بسم الله الرحمن الرحيم

شبیه‌سازی و طراحی فرایندها با

ASPEN و ProMax

مهندس‌یار

نویسندگان:

Dominic Chwan Yee Foo

و همکاران

ترجمه و تالیف:

دکتر میترا امانی

عضو هیات علمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد رباط کریم

مهندس اشکان اوجی

نشردانشگاهی کیان

Kian Publication

سخن ناشر

بشر قرن ۲۱ بی‌وقفه و به‌سرعت در تکاپوی توسعه‌ی همه‌جانبه‌ی مرزهای دانش در تمامی حوزه‌هاست و در این مسیر از تلاش باز نمی‌ایستد؛ چرا که اثرگذارترین ابزار برتری‌جویی در فضای رقابتی امروز را دست‌یابی به فناوری‌های پیشرفته، علوم نوین و گسترش صنایع پیشرفته، کارآمد و منحصربه‌فرد یافته است. براساس چنین نگرشی است که رشد سریع علوم و فنون کاربردی در گستره‌ی عظیمی از زمینه‌های تحقیقاتی در دستورکار بازی‌گردانان نظام جهانی قرار گرفته است.

در شرایط ویژه و پیچیده‌ای که کشور ما با آن روبه‌روست، گام برداشتن در مسیر پیشرفت و رشد و توسعه‌ی داخلی و نیز کسب جایگاه درخور و تاثیرگذار در عرصه‌ی بین‌المللی منوط به اصلاح دید کلان نسبت به توسعه‌ی علمی و پژوهشی با هدف ارتقای شاخص‌های پیشرفت و توسعه‌ی کشور است و این جز با حمایت ویژه و مستمر از بخش‌های دانشگاهی و پژوهشی امکان‌پذیر نخواهد بود.

انتشارات دانشگاهی کیان، به عنوان یکی از بسترهای مستعد تحقق بومی‌سازی فناوری‌های پیشرفته (High Technology) قصد دارد با استفاده از همت بلند متخصصان صنعتی و دانشگاهی کشور و با استفاده از تجارب خود در زمینه چاپ و نشر بیش از سیصد عنوان کتاب‌های فنی و مهندسی، بخشی هرچند کوچک از این وظیفه‌ی خطیر را به انجام برساند.

مجموعه کتاب‌های مهندس‌یار، با هدف دسترسی دانشجویان، اساتید، پژوهشگران و علاقمندان به دانش فنی و تخصص روز دنیا در حوزه‌ی فنی و مهندسی با نگاه ویژه‌ای تدوین شده است. در این آثار سعی شده است تا تجارب و دستاوردهای علمی و پژوهشی مولفان به‌نام و فرهیخته‌ی کشور، به شیوه‌ای آموزشی و استاندارد و با بالاترین کیفیت فنی و محتوایی، به مخاطبان علاقمند انتقال یابد. این مجموعه، گستره‌ی وسیعی از علوم فنی و مهندسی را دربر می‌گیرد و تلاش بر آن است تا در آینده‌ی نزدیک در سایه‌ی الطاف الهی و با تکیه بر دانش و تخصص بومی، عناوین کاملی از کتاب‌های کاربردی و ارزشمند در این مجموعه پوشش داده شود.

انتشارات دانشگاهی کیان در این مسیر دست یکایک اساتید و پژوهشگران حوزه‌ی فنی و مهندسی را به گرمی می‌فشارد و از **پیشنهادهای ارزنده‌ی تالیف و ترجمه** در این چارچوب استقبال می‌کند و از مخاطبان این مجموعه خواهشمند است نقدها و نظرهای سازنده‌ی خود را از طریق پل‌های ارتباطی موجود در جهت ارتقای محتوایی و کیفی آثار مطرح نمایند.

نشر دانشگاهی کیان
www.kianpub.com
info@kianpub.com

سخن نویسندگان

با توجه به رشد روزافزون صنایع شیمیایی و فرایندهای نفت، گاز و پتروشیمی به‌کارگیری نرم‌افزارهای مهندسی برای شبیه‌سازی و ارزیابی واحدهای شیمیایی الزامی است. امروزه طراحی و شبیه‌سازی فرایندهای شیمیایی با استفاده از نرم‌افزارهای مناسب، یکی از مهم‌ترین بخش‌های هر پروژه‌ی مهندسی است؛ بنابراین توانایی و تسلط بر نرم‌افزارهای تخصصی یکی از مهم‌ترین معیارهای استخدام افراد در شرکت‌های مختلف است. در این کتاب دو نرم‌افزار متداول و محبوب مهندسان شیمی به نام‌های پرومکس[1] و اسپن[2] برای شبیه‌سازی فرایندهای شیمیایی حالت پایا مورد مطالعه قرار گرفته است.

نرم‌افزار اسپن محصول شرکت AspenTech است که در یک مجموعه‌ی جامع و کامل با عنوان AspenOne ارایه می‌شود. در این مجموعه علاوه بر اسپن پلاس نرم‌افزارهای مهندسی دیگری همچون Aspen Hysys، Aspen Basic Engineering، Exchanger Design and Rating، Aspen energy analyzer، Aspen utility planner و... نیز گنجانده شده است. این نرم‌افزار در شبیه‌سازی فرایندهای پالایشگاهی، پتروشیمی، الکترولیتی و مواد جامد از قدرت و دقت فراوانی برخوردار است. بانک اطلاعاتی قوی این نرم‌افزار در زمینه‌ی خواص فیزیکی و شیمیایی جامدات، مایعات و گازها، امکان طراحی و شبیه‌سازی واحدهای فرایندی پلیمری و فرایندهای مواد جامد، بانک اطلاعاتی قوی از بسته‌های ترمودینامیکی و امکان طراحی و شبیه‌سازی تمام تجهیزات فرایندی موجود در فرایندهای مرتبط با صنایع نفت و گاز از مهم‌ترین نقاط قوت این نرم‌افزار در مقایسه با سایر نرم‌افزارهای شبیه‌سازی فرایند است. همچنین به کمک این نرم‌افزار علاوه بر شبیه‌سازی واحدهای شیمیایی، می‌توان هر یک از تجهیزات فرایندی را به‌صورت جداگانه شبیه‌سازی و بررسی نمود. مجموعه‌ی این قابلیت‌ها نرم‌افزار اسپن را به یکی از جامع‌ترین و ضروری‌ترین نرم‌افزارهای مهندسی شیمی تبدیل کرده است.

نرم‌افزار پرومکس نیز یکی از محبوب‌ترین نرم‌افزارهای مورد استفاده برای طراحی و بهینه‌سازی انواع فرایندهای گاز، شیمیایی و پالایش است. با استفاده از این نرم‌افزار به‌خوبی می‌توان فرایندهایی همچون شیرین‌سازی گاز، هیدروژن‌زدایی گلیکول، پالایش نفت خام، بازیابی LPG و... را شبیه‌سازی و بهینه‌سازی نمود. از مهم‌ترین قابلیت‌های

---

1. ProMax
2. AspenONE Engineering

این نرم‌افزار می‌توان به بانک اطلاعاتی غنی، دسترسی به تمام خواص نفت خام، پشتیبانی و ارتباط قوی با فایل‌های مایکروسافت آفیس و مخصوصا اکسل و... اشاره کرد. امکانات ویژه‌ی این نرم‌افزار در زمینه‌ی شبیه‌سازی فرایندهای شیرین‌سازی گاز، آن را متمایز و منحصربه‌فرد کرده است.

برای یک متخصص نرم‌افزار مهندسی شیمی تسلط به هر دو نرم‌افزار کاربردی و لازم است و گاهی برای اجرای پروژه‌ای، شبیه‌سازی با هر دو نرم‌افزار انجام می‌شود. با وجود شباهت کلی رابط کاربری این دو شبیه‌ساز با یکدیگر، نرم‌افزار پرومکس برای مبتدیان ساده‌تر و ارزان‌تر است. همچنین پرومکس بهترین نرم‌افزار شبیه‌سازی واحدهای آمین و شیرین‌سازی سیستم‌های گازی است. از طرف دیگر نرم‌افزار اسپن مجموعه‌ی وسیعی از انواع ابزارها و شبیه‌سازها و امکانات برای مهندسان شیمی است و می‌توان آن را کامل‌ترین و قدرتمندترین نرم‌افزار شبیه‌سازی مهندسی شیمی دانست. البته براساس ادعای برخی از مهندسان، دقت و قدرت پرومکس در حوزه‌ی تخصصی خود حتی از اسپن نیز بیشتر است.

این کتاب می‌تواند به‌عنوان یک خودآموز شبیه‌سازی برای دانشجویان، استادان و علاقه‌مندان به یادگیری نرم‌افزارهای شبیه‌سازی فرایند بسیار مفید باشد. شایان ذکر است علی‌رغم ارتباط فصل‌های این کتاب با یکدیگر، هر یک از فصل‌ها مستقل از دیگر فصل‌ها نوشته شده و به خواننده این امکان را می‌دهد که فصل مورد نظر خود را بدون نیاز به مطالعه‌ی فصل‌های پیشین مطالعه نماید.

این کتاب در قالب چهار بخش ارایه شده است. در فصل اول از بخش اول مفهوم و اصول حاکم بر شبیه‌سازی فرایند و تاریخچه‌ی آن بررسی شده است. در فصل‌های دوم تا چهارم این بخش نیز مفاهیم پایه‌ای و مهم موجود در تمام نرم‌افزارهای تجاری شبیه‌سازی مانند تخمین خواص فیزیکی (مدل‌های ترمودینامیکی)، اضافه کردن ترکیب جدید و شبیه‌سازی جریان‌های برگشتی معرفی شده‌اند؛ بنابراین بهتر است تمام خوانندگان و خصوصا مبتدیان شبیه‌سازی، پیش از مطالعه‌ی هر فصلی، ابتدا فصل‌های مذکور را مطالعه کنند.

در بخش‌های دوم و سوم این کتاب دو نرم‌افزار تجاری پرومکس و اسپن به‌صورت کامل معرفی شده‌اند. در هر یک از این دو بخش ابتدا یک فصل مجزا برای معرفی و آموزش مرحله‌به‌مرحله‌ی هر نرم‌افزار اختصاص داده شده است تا خوانندگان پیش از مطالعه‌ی مباحث پیشرفته‌تر در خصوص آن نرم‌افزار، به‌صورت کامل با مقدمات آن آشنا شوند. سپس با شبیه‌سازی کامل فرایندهای واقعی در فصل‌های بعدی، جزییات بیشتری از شبیه‌سازی با هر نرم‌افزار بازگو شده است. به‌جز اطلاعات اساسی شبیه‌سازی و دانش استفاده از ابزار شبیه‌سازی در طراحی فرایندهای مختلف (شیرین‌سازی گاز، فرایند تولید آکریلیک اسید و...)،

چندین مبحث پیشرفته در خصوص طراحی و شبیه‌سازی فلوشیت فرایند با نرم‌افزار اسپن نیز در بخش چهارم این کتاب گنجانده شده است. این مباحث پیشرفته شامل سیستم تقطیر واکنشی، سیستم تقطیر آزئوتروپی، شبکه‌ی مبدل‌های حرارتی و طراحی تاسیسات سرمایشی و گرمایشی فرایند است.

سطح مباحث تمام فصل‌های کتاب در جدول ۱ نشان داده شده است که این مساله می‌تواند به خوانندگان در انتخاب فصل مورد نظر برای مطالعه کمک کند. امید است این کتاب راهنمای موثر و ارزشمندی برای یادگیری شبیه‌سازی فرایند برای همه‌ی علاقه‌مندان به این علم باشد.

جدول ۱. سطح هر یک از فصل‌های کتاب

شماره و عنوان هر فصل		سطح
بخش اول: مفاهیم پایه در شبیه‌سازی فرایند		
۱	معرفی شبیه‌سازی فرایند	ابتدایی
۲	تعریف ترکیبات جدید در نرم‌افزار شبیه‌سازی	ابتدایی
۳	تخمین خواص فیزیکی برای شبیه‌سازی فرایند	ابتدایی
۴	شبیه‌سازی جریان‌های برگشتی	ابتدایی
بخش دوم: شبیه‌سازی فرایندهای شیمیایی با نرم‌افزار اسپن هایسیس		
۵	مقدمات شبیه‌سازی فرایند با نرم‌افزار اسپن هایسیس	ابتدایی
۶	شبیه‌سازی فرایند تولید مونومر وینیل کلراید (VCM)	پیشرفته
۷	شبیه‌سازی و طراحی فرایند تولید آکریلیک اسید	پیشرفته
بخش سوم: شبیه‌سازی با نرم‌افزار پرومکس		
۸	اصول شبیه‌سازی فرایند با نرم‌افزار پرومکس (ProMax)	ابتدایی
۹	مدل‌سازی فرایند شیرین‌سازی گاز ترش با متیل دی اتانول آمین (MDEA)	پیشرفته
بخش چهارم: طراحی و شبیه‌سازی فرایندهای پیچیده‌ی شیمیایی با نرم‌افزار اسپن		
۱۰	طراحی و شبیه‌سازی فرایندهای تقطیر واکنشی	پیشرفته
۱۱	طراحی سیستم‌های تقطیر آزئوتروپی	پیشرفته
۱۲	شبیه‌سازی و آنالیز شبکه‌ی مبدل‌های حرارتی با Aspen energy analyzer	پیشرفته
۱۳	شبیه‌سازی و آنالیز نیروگاه‌های بخار با استفاده از Aspen Utility Planner	پیشرفته

Dominic C.Y. Foo

فهرست مطالب

بخش اول: مفاهیم پایه در شبیه‌سازی فرایند

فصل اول: معرفی شبیه‌سازی فرایند

۱-۱. طراحی و شبیه‌سازی فرایند ۲۰
۱-۲. تاریخچه‌ی شبیه‌سازی فرایند ۲۲
۱-۳. ساختار اولیه‌ی یک نرم‌افزار شبیه‌سازی تجاری ۲۵
۱-۴. الگوریتم‌های اولیه برای شبیه‌سازی فرایند ۲۶
۱-۴-۱. روش حل پی‌درپی ۲۶
۱-۴-۲. روش حل همزمان ۲۹
۱-۵. تلفیق مدل ساخت فلوشیت و روش حل پی‌درپی ۲۹
۱-۶. ده نکته‌ی سودمند برای شبیه‌سازی فرایند ۳۴

فصل دوم: تعریف ترکیبات جدید در نرم‌افزار شبیه‌سازی

۲-۱. تعریف ترکیبات فرضی در نرم‌افزار اسپن هایسیس ۴۴
۲-۲. تعریف نفت خام در اسپن هایسیس ۴۵
۲-۳. تعریف ترکیبات فرضی و برش نفتی در نرم‌افزار پرومکس ۶۲
تمرین ۷۲

فصل سوم: تخمین خواص فیزیکی برای شبیه‌سازی فرایند

۳-۱. فرایندهای مهندسی شیمی ۷۴
۳-۱-۱. جداکننده ۷۵
۳-۱-۲. مبدل حرارتی ۷۵
۳-۱-۳. کمپرسور ۷۵
۳-۲. فرایندهای ترمودینامیکی ۷۵
۳-۲-۱. توابع خاص ترمودینامیکی (اسمیت و همکاران) ۷۷
۳-۲-۲. روابط ماکسول ۷۸
۳-۳. معادلات حالت ۷۹
۳-۳-۱. قانون گاز ایده‌آل (از سال ۱۸۳۴) ۷۹
۳-۳-۲. اصلاحات قانون گاز ایده‌آل (معادلات حالت مکعبی) ۸۰
۳-۴. حجم‌های مایع ۸۳
۳-۵. ویسکوزیته و سایر خواص ۸۵
۳-۶. تعادل فازی ۸۶
۳-۶-۱. تصحیح فاز بخار ۸۷
۳-۶-۲. تصحیح‌های فاز مایع ۸۹
۳-۶-۳. درنظر گرفتن همزمان تصحیح‌های هردو فاز گاز و مایع ۹۱
۳-۷. محاسبات فلش (اسمیت و همکاران) ۹۳
۳-۷-۱. معادلات MESH ۹۳
۳-۷-۲. روش محاسبه‌ی فلش نقطه‌ی حباب ۹۴
۳-۷-۳. روش محاسبه‌ی فلش نقطه‌ی شبنم ۹۵

فهرست مطالب

۳-۷-۴. محاسبات فلش فشار – دما در سیستم دوفازی ۹۵
۳-۷-۵. سایر روش‌های فلش ۹۶
۳-۸. نمودارهای فازی ۹۶
۳-۸-۱. نمودارهای فشار – دما برای ترکیبات خالص و مخلوط‌ها ۹۷
۳-۸-۲. رفتار برگشتی ۱۰۱
۳-۹. نتیجه‌گیری ۱۰۲
تمرین ۱۰۳

فصل چهارم: شبیه‌سازی جریان‌های برگشتی
۴-۱. انواع جریان‌های برگشتی ۱۰۵
۴-۲. نکات لازم برای حل جریان‌های برگشتی ۱۰۶
۴-۲-۱. آنالیز فلوشیت ۱۰۷
۴-۲-۲. ارایه‌ی تخمین‌هایی برای جریان‌های برگشتی ۱۰۸
۴-۲-۳. ساده‌سازی فلوشیت ۱۰۹
۴-۲-۴. اجتناب از مشخص کردن بیش از حد پارامترهای موجود در موازنه‌ی جرم ۱۱۰
۴-۲-۵. بررسی مواد گیرافتاده ۱۱۱
۴-۲-۶. افزایش دفعات حدس و خطا ۱۱۱
۴-۳. همگرایی جریان برگشتی و تکنیک‌های تسریع آن ۱۱۲
تمرین ۱۱۷

بخش دوم: شبیه‌سازی فرایندهای شیمیایی با نرم‌افزار اسپن هایسیس

فصل پنجم: مقدمات شبیه‌سازی فرایند با نرم‌افزار اسپن هایسیس
۵-۱. مقدمه ۱۲۱
۵-۲. بخش اول: آموزش اصول پایه‌ی شبیه‌سازی با نرم‌افزار اسپن هایسیس ۱۲۲
۵-۲-۱. شروع کار با نرم‌افزار ۱۲۲
۵-۲-۲. تعیین ترکیبات موجود در شبیه‌سازی ۱۲۴
۵-۲-۳. تعیین بسته‌ی ترمودینامیکی ۱۲۶
۵-۲-۴. تعریف واکنش شیمیایی در شبیه‌سازی ۱۳۰
۵-۲-۵. شبیه‌سازی جریان‌ها و واحدهای عملیاتی ۱۳۳
۵-۳. بخش دوم: شبیه‌سازی فرایند تولید نرمال اکتان ۱۴۴

فصل ششم: شبیه‌سازی فرایند تولید مونومر وینیل کلراید (VCM)
۶-۱. مقدمه ۱۶۸
۶-۲. شبیه‌سازی فرایند ۱۶۹
۶-۲-۱. ترکیب دو فرایند کلریناسیون مستقیم و کلریناسیون غیرمستقیم اتیلن (Balanced process) ۱۶۹
۶-۳. نتیجه‌گیری ۱۹۲
تمرین ۱۹۲

فصل هفتم: شبیه‌سازی و طراحی فرایند تولید آکریلیک اسید
۷-۱. مقدمه ۱۹۵

فهرست مطالب

۷-۲. بررسی فرایند تولید آکریلیک اسید ۱۹۶
۷-۲-۱. سینتیک واکنش ۱۹۷
۷-۲-۲. تعادل فازی ۱۹۸
۷-۲-۳. فلوشیت فرایند بالادستی ۱۹۸
۷-۲-۴. فلوشیت جداسازی پایین‌دستی ۲۰۲
۷-۲-۵. فرایند جداسازی پیوسته ۲۰۸
۷-۳. تاثیر متغیرهای مهم طراحی و نمونه‌هایی از بهینه‌سازی فرایند ۲۱۰
۷-۳-۱. دما و اندازه‌ی راکتور ۲۱۰
۷-۳-۲. میزان تزریق آب به داخل برج جذب ۲۱۳
۷-۳-۳. متغیرهای طراحی در قسمت جداسازی بعدی ۲۱۳
۷-۳-۴. مقایسه‌ی دو فرایند هیبریدی استخراج – تقطیر و جداسازی پیوسته ۲۱۹
۷-۴. پیشنهادهای بیشتر در شبیه‌سازی با اسپن پلاس ۲۲۱
۷-۴-۱. قسمت واکنش ۲۲۱
۷-۴-۲. بخش جداسازی بعدی ۲۲۳
۷-۵. نتیجه‌گیری ۲۲۴
تمرین ۲۲۵

بخش سوم: شبیه‌سازی با نرم‌افزار پرومکس

فصل هشتم: اصول شبیه‌سازی فرایند با نرم‌افزار پرومکس (ProMax)

۸-۱. مقدمه ۲۳۵
۸-۲. تنظیم محیط شبیه‌سازی ۲۳۶
۸-۳. تعریف و اضافه کردن واکنش به محیط شبیه‌سازی ۲۳۸
۸-۳-۱. تعریف Reaction Set ۲۳۸
۸-۳-۲. اضافه کردن Reaction set به محیط شبیه‌سازی ۲۴۲
۸-۴. ساخت فلوشیت و تعیین بلوک‌ها و جریان‌ها ۲۴۳
۸-۴-۱. اضافه کردن و اتصال راکتور، برج تقطیر و بلوک‌های تقسیم‌کننده در فلوشیت ۲۴۵
۸-۴-۲. تعیین مشخصات و شبیه‌سازی جریان ورودی راکتور، راکتور، برج تقطیر... ..... ۲۴۷
۸-۴-۳. حلقه‌ی جریان برگشتی و پیش‌گرمایش جریان ورودی راکتور: افزودن... ..... ۲۶۰
۸-۴-۴. تعیین مشخصات و شبیه‌سازی بلوک‌های کمپرسور، مبدل حرارتی جریان متقاطع... ..... ۲۶۳
۸-۵. تعیین حدسی برای بلوک جریان برگشتی و بستن حلقه‌ی برگشتی ۲۶۸
۸-۵-۱. بلوک برگشتی و بلوک میکسر ۲۶۸
۸-۵-۲. بستن حلقه‌ی برگشتی ۲۶۹
۸-۶. مشاهده‌ی نتایج ۲۷۱
۸-۷. نتیجه‌گیری ۲۷۱
تمرین ۲۷۲

فصل نهم: مدل‌سازی فرایند شیرین‌سازی گاز ترش با متیل‌دی‌اتانول‌آمین (MDEA)

۹-۱. مقدمه ۲۷۳
۹-۱-۱. مثال شیرین‌سازی گاز با MDEA ۲۷۵

فهرست مطالب

۹-۲. شبیه‌سازی فرایند ۲۷۶
۹-۳. تنظیم محیط شبیه‌سازی ۲۷۶
۹-۴. افزودن بلوک‌ها به فلوشیت ۲۷۷
۹-۴-۱. افزایش تعداد سینی‌های برج‌های جذب و دفع ۲۷۷
۹-۴-۲. نمایش سینی‌ها در بلوک برج دفع ۲۷۸
۹-۵. افزودن و اتصال جریان‌های فرایندی و جریان‌های انرژی ۲۷۹
۹-۶. تعیین مشخصات بلوک‌ها و جریان‌ها ۲۸۰
۹-۶-۱. تعیین مشخصات جریان فرایندی گاز ترش برمبنای خشک و بلوک اشباع‌کننده ۲۸۰
۹-۶-۲. برج جذب آمین ۲۸۳
۹-۶-۳. فلش محلول آمین غنی و مبدل محلول آمین غنی- آمین رقیق ۲۸۵
۹-۶-۴. برج دفع آمین ۲۸۶
۹-۶-۵. بلوک جریان برگشتی ۲۸۸
۹-۶-۶. بلوک Makeup/Blowdown ۲۸۹
۹-۶-۷. پمپ جریان برگشتی و کولر کمکی (Trim cooler) ۲۹۰
۹-۷. مشاهده‌ی نتایج ۲۹۱
تمرین ۲۹۴

بخش چهارم: طراحی و شبیه‌سازی فرایندهای پیچیده‌ی شیمیایی با نرم‌افزار اسپن

فصل دهم: طراحی و شبیه‌سازی فرایندهای تقطیر واکنشی

۱۰-۱. مقدمه ۲۹۷
۱۰-۲. فرایند تقطیر واکنشی متیل استات (MeAc) ۲۹۹
۱۰-۲-۱. مدل ترمودینامیکی ۲۹۹
۱۰-۲-۲. مدل سینتیکی ۳۰۱
۱۰-۲-۳. ساختار فرایند ۳۰۲
۱۰-۳. فرایند تقطیر واکنشی بوتیل استات (BuAc) ۳۱۰
۱۰-۳-۱. مدل ترمودینامیکی ۳۱۰
۱۰-۳-۲. مدل سینتیکی واکنش ۳۱۲
۱۰-۳-۳. ساختار فرایند ۳۱۳
۱۰-۴. تقطیر واکنشی ایزوپروپیل استات (IPAc) با ساختار کوپل حرارتی ۳۲۰
۱۰-۴-۱. مدل ترمودینامیکی ۳۲۰
۱۰-۴-۲. مدل سینتیکی ۳۲۱
۱۰-۴-۳. ساختار فرایند ۳۲۲
۱۰-۵. نتیجه‌گیری ۳۳۱
تمرین ۳۳۲

فصل یازدهم: طراحی سیستم‌های تقطیر آزئوتروپی

۱۱-۱. مقدمه ۳۴۵
۱۱-۲. جداسازی ترکیبات آزئوتروپی بدون استفاده از حلال کمکی ۳۴۶
۱۱-۲-۱. تقطیر با فشار نوسانی ۳۴۷

فهرست مطالب

۱۱-۲-۲. جداسازی آزئوتروپ دوتایی ناهمگن (هتروژن) ۳۴۹
۱۱-۲-۳. سایر روش‌های جداسازی ۳۵۰
۱۱-۳. روش جداسازی آزئوتروپی با استفاده از حلال کمکی ۳۵۰
۱۱-۳-۱. تقطیر آزئوتروپی ناهمگن (هتروژن) ۳۵۱
۱۱-۳-۲. تقطیر استخراجی ۳۵۳
۱۱-۳-۳. سایر روش‌های جداسازی با افزایش یک ماده‌ی دیگر ۳۵۵
۱۱-۴. شبیه‌سازی دو نمونه‌ی صنعتی با نرم‌افزار اسپن پلاس ۳۵۶
۱۱-۴-۱. جداسازی متانول و ایزوپنتان ۳۵۶
۱۱-۴-۲. فرایند دی‌هیدراسیون اتانول ۳۶۱
۱۱-۵. صرفه‌جویی بیشتر انرژی فرایند از طریق انتگراسیون حرارتی ۳۶۸
۱۱-۵-۱. مبدل حرارتی خوراک- پساب ۳۶۸
۱۱-۵-۲. برج‌های تقطیر چندکاره ۳۶۹
۱۱-۵-۳. سیستم تقطیر استخراجی با کوپل حرارتی (دیوار میانی) ۳۷۰
۱۱-۵-۴. سیستم تقطیر آزئوتروپی هتروژن با کوپل حرارتی (دیوار میانی) ۳۷۲
۱۱-۶. نتیجه‌گیری ۳۷۴
تمرین ۳۷۵

فصل دوازدهم: شبیه‌سازی و آنالیز شبکه مبدل‌های حرارتی با Aspen energy analyzer
۱۲-۱. مقدمه ۳۸۱
۱۲-۲. طراحی شبکه‌ی مبدل‌های حرارتی ۳۸۴
۱۲-۲-۱. اصول اولیه ۳۸۴
۱۲-۲-۲. مساله‌ی ساده‌ی بازیابی حرارتی بین یک جریان گرم و یک جریان سرد ۳۸۵
۱۲-۲-۳. مساله‌ی ساده‌ی بازیابی حرارتی بین دو جریان گرم و دو جریان سرد ۳۸۸
۱۲-۳. آنالیز و طراحی سیستم‌های بازیابی حرارتی با Aspen energy analyzer ۳۹۳
تمرین ۴۰۰

فصل سیزدهم: شبیه‌سازی و آنالیز نیروگاه‌های بخار با استفاده از Aspen Utility Planner
۱۳-۱. مقدمه ۴۰۳
۱۳-۲. معرفی نرم‌افزار ASPEN UTILITY PLANNER (AUP) ۴۰۶
۱۳-۳. مثال: شبیه‌سازی نیروگاه بخار ساده ۴۰۹
۱۳-۳-۱. وارد کردن خواص ترکیبات ۴۱۰
۱۳-۳-۲. شبیه‌سازی بخش بویلر ۴۱۲
۱۳-۳-۳. شبیه‌سازی بخش هدر فشار بالا، توربین میعانی تک‌مرحله‌ای و کندانسور تک‌مرحله‌ای ۴۱۶
۱۳-۳-۴. شبیه‌سازی بخش هدر فشار پایین، فشارشکن بخار و دی‌سوپرهیتر بخار ۴۲۱
۱۳-۳-۵. بخش فرایندی آب ورودی بویلر (BFW) به همراه جریان جبرانی آن ۴۲۴
۱۳-۳-۶. توربین تک‌مرحله‌ای با فشار پشت و سیستم الکتریکی متصل به شبکه‌ی برق... ..... ۴۳۰
۱۳-۳-۷. بهینه‌سازی عملیاتی سیستم تاسیسات بخار ۴۳۳
تمرین ۴۳۷

بخش اول

مفاهیم پایه در شبیه‌سازی فرایند

فصل ۱

معرفی شبیه‌سازی فرایند

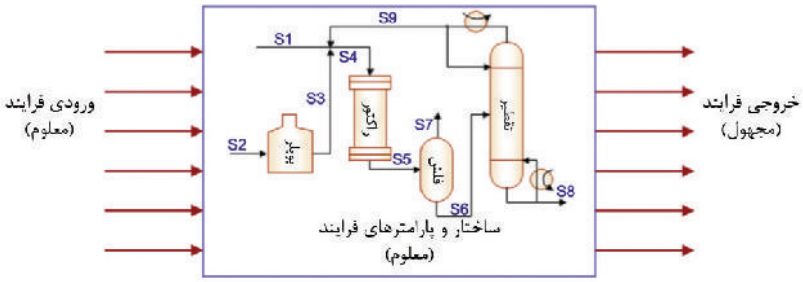
شبیه‌سازی فرایند، تشریح یک فرایند شیمیایی توسط یک مدل ریاضی است که با حل این مدل می‌توان اطلاعاتی در خصوص آن فرایند به دست آورد (Motard et al., 1975). این عمل فلوشیت‌بندی فرایند[1] نیز نامیده می‌شود. فلوشیت‌بندی را می‌توان با استفاده از نرم‌افزارهای کامپیوتری جهت برقراری موازنه‌ی جرم و حرارت در حالت پایدار، تخمین اندازه‌ی تجهیزات و انجام محاسبات اقتصادی یک فرایند شیمیایی نیز تعریف نمود (Westerberg et al., 1979). در این فصل اطلاعات اولیه‌ای در خصوص شبیه‌سازی ارایه خواهد شد. این اطلاعات شامل پیشرفت‌های حاصل در زمینه‌ی شبیه‌سازی، طراحی‌های اولیه و الگوریتم‌های حل مدل است. علاوه بر این، به‌منظور راهنمایی خوانندگان در استفاده از نرم‌افزارهای شبیه‌سازی فرایند، در انتهای این فصل ده راه‌کار مفید نیز برای شبیه‌سازی فرایند ارایه شده است.

1. Process Flowsheeting

۱-۱. طراحی و شبیه‌سازی فرایند

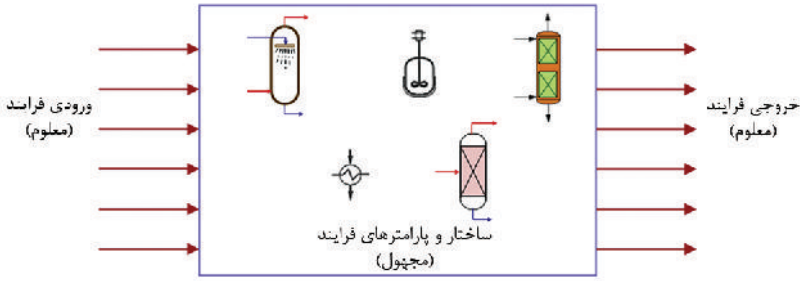
بسیاری شبیه‌سازی فرایند و طراحی آن را معادل یکدیگر می‌دانند، درحالی‌که این یک تصور اشتباه است. در واقع، شبیه‌سازی فرایند و ساخت فرایند[1] (انتخاب ساختار فلوشیت) دو عنصر مهم و مرتبط به هم در طراحی فرایند شیمیایی است که می‌توان از آنها برای دستیابی به بهترین طراحی فرایند استفاده کرد. هدف از شبیه‌سازی فرایند، پیش‌بینی رفتار واقعی فرایند تعریف‌شده در شرایط عملیاتی معلوم است. به عبارت دیگر، هدف از شبیه‌سازی پیش‌بینی خروجی‌های یک فرایند در شرایطی است که فلوشیت فرایند و ورودی‌های آن مشخص باشد (تصویر ۱-۱). در دنیای مدرن امروز، برای انجام این کار از نرم‌افزارهای تجاری شبیه‌سازی فرایند استفاده می‌شود.

از سوی دیگر در ساخت فرایند، برای فرایندی با جریان‌های ورودی و خروجی معلوم، فلوشیتی با ساختار و پارامترهای مجهول ایجاد می‌شود (تصویر ۱-۲). ساخت فرایند یکی از زمینه‌های مهم تحقیقاتی در پنجاه سال اخیر بوده است که در برخی زمینه‌های خاص مانند سیستم بازیابی حرارت، سیستم بازیافت مواد و شبکه‌ی واکنش دستاوردهای قابل‌توجهی داشته است (El-Halwagi & Foo, 2014). شبیه‌سازی فرایند و ساخت فرایند به‌خوبی یکدیگر را تکمیل می‌کنند. در بیشتر موارد، به‌منظور بهینه‌سازی فلوشیت فرایند پس از ساخت آن، می‌توان مشخصات جزیی فلوشیت (مانند دما، فشار و دبی جریان‌ها) را با استفاده از ابزارهای مختلف شبیه‌سازی پیش‌بینی نمود.



تصویر ۱-۱. مساله‌ی آنالیز فرایند (El-Halwagi, 2006; Foo, 2012)

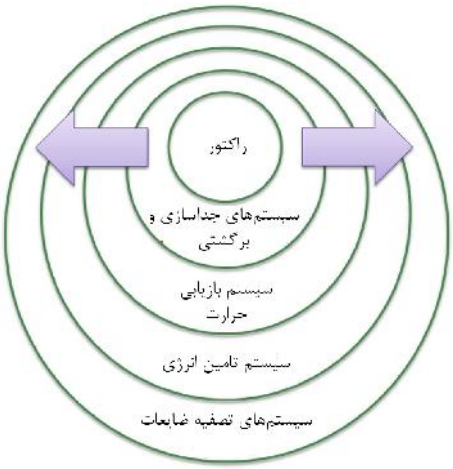
1. Process synthesis



تصویر ۱-۲. مساله‌ی ساخت فرایند (El-Halwagi, 2006; Foo, 2012)

یکی از مهم‌ترین مدل‌های راهنمای ساخت فلوشیت یک فرایند، مدل لایه‌ای (مدل پیاز[1]) است که اولین بار در سال ۱۹۸۲ توسط لین‌هوف[2] ارایه شد (Linnhoff et al., 1982). همان‌طورکه در تصویر ۱-۳ مشاهده می‌شود، طراحی فرایند از مرکز فرایند شروع می‌شود و به سمت لایه‌های بیرونی ادامه می‌یابد. در مرکز این مدل، ابتدا سیستم راکتور طراحی می‌شود. طراحی راکتور، ساختار قسمت‌های جداسازی و جریان برگشتی در لایه‌ی دوم مدل را تحت تاثیر قرار می‌دهد. در مرحله‌ی بعد ساختار راکتور و جداکننده و ملزومات حرارتی فرایند (گرمایش و سرمایش) مشخص می‌شود؛ بنابراین در مرحله‌ی سوم سیستم بازیابی حرارتی فرایند طراحی می‌شود. سپس در مرحله‌ی چهارم، برای تامین گرمایش و سرمایش اضافی مورد نیاز فرایند که از طریق سیستم بازیابی حرارتی تامین نمی‌شوند، تاسیسات جانبی فرایند طراحی می‌شود. در مرحله‌ی آخر به‌منظور تصفیه‌ی پساب و مواد مختلف دورریز حاصل از فرایند، پیش از تخلیه‌ی آنها به محیط زیست، سیستم تصفیه‌ی ضایعات طراحی می‌شود.

1. Onion model
2. Linnhoff



تصویر ۱-۳. مدل لایه‌ای

در بخش‌های بعدی این فصل، از مدل لایه‌ای برای راهنمایی مراحل شبیه‌سازی فلوشیت کامل فرایندهای شیمیایی استفاده خواهد شد.

۱-۲. تاریخچه‌ی شبیه‌سازی فرایند

اولین نرم‌افزار تجاری شبیه‌سازی فرایند در سال ۱۹۶۰ به بازار عرضه شد. اولین نرم‌افزار عمومی شبیه‌سازی فرایند نیز که به نام "PROCESS" شناخته می‌شود، در سال ۱۹۶۶ توسط شرکت Simulation Science واقع در لس‌آنجلس آمریکا جهت شبیه‌سازی برج‌های تقطیر مورد استفاده قرار گرفت (Dimian et al., 2014). در سال‌های اخیر، تکامل‌یافته‌ی این نرم‌افزار با نام "PRO/II" توسط شرکت Schneider Electric به بازار عرضه شد (Schneider Electric, 2017). نرم‌افزار تجاری دیگر در زمینه‌ی نفت و گاز، که به نام "DESIGN" شناخته می‌شود، در سال ۱۹۶۹ توسط شرکت ChemShare واقع در هوستن آمریکا به بازار عرضه گردید (Dimian et al., 2014). این نرم‌افزار از سال ۱۹۹۵ با نام "DESIGN II" توسط شرکت WinSim برای محیط ویندوز عرضه شده است (WinSim, 2017).

با ورود به دهه‌ی ۱۹۷۰ که به‌عنوان عصر طلایی محاسبات علمی شناخته می‌شود، بروز چندین نقطه‌ی عطف مهم تاریخی، تحولات پویای ابزارهای شبیه‌سازی فرایند را نشان می‌دهند. در ابتدا، زبان برنامه‌نویسی فرترن[1] به زبان علمی استاندارد در میان دانشمندان و مهندسان تبدیل شد (Evanset al., 1977). دو کتاب مهم نیز برای تشریح برخی از پیشرفت‌های مهم حاصل در خصوص

1. Fortran