



دانشگاه صنعتی شریف

دانشکده مهندسی شیمی و نفت

درس: بررسی مقدماتی طرح

استاد درس: دکتر سعید عینی - پاییز ۱۴۰۲

تمرین اول: طراحی و شبیه‌سازی فرایند تولید استایرن

زمان بارگذاری تمرین: ۱۰ آبان ماه ۱۴۰۲

زمان تحویل پاسخ: ۳۰ آبان ماه ۱۴۰۲

ویرایش: ۰۱

**لطفاً به نکات زیر توجه نمایید:**

- ۱- به هنگام نگارش و تحویل تکالیف درس، به فایل «مقررات تنظیم گزارش و تحویل تکالیف و پروژه‌های درسی» توجه ویژه‌ای داشته باشید. تمامی موارد ذکر شده در فایل مقررات، در نمره‌دهی ترتیب اثر داده می‌شوند.
- ۲- برای شبیه‌سازی، استفاده از هرگونه شبیه‌سازهای تجاری رایج اعم از Aspen HYSYS، Aspen Plus، PROII، UniSim و ... آزاد، و به اختیار دانشجویان است.
- ۳- شرح روند شبیه‌سازی و رفع خطاهای پیش آمده در مسیر آن به همراه تحلیل نتایج نهایی برای هر خواسته الزامی است.
- ۴- در صورت هرگونه سوال و ابهام در مورد تمرین، با دستیارهای آموزشی تمارین از طریق ایمیل‌های زیر در ارتباط باشید:

G-mail: [Peymanfard.mj@gmail.com](mailto:Peymanfard.mj@gmail.com)

G-mail: [Milad.sohrabii21@gmail.com](mailto:Milad.sohrabii21@gmail.com)



دانشگاه صنعتی شریف، دانشکده مهندسی شیمی و نفت

بررسی مقدماتی طرح، دکتر سعید عینی، نیمسال اول سال تحصیلی ۱۴۰۳-۱۴۰۲

زمان تحویل پاسخ: ۳۰ آبان ماه ۱۴۰۲

تمرین اول: طراحی و شبیه سازی فرایند تولید استایرن

## ۱- شرح مسئله

استایرن، منومر تولید پلی استایرن بوده که استفاده های متعددی در صنعت به عنوان استایروفوم دارد. استایروفوم برای تولید انواع ظروف بسته بندی غذا یا لیوان های کاغذی نوشیدنی استفاده شده و هم چنین به طور گسترده برای کاربردهای عایق بندی عایق بندی تحت نام محصول یونولیت در ایران دارد.

استایرن از واکنش گرماگیر هیدروژن زدایی اتیل بنزن تولید می شود اما واکنش های جانبی زیادی در کنار واکنش اصلی رخ می دهد. طراحی واحد فرایندی مناسب برای جداسازی بعد از واحد واکنش و تولید اقتصادی استایرن از اهمیت بالایی برخوردار است. در این تمرین سعی در طراحی، شبیه سازی و بررسی تغییر انواع پارامترهای طراحی بر روی فرایند تولید استایرن خواهیم داشت. مجموعه واکنش های فرایند به صورت زیر است.

واکنش ۱	هیدروژن + استایرن $\leftrightarrow$ اتیل بنزن
واکنش ۲	اتیلن + بنزن $\rightarrow$ اتیل بنزن
واکنش ۳	متان + تولوئن $\rightarrow$ هیدروژن + اتیل بنزن
واکنش ۴	هیدروژن + کربن مونوکسید $\rightarrow$ اتیلن + بخار آب
واکنش ۵	هیدروژن + کربن مونوکسید $\rightarrow$ متان + بخار آب
واکنش ۶	هیدروژن + کربن دی اکسید $\rightarrow$ کربن مونوکسید + بخار آب

برای تمامی واکنش ها، نرخ واکنش به فرم آرنیوس است. نرخ واکنش ها بر اساس واحد کیلومول بر مترمکعب ثانیه محاسبه شده و غلظت اجزاء موجود در معادله نرخ واکنش ها بر اساس فشار جزئی در واحد پاسکال جایگذاری می شود. اطلاعات سینتیکی واکنش های غیر تعادلی در جدول ۱ داده شده است.

جدول ۱: اطلاعات سینتیکی واکنش های غیر تعادلی

غلظت	انرژی فعال سازی (کیلوژول بر کیلومول)	ثابت واکنش	واکنش
اتیل بنزن P	۲۰۷۹۸۹	۲۷۱۰۰	واکنش ۱
هیدروژن P اتیل بنزن P	۹۱۵۱۵	$6/484 \times 10^{-7}$	واکنش ۲
اتیلن P (آب) P	۱۰۳۹۹۷	$4/487 \times 10^{-7}$	واکنش ۳
متان P آب P	۶۷۲۳	$2/564 \times 10^{-6}$	واکنش ۴
کربن مونوکسید P آب P	۷۳۶۳۸	۱۷۷۹	واکنش ۵



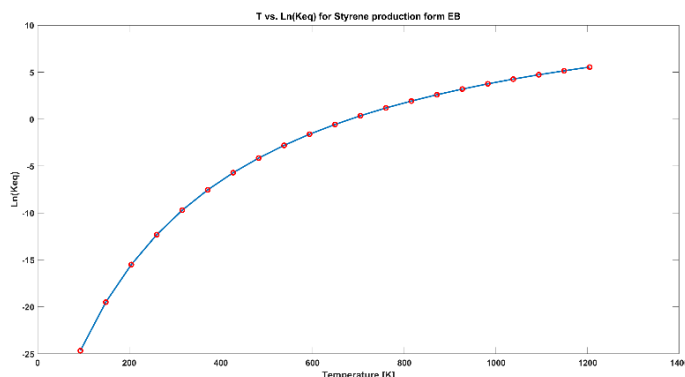
دانشگاه صنعتی شریف، دانشکده مهندسی شیمی و نفت

بررسی مقدماتی طرح، دکتر سعید عینی، نیم‌سال اول سال تحصیلی ۱۴۰۳-۱۴۰۲

زمان تحویل پاسخ: ۳۰ آبان ماه ۱۴۰۲

تمرین اول: طراحی و شبیه‌سازی فرایند تولید استایرن

هم‌چنین، اطلاعات سینتیکی واکنش تعادلی تولید استایرن به صورت نمودار دما بر حسب لگاریتم طبیعی ثابت تعادل در شکل ۱ ارائه شده است.<sup>۱</sup>



شکل ۱: نمودار دما بر حسب لگاریتم طبیعی ثابت تعادل برای واکنش تعادلی تولید استایرن از اتیل‌بنزن

## ۲- خواسته‌های مسئله

**خواسته ۱)** با توجه به سیستم واکنشی ارائه شده، استفاده از بخار به عنوان ورودی سیستم چه مزایا و معایبی دارد؟ حداقل دو مزیت و حداقل یک عیب را نام برده و راهکارهای فرایندی خود را برای رفع معایب بیان کنید. افزایش نسبت بخار به اتیل‌بنزن ورودی، چه تاثیری بر روی درصد تبدیل تولید استایرن خواهد داشت؟

**خواسته ۲)** افزایش دمای راکتور چه تاثیری بر درصد تبدیل<sup>۲</sup> و انتخاب گزینی<sup>۳</sup> سیستم واکنشی دارد؟ دلایل خود را ذکر کنید.

- اطلاعات سینتیکی بر اساس آزمایش‌های تجربی بر روی یک راکتور کاتالیستی با مشخصات منطبق بر جدول ۲ انجام شده است.

جدول ۲: مشخصه‌های راکتور کاتالیستی به کار رفته

ضریب تخلخل	۰/۷۲
چگالی توده سیال	۱۱۹۳ (کیلوگرم بر مترمکعب)
ضریب کرویت دانه‌های کاتالیست	۱
قطر دانه‌های کاتالیست	۱/۶ (میلی‌متر)
سرعت فضایی جرمی <sup>۴</sup> بر پایه میزان اتیل‌بنزن ورودی به راکتور	۰/۴۴۶ (ساعت وارون)

<sup>۱</sup> برای تعریف دقیق واکنش تعادلی در شبیه‌ساز مورد استفاده، از نرم افزار 'GetData Graph Digitizer' یا نرم‌افزارهای مشابه برای استخراج اطلاعات نمودار سینتیکی، استفاده نمایید.

<sup>۲</sup> Conversion

<sup>۳</sup> Selectivity

<sup>۴</sup> Weight Hourly Space Velocity (WHSV)



دانشگاه صنعتی شریف، دانشکده مهندسی شیمی و نفت

بررسی مقدماتی طرح، دکتر سعید عینی، نیم‌سال اول سال تحصیلی ۱۴۰۳-۱۴۰۲

زمان تحویل پاسخ: ۳۰ آبان ماه ۱۴۰۲

تمرین اول: طراحی و شبیه‌سازی فرایند تولید استایرن

در ادامه، به دنبال طراحی و شبیه‌سازی بهینه واحد واکنش از فرایند تولید استایرن هستیم. مشخصات دو خط خوراک اصلی به فرایند در جدول ۳ آمده است. دو جریان کاملاً با یکدیگر ترکیب شده و وارد بخش واکنش می‌شوند.

جدول ۳: مشخصه‌های جریان‌های اصلی ورودی به فرایند

بخار کم فشار	خوراک تازه اتیل بنزن	
۲۰۰	۲۲۰	دما (درجه سانتی‌گراد)
۴۰۰	۴۰۰	فشار (کیلوپاسکال)
۳۴۰۰	۱۵۳	دبی مولی (کیلوگرم مول بر ساعت)
	$x_{\text{اتیل بنزن}} = ۰/۹۸۰۴$	
$x_{\text{آب}} = ۱$	$x_{\text{بنزن}} = ۰/۰۰۹۸$	جزء مولی
	$x_{\text{تولون}} = ۰/۰۰۹۸$	

**خواسته ۳)** مطابق اطلاعات آزمایشگاهی شرایط بهینه خوراک ورودی به راکتور برای انجام واکنش در دمای ۶۵۰ درجه سانتی‌گراد و فشار ۲۷۰ کیلوپاسکال است. دو جریان خوراک را مخلوط نموده و سپس با استفاده از یک کوره و در صورت نیاز شیرهای فشار شکن، دما و فشار مخلوط را به مقادیرهای بهینه فوق برسانید. الف) در صورتی که افت فشار مجاز در طول راکتور حداکثر ۳۰ کیلوپاسکال باشد، طول و قطر راکتوری را بیابید که به حداکثر مقدار نسبت ابعاد<sup>۵</sup> ممکن برسد. ب) میزان درصد تبدیل اتیل بنزن و بازده<sup>۶</sup> تولید استایرن را گزارش نمایید.

(راهنمایی: از رابطه اُرگان برای محاسبه افت فشار در راکتور بستر ثابت استفاده نمایید. مشخصات جریان خروجی از راکتور در رابطه اورگان قرار می‌گیرد ولی برای سادگی از همان مشخصات جریان ورودی استفاده نمایید.)

**خواسته ۴)** با توجه به گرماگیر بودن واکنش تعادلی تولید استایرن، دما در طول راکتور افت کرده و در نتیجه نیاز به گرمایش مجدد جریان برای افزایش نرخ تولید استایرن هستیم. دما جریان خروجی از راکتور اول را به ۶۵۰ درجه سانتی‌گراد رسانده و وارد راکتور دومی مشابه با راکتور اول نمایید. میزان درصد تبدیل کلی اتیل بنزن و بازده کلی تولید استایرن پس از دو راکتور را گزارش نمایید.

**خواسته امتیازی)** دمای و فشار ورودی به راکتورها یکی از متغیرهای تصمیم‌گیری مهم در عملکرد مجموعه واکنشی است. بررسی نمایید که آیا دمای ۶۵۰ درجه سانتی‌گراد و فشار ۲۷۰ کیلوپاسکال واقعا دما و فشار بهینه‌ای برای انجام واکنش‌ها هستند؟ می‌توانید از

<sup>5</sup> Aspect Ratio

<sup>6</sup> Yield



دانشگاه صنعتی شریف، دانشکده مهندسی شیمی و نفت

بررسی مقدماتی طرح، دکتر سعید عینی، نیم‌سال اول سال تحصیلی ۱۴۰۳-۱۴۰۲

زمان تحویل پاسخ: ۳۰ آبان ماه ۱۴۰۲

تمرین اول: طراحی و شبیه‌سازی فرایند تولید استایرن

مطالعه‌ی موردی<sup>۷</sup> یا بهینه‌ساز شبیه‌ساز خود استفاده نموده و به دنبال دمایی باشید که بیشترین میزان درصد تبدیل اتیل‌بنزن را در طول دو راکتور به دنبال داشته باشد.

- پس از انجام واکنش‌ها باید محصولات به مرحله جداسازی وارد شده تا محصولات خالص و با ارزش بدست آیند. برای جداسازی ترکیبات سنگین از سبک‌تر نیاز است که دمای محصولات راکتور خنک‌سازی شوند. از سوی دیگر در ابتدای فرایند نیز برای رسیدن به دمای بهینه انجام واکنش، با استفاده از کوره دمای خوراک را افزایش داده بودیم.

**خواسته ۵)** برای کاهش مصرف سوخت در کوره خوراک، از یک مبدل حرارتی قبل از آن استفاده نموده و محصولات خروجی راکتور را به عنوان سیال گرم به کار برید. با در نظر گرفتن حداقل ضریب اصلاحی<sup>۸</sup> ۰.۹ و حداقل دمای نزدیک‌شدگی<sup>۹</sup> ۱۵ درجه سانتی‌گراد برای مبدل، دمای محصولات خروجی از راکتور را تا چه دمایی می‌توان کاهش داد؟ با به کارگیری این مبدل حرارتی کمکی، میزان مصرف سوخت کوره اولیه برای افزایش دمای خوراک، چند درصد کاهش می‌یابد؟

(توجه نمایید دو مشخصه حداقل ضریب اصلاحی ۰.۹ و حداقل دمای نزدیک‌شدگی ۱۵ درجه سانتی‌گراد باید در طراحی هر مبدل حرارتی در این فرایند تا انتها در نظر گرفته شود.)

**خواسته ۶)** در گام بعدی برای جداسازی اولیه محصولات سبک و سنگین، از یک مبدل حرارتی دیگر با سیال سرد آب خنک‌کننده استفاده می‌نماییم. چه میزان دبی حجمی آب خنک‌کننده لازم است تا دمای محصولات به ۴۰ درجه سانتی‌گراد رسد؟

- بعد از جداکننده سه فازی، با استفاده از برج‌های تقطیر به جداسازی نهایی محصولات پرداخته می‌شود. سه برج تقطیر متوالی به ترتیب برای خالص‌سازی استایرن، خالص‌سازی اتیل‌بنزن و خالص‌سازی تولوئن به کار گرفته می‌شود.

با استفاده از مشخصات زیر، مجموعه برج‌های تقطیر را طراحی و شبیه‌سازی نمایید.

- ۱- میزان نسبت جریان برگشتی<sup>۱۰</sup> در هر کدام از سه برج، نباید بیشتر از ۱۰ باشد.
- ۲- میزان نسبت جریان برگشتی واقعی در هر کدام از سه برج، باید نهایتاً ۲ برابر نسبت جریان برگشت حداقلی باشد.
- ۳- افت فشار در هر سینی را بنابر قاعده سرانگشتی، برابر ۰/۱ پوند بر اینچ مربع فرض نمایید.
- ۴- در چگالنده تمامی برج‌ها، تنها استفاده از آب خنک‌کننده مجاز بوده و در جوش‌آور هر برج نیز تنها استفاده از بخار کم فشار مجاز است. مشخصات جریان‌های جانبی فوق در جدول ۴ ارائه شده است.

<sup>7</sup> Case Study Section

<sup>8</sup> Ft Correction Factor

<sup>9</sup> Approach Temperature

<sup>10</sup> Reflux Ratio



دانشگاه صنعتی شریف، دانشکده مهندسی شیمی و نفت

بررسی مقدماتی طرح، دکتر سعید عینی، نیم‌سال اول سال تحصیلی ۱۴۰۳-۱۴۰۲

تمرین اول: طراحی و شبیه‌سازی فرایند تولید استایرن

زمان تحویل پاسخ: ۳۰ آبان ماه ۱۴۰۲

جدول ۴: مشخصات استاندارد سیالات سرویس بکار رفته در فرایند

خروجی	ورودی	شاخص‌ها	جریان جانبی
۱۲۰ درجه فارنهایت	۹۰ درجه فارنهایت	دما	آب خنک‌کننده
۴۹۶ کیلوپاسکال	۵۱۶ کیلوپاسکال	فشار	
کمتر از ۲۵۰ درجه فارنهایت	کمتر از ۲۵۰ درجه فارنهایت	دما	
کمتر از ۱۵ پوند بر اینچ مربع	کمتر از ۱۵ پوند بر اینچ مربع	فشار	بخار کم فشار
مایع اشباع	بخار اشباع	فاز	

۵- میزان خلوص مولی استایرن در پایین برج اول باید بالای ۹۹/۵ درصد باشد. ۱ ✓

۶- برج اول به گونه‌ای طراحی شود تا تمامی محصولات گازی سبک باقی مانده به صورت جریان تهویه<sup>۱۱</sup> کاملاً خارج شوند. ۱ ✓

۷- خلوص مولی اتیل بنزن در بالای برج دوم حداکثر ۱ درصد باشد. ۲

۸- حداقل ۹۵ درصد بازیابی مولی اتیل بنزن در مجموع دو برج اول و دوم انجام شده باشد. ۲

۹- خلوص مولی تولوئن در پایین برج سوم حداقل ۹۵ درصد باشد.

۱۰- خلوص مولی تولوئن در بالای برج سوم حداکثر ۵ درصد باشد.

- برج اول برای جلوگیری از پلیمریزاسیون و هم‌چنین جداسازی نهایی گازهای سبک باقی مانده باید در فشار خلاء کار کند، لذا فشار بالای برج را در ۱۰ کیلوپاسکال تنظیم نمایید. برج اول دارای ۸۲ مرحله تعادلی بوده و فرض نمایید خوراک از سینی ۱۴۰ام وارد برج شود. (شماره گذاری سینی‌ها را از بالای برج انجام دهید).

**خواسته ۷)** اثر انتخاب سینی خوراک را بر روی میزان بخار کم فشار مصرفی (بار حرارتی ریویلر) برای چند سینی نمونه دل‌خواه در طول برج بررسی نمایید.

**خواسته ۸)** مزایا و معایب افزایش دمای بالای برج را شرح دهید. افزایش دمای بالای برج چه تاثیری بر روی میزان بازیابی اتیل بنزن در جریان مقطره مایع بالای برج دارد؟ آیا این افزایش دما، باعث بهبود عملکرد کلی چگالنده (به عنوان یک مبدل حرارتی) می‌شود؟

- خروجی جریان مقطره برج اول به عنوان خوراک برج دوم استفاده می‌شود. یکی از چالش‌های طراحی برج دوم، نامعلوم بودن تعداد سینی‌های برج است. البته با توجه به خروج حداکثری استایرن و گازهای سبک دیگر ملزم به عملیات زیر فشار اتمسفریک نبوده و مایل هستیم تا فشار کاری را افزایش دهیم. یکی از مزایای این کار جلوگیری از ورود هوا پیرامون به داخل سیستم در صورت ایجاد نشتی و شکستگی‌های جزئی است. فشار بالای برج را ۱۲۰ کیلوپاسکال فرض نمایید. ابتدا حدس اولیه‌ای از تعداد

<sup>11</sup> Vent Flow



سینی‌ها بزنید سپس با توجه به آن و با استفاده از برج میانبر<sup>۱۲</sup> تعداد سینی‌های واقعی را بدست آورید. در گام بعدی اکنون تعداد سینی واقعی بدست آمده را مبنا قرار داده و فشار پایین برج جدید را به برج میانبر دهید. مراحل را تکرار کرده تا برج میانبر به تعداد سینی واقعی نهایی همگرا شود. در حین عملیات یافتن تعداد سینی مورد نیاز، به اطلاعات دمایی جریان‌های خروجی برج میانبر توجه داشته باشید که آیا می‌توانند در مبدل حرارتی با یوتیلیتی‌های مشخص شده با عملکرد مناسب به کار روند یا خیر.

**خواسته ۹)** تعداد سینی واقعی و سینی بهینه ورود خوراک برای برج دوم را گزارش نمایید. پس از شبیه‌سازی برج دوم، نتایج جزء مولی اجزا در جریان مقطره برج اصلی را با برج میانبر مقایسه نمایید. نشان دهید برج اول و دوم به گونه‌ای طراحی شده‌اند که شرط مشخصه حداقل مجموع ۹۵ درصد بازیابی مولی اتیل‌بنزن ارضا شده باشد.

**خواسته ۱۰)** فرض نمایید تعداد واقعی سینی‌ها ۱/۵ برابر تعداد سینی واقعی محاسبه شده از همگرایی برج میانبر باشد. بازیابی اتیل‌بنزن در جریان مقطره چند درصد افزایش می‌یابد؟

• خروجی جریان مقطره برج دوم به فشار ۳۰۰ کیلوپاسکال رسیده و وارد برج سوم می‌شود. هدف از برج سوم جداسازی و خالص‌سازی تولوئن به عنوان محصول است.

**خواسته ۱۱)** برج میانبر و برج اصلی سوم را به گونه‌ای طراحی و شبیه‌سازی کرده که مشخصه‌های ذکر شده را ارضا نمایید. هم‌چنین اختلاف حداکثر ۵ درصد میان نتایج جزء مولی محصول سبک در پایین برج و محصول سنگین در بالای برج، میان برج میانبر و برج اصلی طراحی شده مجاز است. دمای بالای برج سوم طراحی شده خود را گزارش نمایید.

**خواسته امتیازی)** افزایش فشار برج باعث افزایش دمای اشیاع ترکیب مایع می‌شود. بنابراین انرژی بیشتری برای جداسازی دو ماده از یکدیگر در برج تقطیر لازم است. هم‌چنین افزایش فشار باعث به کار رفتن مواد بیشتر و مستحکم‌تری برای ساخت برج شده که باعث افزایش قیمت پایه ساخت می‌شود. بررسی نمایید که اثر کاهش فشار عملیاتی برج سوم چه تاثیری بر روی طراحی و عملکرد برج سوم دارد. آیا حداقل فشار عملیاتی برای طراحی مناسب برج سوم که مشخصه‌های داده شده را نیز ارضا نماید، قابل بیان است؟

**خواسته ۱۲)** دبی جریان آب خنک‌کننده و دبی بخار کم فشار مورد نیاز برای هر برج را در قالب یک جدول گزارش نمایید.

**توجه:** برای محاسبه دبی‌های آب خنک‌کننده و بخار کم فشار هر برج، از مبدل‌های حرارتی استفاده نمایید. مشخصات جریان ورودی و خروجی سیال فرایندی را نیز از داخل محیط برج<sup>۱۳</sup> برداشته و جایگذاری نمایید. با این روش علاوه بر به دست آمدن دبی سیال سرویس آب و بخار، می‌توانید بر حداقل ضریب اصلاحی و حداقل دمای نزدیک‌شدگی چگالنده و جوش آور نیز نظارت داشته باشید و برج را به گونه‌ای طراحی نمایید که چگالنده و جوش آور برج نیز عملکرد خوبی داشته باشد.

<sup>12</sup> Shortcut Column

<sup>13</sup> Column Environment



دانشگاه صنعتی شریف، دانشکده مهندسی شیمی و نفت

بررسی مقدماتی طرح، دکتر سعید عینی، نیم‌سال اول سال تحصیلی ۱۴۰۳-۱۴۰۲

زمان تحویل پاسخ: ۳۰ آبان ماه ۱۴۰۲

تمرین اول: طراحی و شبیه‌سازی فرایند تولید استایرن

**خواسته ۱۳)** با بازگشت دادن<sup>۱۴</sup> جریان اتیل‌بنزن از پایین برج دوم به ابتدای فرایند و مخلوط کردن آن با خوراک اتیل‌بنزن تازه، فرایند را شبیه‌سازی نمایید. با این کار چند درصد به تولید استایرن خروجی از پایین برج اول افزوده می‌شود؟

مراجع:

- [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.

<sup>14</sup> Recycle