n-C14)	0.0000	
Comp Mole Frac (n-C15)	0.0000	
Comp Mole Frac (n-C16)	0.0000	
Comp Mole Frac (H2O)	0.1667	

True VP at 37.8 C
Reid VP at 37.8 C
ASTM D93 Flash Point
ASTM D97 Pour Point
Refractive Index
Cetane Index
Research Octane Num.
Viscosity at 37.8 C
Viscosity at 98.9 C

منحنی تغییرات TBP را بر حسب درصد Cut Point ها ترسیم نمایید.

تمرین ۲:

جریان تمرین ۱ را با جریانی از متانول ترکیب کرده و تأثیر اختلاط متانول به این جریان را با یک مطالعه موردی بر حسب متغیرهای وابسته فشار بخار راید و عدد اکتان بررسی نمایید.

راهنمایی: دو جریان متانول و سوخت را در یک میکسر ترکیب نموده و با استفاده از لاجیک تنظیم Set تغییرات دبی های این دو جریان را به یکدیگر ارتباط دهید. مجموع دو جریان را برابر $100 \frac{kgmol}{hr}$ در نظر بگیرید.

۳- Critical Property

از این UTILITY برای محاسبه خواص بحرانی از قبیل دما، فشار، حجم و ضریب تراکم پذیری بحرانی استفاده می شود. در این UTILITY دو نوع خواص بحرانی حقیقی و شبه بحرانی محاسبه می شود. خواص بحرانی حقیقی با استفاده از قانون اختلاط (Mixing Rule) و خاصیت شبه بحرانی با استفاده از رابطه خطی بین خواص بحرانی ماده خالص و ترکیب درصد آن در مخلوط محاسبه می شود. برای استفاده از این UTILITY باید از معادله ترمودینامیکی Peng Robinson استفاده کرد.

تمرین ۳

منحنی P-T را همراه خط تشکیل هیدرات و منحنی P-H را با دو ایزوترم دلخواه برای جریان با مشخصات زیر ترسیم نمایید. همچنین خواص بحرانی این جریان را محاسبه نمایید.

Temperature	60.0000 °F
Pressure	600.0000 psi
Molar Flow	100.0000 lbmole/hr
Nitrogen Mole Frac	0.0069
CO2 Mole Frac	0.0138
Methane Mole Frac	0.4827
Ethane Mole Frac	0.1379
Propane Mole Frac	0.0690
i-Butane Mole Frac	0.0621
n-Butane Mole Frac	0.0552
i-Pentane Mole Frac	0.0483
n-Pentane Mole Frac	0.0414
n-Hexane Mole Frac	0.0345
n-Heptane Mole Frac	0.0276
n-Octane Mole Frac	0.0206

۴- Depressurizing

ابزار Depressurizing در نرم افزار HYSYS به کاربر این امکان را می دهد که پروفایل های دما و فشار را در مواقع عمل کردن شیرهای Blowdown جهت تخلیه گاز از خطوط لوله یا ظروف تحت فشار محتوی گاز-مایع تولید نماید. همچنین از این ابزار می توان برای طراحی PSV ها تحت شرایط Shutdown و در مواقع اضطراری استفاده نمود.

به طور کلی در این ابزار دو حالت برای Depressurizing وجود دارد:

- 1- Adiabatic Depressurizing
- 2- Wetted Fire model

حالت اول برای تخلیه گاز در ظروف تحت فشار در حالت نرمال استفاده می شود و حالت دوم تحت شرایط اضطراری در واحد کاربرد دارد.

در این ابزار محاسبات پیچیده کاهش فشار و کاهش ترکیبات در تابعیت با زمان انجام می شود. اگر چه عمل Depressurizing یک ماهیت دینامیکی دارد، اما این کار در محیط پایدار HYSYS انجام می شود.

انتخاب حالت عملیاتی^۱

در نرم افزار HYSYS ۴ حالت برای شبیه سازی فرآیند Depressurizing وجود دارد که هر کدام از آنها می بایست در شرایط خاص مربوط به آن بکار برده شوند. این حالت ها عبارتند از:

- 3- Fire Mode
- 4- Fire Stephan Boltzman
- 5- Fire API521
- 6- Adiabatic
- 7- Use Spreadsheet

• حالت اول تحت شرایط وقوع حریق استفاده می شود و پروفایل های دما، فشار و جریان بر اساس انتقال حرارت از یک منبع حرارتی خارجی به درون ظرف محاسبه می شوند. در این حالت میزان فلاکس حرارتی مستقیماً توسط کاربر وارد برنامه می شود (ضرایب C_1 تا C_5 معادله زیر) و نیازی به وارد کردن سطح خیس ظرف برای محاسبه فلاکس حرارتی نیست.

$$Q = C_1 + C_2 (Time) + C_3 (C_4 - Vessel\ Temperature) + C_5 \left(\frac{Liq\ Volume [time = t]}{Liq\ Volume [time = 0]} \right)$$

• حالت دوم در محاسبات شامل ترم های تشعشع، جابجایی اجباری، دمای شعله و دمای محیط می شوند.

$$Q = A_{total} (k \times (\epsilon_f \times (T_f + 273.15)^4 - \epsilon_v \times (T_v + 273.15)^4) + OutsideU (T_{amb} - T_v))$$

¹ - Operation mode

where:

A_{total} = surface area

Em_f = flame emissivity

Em_v = vessel emissivity

k = Boltzman constant

T_f = flame temperature (in Kelvin)

$OutsideU$ = convective heat transfer coefficient between vessel and surrounding air

T_a = ambient temperature (in Kelvin)

T_v = vessel temperature (in Kelvin)

- حالت سوم مشابه حالت اول است با این تفاوت که در آن فلاکس حرارتی منتقل شده از آتش به مایع داخل ظرف طبق معادلات مربوطه در API محاسبه می شود. در این حالت سطح خیس ظرف برای محاسبه فلاکس حرارتی باید مشخص شود.

$$Q = C1 [C3 \times \text{wetted area}(time = t)]^{C2}$$

where:

$$\text{wetted area}(time = t) = \text{wetted area}(time = 0) \times \left(1 - C3 \left[1 - \frac{\text{LiqVol}(time = t)}{\text{LiqVol}(time = 0)} \right] \right)$$

- حالت چهارم برای مدل کردن تخلیه گاز از ظروف تحت فشار و یا لوله کشی ها استفاده می شود. در این حالت هیچگونه فلاکس حرارتی بیرونی به ظرف اعمال نمی شود. فلاکس حرارتی بین دیواره ظرف و سیال بر اساس افت دمای سیال در اثر Depressurizing مدل می شود. ضریب انتقال حرارت توسط کاربر وارد نرم افزار می شود و یا توسط نرم افزار از خواص بخارات محتوی ظرف و سطح خیس ظرف محاسبه می شود.
- حالت چهارم این امکان را به کاربر می دهد تا معادله دیگری را برای محاسبه فلاکس حرارتی در برنامه تعریف نماید.

معادلات شیرها

شش نوع شیر به نام های Fisher, Relief Valve, Subsonic Valve, Supersonic Valve, Masonellan Valve, General Valve وجود دارند که برای مدل کردن PSV می تواند استفاده شود. در شکل زیر معادلات این شیرها نشان داده شده اند:

Depressuring Valve Equation Help

<Fisher> and <Relief> use the standard HYSYS valve and relief valve. The Relief valve is a good general choice and handles choked and non-choked flow automatically.

To have the relief valve open all the time, set its Full Open Pressure lower than the final expected vessel pressure and set its Set (or Relief) Pressure slightly lower than the Full Open Pressure.

Supersonic:
Valve Rate = $Cd * Area * (Pup * Density)^{0.5}$

Subsonic:
Valve Rate = $Cd * Area * ((Pup + Pback) * (Pup - Pback) / Pup * Density)^{0.5}$

Masonelan:
Valve Rate = $Constant * Cv * Cf * Yf * (Pup * Density)^{0.5}$

General:
Valve Rate = $Cd * Area * Kterm * (Pup * Density * k)^{0.5}$

Where:
Cd = Discharge co-efficient (typically 0.7-1.0)
Pup = upstream pressure
Pback = back pressure
Cf = critical flow factor
Yf = $y - 0.148 y^3$ where y = expansion factor
Kterm = $[2 / (k + 1)]^{(k + 1) / [2 * (k - 1)]}$, where k = Cp/Cv

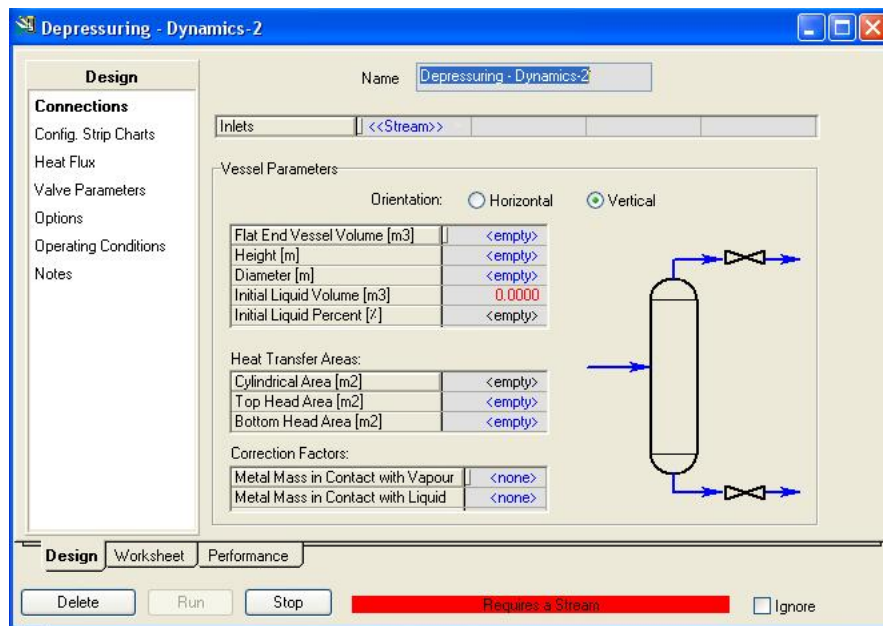
The <Use Spreadsheet> option refers to the flow rate spreadsheet in the flowsheet used by the utility. This option allows the user to edit the spread sheet without changes getting overwritten.

- شیرهای Fisher و Relief از مدل های شیر و Relief Valve استاندارد HYSYS استفاده می کنند. HYSYS توصیه می کند برای سایز شیرهای Blowdown از معادله Fisher و برای سایز کردن PSV ها از مدل Relief Valve استفاده شود. معادلات این شیرها در مقایسه با معادلات دیگر پیشرفته تر هستند و به طور اتوماتیک جریان شوک و غیر شوک را در نظر می گیرند.
- اگر بخواهیم Relief Valve در تمام مدت باز باشد کافیست مقدار Full Open Pressure را پایین تر از مقدار فشار مقرر (Set Pressure) قرار دهیم.
- از Subsonic Valve زمانی استفاده می شود که جریان عبوری از شیر کاملاً مادون صوت باشد. این حالت معمولاً زمانی رخ می دهد که فشار بالاسری کمتر از دو برابر Back Pressure شیر باشد.

- از Supersonic Valve زمانی استفاده می شود که اطلاعات کافی در مورد عملکرد شیر نداشته باشیم.
- از Masonellan Valve برای شیرهای عمومی (General Depressring) تخلیه به خط فلر استفاده می شود.
- از General Valve زمانی استفاده می شود که سطح مقطع مؤثر گلوبی شیر معلوم باشد.

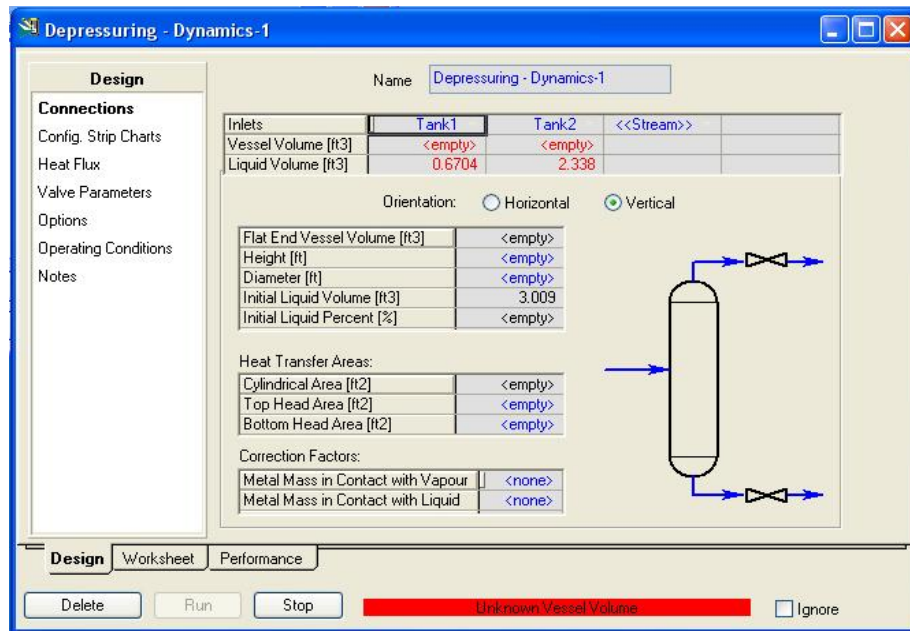
مراحل کار با ابزار Depressurizing

- ۱- از مسیر Tools/Utilities ابزار Depressurizing-Dynamics را انتخاب می کنیم.
- ۲- مطابق شکل زیر در صفحه Design در قسمت Connections تا ۴ جریان معلوم و شناخته شده را می توان اضافه کرد. اگر کاربر فقط یک جریان اضافه نماید باید (حجم ظرف، حجم مایع و ارتفاع یا قطر ظرف) یا (حجم مایع، ارتفاع و قطر ظرف) را وارد برنامه نماید. در اینصورت مابقی اطلاعات را HYSYS برای زمان اقامت یک ساعت سایز خواهد کرد.



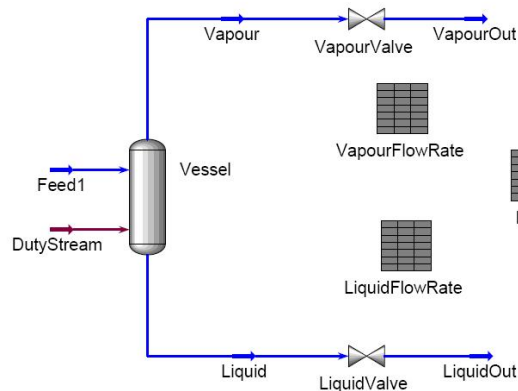
در صورتیکه کاربر بیش از یک جریان انتخاب نماید در اینصورت دو ردیف اضافی زیر ردیف انتخاب جریان ها اضافه می شود. اطلاعات این دو ردیف شامل حجم ظرف و حجم مایع می شود که باید برای هر

دو جریان به طور مجزا تعریف شود. سایر پارامترهای دیگر برای ظرف توسط خود نرم افزار تخمین زده می شود.



نکته:

ابزار Depressurizing یک محیط واسطه را برای کاربر جهت ورود داده ها فراهم می کند. سپس داده های ورودی به داخل یک Subflowsheet در محیط اصلی منتقل می شوند که شامل یک جریان ورودی و یک ظرف است.

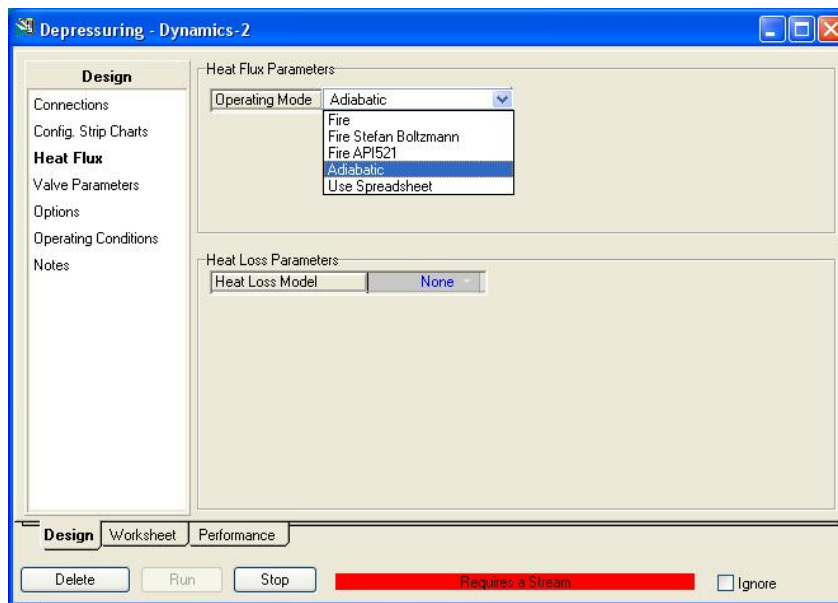


HYSYS قبل از اجرای برنامه Depressurizing، تعداد و مشخصات جریان ها را در داخل این ابزار چک می کند. اگر تغییر کرده باشند، نرم افزار به طور خودکار Subflowsheet قبلی را پاک

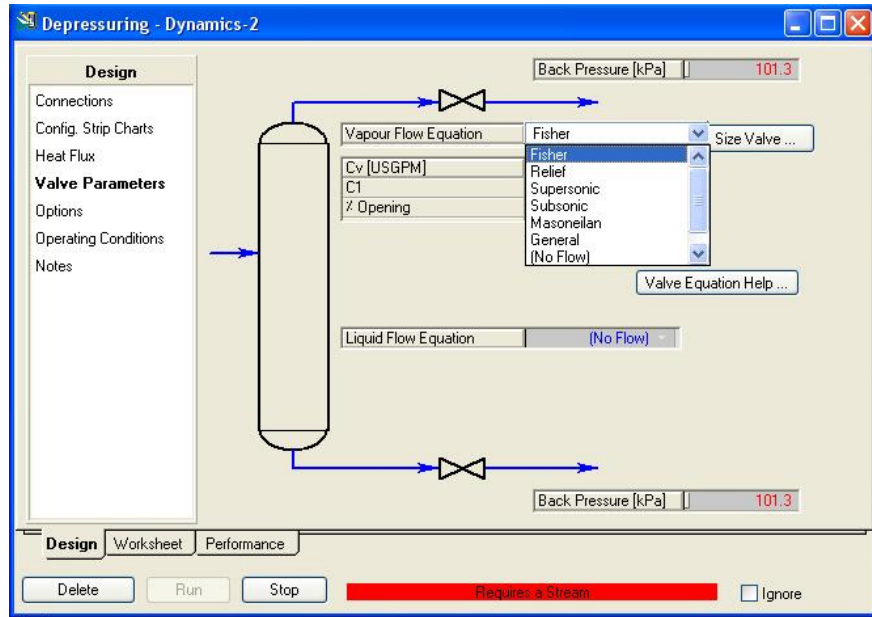
کرده و یک Subflowsheet جدید جایگزین آن می کند. در داخل محیط Subflowsheet مطابق شکل زیر سه عدد Spreadsheet به نام های Vapor Flow Rate، Liquid Flow Rate و Duty وجود دارند که به طور مداوم اطلاعات را از Utility گرفته و محاسبات مربوط به شدت جریان ها و فلاکس حرارتی در آنها انجام شده و سپس به جریان های مربوطه در داخل Subflowsheet منتقل می شوند. اگر کاربر اطلاعات مربوط به Spreadsheet ها را تغییر دهد و برنامه را اجرا کند اطلاعات تغییر یافته اعمال نمی شوند مگر اینکه گزینه Use Spreadsheet در انتخاب مدل ها برای جریان های خروجی از ظرف و فلاکس حرارتی ورودی، انتخاب شده باشند. Spreadsheet های جریان ها همیشه استفاده نمی شوند. زمانیکه شیر Fisher و یا Relief انتخاب شده باشند Unit Operation های استاندارد به Subflowsheet اضافه می شوند.

باید توجه داشت که این ابزار برای تمامی معادلات ترمودینامیکی موجود در نرم افزار به غیر از معادله Electrolyte سازگار است و برای حالتیکه جامدات حضور دارند جواب نمی دهد.

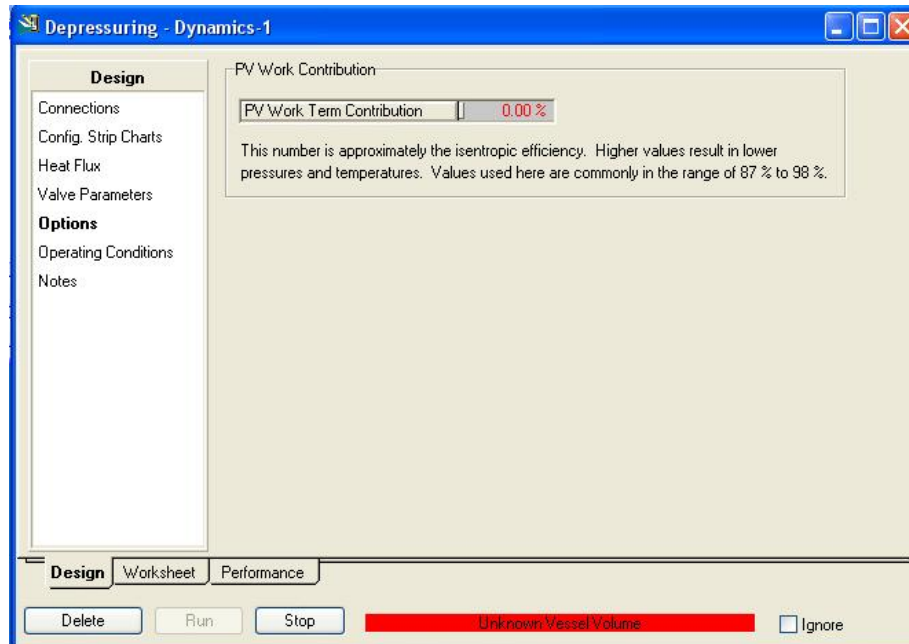
۳- در قسمت Heat Flux یکی از حالت های عملیاتی تعیین فلاکس حرارتی را مطابق شکل زیر تعیین می کنیم. در صورتیکه مدل Fire API521 انتخاب شود مقدار سطح خیس باید توسط کاربر وارد برنامه شود.



۴- در صفحه Valve Parameter یکی از معادلات مربوط به شیرها برای هر کدام از جریان های خروجی از ظرف تحت فشار یا هر دوی آنها انتخاب می شود.



۵- در صفحه Option درصد توزیع ترم کار (PV) وارد برنامه می شود که برای تخمین بازدهی آیزنتروپیک مورد استفاده قرار می گیرد. مقادیر بالا در فشارها و دماهای پایین بدست می آیند. مقدار متداول آن در محدوده ۹۸٪-۸۷٪ است.



تمرین ۴

جریان Tank1 را با مشخصات جدول زیر ایجاد نمایید:

Tank1		
Temperature	25.00	C
Pressure	4000	kPa
Molar Flow	1.000	kgmole/h
Master Comp Mole Frac (Methane)	0.5600	
Master Comp Mole Frac (Ethane)	0.2000	
Master Comp Mole Frac (Propane)	0.1000	
Master Comp Mole Frac (i-Butane)	0.0500	
Master Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0500	
Master Comp Mole Frac (i-Pentane)	0.0200	
Master Comp Mole Frac (n-Pentane)	0.0200	

پروفایل های کاهش دما و فشار ظرف تحت فشار را طی فرآیند Depressurizing رسم نمایید. حجم ظرف $45m^3$ و حجم مایع داخل ظرف $15 m^3$ در نظر بگیرید.

۵- Envelope

این UTILITY به کاربر این امکان را می دهد تا روابط بین PVT را برای یک شاخه جریان با ترکیب درصد های معین مشاهده نماید. نمودارهای محاسبه شده عبارتند از :

- فشار/ دما
- فشار/ حجم
- فشار/ آنترופی
- دما/ حجم
- دما/ آنتالپی
- دما/ آنترופی

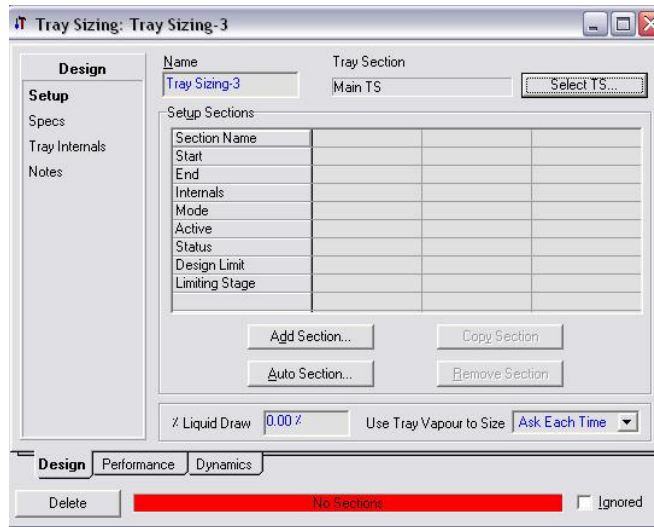
لازم به ذکر است که این UTILITY فقط محدود به دو مدل ترمودینامیکی Peng Robinson و Soave Redlich-Kwong می باشد. باید توجه داشت که منحنی های مربوط به این UTILITY بر مبنای جریان خشک و عاری از فاز مایع می باشد. برای منحنی فشار/ دما می توان خطوط کیفیت بخار و منحنی هیدرات را به نمودار فوق اضافه کرد.

۶- Pipe Sizing

از این UTILITY برای طراحی لوله برای یک جریان معلوم استفاده می شود. برای شروع طراحی یکی از دو مشخصه افت فشار بر واحد طول و یا قطر لوله باید وارد شود تا مشخصه دیگری محاسبه گردد. علاوه بر این ، محاسبات عدد رینولدز ، ضریب اصطکاک ، سرعت در داخل خط لوله و ... برای هر دو فاز ممکن انجام می گردند.

Tray Sizing Utility – ۷

با استفاده از این UTILITY می توان محاسبات مربوط به Design و Rating برج های سینی دار و Packed کردن برج های سینی دار را که قبلاً شبیه سازی شده اند انجام داد. پس از انتخاب گزینه Tray Sizing از پنجره Utility صفحه زیر ظاهر خواهد شد که در این صفحه بایست برج مورد نظر را انتخاب نمود.



برای شروع طراحی بعد از انتخاب ستون مورد نظر کلید Auto Section را زده و پنجره زیر ظاهر خواهد شد که به صورت wizard اطلاعات طراحی را به صورت سلسله وار از ما خواهد پرسید. مراحل بعدی را می توان با زدن کلید NEXT ادامه داد. لازم به ذکر است که در صورت عدم ورود اطلاعات، HYSYS برای همه این اطلاعات اعداد پیش فرضی را بر اساس قانون سر انگشتی که در مراجع معرفی شده اند جایگذاری می کند. کلیه صفحات مربوط به اطلاعات سینی ها و آکنه های مختلف در شکل های بعدی ملاحظه می شوند. بعد از وارد کردن اطلاعات لازم و یا قبول پیش فرض های موجود باید کلید Complete AutoSection را فشار داد. برای طراحی کامل برج باید گزینه Active موجود در صفحه Design/Setup را فعال کرد. سپس جهت اعمال هیدرولیک محاسبه شده در فشار برج باید در صفحه Performance/Results کلید Export Pressure را فشار داد.

Auto Section Information

Internal Type
 Sieve Valve Bubble Cap Packed

Area Tolerance
 When the ratio between the current calc'd area and either of min/max previous areas for the section exceeds this tolerance, a new diameter section is started.
 Higher more sections; lower fewer sections.

NFP Diam Factor
 When a new number of flow paths will result in a diameter diff \geq diam fact * old diameter, a new NFP section is started.
 Not required for packed columns.
 Lower more sections; higher fewer sections.

Auto Section Information

Internal Type
 Sieve Valve Bubble Cap Packed

Packing Type
 Ballast Rings (Metal, random) 1_inch
 Ballast Rings (Metal, random) 1&1_2_inch
 Ballast Rings (Metal, random) 2_inch
 Ballast Rings (Metal) 3&1_2_inch
 Ballast Rings (Plastic, random) 1_inch
 Ballast Rings (Plastic, random) 1&1_2_inch
 Ballast Rings (Plastic, random) 2_inch
 Ballast Rings (Plastic, random) 3&1_2_inch
 Ballast Plus Rings (Metal, random) 60_mm

Area Tolerance

NFP Diam Factor
 When a new number of flow paths will result in a diameter diff \geq diam fact * old diameter, a new NFP section is started.
 Not required for packed columns.
 Lower more sections; higher fewer sections.

Tray Section Information

Internals
 Sieve Valve Bubble Packed

Valve Tray

Orifice Type	Straight
Design Manual	Glitsch
Valve Mat'l Density	513.2 lb/ft ³
Valve Mat'l Thickness	0.060 in
Hole Area (% of AA)	15.30 %

Common Tray Properties

Tray Spacing	24.00 in
Tray Thickness	0.1250 in
Tray Foaming Factor	1.000
Max Tray dP (ht of liquid)	6.000 in
Max Tray Flooding	85.00 %

DC/Weir Info

Weir Height	2.000 in
Max Weir Loading	120.0 USGPM/ft
Downcomer Type	Vertical
Downcomer Clearance	1.500 in
Maximum DC Backup	50.00 %

Tray Section Information

Internals
 Sieve Valve Bubble Packed

Sieve Tray

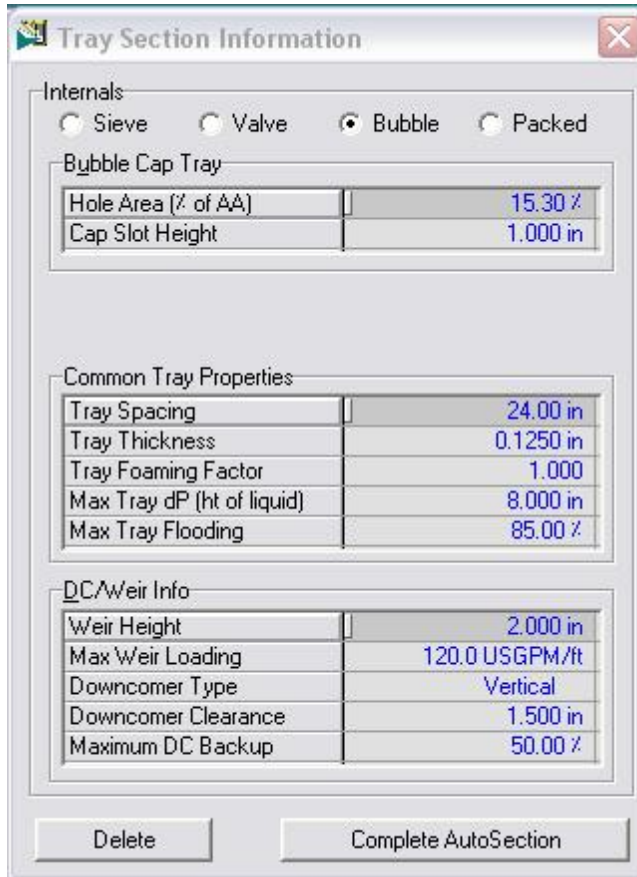
Hole Diameter	0.188 in
Hole Pitch	0.5000
Flooding Method	Minimum Csb

Common Tray Properties

Tray Spacing	24.00 in
Tray Thickness	0.1250 in
Tray Foaming Factor	1.000
Max Tray dP (ht of liquid)	8.000 in
Max Tray Flooding	85.00 %

DC/Weir Info

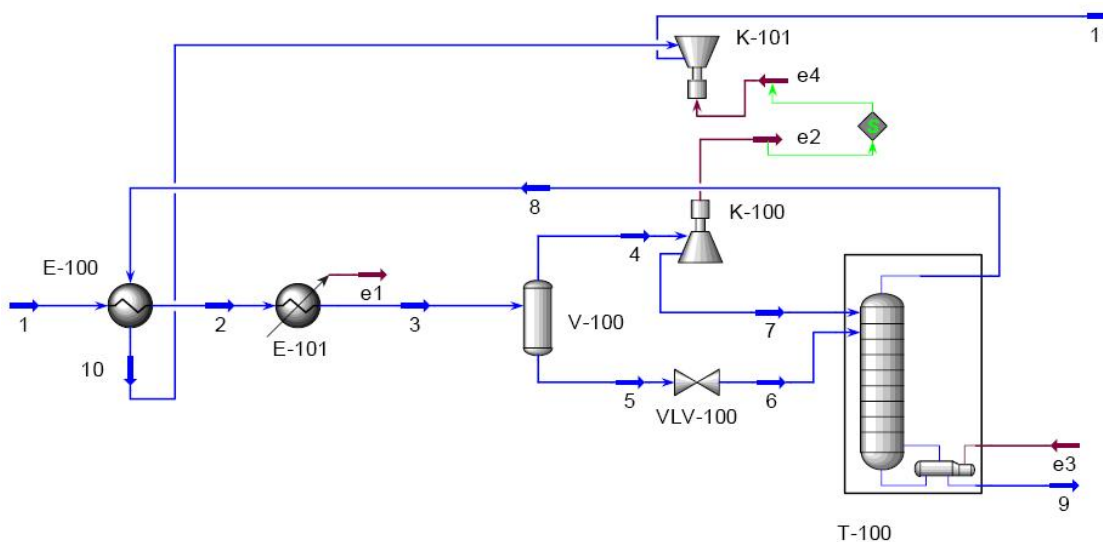
Weir Height	2.000 in
Max Weir Loading	120.0 USGPM/ft
Downcomer Type	Vertical
Downcomer Clearance	1.500 in
Maximum DC Backup	50.00 %



تمرین ۴:

واحد زیر را با مشخصات داده شده شبیه سازی نمایید.

PP: Peng Robinson



مشخصات خوراک :

1		
Temperature	120.0	F
Pressure	588.0	psia
Molar Flow	2532	lbmole/hr
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0791	
Comp Mole Frac (Methane)	0.7305	
Comp Mole Frac (Ethane)	0.0768	
Comp Mole Frac (Propane)	0.0569	
Comp Mole Frac (i-Butane)	0.0099	
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0244	
Comp Mole Frac (i-Pentane)	0.0069	
Comp Mole Frac (n-Pentane)	0.0082	
Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0042	
Comp Mole Frac (n-Heptane)	0.0031	

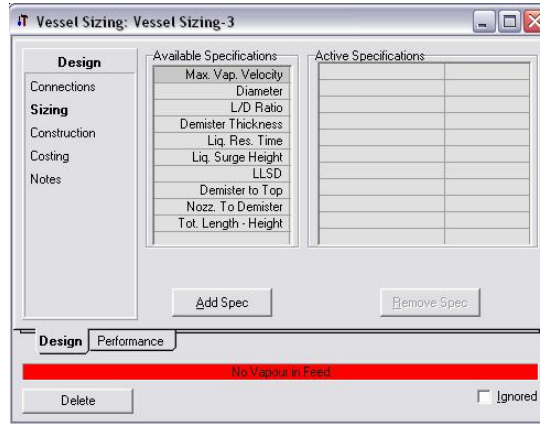
- اختلاف دمای دو جریان ۲ و ۱۰ ، ۱۰ درجه فارنهایت است.
- افت فشار مبدل در سمت لوله ۱۰ psi و سمت پوسته ۵ psi است.
- افت فشار چیلر ۵ psi است و دمای خروجی از آن تا ۸۴- درجه فارنهایت افت می کند.
- جریان بخار خروجی از جدا کننده بعد از عبور از توربین در فشار ۱۲۵ psig وارد سینی اول برج ۱۰ مرحله ای دی متانایزر می شود.
- فشار پایین برج ۲۰۰ psig می باشد.
- جریان مایع خروجی از جداکننده هم وارد یک شیر فشار شکن می شود تا در فشار سینی سوم برج وارد برج شود.
- بازدهی آدیاباتیک توربین ۸۰٪ و کمپرسور ۷۵٪ است. و توربین ۹۰٪ انرژی خود را به کمپرسور منتقل می کند.
- نسبت متان به اتان در جریان ۹ ، ۱۵/۰ حجمی می باشد که توسط تنظیم بار حرارتی ریبولر قابل دسترسی است.

مطلوبست انجام Tray Sizing در حالت های زیر:

- ۱- طراحی برج در حالت آکنه
- ۲- طراحی برج در حالت سینی دار

۸- Vessel Sizing

این UTILITY محاسبات مربوط به طراحی و تخمین قیمت یک مخزن را انجام می دهد. طراحی یک مخزن حداقل با سه معیار اولیه انجام می شود اما برای محدود کردن حیطة طراحی مخزن می توان Spec های جدیدی را تعریف کرد که همگی در قسمت Sizing در زیر صفحه Design وجود دارند.



همانطور که در شکل بالا ملاحظه می گردد این Spec ها عبارتند از:

- ماکزیمم سرعت بخار
- قطر مخزن
- نسبت طول به قطر
- ضخامت مخزن
- زمان ماند مایع
- ارتفاع Surg مایع
- سطح پایین مایع در حالت (LLSD) Shut Down
- فاصله Demister تا بالای ظرف
- فاصله نازل تا Demister
- ارتفاع مخزن
- ...

بخش Costing از زیر صفحه Design مربوط به برآورد قیمت جداکننده می باشد. در این صفحه قیمت مخزن بر اساس فرمول شکل زیر تعیین می شود که ضرایب آن باید توسط کاربر وارد شود. کلیه نتایج طراحی در صفحه Performance قابل ملاحظه است.

Costing Equations Help

Thickness
 Thickness based on the strength of the long seams
 $B1 = (P * D/2)/(T * Eff - A1 * P) + \text{Corrosion Allowance}$
 Thickness based on the strength of the ends
 $B2 = (P * D/2)/(A2 * T * Eff - A3 * P) + \text{Corrosion Allowance}$

Shell Mass
 $B = \max(B1, B2)$
 $\text{Shell Mass} = \pi * D * (L + A4 * D) * B * \text{Mass Density}$

Base Cost
 $\text{Base Cost} = \text{FMC} * (\text{Index}/252.5) * e^Y$
 $Y = A5 + A6 * \text{Log}(M) + A7 * \text{Log}(M^2)$

Accessories
 $\text{Associated Cost} = (\text{Index}/252.5) * A8 * D^{A9} * L^{A10}$

Variables

P = Pressure (Kpag)	D = Diameter (m)
T = Max. Stress (Kpa)	M = Shell Mass (Kg)
FMC = Material of Fab Factor	Index = CE Fab Index
L = Length (m)	Eff = Joint Efficiency

Vessel Sizing: Vessel Sizing-1

Design

Connections

Sizing

Construction

Costing

Notes

Base Cost Coefficients		Accessories Cost Coefficients	
A5	<empty>	A8	<empty>
A6	<empty>	A9	<empty>
A7	<empty>	A10	<empty>
Shell Thickness Coefficients		Shell Mass Coefficients	
A1	<empty>	A4	<empty>
A2	<empty>		
A3	<empty>		

Costing Results	
Base Cost	<empty>
Ladders and Platforms	<empty>
Total Cost (US\$)	<empty>

Design | Performance

No Vapour in Feed

Ignored



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

HYSYS

جلسه یازدهم

- مدیریت برش های نفتی در Oil Manager
- شبیه سازی و بهینه سازی اقتصادی فرآیند پالایش نفت خام
-

مدیریت برش های نفتی در OIL MANAGER

برش های نفتی شامل تعداد زیادی از مواد بوده و امکان آنالیز دقیق مشخصات این ترکیبات پیچیده وجود ندارد. لذا جهت تعریف یک برش نفتی در نرم افزارهای شبیه سازی ، از منحنی های مختلف نقطه جوش که بر اساس استانداردهای مختلف TBP و ASTM بدست می آیند ، استفاده می گردد که عبارتند از:

منحنی های تقطیر TBP

منحنی های تقطیر D1160

منحنی های تقطیر ASTM D86

منحنی های تقطیر D86-D1160

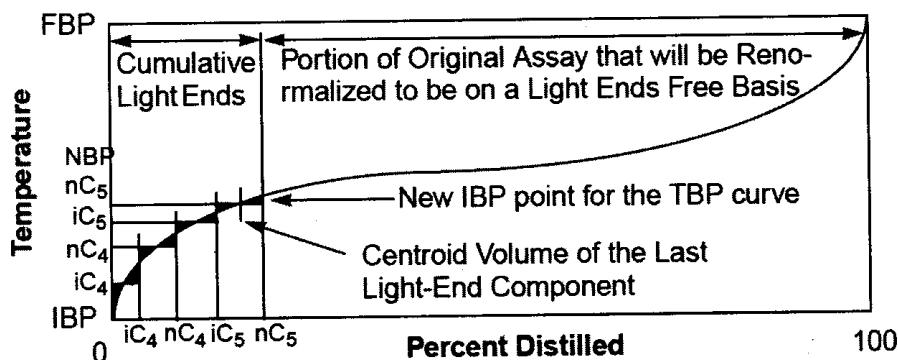
منحنی های تقطیر شبیه سازی شده D2887

منحنی های تبخیر تعادلی EFV : (در این سیستم تقطیر ناپیوسته اتمسفریک همواره بخار با مایع در حال تعادل است) داده های کروماتوگرافی: یک آنالیز وابسته به رنگ در تبخیر کامل نفت خامی می باشد که به گروه های پارافین ها ، آروماتیک ها و گروه های هیدروکربنی نفتنیک از C₆ تا C₃₀ تجزیه شده باشد. داده ها می توند مولی یا حجمی باشند.

اگر هیچ کدام از این منحنی های آزمایشگاهی موجود نباشند ، HYSYS بر اساس دو مورد از سه خاصیت (وزن مولکولی ، چگالی و فاکتور Watson (UOP)K factor که معیاری از پارافینی بودن برش می باشد) ، یک منحنی نقطه جوش TBP ایده آل تولید می کند.

$$\text{Watson (UOP)K factor} = \frac{\sqrt[3]{BP_{\text{average}}}}{SG_{60^{\circ}F}}$$

HYSYS بر اساس این منحنی های تولید شده ، منحنی اصلاح شده TBP ، ویسکوزیته ، چگالی و ... را برای برش های مختلف محاسبه می کند. در صورتیکه خواص فیزیکی برش ها نیز که مطابق آزمایش ها بدست آمده اند وارد سیستم شوند، منحنی های تولید شده HYSYS تنظیم و هموارتر می شوند تا با خواص کل سازگاری داشته باشند. در صورتیکه اطلاعات Light Ends ها معلوم باشد HYSYS قادر است تا بخش سبک منحنی TBP یا ... را با هیدروکربن های سبکتر از C₅ تعویض کند و منحنی تقطیر را بر نتایج این آنالیز تطبیق دهد. در صورتیکه نقطه شروع منحنی TBP با نقطه جوش سنگین ترین محصول سبک (Light Ends) منطبق نباشد ، در اینصورت HYSYS فرض را بر وجود خطا بر منحنی TBP گذاشته و نقطه شروع منحنی TBP را تصحیح می نماید.



پس از انجام این مراحل برش نفت خام باید به برش های کوچکتر شکسته شوند. محدوده دمایی هر یک از این برش ها را می توان به صورت دستی تعیین کرد و یا اینکه به خود نرم افزار اجازه داد که خود به طور بهینه این برش ها را تعیین نماید. HYSYS هر یک از این برش های کوچک را به عنوان یک Hypo component به فهرست مواد ما اضافه می کند و به طور خودکار تمامی خواص هر یک از این برش ها را محاسبه می نماید. باید توجه داشت که معادله حالت انتخاب شده قابلیت کار با ترکیبات Hypo ایجاد شده را داشته باشند.

روش های تقطیر استاندارد نفت خام

روش های تقطیر استاندارد نفت خام عبارتند از:

- ASTM D-2892
- ASTM D-5236
- ASTM D-2887
- ASTM D-86
- ASTM D-1160

روش تقطیر استاندارد ASTM D-2892

این روش تست برای تقطیر نفت خام با فشار بخار کمتر از ۱۲ psi تا نقطه جوش کمتر از 400°C در فشار اتمسفریک استفاده می شود. در این روش از یک برج تفکیک کننده با ۱۴ تا ۱۸ سینی تئوری و با نسبت رفلاکس ۵ به صورت ناپیوسته (Batch) استفاده می شود. بر اساس دستگاه های موجود، مقدار نمونه از ۱ تا ۵۰ لیتر قابل تقطیر است. در انتهای هر برش دما و فشار و برای هر برش دانسیته و جرم ثبت می شوند.

از این اطلاعات منحنی درصد تقطیر یافته جرمی یا حجمی در مقابل دما رسم می شود که به آن منحنی TBP اطلاق می شود.

NO.	دما در فشار اتمسفیریک (°C)	فشار mmHg	دمای واقعی (°C)	وزن رسیور	وزن رسیور + وزن نمونه	درصد نمونه وزنی
1	IBP - 15	ROOM				
2	15-65	ROOM				
3	65-100	ROOM				
4	100-125	ROOM				
5	125-150	ROOM				
6	150-175	ROOM				
7	175-200	ROOM				
8	200-225	40				
9	225-250	40				
10	250-275	40				
11	275-300	40				
12	300-325	2				
13	325-350	2				
14	385-385	2				
15	385+					

روش تقطیر استاندارد ASTM D-5236

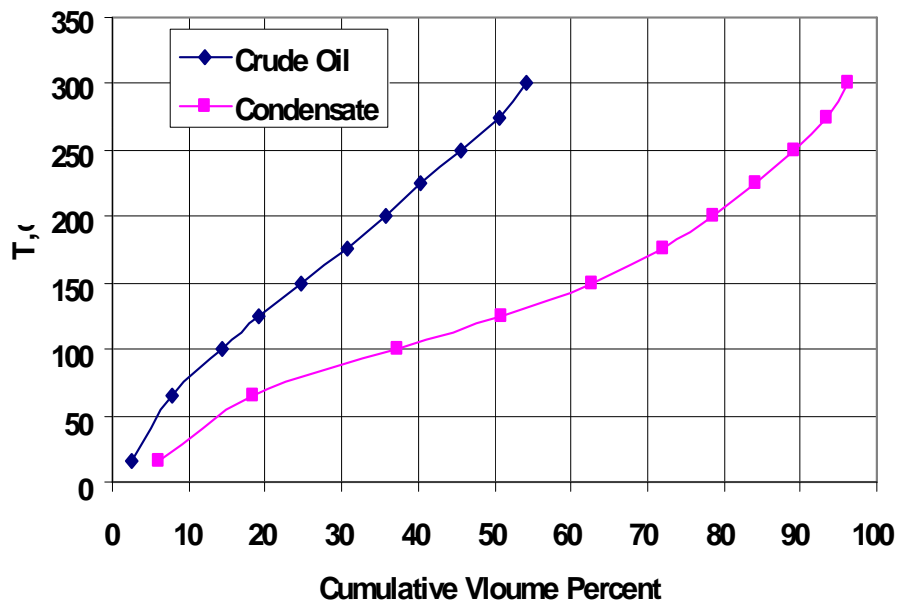
این روش تست برای تقطیر در شرایط خلأ مخلوط های هیدروکربنی سنگین که دمای شروع جوش آنها بالاتر از 150°C (300°F) است (از قبیل نفت خام های سنگین، تقطیر یافته های نفتی مانند برش های روغنی، باقیمانده های تقطیر و مخلوط های سنتزی) استفاده می شود. در این روش مطابق جدول زیر شرایط تقطیر خلأ در شرایط معادل تقطیر استاندارد تبدیل و گزارش می شوند.

NO.	دما در فشار اتمسفیریک (°C)	وزن رسیور	وزن رسیور + وزن نمونه	درصد نمونه وزنی
1	385-425			
2	425-450			
3	450-475			
4	475-500			
5	500-530			
6	530-565			
7	565+			

در نهایت با تجمیع اطلاعات تقطیر ASTM D-2892 و ASTM D-5236 جدول تقطیر TBP برای برش تقطیر یافته تکمیل شده و منحنی آن رسم می شود:

FRAC. NO	BOILING RANGE OF FRAC.@ 1 atm (DEG. C)	WEIGHT PERCENT	CUTTING RANGE (WT %)	SP.Gr. @15.56/15. 56 °C	Molecular Weight	VOLUME PERCENT	CUTTING RANGE (VOL %)
1	IBP-15						
2	15-65						
3	65-100						
4	100-125						
5	125-150						
6	150-175						
7	175-200						
8	200-225						
9	225-250						
10	250-275						
11	275-300						
12	300-325						
13	325-350						
14	350-385						
15	385-425						
16	425-450						
17	450-475						
18	475-500						
19	500-530						
20	530-565						
21	565+						

برای نمونه در شکل زیر منحنی های تقطیر TBP یک نمونه نفت خام و کندانسیت مشاهده می شود.

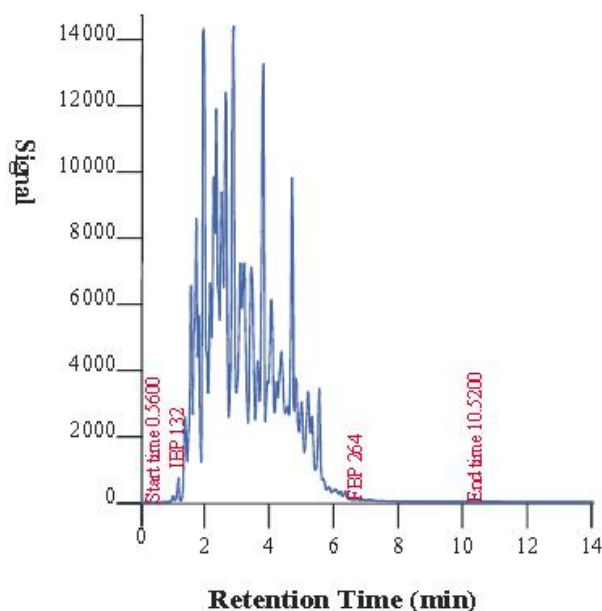


روش تقطیر استاندارد ASTM D-2887

این روش تست برای تقطیر برش های نفتی همراه با کروماتوگرافی گاز جهت تخمین توزیع محدوده نقطه جوش محصولات نفتی به کار می رود. این روش تقطیر برای محصولات نفتی از نقطه جوش ابتدایی 55°C تا نقطه جوش انتهایی 538°C (1000°F) در فشار اتمسفریک کاربرد دارد. لازم به ذکر است از این روش برای آنالیز تقطیر گسولین استفاده نمی شود. روش تست گسولین روش ASTM D 3710 است.



دستگاه استاندارد تقطیر ASTM D-2887



یک نمونه نتیجه آنالیز سوخت جت با استاندارد تقطیر ASTM D-2887

روش تقطیر استاندارد ASTM D-86

این روش تست برای تقطیر محصولات نفتی (به ویژه سوخت های تقطیر یافته مانند بنزین طبیعی، سوخت هواپیما، نفت سفید، انواع گازوئیل و ...) تا نقطه جوش کمتر از 400°C در فشار اتمسفریک استفاده می شود. این روش برای برش هایی که حاوی باقیمانده های سنگین هستند به کار نمی رود.

ASTM D86		TEMPERATURE, °C
IBP		
5.0	vol%	
10.0	vol%	
20.0	vol%	
30.0	vol%	
40.0	vol%	
50.0	vol%	
60.0	vol%	
70.0	vol%	
80.0	vol%	
90.0	vol%	
95.0	vol%	
FBP		

روش تقطیر استاندارد ASTM D-1160

این روش تست برای تعیین محدوده نقاط جوش محصولات نفتی سنگین در فشارهای پایین که می توانند ماکزیمم تا دمای 400°C تا حدی یا به طور کامل تبخیر شوند، استفاده می شود. در این روش شرایط تقطیر خلأ به کمک روابط مربوطه در شرایط معادل تقطیر استاندارد تبدیل و گزارش می شوند.

در جدول زیر فاصله جوش برش های مختلف نفتی اشاره شده است:

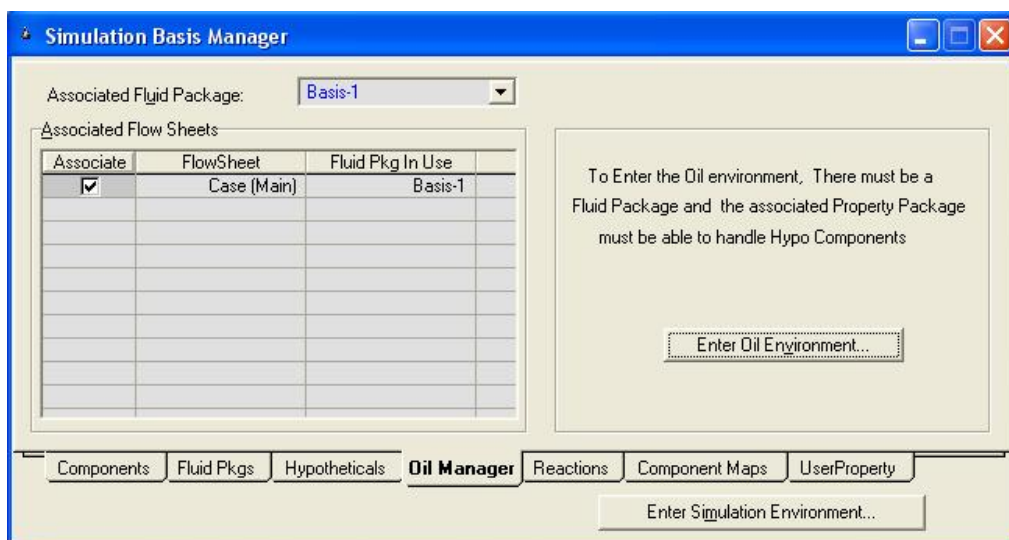
فاصله جوش برشهای نفتی

فاصله جوش		برش
TBP F (°C)	ASTM F (°C)	
-	-	بوتانها و سبکتر
90-190 (32/2-87/8)	90-220 (32/2-104/4)	بنزین سبک تقطیر مستقیم (LSRG)
190-380 (87/7-193/3)	180-400 (82/2-204/4)	بنزین سنگین تقطی مستقیم (HSRG)
380-520 (193/3-271/1)	330-540 (165/5-282/2)	کروزن (نفت سفید)
520-610 (271/1-321/1)	420-640 (215/6-327/8)	گازوئیل سبک (LGO)
610-800 (321/1-426/7)	550-830 (287/8-443/3)	گازوئیل اتمسفری (AGO)
-1050 (426/7-565/6) 800	750-1050 (398/9-565/6)	گازوئیل خلأ (VGO)
1050 (565/6)	1000 (565/5)	باقیمانده خلأ

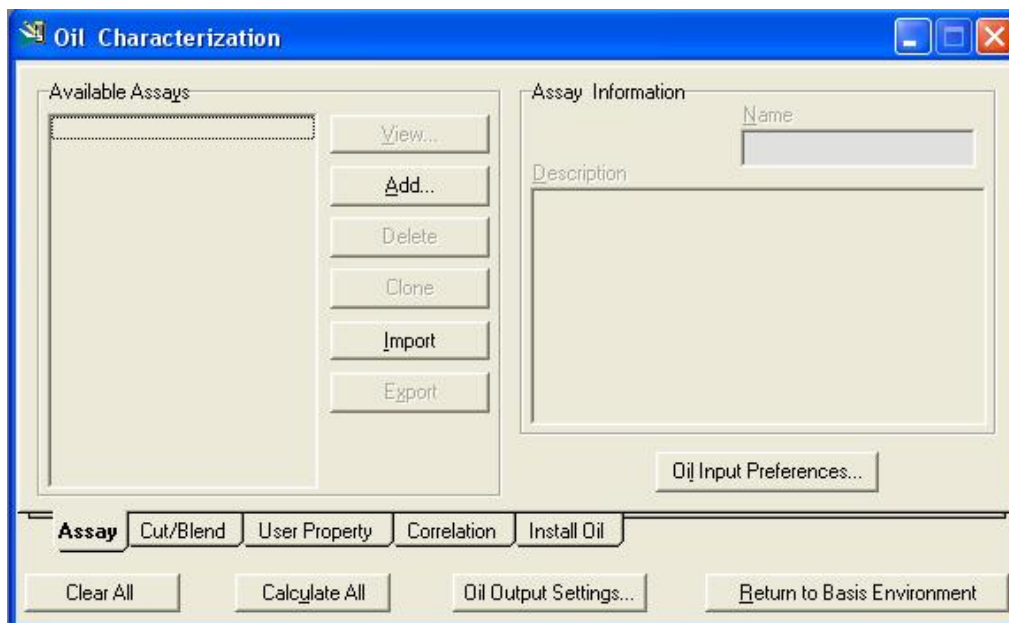
مراحل تعریف یک برش نفتی در F.P. به شرح زیر می باشد:

۱- تعیین معادله حالت مناسب

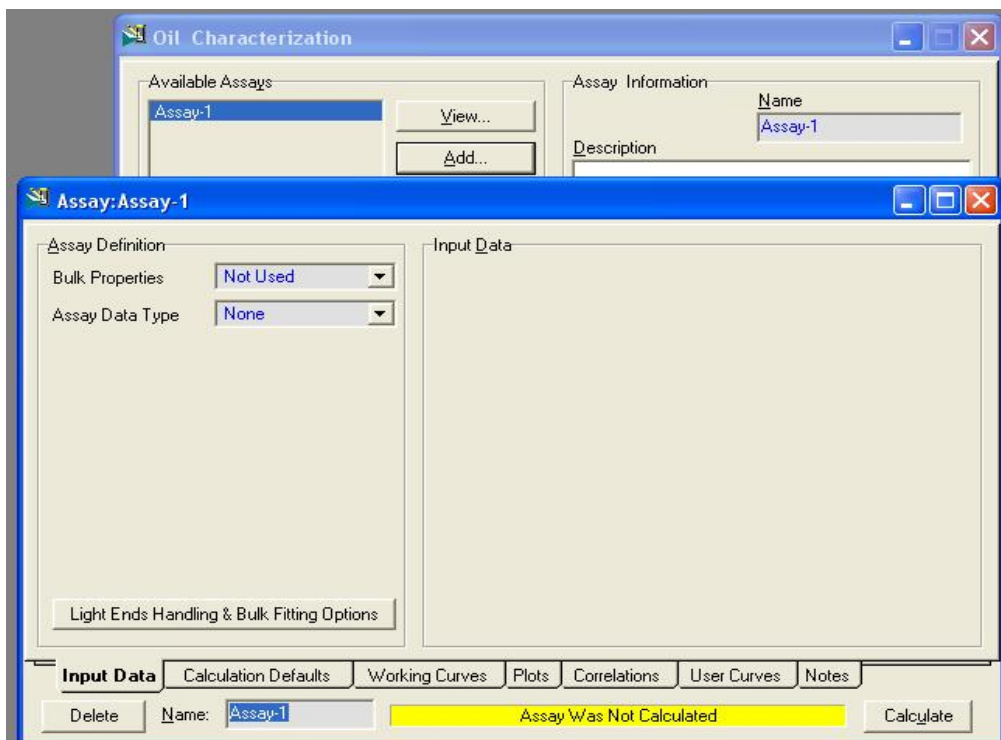
۲- ورود به صفحه Oil Manager



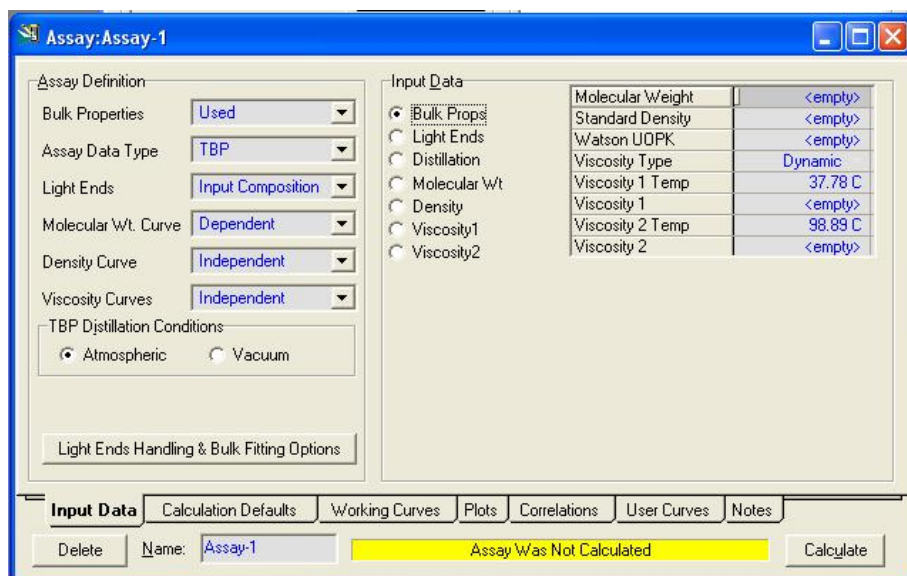
۳- ورود به محیط نفتی (Enter Oil Environment)



۴- اضافه کردن یک Assay جدید



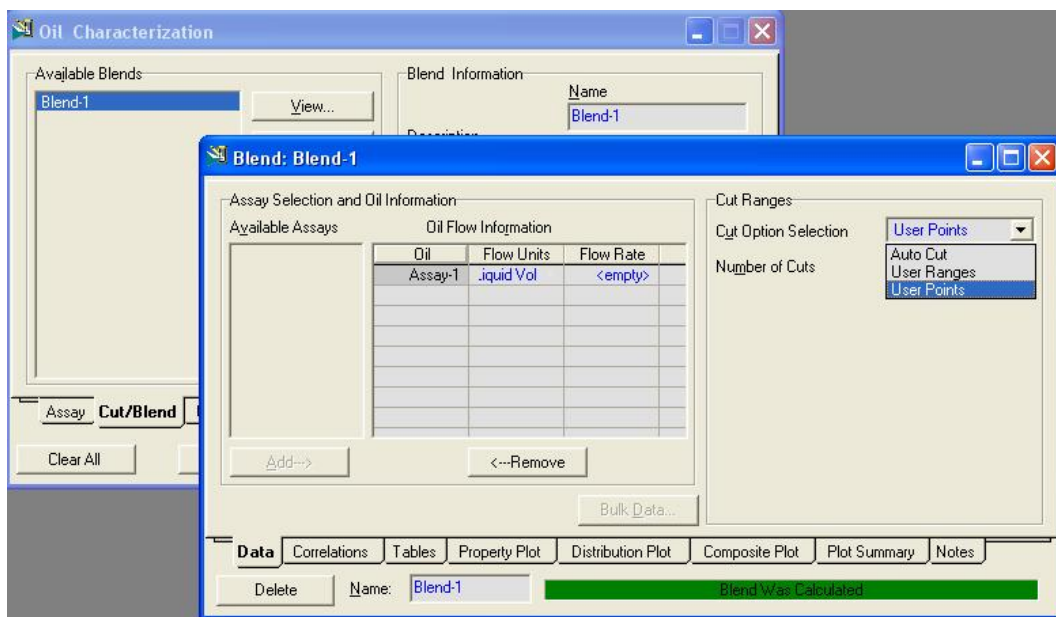
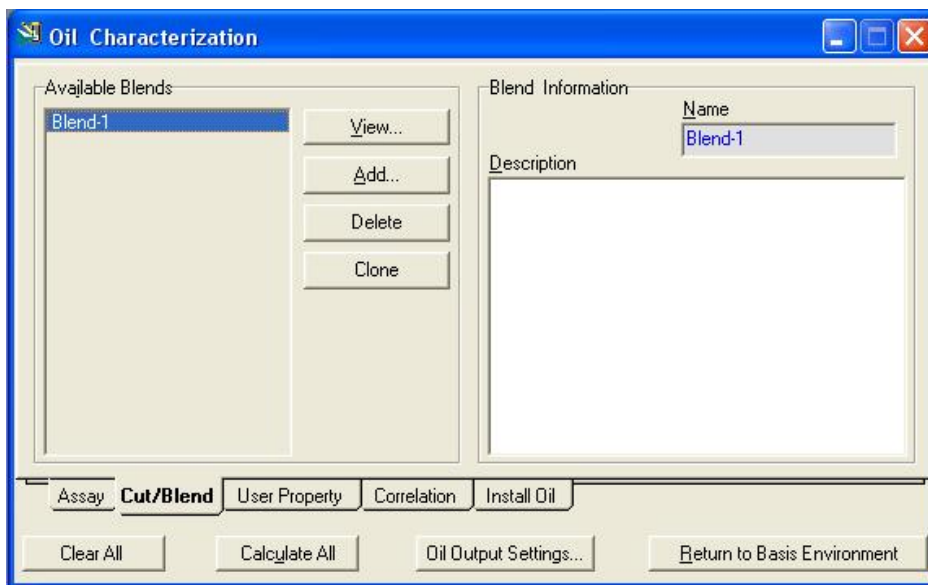
۵- ورود اطلاعات مربوط به Assay



در این صفحه داده های مربوط به خواص کلی Assay از منوی Bulk Properties، داده های مربوط به ترکیبات سبک از منوی Light End (در صورت موجود بودن)، داده های مربوط به تقطیر نفت خام از

منوی Assay Data Type/Distillation، داده های مربوط به جرم مولکولی، دانسیته و ویسکوزیته بر حسب درصد های مختلف Assay از منوهای مربوطه وارد سیستم می شوند. پس از این مرحله با زدن دکمه Calculate محاسبات مربوط به منحنی های عملکردی برش آغاز می گردند. در برگه Plot امکان مشاهده منحنی های محاسبه شده وجود دارند.

۶- ورود به صفحه Cut/Blend جهت ایجاد ترکیبات Hypo



نکته:

در حالت انتخاب گزینه Auto Cut، HYSYS اجزاء لازم برای برش های مختلف را به روش زیر محاسبه می کند:

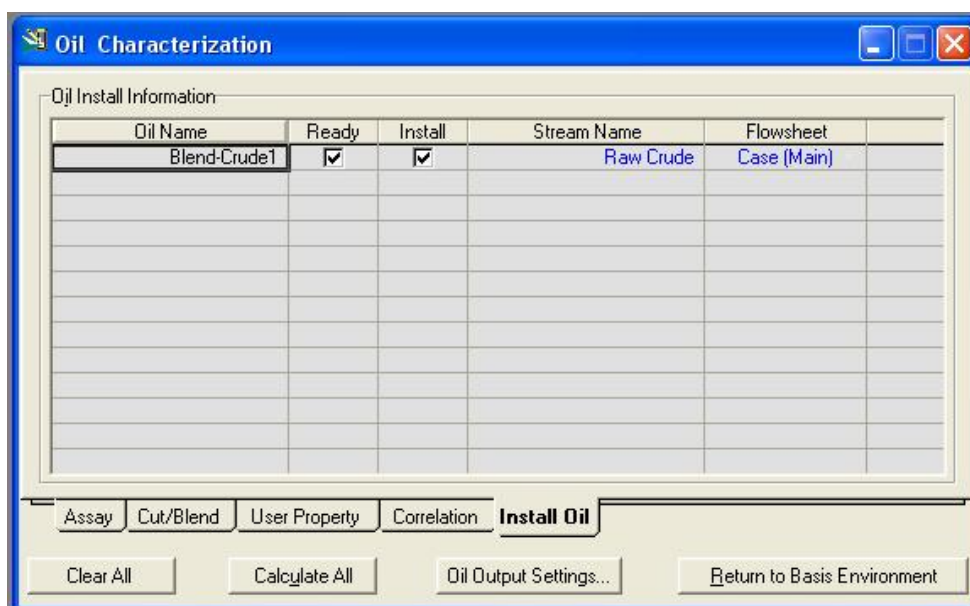
۱- از دمای IBP (که برابر با دمای جوش نرمال پنتان (۹۶/۶ درجه فارنهایت) است) تا دمای ۸۰۰ درجه فارنهایت در هر ۲۵ درجه یک جزء به وجود می آورد. یعنی در این محدوده $\frac{800-97}{25} = 28$ جزء به وجود می آورد.

۲- از دمای ۸۰۰ تا دمای ۱۲۰۰ درجه فارنهایت در هر ۵۰ درجه یک جزء به وجود می آورد. یعنی در این محدوده $\frac{1200-800}{50} = 8$ جزء به وجود می آورد.

۳- از دمای ۱۲۰۰ تا دمای ۱۴۰۰ درجه فارنهایت در هر ۱۰۰ درجه یک جزء به وجود می آورد. یعنی در این محدوده $\frac{1400-1200}{100} = 2$ جزء به وجود می آورد.

که در مجموع ۳۸ ماده فرضی تولید می شود. پس از این مرحله HYSYS توزیع مربوط به برش نفتی را به صورت تخمینی محاسبه می کند که نتایج آن را می توان به صورت جدولی، میله ای و نموداری در این صفحه مشاهده نمود.

۷- انتقال تمام اطلاعات مواد Hypo به فلوشیت

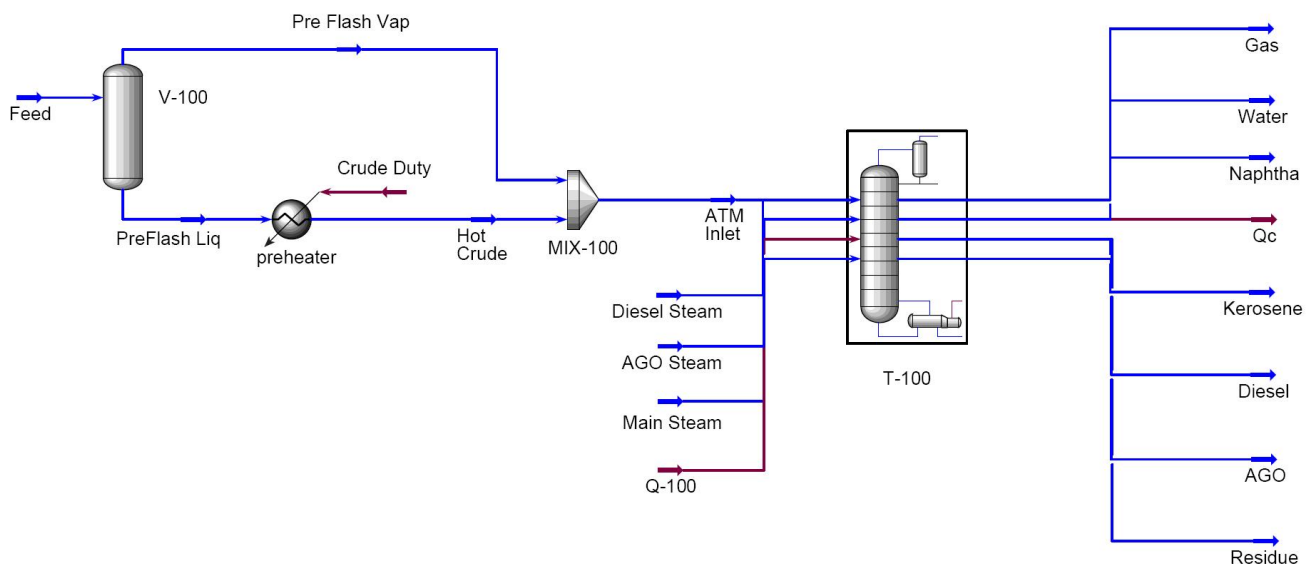


در این مرحله با زدن کلید Return Basis Environment ، وارد محیط شبیه سازی HYSYS می شویم که در آن جریانی به نام Raw Crude ایجاد شده و تمام داده های Blend به آن منتقل شده است. اگر روی این جریان کلیک کنیم و به برگه Composition برویم ، در این بخش مشخصات مواد Hypo Component ایجاد شده توسط HYSYS قابل ملاحظه است.

تمرین ۱:

۱۰۰،۰۰۰ بشکه در روز از نفت خام با چگالی استاندارد API ۲۹ مطابق دیاگرام زیر پس از پیش گرم شدن وارد یک جداکننده Pre Flash با دما و فشار عملیاتی ۴۵۰F و ۷۵ psia می شود. جریان مایع خروجی از جداکننده وارد کوره شده و دمای آن به ۶۵۰ F می رسد. افت فشار کوره برابر ۱۰ psi است. این جریان با جریان بخار خروجی از جداکننده یکی شده و سپس وارد برج تقطیر اتمسفریک می شود. برج تقطیر اتمسفریک دارای سه استریپر و سه پمپ حرارتی جانبی می باشد. مطلوبست شبیه سازی فرآیند فوق با مشخصات داده شده زیر :

FP: Peng Robinson



Main Steam: T=375 F, P=130 psia, F=7500 lb/hr
 Diesel Steam: T=300 F, P=30 psia, F=3000 lb/hr
 AGO Steam: T=300 F, P=30 psia, F=2500 lb/hr

Condenser Pressure = 19.7 psia
 Condenser pressure drop = 9 psia
 Bottom Stage Pressure = 32.7 psia

Temperature Estimate for Condenser = 100 F
 Temperature Estimate for Top Stage = 250 F
 Temperature Estimate for Bottom Stage = 600 F

Kero-ss prod flow = 9,300 bbl/day
 Diesel-ss prod flow = 19,250 bbl/day
 AGO-ss prod flow = 4,500 bbl/day

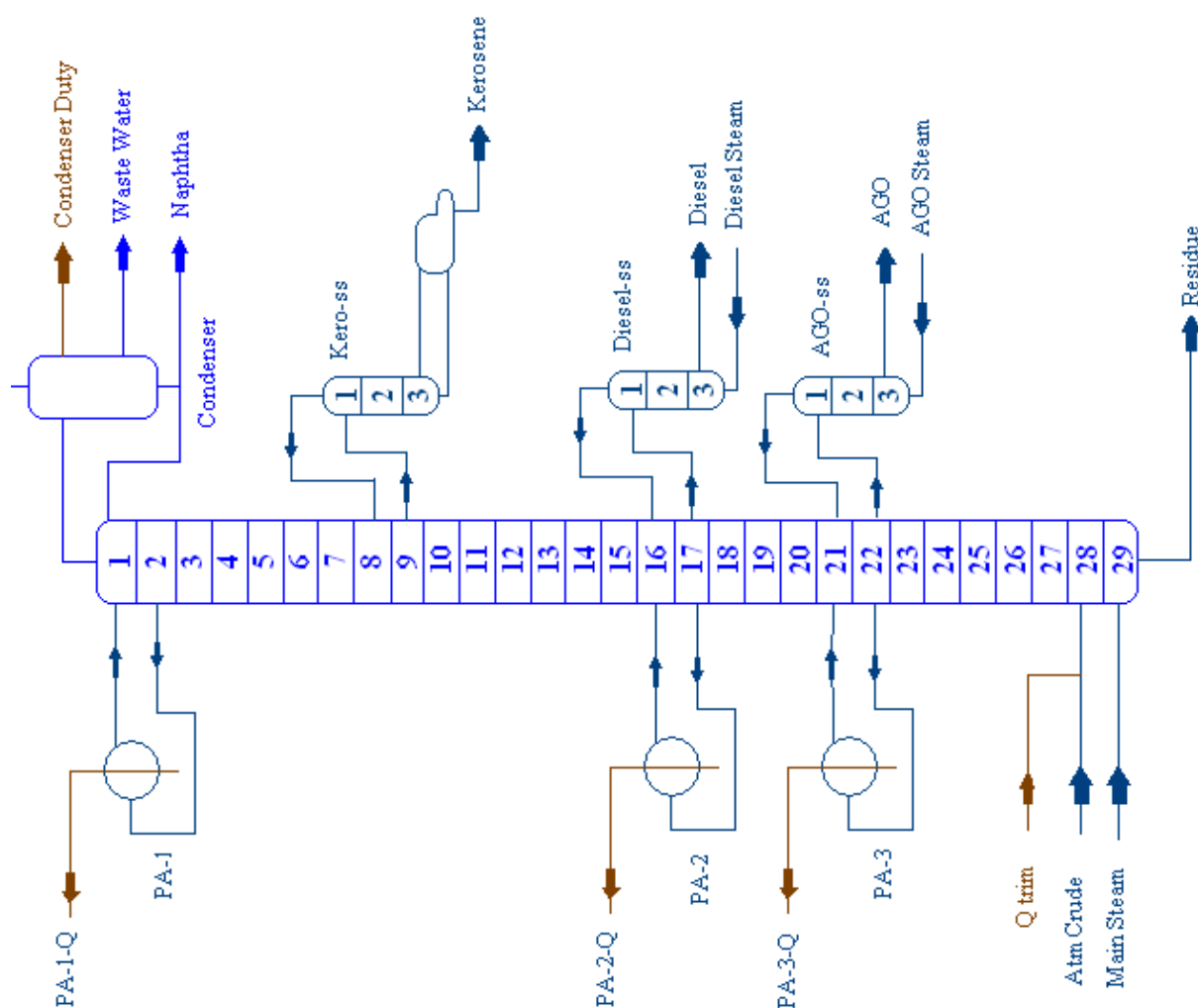
PA-1-Rate(pa)=5e+4 bbl/day
 PA-1-Duty = -5.5e+7
 PA-2-Rate(pa)=3e+4 bbl/day
 PA-2-Duty = -3.5e+7
 PA-3-Rate(pa)=3e+4 bbl/day
 PA-3-Duty = -3.5e+7

Distillate Rate = 2.3e+4 bbl/day

Liquid flow @27 tray = 3,500 bbl/day

Kero-reb-duty = 7.5e+6

Vapor Product flow @condenser = 0



آنالیز ترکیبات سبک موجود در نفت خام عبارتند از:

Ligh Ends (L. Volume %)	Composition
Methane	0.0065
Ethane	0.0225
Propane	0.32
i-Butane	0.24
n-Butane	0.82
H ₂ O	0

داده های تقطیر TBP به شرح جدول زیر می باشد:

Assay % (Liquid Volume)	T (F)
0	15
4.5	90
9	165
14.5	240
20	310
30	435
40	524
50	620
60	740
70	885
76	969
80	1015
85	1050

هر جریان خروجی از برج تقطیر نفتی حداقل باید دارای ۵ ترکیب فرضی با ترکیب درصدی هر کدام بالاتر از ۱٪ باشد. بنابراین در این مثال برش نفت خام را به ۳۰ ماده فرضی تقسیم نمایید.

مطلوبست:

- نمودار توزیع محصولات برش نفتی
- میزان پارافین، نفتن و آروماتیک موجود در جریان خوراک
- منحنی های تقطیر در استانداردهای مختلف تقطیر

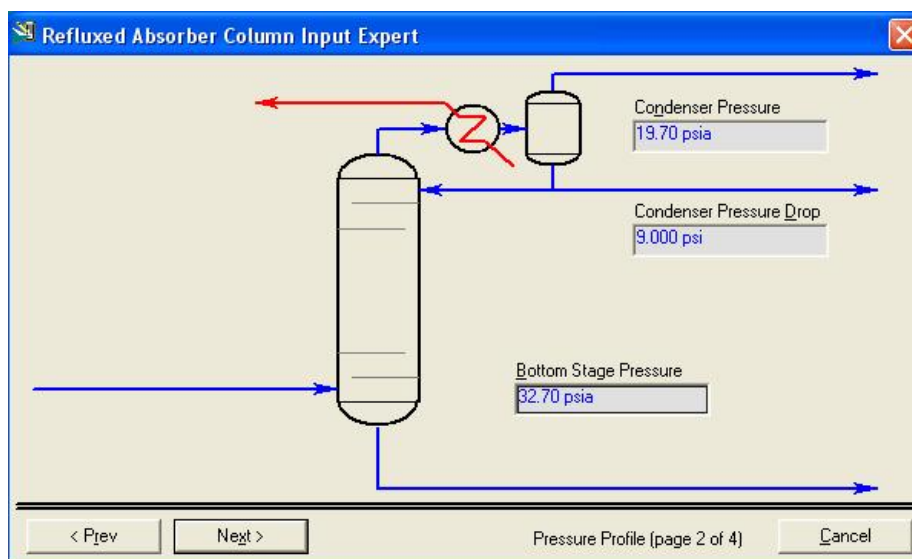
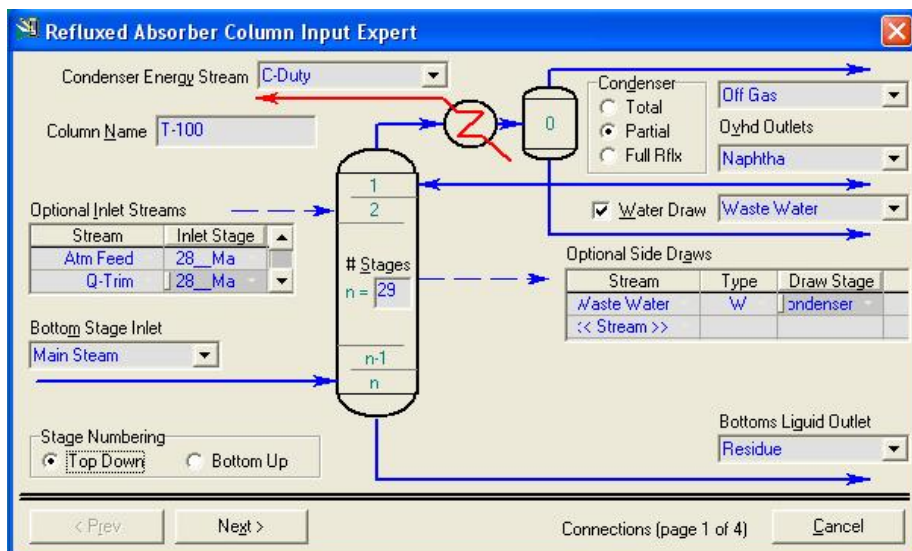
مشخصات خوراک نفت خام:

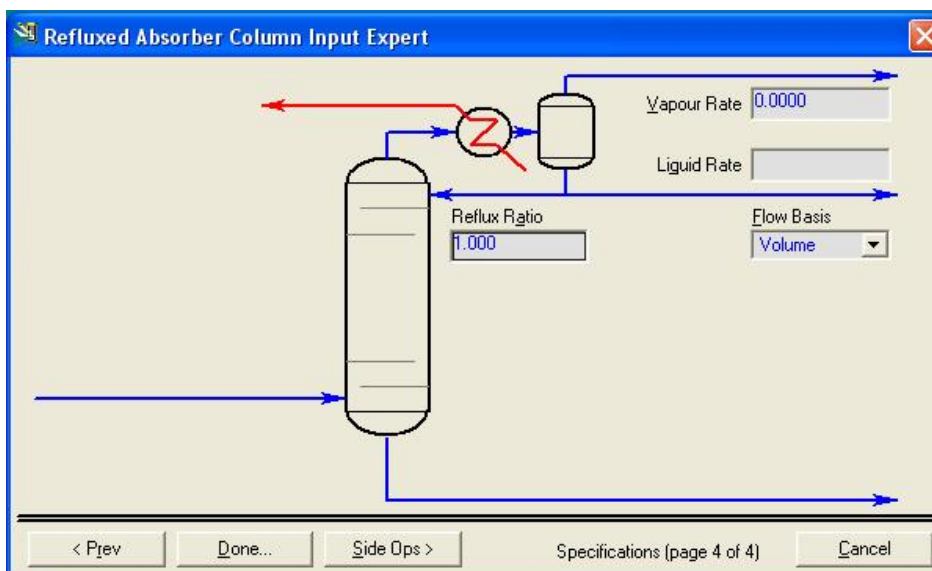
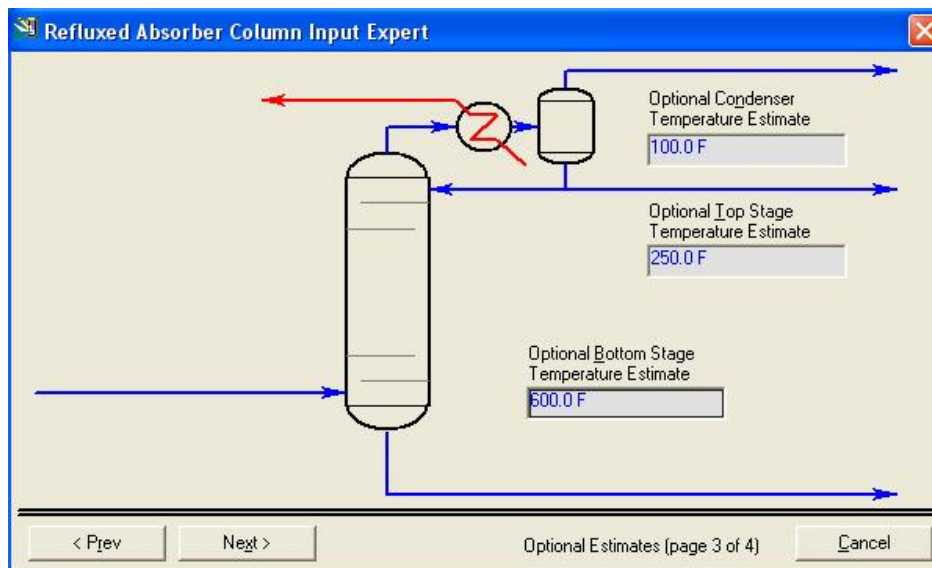
T (F)	450
P (psia)	75
Q (barrel/day)	100000

مشخصات خطوط بخار پشتیبانی:

	Main Steam	AGO Steam	Diesel Steam
T (F)	375	300	300
P (psia)	150	50	50
m (lb/hr)	7500	2500	3000

مطابق شکل های زیر شرایط عملیاتی برج تقطیر را وارد برنامه نمایید:

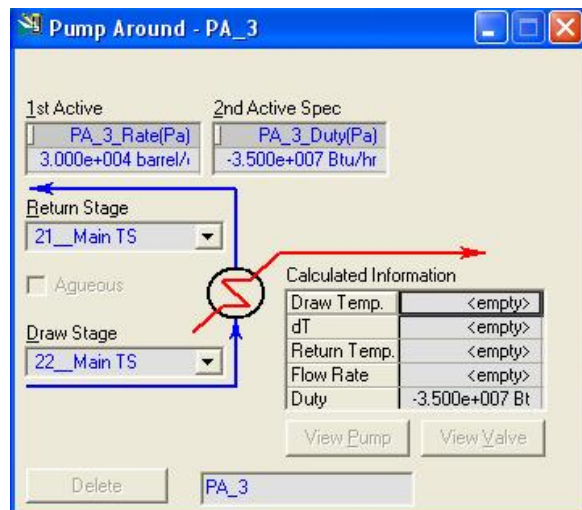
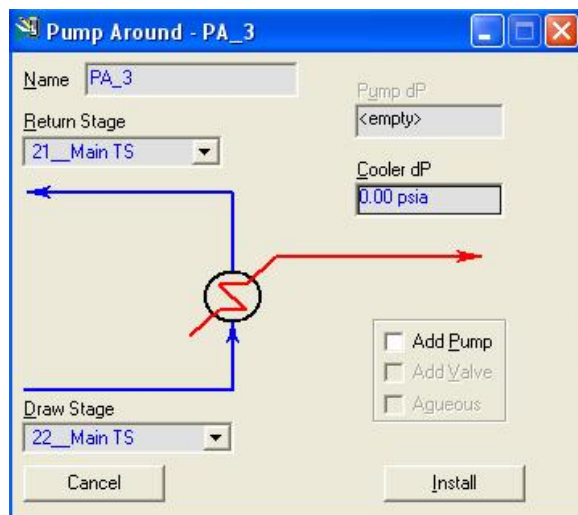
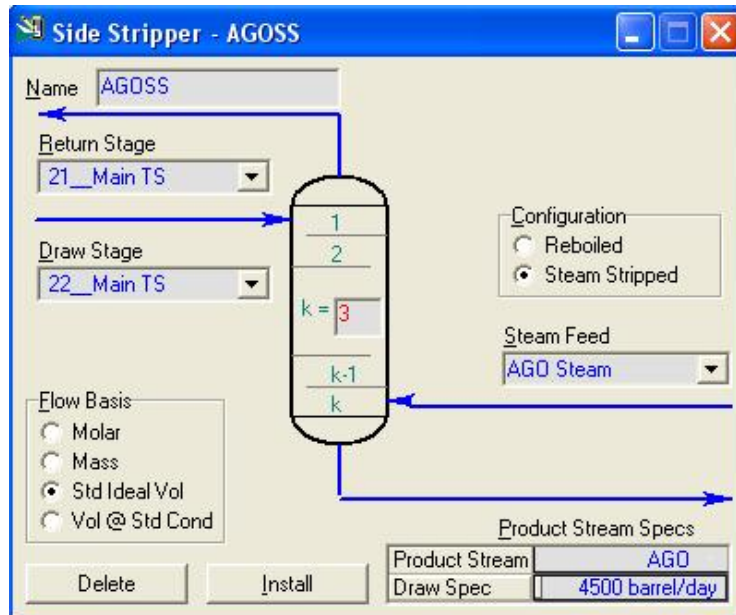




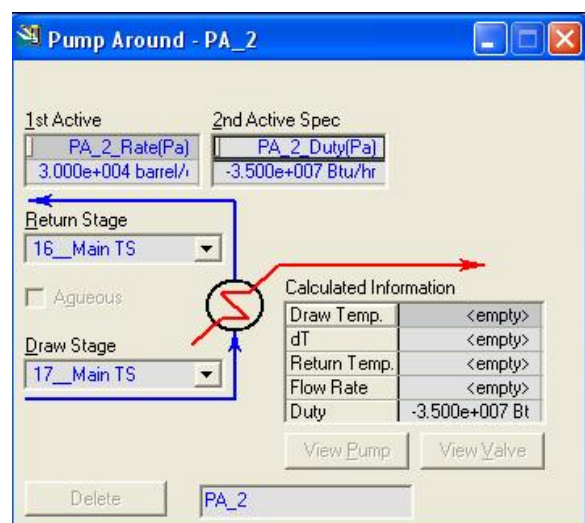
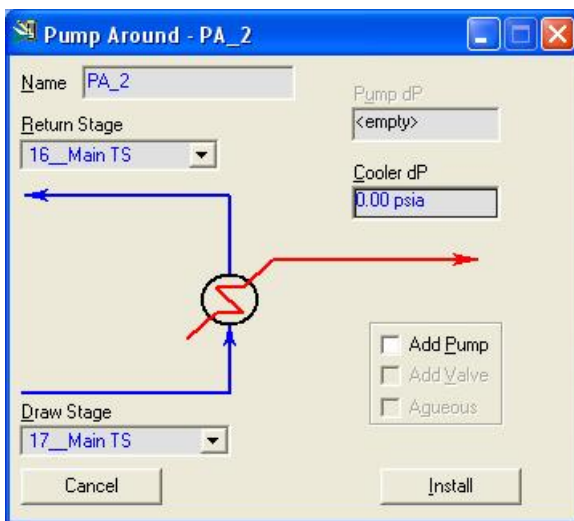
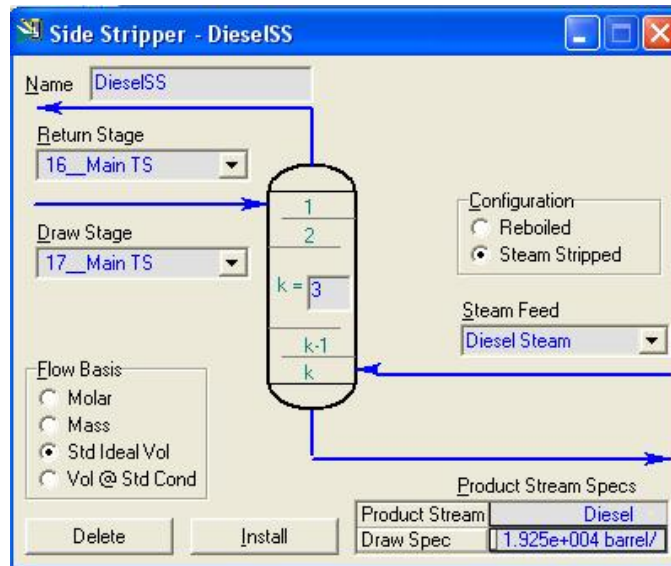
پس از انجام مراحل بالا وارد صفحه Monitor شده و تغییرات زیر را اعمال نموده و سپس برنامه را اجرا نمایید:

- مقدار Distillate Rate را برابر ۲۳۰۰۰ بشکه در روز وارد نمایید. (شدت نفتا)
- مقدار Reflux Ratio را در حالت Estimate قرار دهید.

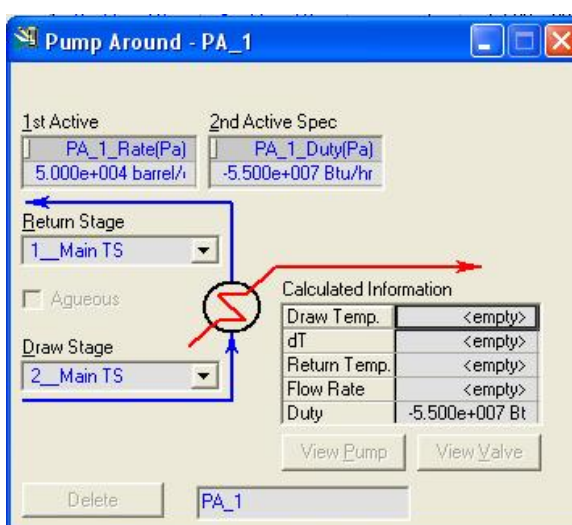
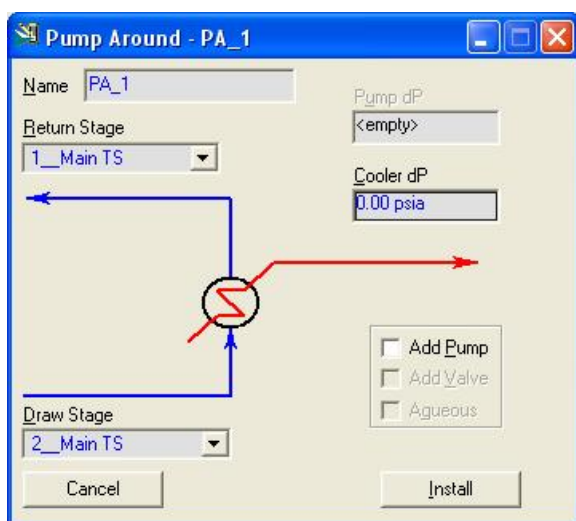
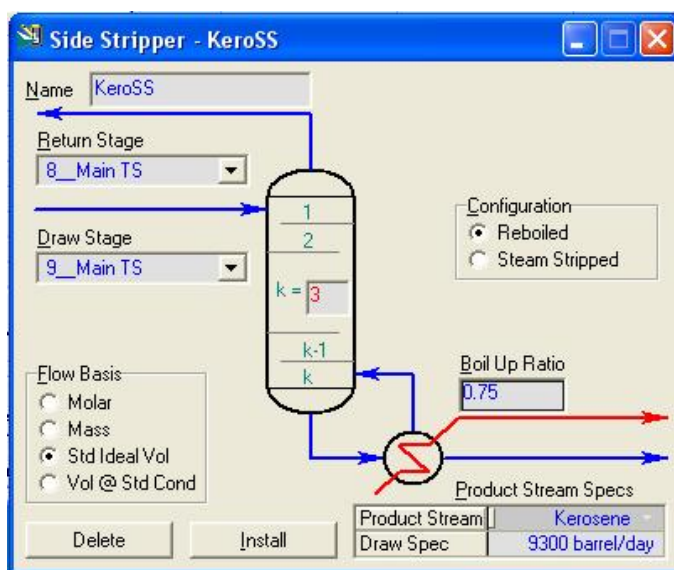
در مرحله بعدی پمپ حرارتی و استریپر مربوط به محصول AGO را مطابق شکل های زیر به برج تقطیر اضافه و سپس برنامه را اجرا نمایید:



در مرحله بعدی پمپ حرارتی و استریپر مربوط به محصول Diesel را مطابق شکل های زیر به برج تقطیر اضافه و سپس برنامه را اجرا نمایید:



در مرحله بعدی پمپ حرارتی و استریپر مربوط به محصول Kerosene را مطابق شکل های زیر به برج تقطیر اضافه و سپس برنامه را اجرا نمایید:



همانطور که ملاحظه می شود اجرای برنامه به دلیل عدم موازنه انرژی به همگرایی نمی رسد. جهت رفع این مشکل یک جریان انرژی به نام Q-Trim همراه با جریان خوراک از سینی ۲۸ ام وارد برج نمایید. این جریان به عنوان یک مبدل جانبی روی سینی خوراک عمل می کند و مقدار آن در اثر محاسبات موازنه انرژی برج محاسبه می شود. با اضافه کردن جریان Q-Trim درجه آزادی به ۱ تغییر پیدا می کند. برای صفر کردن درجه آزادی سیستم وارد صفحه Monitor شده و مشخصه های زیر را اضافه نمایید:

Column Liquid Flow : (Over Flash), Stage 27 = 3500 barrel/day

برنامه را اجرا نمایید.

- **مطلوبست نحوه توزیع محصولات در جریان های خروجی از برج**

در صورتیکه دبی نفت خام تغییر قابل ملاحظه ای نماید امکان دارد اجرای برنامه به همگرایی نرسد. این امر به علت عدم توانایی نرم افزار در موازنه جرمی سیستم می باشد. جهت رفع تمامی مشکلات مربوط به حل برج های نفتی بهتر است تا محاسبات مربوط به برج را به جای مشخصه های دبی جریان برای محصولات بر مبنای مشخصه CUT POINT انجام دهیم. بر این اساس:

- **دمای تقطیر 95% ASTM D86 محصول نفتا، کروزن، دیزل و AGO را گزارش نمایید.**
- **مطلوبست دبی لازم برای محصولات نفتا و دیزل برای تولید نفتا با دمای تقطیر 190 درجه سانتیگراد در 95% ASTM D86 و تولید دیزل با دمای تقطیر 275 درجه سانتیگراد در 95% ASTM D86 ؟**



دوره آموزش شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار

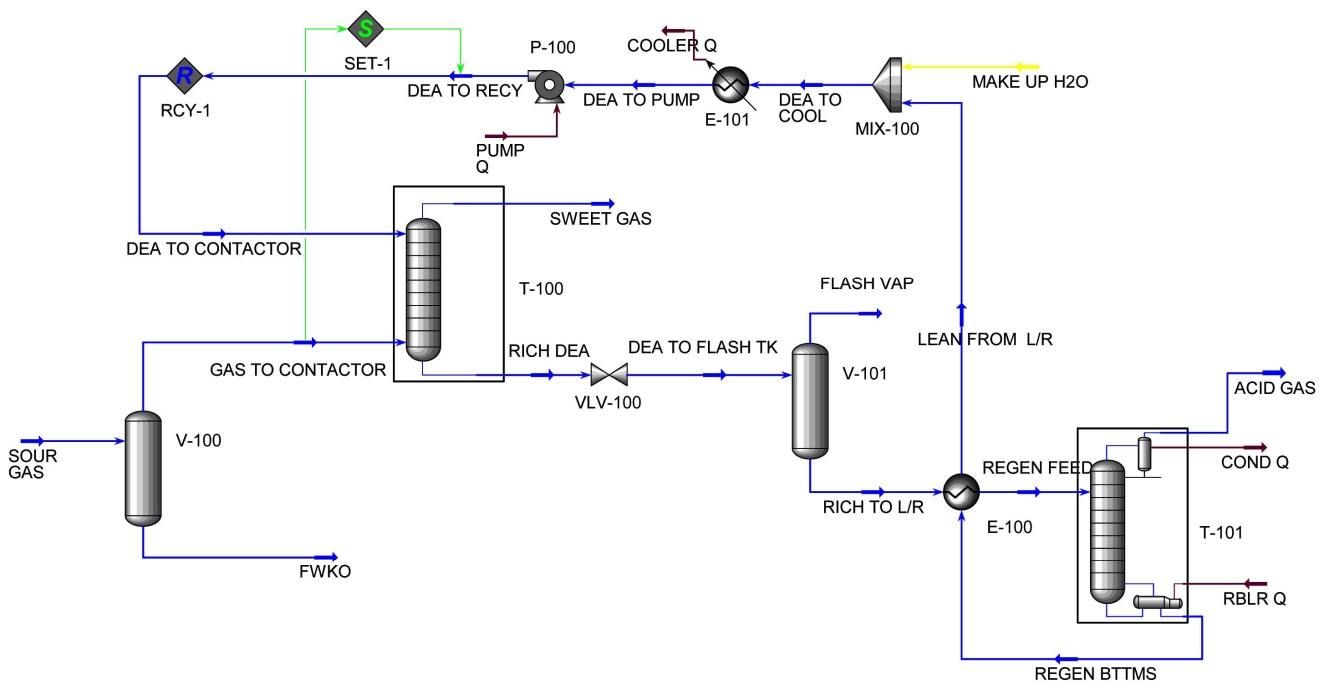
HYSYS

جلسه دوازدهم

- شبیه سازی فرآیند شیرین سازی جریان گاز طبیعی
- شبیه سازی فرآیند رطوبت زدایی از جریان گاز طبیعی
- شبیه سازی فرآیند تفکیک میعانات گاز طبیعی (LNG) از جریان گاز طبیعی

تمرین ۱

هدف شبیه سازی فرآیند شیرین سازی جریان گاز طبیعی مرطوب و ترش SOUR GAS توسط محلول ۲۸٪ وزنی دی اتانول آمین (DEA) مطابق فرآیند ذیل است. در این فرآیند فشار جریان RICH DEA خروجی از برج تماس پس از عبور از شیر فشار شکن از ۱۰۰۰ psia به ۹۰ psia کاهش پیدا کرده و در اثر این افت فشار کلیه هیدرو کربن های جذب شده در RICH DEA در داخل جدا کننده جدا شده و جهت پیش گرم شدن تا دمای خوراک برج احیا (۲۰۰ درجه فارنهایت) وارد مبدل LEAN / RICH AMINE H.X می شود. در داخل برج احیای آمین (AMINE REGENERATOR)، جریان گاز اسیدی و محلول LEAN AMINE با فرآیند تقطیر از RICH AMINE جدا شده و در نهایت LEAN AMINE پس از خنک شدن به صورت جریان برگشتی به برج تماس DEA باز می گردد.



PP: AMINE Package/ Li-Mather/Non-Ideal

مشخصات جریان های ورودی و تجهیزات فرآیندی به شرح جداول ذیل است:

DEA TO CONTACTOR		
Temperature	95.00	F
Pressure	995.0	psia
Std Ideal Liq Vol Flow	190.0	USGPM
Comp Mass Frac (CO2)	0.0018	
Comp Mass Frac (H2O)	0.7187	
Comp Mass Frac (DEAmine)	0.2795	

SOUR GAS		
Temperature	86.00	F
Pressure	1000	psia
Molar Flow	25.00	MMSCFD
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0016	
Comp Mole Frac (CO2)	0.0413	
Comp Mole Frac (H2S)	0.0172	
Comp Mole Frac (Methane)	0.8692	
Comp Mole Frac (Ethane)	0.0393	
Comp Mole Frac (Propane)	0.0093	
Comp Mole Frac (i-Butane)	0.0026	
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0029	
Comp Mole Frac (i-Pentane)	0.0014	
Comp Mole Frac (n-Pentane)	0.0012	
Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0018	
Comp Mole Frac (n-Heptane)	0.0072	
Comp Mole Frac (H2O)	0.0050	
Comp Mole Frac (DEAmine)	0.0000	

V-100		
Vessel Pressure Drop	0.0000	psi

V-101		
Vessel Pressure Drop	0.0000	psi

VLV-100		
Product Pressure	90.00	psia

E-101		
Pressure Drop	5.000	psi

P-100		
Product Temperature	95.00	F

SET-1		
Multiplier	1.000	
Increment	-5.000	psi

T-100		
Number of Trays	20.00	
Pressure Profile (Top)	995.0	psia
Pressure Profile (Bottom)	1000	psia
Temperature Est (Top)	100.0	F
Temperature Est (Bottom)	160.0	F

T-101		
Number of Trays	18.00	
Feed Stage	4.00	
CondenserType	Full Reflux	
Condenser Pressure	27.50	psia
Condenser Pressure Drop	2.500	psi
Reboiler Pressure	31.50	psia
Damping Factor	0.4000	
Condenser Efficiency	1.000	
Reboiler Efficiency	1.000	
1_TS to 18_TS CO2 Efficiency	0.15	
1_TS to 18_TS H2S Efficiency	0.80	
Condenser Temperature	179.600	F
Reboiler Duty	1.356e7	BTU/hr

E-100		
Tube Side Pressure Drop	10.00	psi
Shell Side Pressure Drop	10.00	psi
Tube Outlet Temperature	200.0	F

MAKE UP H2O		
Temperature	70.00	F
Pressure	21.50	psia
Comp Mole Frac (H2O)	1.0000	

MIX-100		
Product Volume Flow	190.0	USGPM

در بسته ترمودینامیکی آمین (Amines property package) برای شبیه سازی برج های Contactor و برج های Regenerator می بایست تعداد واقعی سینی ها وارد سیستم شود و نیز میزان بازدهی ترکیبات H2S و CO2 در تمام سینی های برج معلوم باشد.

مطلوبست محاسبه درصد حجمی CO₂ و H₂S در جریان گاز شیرین؟

نکته:

جریان گاز شیرین نباید بیشتر از ۲٪ حجمی CO₂ و ۴ ppm (حجمی) H₂S داشته باشد.
میزان بارهای گاز اسیدی H₂S و CO₂ را در جریان های RICH AMINE و LEAN AMINE محاسبه
نمایید.

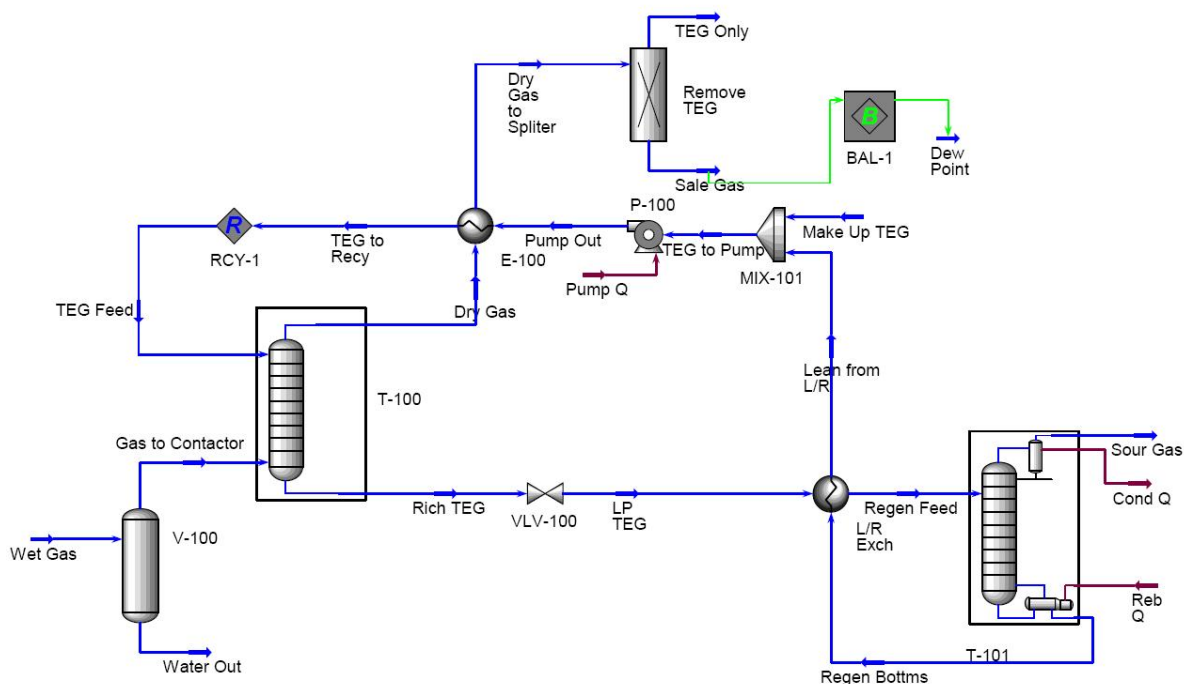
$H_2S \text{ Loading} = \text{mole } H_2S \text{ in AMINE} / \text{mole AMINE}$

مقادیر پیشنهاد شده برای بیشترین مقدار مجاز بار گازهای اسیدی توسط D.B.Robinson به شرح جدول
ذیل است:

Maximum Acid Gas Loadings (moles acid gas/mole of amine)		
	CO ₂	H ₂ S
MEA, DGA	0.5	0.35
DEA	0.45	0.30
TEA, MDEA	0.30	0.20

تمرین ۲

هدف شبیه سازی فرآیند رطوبت زدایی از جریان گاز طبیعی مرطوب و اشباع (Natural Gas Dehydration) توسط محلول ۹۹٪ وزنی تری اتیلن گلیکول (TEG) مطابق فرآیند ذیل است. در این تمرین جریان گاز ورودی (Inlet Gas) عاری از آب است که تا حد اشباع شدن آن از آب، با جریان آب (Water to saturate) مخلوط می شود. جریان خروجی از میکسر جهت جداسازی آب آزاد همراه گاز وارد جداکننده می شود. سپس جریان گاز خروجی از جدا کننده جهت جداسازی آب محلول در گاز وارد برج تماس با Lean TEG می شود. جریان گلیکول غنی از آب (Rich TEG) خروجی از برج تماس نیز پس از عبور از شیر فشار شکن وارد مبدل L/R Exch شده و در تماس با جریان داغ Lean Amine خروجی از پایین برج استریپر تا دمای ۲۲۰ درجه فارنهایت گرم شده و وارد برج استریپر می شود. TEG بازیافت شده هم پس از خنک شدن به برج تماس بازگردانی می شود.


PP: Peng Robinson

مشخصات جریان های ورودی و تجهیزات فرآیندی به شرح جداول ذیل است:

Wet Gas		
Temperature	85.00	F
Pressure	900.0	psia
Molar Flow	10.01	MMSCFD
Comp Mass Frac (Nitrogen)	0.0015	
Comp Mole Frac (CO2)	0.0284	
Comp Mole Frac (H2S)	0.0155	
Comp Mole Frac (Methane)	0.8980	
Comp Mole Frac (Ethane)	0.0310	
Comp Mole Frac (Propane)	0.0148	
Comp Mass Frac (i-Butane)	0.0186	
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0030	
Comp Mole Frac (i-Pentane)	0.0010	
Comp Mole Frac (n-Pentane)	0.0005	
Comp Mole Frac (H2O)	0.0010	
Comp Mole Frac (TEGlycol)	0.0000	

V-100		
Vessel Pressure Drop	0.0000	psi

T-100		
Number of Trays	14.00	
Over Head Pressure	900.0	psia
Bottom Pressure	900.0	psia
Stages 1,14 Efficiency	1.000	
Stages 2-13 Efficiency	0.5000	

MIX-101		
Product Volume Flow	2.000	USGPM
Equalize Pressures	Yes	

P-100		
Product Pressure	910.0	psia

E-100		
Tube Outlet Temperature	120.0	F
Tube Side Pressure Drop	10.00	psi
Shell Side Pressure Drop	5.000	psi

TEG Feed		
Temperature	120.0	F
Pressure	900.0	psia
Std Ideal Liq Vol Flow	2.000	USGPM
Comp Mass Frac (H2O)	0.0100	
Comp Mass Frac (TEGlycol)	0.9900	

Make Up TEG		
Temperature	60.00	F
Comp Mass Frac (TEGlycol)	0.9900	
Comp Mass Frac (H2O)	0.0100	

L/R Exch		
Tube Side Pressure Drop	0.1000	psi
Shell Side Pressure Drop	10.00	psi
Shell Outlet Temperature	220.0	F
Shell Outlet Pressure	16.00	psia

T-101		
Number of Trays	3.000	
Feed Stage	2.000	
CondenserType	Full Reflux	
Over Head Pressure	14.70	psia
Bottom Pressure	15.00	psia
Condenser Delta P	15.00	psia
Spec Value (Condenser Temp)	215.0	F
Spec Value (Reboiler Temp)	400.0	F

RCY-1		
Vapour Fraction Sensitivity	10.00	
Temperature Sensitivity	10.00	
Pressure Sensitivity	10.00	
Flow Sensitivity	1.000	
Enthalpy Sensitivity	1.000	
Composition Sensitivity	0.1000	

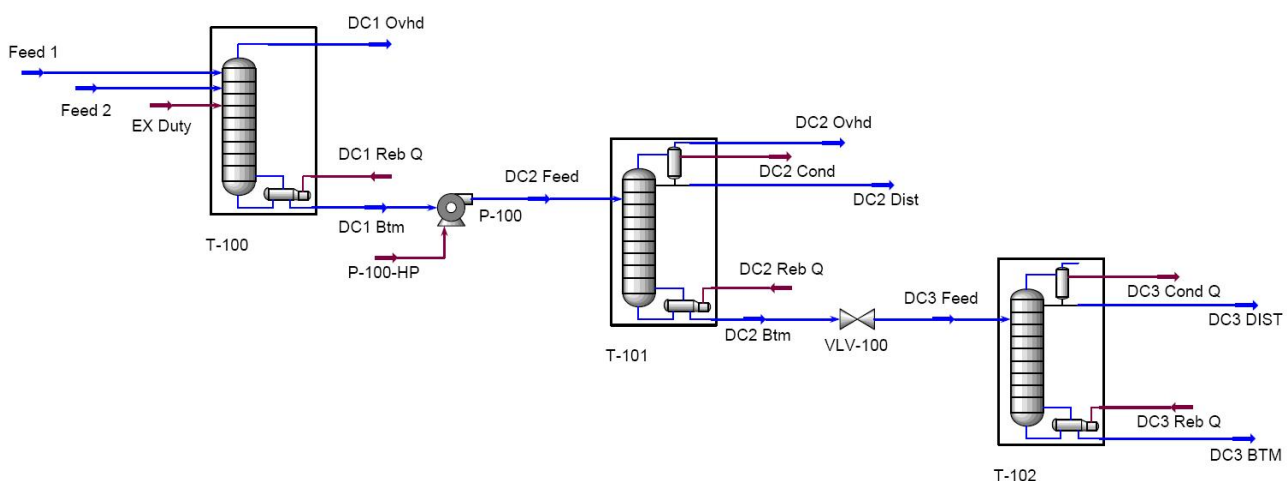
Remove TEG		
Overhead Stream Pressure	895.0	psia
Bottoms Stream Pressure	895.0	psia
Overhead Fraction (TEGlycol)	1.0000	

مطلوبست محاسبه نقطه شبنم جریان گاز Sale Gas ؟

تمرین ۳

هدف شبیه سازی فرآیند تفکیک میعانات گاز طبیعی (LNG) از جریان گاز طبیعی است. در این فرآیند بازیافت به سه منظور انجام می شود:

- تولید جریان گاز قابل انتقال در خطوط لوله (عاری از هیدروکربن های سنگین و قابل کندانس شدن در خط لوله)
- دسترسی به خصوصیات گاز فروشی
- افزایش میزان بازیافت محصولات مایع (از آنجایی که ارزش محصولات مایع به مراتب بیشتر از محصولات گازی است).



PP: Peng Robinson

مشخصات جریان های ورودی و تجهیزات فرآیندی به شرح جداول ذیل است:

Feed 1		
Temperature	-95.00	C
Pressure	2275	kPa
Molar Flow	1620	kgmole/h
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0025	
Comp Mole Frac (CO2)	0.0048	
Comp Mole Frac (Methane)	0.7041	
Comp Mole Frac (Ethane)	0.1921	
Comp Mole Frac (Propane)	0.0706	
Comp Mole Frac (i-Butane)	0.0112	
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0085	
Comp Mole Frac (i-Pentane)	0.0036	
Comp Mole Frac (n-Pentane)	0.0020	
Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0003	
Comp Mole Frac (n-Heptane)	0.0002	
Comp Mole Frac (n-Octane)	0.0001	

Feed 2		
Temperature	-85.00	C
Pressure	2290	kPa
Molar Flow	215.0	kgmole/h
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0057	
Comp Mole Frac (CO2)	0.0029	
Comp Mole Frac (Methane)	0.7227	
Comp Mole Frac (Ethane)	0.1176	
Comp Mole Frac (Propane)	0.0750	
Comp Mole Frac (i-Butane)	0.0204	
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0197	
Comp Mole Frac (i-Pentane)	0.0147	
Comp Mole Frac (n-Pentane)	0.0102	
Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0037	
Comp Mole Frac (n-Heptane)	0.0047	
Comp Mole Frac (n-Octane)	0.0027	

EX Duty		
Heat Flow	2.100e+006	kJ/h

T-100		
Number of Trays	10.00	
Feed1 Stage	1.00	
Feed2 Stage	2.00	
CondenserType	None	
Top Stage Press	2275	kPa
Bottom Stage Press	2310	kPa
Temperature Est (1__Main TS)	-88.00	C
Temperature Est (Reboiler)	27.00	C
C1 mole Fraction in Stage 1	0.9600	

P-100		
Product Pressure	2790	kPa

VLV-100		
Product Pressure	1690	kPa

T-101		
Number of Trays	14.00	
Feed Stage	6.00	
CondenserType	Partial	
Top Stage Press	2725	kPa
Condenser Pressure Drop	35.00	kPa
Bottom Stage Press	2792	kPa
Temperature Est (Condenser)	-4.000	C
Temperature Est (Reboiler)	95.00	C
Distillate Rate	0.0000	kgmole/h
Reflux Ratio	2.500	
C2/C3 in Reboiler	1.000e-002	

T-102		
Number of Trays	24.00	
CondenserType	Total	
Top Stage Press	1585	kPa
Condenser Pressure Drop	35.00	kPa
Bottom Stage Press	1655	kPa
Temperature Est (Condenser)	38.00	C
Temperature Est (Reboiler)	120.0	C
i-C4 + n-C4 in Distillate	1.500e-002	
C3 in Reboiler	2.000e-002	

پس از شبیه سازی ستون T-100 (برج دی متانایزر) مقدار UA را برای ریبولر این برج با فرض اینکه از سمت پوسته بخار اشباع با فشار ۱۰۰ psi، دبی ۱۰۰۰ kmol/h و افت فشار ۵ psi جریان داشته باشد و خلوص مولی متان در بالای برج ۹۶٪ مولی حفظ شود، محاسبه نمایید.