

به نام خدا



دانشگاه صنعتی شریف

دانشکده مهندسی شیمی و نفت

تمرین اول درس بررسی مقدماتی طرح - دکتر سعید عینی

عنوان تمرین:

طراحی و شبیه سازی فرایند تولید استایرن

نویسنده گزارش:

پوریا مطهری (۹۹۱۷۱۰۹۹)

پاییز ۱۴۰۲

فهرست

4	مقدمات و نکات شبیه‌سازی
5	خواسته‌های تمرین
5	خواسته ۱
6	خواسته ۲
6	خواسته ۳
8	خواسته ۴
8	خواسته امتیازی ۱
9	خواسته ۵
9	خواسته ۶
10	خواسته ۷
10	خواسته ۸
11	خواسته ۹
12	خواسته ۱۰
12	خواسته ۱۱
13	خواسته امتیازی ۲
14	خواسته ۱۳
15	منابع

فهرست اشکال

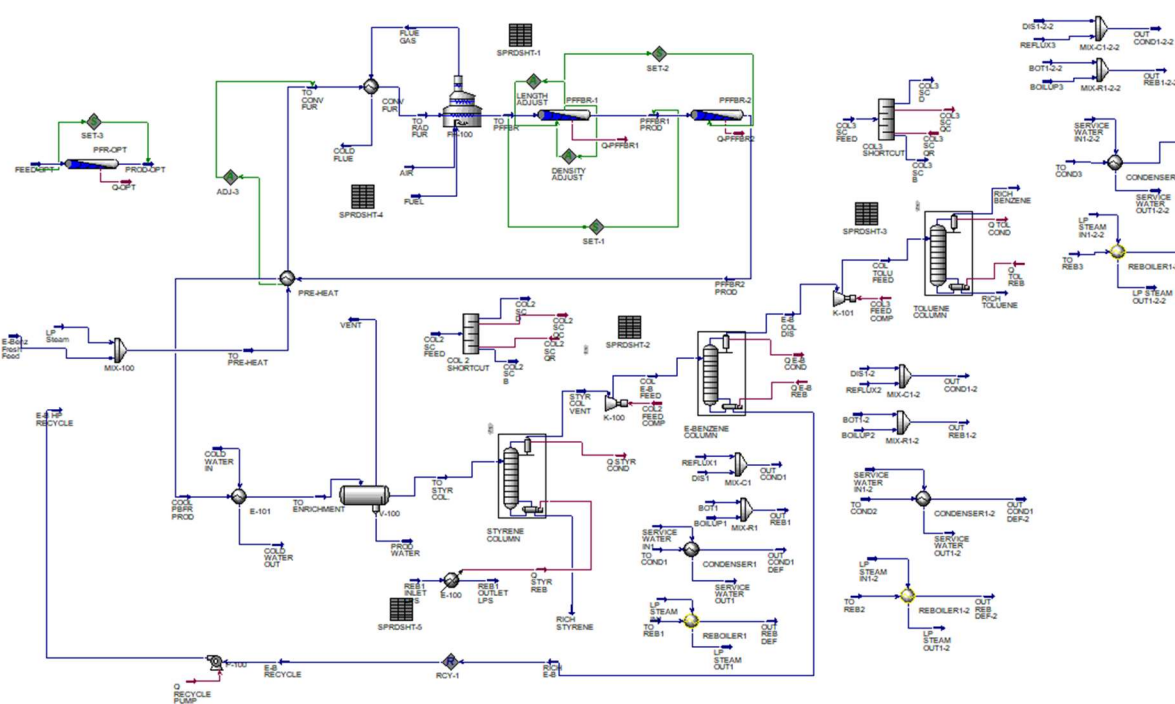
- 4 شکل (۱) - نمودار نهایی فرایند تولید استایرن (در سطح این تمرین)
- 7 شکل (۲) - شکل خواسته ۳
- 8 شکل (۳) - نمودار بهینه سازی دما برای خواسته امتیازی
- 9 شکل (۴) - جریان های مبدل حرارتی خواسته ۶
- 13 شکل (۵) - ویژگی های جریان های برج ۳
- 13 شکل (۶) - خواسته امتیازی ۲: تاثیر فشار بر بار حرارتی کندانسور و ریپویلر

فهرست جداول

- 10 جدول (۱) - خواسته ۷: تغییرات مقدار بخار کم فشار مصرفی با تغییرات سینی خوراک برج اول
- 11 جدول (۲) - خواسته ۸: تاثیرات افزایش دمای بالای برج تقطیر اول
- 11 جدول (۳) - خواسته ۹: اجزای مولی برج واقعی و میانبر دوم
- 12 جدول (۴) - خواسته ۱۰: اتیل بنزن خالص شده در جریان پایین برج دوم در دو حالت تعداد سینی ها
- 14 جدول (۵) - خواسته ۱۲: دبی سیالات سرویس برای برج های تقطیر استایرن، اتیل بنزن و تولوئن
- 14 جدول (۶) - خواسته ۱۳: مقدار محصولات نهایی استایرن در حالت جریان برگشتی و بدون جریان برگشتی

مقدمات و نکات شبیه‌سازی

در ابتدای شروع کار قبل از جواب یه خواسته‌های تمرین، باید مواد، واکنش‌ها و مدل ترمودینامیکی تعریف شود. مواد ذکر شده در صورت تمرین به همراه اکسیژن و نیتروژن اضافه شده و مشخصه‌های واکنش‌های ۲ تا ۶ به نرم‌افزار اضافه شده است. برای بدست آوردن داده‌های واکنش تعادلی اول، از برنامه GetData Graph Digitizer استفاده شده است و خود داده‌های تعادلی همراه تمرین در یک فایل اکسل پیوست شده است. در نهایت از مدل ترمودینامیکی Peng-Robinson برای محاسبات ترمودینامیکی این تمرین استفاده شده است. شکل زیر نموداری از شبیه‌سازی نهایی تمرین است.



شکل (۱) - نمودار نهایی فرایند تولید استایرن (در سطح این تمرین)

در فایل فرستاده شده این تمرین، فایل Word و PDF گزارش، فایل Excel داده‌های تعادلی واکنش اول و دو فایل اصلی شبیه‌سازی هر دو در همه فرمت‌های HSC، XML، HSP و HCF یکی در حالت جریان برگشتی و دیگری در حالت بدون جریان برگشتی پیوست شده است. خواهشاً برای جزئیات دقیق محاسبات دستی در صورت عدم وجود آنها در این گزارش، به جدول‌ها و کامنت‌های خود فایل شبیه سازی مراجعه کنید.

با تشکر فراوان.

خواسته‌های تمرین

خواسته ۱

استفاده از بخار به عنوان ورودی سیستم مزایا و معایبی دارد که به شرح زیر می‌باشد:

مزایا:

- با ورود بخار به سیستم فرایند، در واقع فشارهای جزئی برای همه واکنش دهنده‌ها کم شده و سرعت پیشروی واکنش‌های سرعتی^۱ کاهش می‌یابد؛ در حالی که پیشروی واکنش تعادلی اول با افزایش فشار بیشتر شده و محصول استایرن بیشتری تولید می‌شود. به عبارتی دیگر گزینش پذیری^۲ استایرن با افزایش دبی بخار بیشتر می‌شود. در صورتی که بخار به سیستم وارد نشود، فقط واکنش‌های اول و دوم پیش رفته و مقادیر زیادی اتیلن، بنزن، و هیدروژن تولید می‌شود که از محصولات ناخواسته ما هستند.
- اگر که خوراک اولیه سیستم را بصورت مستقیم بدون بخار وارد سیستم کنیم، زمانی که خوراک وارد کوره شده و قبل از ورود به کوره گرم می‌شود، بدلیل دمای بالای کوره و گرمای تجزیه حرارتی کم برای واکنش دهنده‌ها، احتمال تشکیل دوده^۳ درون لوله‌ها و تجزیه حرارتی خوراک به وجود می‌آید. دلیل دیگری که به ورودی در ابتدای فرایند، مقدار زیادی بخار اضافه می‌شود، جلوگیری از به وجود آمدن این پدیده و از بین نرفتن خوراک و همچنین هزینه نگهداری کمتر و بازدهی بیشتر کوره می‌باشد.

معایب:

- با افزایش بخار به سیستم در واقع داریم دبی را به مقدار قابل توجهی افزایش می‌دهیم. این امر باعث می‌شود که اندازه و قیمت تجهیزات به میزان زیادی بیشتر شده و همچنین سوخت مصرفی کوره برای گرمایش خوراک افزایش زیادی داشته باشد.
- بخار اضافه شده به سیستم، آب خالص با دبی زیادی نسبت به خوراک اولیه (۳۴۰۰ در برابر ۱۵۳) می‌باشد که در نهایت در جداکننده ۳ فازی بعد راکتورها از سیستم خارج می‌شود. بخار آب خوراک خالص و بدون املاح^۴ (برای جلوگیری از رسوب دهی در تجهیزات) خوراک ارزانی نیست و از آنجایی که این آب به صورت ناخالص از سیستم خارج می‌شود، ضرر مالی آن باید لحاظ شده و قابل طرف نظر نمی‌باشد.

برای رفع نسبی معایب راهکارهایی وجود دارد. به‌نوع مثال برای مصرف کمتر سوخت کوره، می‌توان با استفاده از خروجی گرم راکتورها، خوراک ورودی به کوره را پیش گرم^۵ کرده تا در خود کوره سوخت کمتری مصرف شود. همچنین از لحاظ اقتصادی برای

¹ Kinetic reactions

² Selectivity

³ Coke

⁴ Demineralized Water

⁵ Pre-Heating

استفاده از آب خالص گران کمتر و تجهیزات کوچکتر و ارزان تر باید نسبت دبی بخار به اتیل بنزن را بهینه سازی عملیاتی و اقتصادی کرده تا فرایند نهایی از این منظر قابل قبول واقع شود.

همانطور که در بند قبل ذکر شد، افزایش نسبت بخار به اتیل بنزن ورودی، بدلیل افزایش حجم و کاهش فشارهای جری، پیشروی واکنش و تولید استایرن را بیشتر می کند اما متأسفانه از طرفی دیگر قیمت و اندازه تجهیزات برای تولید را بیشتر کرده و مصرف سوخت کوره را بیشتر می کند.

خواسته ۲

تعیین اندازه راکتور نیز یکی دیگر از چالش های این فرایند می باشد. از آنجایی که سرعت واکنش های ۲ تا ۶ طبق رابطه آرنیوس^۶ با افزایش دما بیشتر می شود، می توان برای تشکیل شدن کمتر محصولات ناخواسته و افزایش گزینش پذیری، دما را کاهش داد. از طرفی دیگر از آنجایی که ثابت تعادل واکنش اول با افزایش دما بیشتر می شود، با کاهش دما، درصد تبدیل^۷ نیز کاهش می یابد. بنابراین باید دمایی را انتخاب و بهینه سازی کرد که بهترین درصد تبدیل و گزینش پذیری را دارا باشد. در فرایند تولید استایرن، بخش جداسازی مواد کمتر مطرح بوده و درصد تبدیل بهتر در راکتورها برای تولید استایرن مهم تر می باشد.

بهینه سازی دما برای بهترین درصد تبدیل در خواسته امتیازی اول انجام شده و در ادامه گزارش می شود.

خواسته ۳

برای انجام این خواسته از یک واحد کوره استفاده کرده و هوای اضافه را ۱۰ درصد و بازدهی آنرا ۶۰ درصد قرار می دهیم. هوای استفاده شده، هوا با فشار جو^۸ و ۲۵ سلسیوس و سوخت استفاده شده، متان خالص در فشار جو فرض شده است. دقت شود که دبی سوخت و هوا نباید داده شود که با تغییر دمای خروجی کوره و یا همان ورودی راکتور، سوخت مورد نیاز توسط برنامه محاسبه شود.

نکته مهم دیگر که نیاز به ذکر است آن است که بدلیل اینکه برنامه اجازه استفاده از بخش همرفت کوره^۹ را برای یک جریان نمی دهد، در این شبیه سازی، بخش همرفت کوره با یک مبدل حرارتی شبیه سازی شده است. از آنجایی که دمای گاز خارج شده از کوره بالا می باشد، از این گاز برای پیشگرم کردن خوراک قبل از ورود به کوره استفاده شده است تا دمای گاز خروجی از دودکش را به دمای معقولی مانند ۴۰۰ تا ۵۰۰ درجه رسانده و نیز خوراک را با سوخت کمتری به دمای ۶۵۰ درجه سلسیوس برساند. برای اطلاعات بیشتر توضیحات داخل واحد مبدل حرارتی مورد نظر را مطالعه کنید.

طبق گفته خواسته، ویژگی های راکتور باید برای این فرایند تعریف شود. همه ویژگی ها بجز ابعاد راکتور و چگالی توده سیال در آن براحتی قابل تغییر است. ابتدا برای چگالی توده سیال از یک واحد Adjust استفاده می کنیم تا چگالی کاتالیست را تغییر دهد تا

⁶ Arrhenius Equation

⁷ Conversion

⁸ Atmospheric Pressure

⁹ Furnace Convection Zone

زمانی که چگالی توده سیال به مقدار مورد نیاز ما برسد. سپس با داشتن مقدار $WHSV^{10}$ ، چگالی کاتالیست و ورودی خوراک راکتور، حجم راکتور را بدست می‌آوریم که محاسبات آن در واحد SPRDSHT-1 قابل مشاهده است. در نهایت از یک واحد Adjust دیگر برای تغییر طول بستر ثابت کاتالیست استفاده می‌کنیم تا با تغییر قطر بستر، افت فشار راکتور را طبق رابطه ارگان (محاسبات برنامه) به ۳۰ کیلوپاسکال برساند.

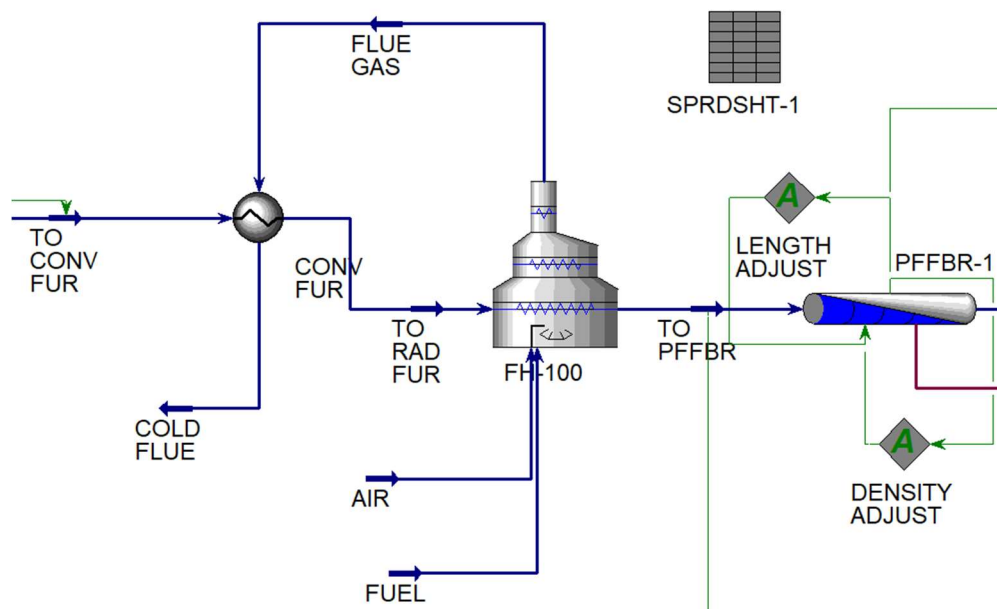
$$WHSV = \frac{\text{Reactor Mass Flow}}{\text{Total Mass of Catalyst}} = \frac{\dot{m}_{\text{reactor}}}{V_{\text{catalyst}} \times \rho_{\text{catalyst}}} = \frac{\dot{m}_{\text{reactor}}}{(V_{\text{reactor}} \times (1 - \varepsilon)) \times \rho_{\text{catalyst}}}$$

زمانی که با معلوم بودن حجم راکتور، طول و عرض آن محاسبه شود، نسبت ابعاد آن که به صورت قطر در طول است، بدست می‌آید.

Plug Flow Fixed Bed Reactor (PFFBR) Aspect ratio = 3.29m × 3.52m

همچنین درصد تبدیل اتیل بنزن و نیز بازدهی استایرن با تعریف بازدهی و درصد تبدیل و موازنه جرم آنها قابل محاسبه و محاسبه جزئیات آنها در SPRDSHT-1 قابل مشاهده است:

$$\text{First reactor: } \begin{cases} X_{EB} = 1 - \frac{\text{mole of outlet EB}}{\text{mole of inlet EB}} = 86\% \\ YIELD_{\text{styrene}} = \frac{\text{mole of outlet styrene}}{\text{mole of reacted EB} \times 1} = 92\% \end{cases}$$



شکل (۲) - شکل خواسته ۳

¹⁰ Weight Hourly Space Velocity

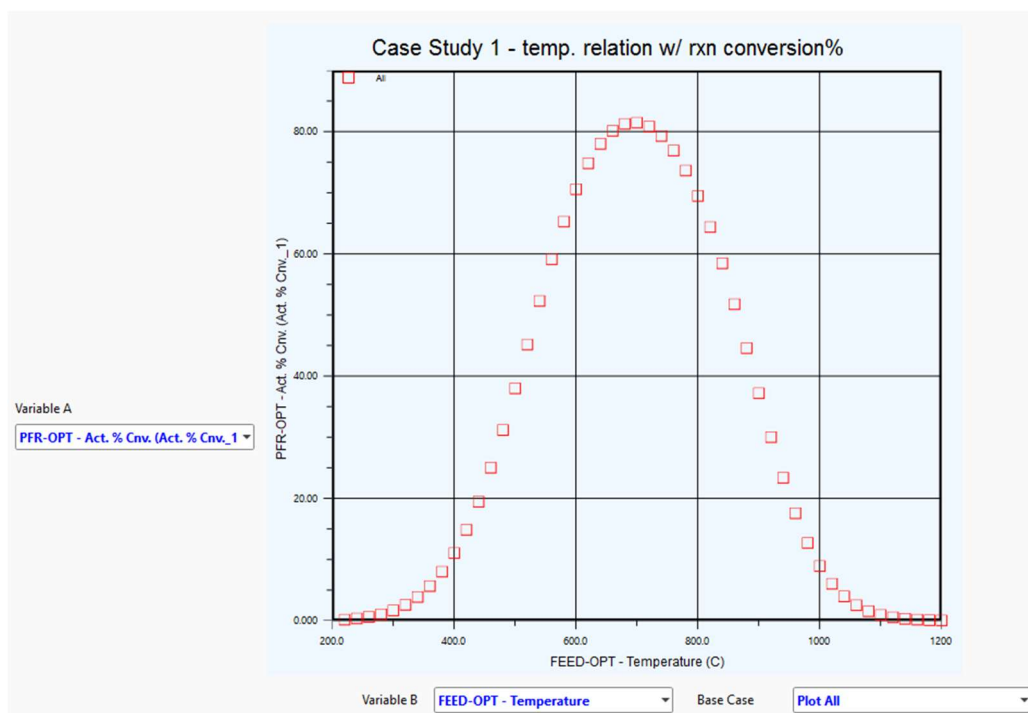
خواسته ۴

در این خواسته ابتدا راکتور دوم را تعریف می‌کنیم و دقیقاً ویژگی‌های راکتور اول را به راکتور دوم نسبت می‌دهیم. سپس برای هر دو راکتور جریان انرژی تعریف می‌کنیم و دمای جریان میانی، ورودی و خروجی دو راکتور را ۶۵۰ درجه سلسیوس قرار می‌دهیم. مقادیر گرما توسط برنامه محاسبه شده و درصد تبدیل اتیل بنزن و بازدهی تولید استایرن مطابق خواسته ۳ قابل محاسبه است:

$$\text{Both Reactors: } \begin{cases} X_{EB} = 87\% \\ YIELD_{styrene} = 86\% \end{cases}$$

خواسته امتیازی ۱

در این خواسته لازم است که دما را برای بیشترین درصد تبدیل واکنش مطلوب اول بهینه سازی کنیم. از قسمت مطالعه موردی^{۱۱} دما را بعنوان متغیر مستقل و درصد تبدیل واکنش اول را بعنوان متغیر وابسته انتخاب می‌کنیم. سپس در بازه دمایی ۲۲۰ درجه سلسیوس (دمای اولیه خوراک) تا ۱۲۰۰ درجه سلسیوس با جهش‌های ۵۰ درجه‌ای نمودار را تولید می‌کنیم.



شکل (۳) - نمودار بهینه سازی دما برای خواسته امتیازی

مشاهده می‌شود که دمای بهینه برای بیشترین درصد تبدیل واکنش اول حدود ۷۰۰ درجه می‌باشد که احتمالاً این دما در عملیات فرایند مشکل ساز است که مطرح نشده است. بنابراین بالاترین دمای ممکن حدود ۶۵۰ درجه را برای انجام واکنش انتخاب می‌کنیم.

¹¹ Case Study

واضح است که طبق گفته‌های این خواسته، فشار ثابت در نظر گرفته شده و در مطالعه موردی ظاهر نمی‌شود.

خواسته ۵

با ورود ویژگی‌های مبدل گفته شده در سوال، دماها بدست می‌آید. برای رسیدن به ضریب اصلاحی ۰.۹، دمای ورودی به کوره را با استفاده از دستور Adjust تغییر داده و در نهایت دمای محصولات خروجی خنک راکتور گزارش داده می‌شود. همانطور که در فایل شبیه سازی قابل مشاهده می‌باشد، دمای محصولات راکتور از ۶۵۰ درجه سلسیوس تا ۴۷۰ درجه سلسیوس خنک شده است. برای مشاهده مصرف سوخت بدون پیشگرم کردن، کافیست واحد Adjust-3 را خاموش کرده و دمای ورودی و خروجی خوراک را در مبدل برابر قرار دهید تا انتقال حرارتی انجام نشود. مصرف سوخت کوره را از واحد SPRDSHT-4 می‌توان مشاهده کرد که در نهایت حدود ۳۷٪ سوخت با انتگراسیون حرارتی^{۱۲} محصولات و خوراک، کاهش یافته است.

خواسته ۶

با استفاده از یک مبدل حرارتی جریان آب سرد ورودی و خروجی را تعریف می‌کنیم. فشار و دمای آب سرد را تعریف کرده ولی محاسبه دبی آنرا، طبق خواسته، به عهده نرم‌افزار می‌گذاریم. با مشخصه‌های^{۱۳} ضریب تصحیح ۰.۹ (تعریف شده به صورت پیشفرض در همه مبدل‌ها) و حداقل دمای نزدیک شدگی^{۱۴} ۱۵ درجه سلسیوس، دبی آب خنک محاسبه شده توسط برنامه تقریباً ۶۶.۱ تن بر ساعت و دمای خروجی آب سرد ۴۵۵ درجه سلسیوس بدست می‌آید.

Heat Exchanger: E-101

	Design	Rating	Worksheet	Performance	Dynamics	Rigorous Shell&Tube
Worksheet	Name	COOL PBFR PROD	TO ENRICHMENT	COLD WATER IN	COLD WATER OUT	
Conditions	Vapour	1.0000	0.0646	0.0000	1.0000	
Properties	Temperature [C]	470.2	40.00	25.00	455.3	
Composition	Pressure [kPa]	173.6	173.6	516.0	496.0	
PF Specs	Molar Flow [kgmole/h]	3721	3721	3668	3668	
	Mass Flow [kg/h]	7.743e+004	7.743e+004	6.609e+004	6.609e+004	
	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	84.84	84.84	66.22	66.22	
	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1.968e+005	-2.555e+005	-2.862e+005	-2.266e+005	
	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	216.4	72.42	53.70	191.8	
	Heat Flow [kJ/h]	-7.323e+008	-9.509e+008	-1.050e+009	-8.314e+008	

Delete OK

شکل (۴) - جریان‌های مبدل حرارتی خواسته ۶

¹² Heat Integration

¹³ Specs

¹⁴ Minimum Temperature Approach

خواسته ۷

از آنجایی که با تغییر ورودی خوراک سینی، جریان‌های مبدل‌های هم ارز تغییر نمی‌کند، میزان بخار کم فشار استفاده شده در ریبویلر^{۱۵} برج اول با کمک یک واحد کولر اندازه گیری شده و گزارش داده می‌شود: (تمام این داده‌ها در واحد SPRDSHT-5 وارد شده است)

جدول (۱) - خواسته ۷: تغییرات مقدار بخار کم فشار مصرفی با تغییرات سینی خوراک برج اول

دبی مولی جریان بخار کم فشار مصرفی در ریبویلر [Kgmole/h]	سینی خوراک برج استایرن (اول)
453.7	20
451.0	30
450.7	40
473.9	50
552.1	60
849.0	70
1552	75

مشاهده می‌شود که هر چه جریان خوراک به پایین برج نزدیک تر شود، بار حرارتی ریبویلر بیشتر می‌شود. ولی از طرفی دیگر، بار حرارتی چگالنده کمتر می‌شود. بنابراین باید خوراک را جایی وارد کرد که برآیند قیمت و اندازه چگالنده و ریبویلر حداقل شود.

خواسته ۸

افزایش دما در بالای برج مزایا و معایبی دارد که به شرح زیر است:

مزایا:

- افزایش دما در خروجی بالای برج باعث می‌شود که خوراک گرم به برج بعدی وارد شده و بار حرارتی ریبویلر برج دوم را کاهش دهد.

معایب:

- افزایش دمای بالای برج، میزان درصد مولی اتیل بنزن بالای برج را کاهش می‌دهد که این مطلوب ما برای ادامه جداسازی به برج غنی سازی اتیل بنزن نیست.
- افزایش دما همچنین باعث می‌شود که بار حرارتی چگالنده بیشتر شده و در نتیجه آب خنک کننده بیشتری برای برج اول استفاده شود و عملکرد کلی چگالنده کاهش می‌یابد. ولی از آنجایی که در مزایای افزایش دما گفته شد، می‌توان دمایی را

¹⁵ Reboiler

برای بهینه سازی بدست آورد که بار حرارتی بر روی برج‌های اول و دوم در کل در بهترین و اقتصادی ترین گزینه ممکن باشد.

در ادامه تاثیرات افزایش دمای بالای برج در چند مقدار برای برج اول ذکر شده است:

جدول (۲)- خواسته ۸: تاثیرات افزایش دمای بالای برج تقطیر اول

دمای بالای برج [°C]	درصد مولی اتیل بنزن بالای برج	بار حرارتی چگالنده [kJ/h]
55	0.4923	15,000,000
60	0.4102	19,000,000
65	0.2942	26,000,000

خواسته ۹

همگرایی برج واقعی و میانبر از این راه قابل انجام است. ابتدا مقدار درصد مولی جز سبک و سنگین به برج میانبر داده می‌شود. اندازه یکی از این دو جز معمولاً به عنوان مشخصه به شبیه ساز برج داده می‌شود. سپس با ورود فشار بالا و پایین برج بر حسب حدس اولیه سینی‌ها، رفلکس مینیوم^{۱۶} محاسبه شده بررسی می‌شود. میزان نسبت جریان برگشتی هر ۳ برج باید زیر ۱۰ و نیز کمتر از دوبرابر رفلکس مینیوم باشد. سپس یک رفلکس حدسی با رعایت شرایط به برج میانگین داده می‌شود تا تعداد سینی‌ها و سینی خوراک محاسبه شود. تعداد سینی بدست آمده و مقدار رفلکس را به برج اصلی داده و مقدار فشار تصحیح شده، مجدداً به برج میانبر داده می‌شود تا جواب‌های هر دو برج همگرا شوند. دقت شود که از آنجایی که فشار خوراک برج ۲ بسیار کم بوده، آنرا وارد یک کمپرسور کرده و به فشار ۱۳۰ کیلوپاسکال رسانده می‌شود.

پس از همگرایی برج واقعی دوم و دوقلوی میانبر آن، تعداد سینی واقعی ۲۰ و سینی بهینه خوراک سینی ۱۱ ام بدست آمد. اجزای مولی جریان‌های مقطره برج واقعی و میانبر در جدول زیر و نیز واحد SPRDSHT-2 گزارش شده است:

جدول (۳)- خواسته ۹: اجزای مولی برج واقعی و میانبر دوم

جز مولی اجزای برج دوم	برج واقعی	برج میانبر
اتیل بنزن	0.0100	0.0100
استایرن	0.0000	0.0000
هیدروژن	0.0039	0.0039
بنزن	0.4561	0.4588
تولون	0.5093	0.5064
آب	0.0063	0.0063
کربن دی‌اکسید	0.0144	0.0145

¹⁶ Minimum Reflux Ratio

همانطور که قابل مشاهده است، درصدهای مولی همه اجزا با تقریب بسیار خوبی با هم برابر است. این امر نشان دهنده آن است که همگرایی دو برج موفقیت آمیز بوده و راه شبیه سازی این بخش به درستی انجام شده است.

برای بررسی شرط مشخصه بازیابی ۹۵ درصد مولی اتیل بنزن، دبی جرمی اتیل بنزن برای جریان ورودی به برج اول، اندازه گیری شده و در ۰.۹۵ ضرب می شود. مقدار بدست آمده، حداقل دبی جرمی اتیل بنزن مجاز برای خروجی از جریان مقطره برج دوم است. طبق محاسبات و جزئیات واحد SPRDSHT-2، مشاهده می شود که این شرط با ضریب اطمینان بالا رعایت شده و مشخصه موردنظر ارضا شده است.

خواسته ۱۰

اگر تعداد سینی ها ۱.۵ برابر شود یعنی در برج دوم اتیل بنزن، ۳۰ سینی داریم. با مقایسه دبی جرمی جریان پایین برج برای هر دو حالت تعداد سینی داریم:

جدول (۴) - خواسته ۱۰: اتیل بنزن خالص شده در جریان پایین برج دوم در دو حالت تعداد سینی ها

تعداد سینی ها	دبی جرمی اتیل بنزن در جریان پایین برج
20	1979.85 [kg/h]
30	1979.91 [kg/h]

بنابراین نتیجه گیری می شود که افزایش سینی ها در برج دوم (با ثابت بودن رفلاکس) تاثیر زیادی بر اتیل بنزن بازیابی شده ندارد و در حالت ۱۰ سینی بیشتر نیز افزایش بازیابی کمتر از صدم درصد است و اصلا صرفه اقتصادی ندارد.

خواسته ۱۱

همگرایی در برج سوم نیز دقیقاً مانند برج دوم در خواسته ۹ است؛ با این تفاوت که در مقایسه اجزای سبک و سنگین برای برج واقعی و میانبر، نهایتاً خطای ۵ درصد برای شبیه سازی مجاز بوده. همچنین برای برج سوم دو مشخصه درصد مولی در جریان های بالا و پایین برج داریم که باید رعایت شوند. طبیعتاً در این حالت برج سوم با تکرار بیشتری همگرا می شود. بنابراین ممکن است که مقدار رفلاکس به صورت دقیق تا ۳ رقم اعشار پیش رفته تا شرط خطای ۵ درصد را ارضا کند.

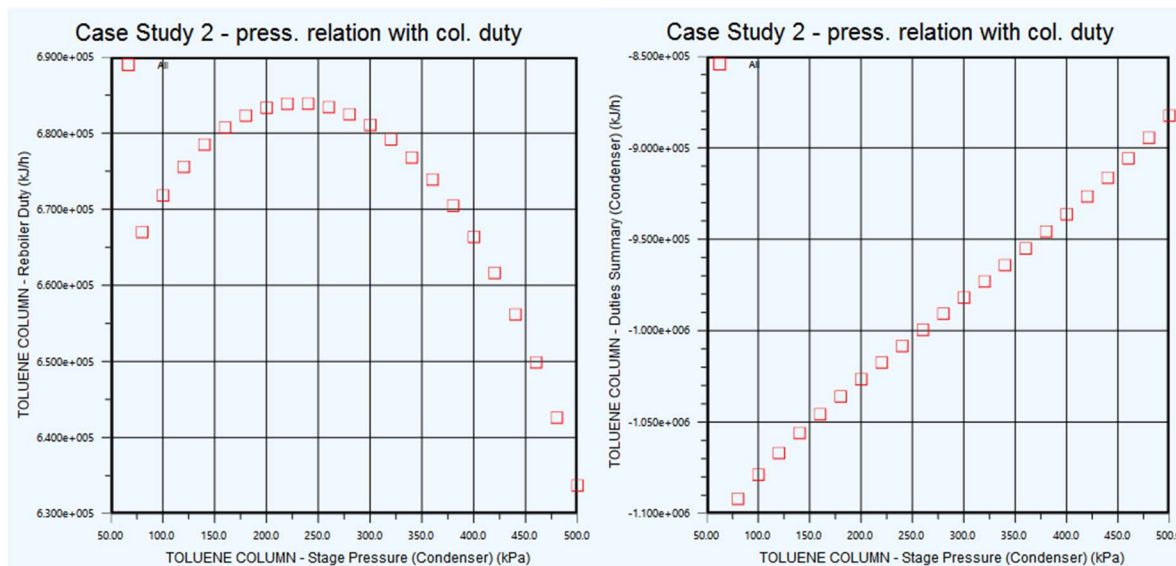
در نهایت با همگرایی برج سوم نیز، تمام ویژگی های آن قابل مشاهده می باشد. دقت شود که برای جزئیات بیشتر و مقایسه خطاها می توان به واحد SPRDSHT-3 در محیط برنامه مراجعه کرد. لازم به ذکر است که از آنجایی که فشار عملیاتی برج سوم را به عنوان مشخصه نداریم، این فشار به صورت فرضی روی ۲۹۰ کیلوپاسکال بالای برج در نظر گرفته شده است. دمای بالای برج سوم که توسط نرم افزار محاسبه شده، ۱۱۹.۳ درجه سلسیوس است.

Column: TOLUENE COLUMN / COL3 Fluid Pkg: Basis-1 / Peng-Robinson									
Design	Parameters	Side Ops	Internals	Rating	Worksheet	Performance	Flowsheet	Reactions	Dynamics
Worksheet									
Conditions	Name	COL TOLU FEED @COL3	TOL COL DIS @COL3	TOL COL BOT @COL3					
Properties	Vapour	0.9906	1.0000	0.0000					
Compositions	Temperature [C]	140.3	119.3	152.9					
PF Specs	Pressure [kPa]	300.0	290.0	301.0					
	Molar Flow [kgmole/h]	19.54	9.568	9.972					
	Mass Flow [kg/h]	1649	731.3	917.3					
	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	1.886	0.8324	1.054					
	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	6.831e+004	7.083e+004	3.536e+004					
	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	7.654	-19.57	-46.33					
	Heat Flow [kJ/h]	1.335e+006	6.777e+005	3.526e+005					

شکل (۵)- ویژگی‌های جریان‌های برج ۳

خواسته امتیازی ۲

با مطالعه موردی تاثیر فشار بالای برج بر بار حرارتی ریبویلر و چگالنده به نتایج زیر می‌رسیم. قبل از شروع مطالعه موردی در جدول ۳ در فضای برنامه، اختلاف ثابت بین فشار ریبویلر و چگالنده ایجاد کردیم تا در طول مطالعه با معکوس شدن فشار^{۱۷} مواجه نشویم.



شکل (۶)- خواسته امتیازی ۲: تاثیر فشار بر بار حرارتی کندانسور و ریبویلر

¹⁷ Pressure inversion

طبق این مشاهدات می‌توان نتیجه گرفت که با کاهش فشار تا حدود فشار جو، بار حرارتی ریپویلر کمتر می‌شود ولی بار حرارتی چگالنده با کاهش فشار افزایش خطی یافته و ضرر اقتصادی دارد. از آنجایی که صعود بار حرارتی چگالنده خطی و نزول بار حرارتی ریپویلر غیر خطی و با تصاعد بیشتر می‌باشد، به احتمال زیاد می‌توان در محدوده عملیاتی فرایند به فشار بهینه رسید.

خواسته ۱۲

برای استفاده از جریان‌های داخلی برج‌ها، باید جریان‌هایی را در داخل محیط برج تعریف کرده، از دکه define from stream جریان‌های داخلی را کپی کرده و در نهایت آن جریان‌ها را در صفحه خود برج export کنیم. مشکل این کار این است که با تغییر مشخصه یا خوراک هر برج این جریان‌ها نیز تغییر نکرده و در حالت اولیه خود می‌مانند. سپس با خارج کردن جریان‌ها از فضای برج، خروجی‌های ریپویلر و چگالنده را مخلوط کرده و مبدل‌های هم ارز آنها و جریان‌های آنها را تعریف می‌کنیم. اگرچه برنامه از کاربر این ویژگی‌ها را می‌خواهد؛ ولی در ۳ مبدل مربوط به ریپویلرهای برج اول، دوم و سوم، مشخصه‌ای تعریف نمی‌شود. زیرا بخار کم فشار سرویس و سیال فرایندی در حال تغییر فاز است و می‌دانیم که اگر سیالی در مبدل‌های حرارتی تغییر فاز دهد، ضریب تصحیح ۱ شده، نزدیک شدگی دمایی نداریم و همچنین تقاطع دمایی^{۱۸} نیز وجود ندارد.

جدول (۵) - خواسته ۱۲: دبی سیالات سرویس برای برج‌های تقطیر استایرن، اتیل بنزن و تولوئن

برج	دبی آب خنک کننده در چگالنده [Kg/h]	دبی بخار کم فشار در ریپویلر [Kg/h]
استایرن (اول)	210,400	8,125
اتیل بنزن (دوم)	41,520	1,020
تولوئن (سوم)	13,710	300

خواسته ۱۳

برای انجام این خواسته از واحد Recycle استفاده می‌شود. ابتدا جریان غنی شده اتیل بنزن وارد واحد جریان برگشتی می‌شود. سپس با استفاده از پمپ فشار جریان برابر با فشار خوراک اولیه ورودی ۴۰۰ کیلوپاسکال می‌شود و در نهایت جریان برگشتی به مخلوط کننده اول فرایند وصل می‌شود. مقایسه دبی‌های جرمی استایرن خروجی از پایین برج اول در حالت جریان برگشتی و بدون جریان برگشتی در جدول زیر ذکر شده است:

جدول (۶) - خواسته ۱۳: مقدار محصولات نهایی استایرن در حالت جریان برگشتی و بدون جریان برگشتی

نوع فرایند	دبی جرمی نهایی محصول استایرن خروجی [Kg/h]
با جریان برگشتی	12,394.5
بدون جریان برگشتی	11,346.7
درصد استایرن افزوده شده	9.23%

که به عبارتی دیگر در واقع ۱۰ درصد از هزینه‌های خرید خوراک استفاده شده به عنوان سود کمتر پرداخت می‌شود.

¹⁸ Temperature Cross

- [1]: Towler, Gavin, and Ray Sinnott. *“Chemical engineering design: principles, practice and economics of plant and process design”*, Butterworth-Heinemann, 2021
- [2]: Turton, Richard, et al. *“Analysis, synthesis and design of chemical processes”*, Pearson Education, 2008, *Appendix B.3 Styrene Production, UNIT 400*
- [3]: Luyben, William L. *“Design and control of the styrene process”*, *Industrial & engineering chemistry research* 50.3 (2011): 1231-1246
- [4]: Austin, George T. *“Shreve’s Chemical Process Industries”*, McGraw-Hill Company, 5th Ed. 1984, *Chap. 36 Rubber Industries*