

# طراحی و مدل سازی یک فرایند تقطیر چندجزئی به روش نیوتون - رافسون بهبودیافته

هادی پورتالاری<sup>۱</sup>، فرشاد ورامینیان<sup>۲\*</sup>، جواد کریمی ثابت<sup>۳</sup>

۱- دانشجوی دکتری مهندسی شیمی، دانشگاه سمنان

۲- استاد مهندسی شیمی، دانشگاه سمنان

۳- استادیار مهندسی شیمی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای

تاریخ دریافت: ۹۴/۰۴/۰۹ تاریخ پذیرش: ۹۴/۰۷/۲۸

پیام‌نگار: [fvaraminian@semman.ac.ir](mailto:fvaraminian@semman.ac.ir)

## چکیده

در تحقیق حاضر، یک ستون تقطیر چندجزئی به کمک روش مرحله‌ی تعادلی مدل سازی شده است. مدل سازی با حل مجموعه‌ی معادلات حاکم بر روش نیوتون - رافسون بهبودیافته انجام شده است. در این تحقیق سعی شده برای حصول اطمینان از همگرایی روش نیوتون و افزایش سرعت رسیدن به جواب نهایی، ابتدا حدس‌های اولیه تصحیح و سپس به عنوان ورودی داده شوند. تصحیح حدس‌های اولیه با استفاده از روش جداسازی معادلات انجام شده است. مدل سازی در گام اول روی یک ستون تقطیر موجود انجام شده و در گام بعدی، این ستون با تعیین مقادیر بهینه برای پارامترهای عملیاتی مؤثر، بازطراحی شده است. برای ارزیابی دقت نتایج مدل سازی، جواب‌های حاصل با نتایج یک پژوهش مشابه مقایسه شده‌اند. مقایسه‌ها انطباق کاملی میان نتایج نشان می‌دهند.

**کلیدواژه‌ها:** تقطیر چندجزئی، مدل سازی تعادلی، روش نیوتون - رافسون بهبودیافته

## ۱. مقدمه

در روش تقطیر، از فازهای بخار و مایع در دما و فشار مشابه به عنوان ناحیه‌های هم‌زیست برای جداسازی استفاده می‌شود [۱]. تقطیر پرکاربردترین عملیات جداسازی در صنایع شیمیایی و پتروشیمی است [۲]. از آن جا که انجام آزمایش با هدف طراحی یا اصلاح سیستم‌های تقطیر در صنعت ضروری اما پرهزینه است، بنابراین استفاده از ابزار مدل سازی برای نیل به این هدف می‌تواند بسیار مفید باشد. مدل‌های مناسب می‌توانند به طراحی بهتر ستون‌های تقطیر با کارایی بالاتر کمک کنند. روش‌های مدل سازی ستون‌های تقطیر بسته به فرضهای به کار رفته در توسعه مدل به سه دسته

اساس تمام عملیات جداسازی ایجاد دو یا چند ناحیه هم‌زیست در سیستم با دما، فشار، ترکیب و یا حالت فازی متفاوت است. هر جزء حاضر در سیستم جداسازی به یک شیوه منحصر به فرد به محیط‌های ایجاد شده توسط این ناحیه‌ها واکنش نشان می‌دهد. با حرکت سیستم به سمت تعادل، هر جزء به غلظت متفاوتی در هر ناحیه می‌رسد و به این ترتیب، جداسازی میان اجزا حاصل می‌شود.

\* سمنان، دانشگاه سمنان، دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز

مدل مرحله تعادلی از لحاظ مفهومی بسیار ساده و از دیدگاه ریاضی کاملاً مرتب است و اساس بسیاری از برنامه‌های تجاری برای شبیه‌سازی ستون‌های تقطیر قرار گرفته است. با استفاده از این مدل، می‌توان بسیاری از خواص سیستم‌های واقعی را شبیه‌سازی کرد.

در پژوهش حاضر، یک ستون تقطیر سینی‌دار برای جداسازی مخلوطی چندجزئی از هیدروکربن‌های سبک با استفاده از روش مرحله تعادلی در گام اول مدل، و در گام بعدی بازطراحی شده است. مدل‌سازی با حل معادلات حاکم در ستون تقطیر به روش نیوتون-رافسون بهبودیافته انجام شده است. برای اطمینان از همگرایی روش در شرایط مختلف و افزایش سرعت حل دستگاه معادلات حاصل، یک الگوی روشمند برای بهبود حدس‌های اولیه ورودی ارائه شده است. مدل‌سازی به کمک یک برنامه کامپیوتری نوشته شده به زبان متلب<sup>۲</sup> انجام شده است. این برنامه کلی است و از قابلیت مدل‌سازی تعادلی هر ستون تقطیری با شرایط مختلف برخوردار است. علاوه بر این، در این برنامه امکان تغییر هدفمند هر یک از پارامترهای عملیاتی مؤثر در عملیات تقطیر برای رسیدن به یک جداسازی مطلوب نیز فراهم است. برای ارزیابی دقت مدل‌سازی انجام شده، نتایج حاصل با نتایج یک کار مشابه مقایسه شده‌اند.

## ۲. جزئیات مدل‌سازی

یک ستون تقطیر به صورت مجموعه‌ای از  $N$  مرحله تعادلی با چگالنده در بالا به عنوان مرحله ۱ و جوش‌آور در پایین به عنوان مرحله  $N$  در نظر گرفته می‌شود. نمایی از یک تک مرحله تعادلی را در شکل (۱) مشاهده می‌کنید. در الگوی مدل‌سازی، مرحله تعادلی چهار نوع معادله برای توصیف هر مرحله نوشته می‌شود که شامل موازنه جرم برای هر جزء، رابطه تعادل فازی برای هر جزء، موازنه انرژی میان جریان‌ها و سرانجام معادلات مجموع کسرهای مولی بخار و مایع هستند. این معادلات به صورت زیر نوشته می‌شوند [۳ و ۱]:

موازنه جرم

$$V_{j+1} y_{i,j+1} + L_{j-1} x_{i,j-1} + F_j z_{i,j} - (V_j + SV_j) y_{i,j} - (L_j + SL_j) x_{i,j} = 0 \quad (1) \quad (c \text{ معادله})$$

تقسیم می‌شوند که عبارتند از: روش‌های تقریبی، روش تعادلی و روش مبتنی بر آهنگ انتقال<sup>۱</sup>. روش‌های تعادلی پرکاربردترین روش مدل‌سازی تقطیر، و بر پایه فرض تعادل میان جریان‌های بخار و مایع خروجی از هر مرحله استوارند [۳]. فرایندهای انتقال واقع در یک ستون تقطیر واقعی ناشی از یک برهم‌کنش پیچیده میان خصوصیات تعادل فازی ترمودینامیکی مخلوط، سرعت‌های انتقال جرم و انرژی درون-فازی و بین فازی و جریان‌های چندفازی‌اند. اما برای مدل‌سازی فرایند، به ساده‌سازی‌هایی نیاز پیدا می‌شود. هر توصیفی از تقطیر با مفهوم مرحله جداسازی آغاز می‌شود. در یک ستون سینی‌دار، هر سینی را می‌توان یک مرحله جداسازی دانست، اما در ستون‌های پر شده هیچ مرز مشخصی برای مراحل وجود ندارد، جز این که مقاطع مشخصی از بستر پر شده به عنوان مراحل جداسازی در نظر گرفته شوند. از لحاظ مفهومی، ساده‌ترین مرحله، مرحله تعادلی یا همان سینی نظری است [۴]. برای چنین مرحله‌ای (که در واقعیت وجود ندارد) فرض می‌شود که جریان‌های بخار و مایع خروجی از هر مرحله با هم در وضعیت تعادل باشند. این فرض دلالت بر این امر دارد که پتانسیل شیمیایی هر جزء در فازهای بخار و مایع و نیز دماها در جریان‌های بخار و مایع با هم برابر باشند. فرض تعادل معادل است با نادیده گرفتن مقاومت‌های انتقال جرم در فازهای مایع و بخار، به طوری که ضرایب انتقال جرم چندان بزرگ باشند که دو فاز با هم به حالت تعادل برسند. بنابراین، می‌توان فرضهای به کار رفته در مدل را به شرح زیر برشمرد [۵]:

- شرایط پایا برقرار باشد.
- از انباشت بخار در ستون صرف‌نظر شود.
- در تمام مراحل جداسازی و نیز در جوش‌آور و چگالنده اختلاط کامل برقرار باشد.
- زمان ماند جریان‌ها در هر سینی آن‌قدر باشد که بخار و مایع خروجی از سینی با هم به تعادل برسند.
- به دلیل برقراری تعادل میان بخار و مایع، دمای بخار و مایع در هر سینی با هم یکسان شوند.
- ستون به خوبی عایق شود، به طوری که اتلاف‌های حرارتی ناچیز باشند.
- بازدهی تمام مراحل ۱۰۰٪ در نظر گرفته شود.

2. MATLAB

1. Rate-Based Method

این مجموعه معادلات باید برای تک تک مراحل ستون نوشته شوند که در این صورت برای یک ستون N مرحله‌ای مجموعاً باید  $N(2c+3)$  معادله را حل کرد. در این میان آنتالپی اجزا و نسبت‌های تعادلی به عنوان متغیر در نظر گرفته نشده‌اند، چرا که مقادیر آن‌ها در هر مرحله از روند حل محاسبه می‌شوند. تعیین نسبت‌های تعادلی بر اساس رفتار تعادل فازی اجزا انجام می‌شود. در پژوهش حاضر، برای تشریح رفتار تعادل فازی اجزا در مخلوط، از مفهوم ضریب فوگاسیته استفاده شده است (الگوی  $\Phi - \Phi$ ). در این الگو نسبت تعادلی از تقسیم ضرایب فوگاسیته فازها به دست می‌آید [۶]:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{\phi_i^L}{\phi_i^V} \quad (5)$$

بنابراین، برای تعیین نسبت تعادلی لازم به تعیین  $\phi_i^L$  و  $\phi_i^V$  است که این کار به کمک معادلات حالت انجام می‌شود. محاسبه آنتالپی یک جزء در مخلوط هم بر اساس معادلات حالت و به کمک رابطه زیر انجام می‌شود [۷]:

$$H - H_0^V = Pv - RT - \int_{\infty}^v \left[ P - T \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_v \right] dv \quad \frac{\partial P}{\partial T} \quad (6)$$

که در این رابطه عبارتهای مربوط به  $P$  و  $\frac{\partial P}{\partial T}$  از معادله حالت جایگزین می‌شوند. در پژوهش حاضر از معادله حالت پنگ-رابینسون [۶] استفاده شده است.

معادلات مدل مرحله تعادلی مجموعه‌ای از معادلات جبری غیرخطی وابسته به هم را پدید می‌آورند و از همین رو باید به کمک روش‌های عددی تکراری حل شوند. روش‌های مختلفی برای حل این مجموعه معادلات ارائه شده‌اند که یکی از متداول‌ترین روش‌های حل، روش نیوتون-رافسون [۸ و ۱] است که معمولاً از آن برای حل مسائل متنوع بدون هیچ محدودیتی استفاده می‌شود. روند همگرایی در این روش بسیار سریع است؛ علاوه بر این، می‌توان از آن برای مدل‌سازی فرایندهای جداسازی محلول‌های غیرایده‌آل هم استفاده کرد. در روش نیوتون-رافسون به جای حل همزمان تعداد  $N(2c+3)$  معادله، سعی می‌شود تا با ایجاد تغییراتی در تعریف متغیرها تعداد معادلات به  $N(2c+1)$  کاهش داده شود. این کار به قرار صفحه بعد انجام می‌شود:

مجموع کسرهای مولی

$$\sum_{i=1}^c x_{i,j} = 1 \quad , \quad \sum_{i=1}^c y_{i,j} = 1 \quad (2) \quad (2 \text{ معادله})$$

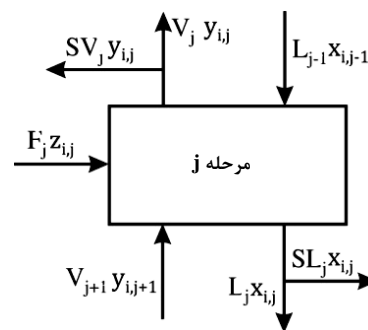
موازنه انرژی

$$V_{j+1}H_{j+1}^V + L_{j-1}H_{j-1}^L + F_jH_j^F - (V_j + SV_j)H_j^V - (L_j + SL_j)H_j^L - Q_j = 0 \quad (3) \quad (1 \text{ معادله})$$

تعادل فازی

$$y_{i,j+1} = K_{i,j} x_{i,j} \quad (4) \quad (c \text{ معادله})$$

که در این روابط  $V_j$  و  $L_j$  دبی جریان‌های داخلی بخار و مایع،  $SV_j$  و  $SL_j$  دبی جریان‌های جانبی بخار و مایع،  $F_j$  دبی خوراک، همگی مربوط به مرحله  $j$  هستند.  $x_{i,j}$  و  $y_{i,j}$  کسر مولی جریان‌های بخار و مایع و  $z_{i,j}$  کسر مولی خوراک، همگی برای جزء  $i$  در مرحله  $j$  هستند.  $H_j^V$ ،  $H_j^L$  و  $H_j^F$  معرف آنتالپی مخلوط برای جریان‌های بخار، مایع و خوراک در مرحله  $j$ ،  $Q_j$  بار حرارتی مرحله  $j$  و  $K_{i,j}$  نسبت تعادلی<sup>۱</sup> جزء  $i$  در مرحله  $j$  هستند. به این ترتیب، برای هر مرحله تعادلی می‌توان  $2c+3$  معادله مستقل نوشت. مجهولهای مربوط به هر مرحله شامل دبی جریان‌های بخار و مایع، کسر مولی‌های اجزا در فازهای بخار و مایع و نیز دمای مرحله به تعداد  $2c+3$  هستند. سایر متغیرها، یعنی متغیرهای مربوط به شرایط خوراک (دبی، ترکیب، دما و فشار)، دبی جریان‌های جانبی بخار و مایع، فشار و بار حرارتی هر مرحله باید به عنوان ورودی ارائه شوند.



شکل ۱. نمای کلی یک تک مرحله تعادلی.

#### 1. Equilibrium Ratio

دبی جزئی اجزا

(۲c+۱ مجهول)

$$X_j = [v_{1,j}, v_{2,j}, \dots, v_{i,j}, \dots, v_{c,j}, T_j, l_{1,j}, l_{2,j}, \dots, l_{i,j}, \dots, l_{c,j}]^T$$

$$v_{i,j} = V_j y_{i,j} \quad , \quad l_{i,j} = L_j x_{i,j} \quad , \quad f_{i,j} = F_j z_{i,j}$$

نسبت جریان‌های جانبی:

$$S_j = SV_j/V_j \quad , \quad s_j = SL_j/L_j$$

(۷)

در روش نیوتون، برای تعیین اصلاحات مربوط به متغیرها در هر تکرار معادله ماتریسی زیر حل می‌شود:

بر این اساس مجموعه معادلات مدل به این شکل درمی‌آیند [۸]:

(۲c+۱ معادله)

$$F_j = [H_j, M_{1,j}, M_{2,j}, \dots, M_{i,j}, \dots, M_{c,j}, E_{1,j}, E_{2,j}, \dots, E_{i,j}, \dots, E_{c,j}]^T$$

موازنه جرم:

$$M_{i,j}: (1 + S_j) v_{i,j} + (1 + s_j) l_{i,j} - v_{i,j+1} - l_{i,j-1} - f_{i,j} = 0$$

(۸) (c معادله)

(۱۴)

که در این رابطه  $\left(\frac{\partial F}{\partial X}\right)$  ماتریس ژاکوبی نام دارد که یک ماتریس  $N \times N$  از بلوک‌های حاوی مشتقات جزئی توابع نسبت به متغیرهاست.

$$E_{i,j}: K_{i,j} l_{i,j} \left( \frac{\sum_{k=1}^c v_{k,j}}{\sum_{k=1}^c l_{k,j}} \right) - v_{i,j} = 0$$

تعالی فازی:

(۹) (c معادله)

اصلاحات تحقق‌یافته در هر مرحله، برای محاسبه مقادیر جدید متغیرها به صورت زیر به کار می‌روند:

موازنه انرژی:

$$H_j: (1 + S_j) H_j^V \sum_{k=1}^c v_{k,j} + (1 + s_j) H_j^L \sum_{k=1}^c l_{k,j} - H_{j+1}^V \sum_{k=1}^c v_{k,j+1} - H_{j-1}^L \sum_{k=1}^c l_{k,j-1} - H_j^F \sum_{k=1}^c f_{k,j} = 0$$

(۱۰) (۱ معادله)

که در اینجا  $t$  عددی بین صفر و یک است و ضریب میرایی<sup>۱</sup> نام دارد که به کمک یک الگوریتم بهینه‌سازی مناسب، مانند روش جستجوی فیبوناتچی [۹] تعیین می‌شود.

به این ترتیب، بردارهای حاوی مجهولات و معادلات به این قرار خواهند بود:

### ۳. بهبود حدس‌های اولیه

یکی از ویژگی‌های روش نیوتون-رافسون وابستگی زیاد آن به حدس‌های اولیه است، به طوری که در صورت مناسب نبودن حدس‌های اولیه ورودی، امکان کندی همگرایی یا حتی واگرا شدن محاسبات هم وجود دارد. در پژوهش حاضر، سعی شده با استفاده از روش جداسازی معادلات<sup>۲</sup> [۸] الگویی برای بهبود حدس‌های اولیه پیشنهاد شود. روند اصلاح پیشنهادی برای حدس‌های اولیه در شکل (۲) ارائه شده است. به کمک این الگو، می‌توان از همگرایی روش حل و سرعت مناسب رسیدن به جواب‌های نهایی اطمینان حاصل کرد.

بردار مجهولات

$$X = [X_1, X_2, \dots, X_j, \dots, X_N]^T$$

(۱۱)

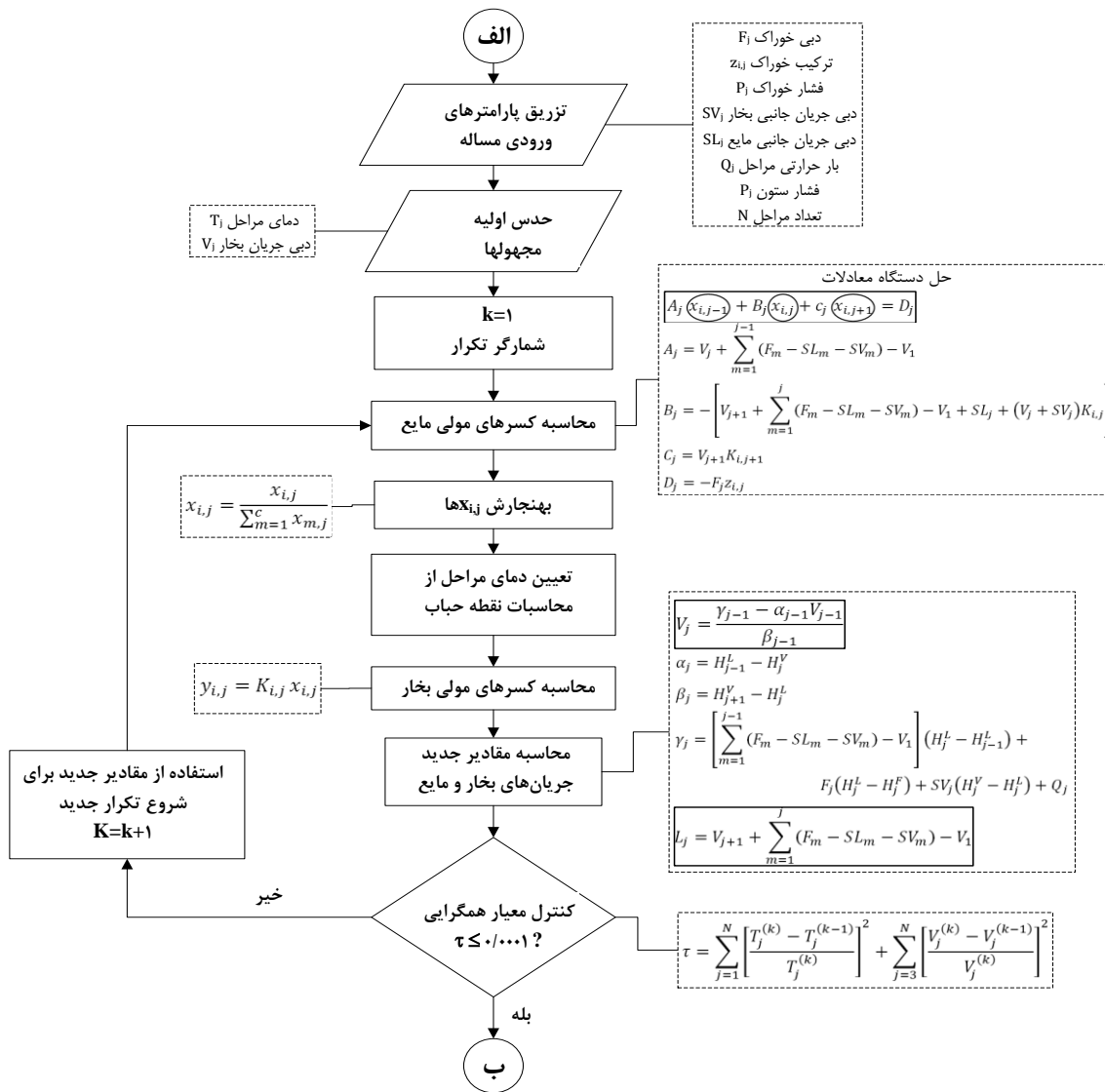
بردار معادلات

$$F = [F_1, F_2, \dots, F_j, \dots, F_N]^T$$

(۱۲)

که در اینجا  $X_j$  بردار مجهولات و  $F_j$  بردار معادلات مربوط به مرحله  $j$  و شامل اعضای سطر بعد هستند:

1. Damping Factor  
2. Tearing Equation Method

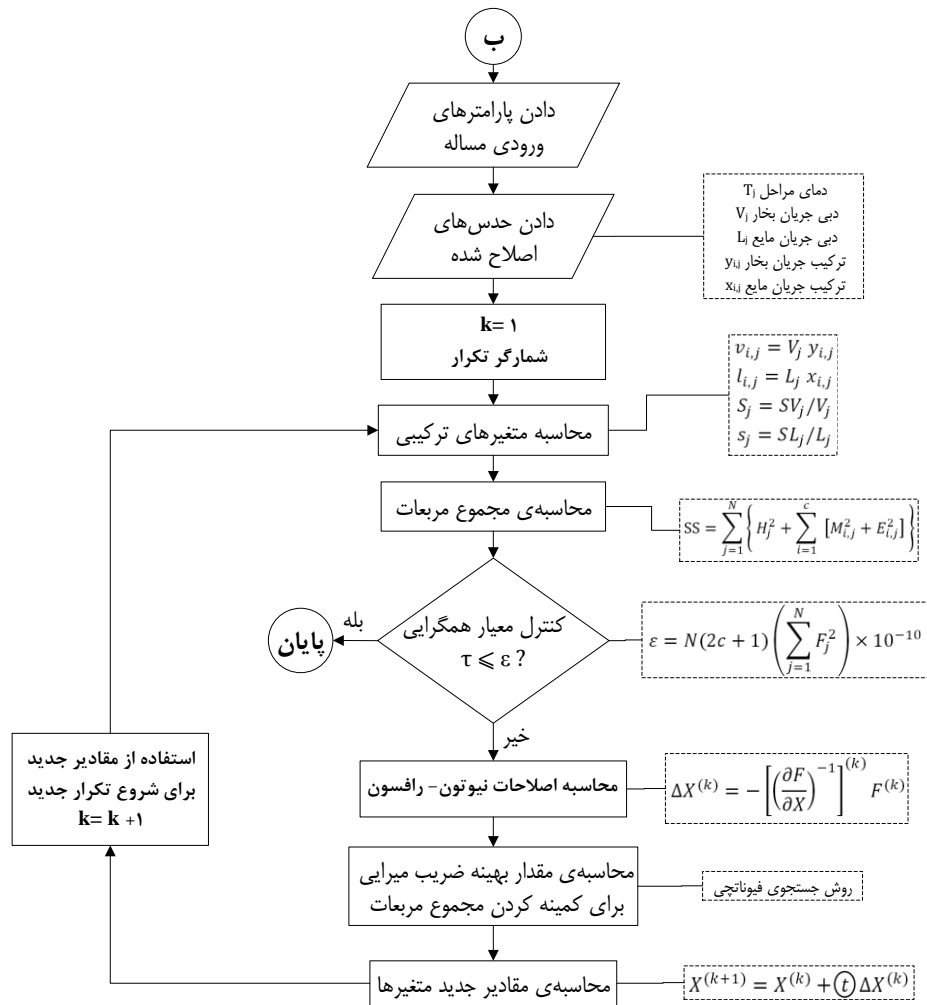


شکل ۲. روند تصحیح حدس‌های اولیه براساس روش جداسازی معادلات.

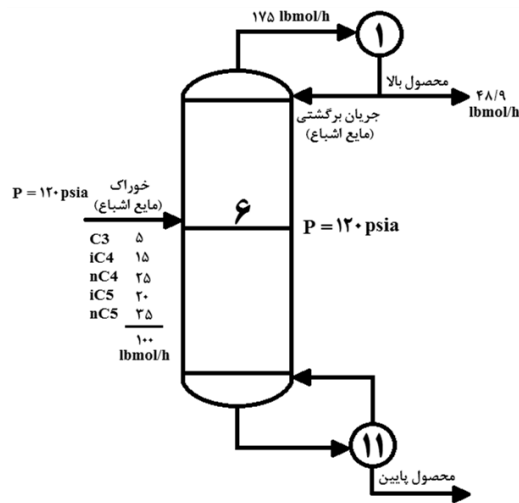
تعادلی با احتساب جوش‌آور جزئی به عنوان یک مرحله تعادلی است. چگالنده ستون به صورت کامل کار می‌کند. مطابق با شرایط طراحی، بیشینه ظرفیت بخار خروجی از بالای ستون (ورودی به چگالنده) معادل ۱/۷۵ برابر دبی خوراک در مبنای مولی است. دبی محصول بالایی هم معادل با ۰/۴۸۹ دبی خوراک در مبنای مولی (۱۲۰ psia) کار می‌کند. خوراک در نقطه حباب خود (مایع اشباع) وارد مرحله ششم می‌شود. اطلاعات مربوط به این ستون تقطیر را در شکل (۴) مشاهده می‌کنید.

الگوی کلی حل از این قرار است که ابتدا الگوریتم (الف) با هدف تصحیح حدس‌های اولیه اجرا، سپس حدس‌های اصلاح شده به عنوان ورودی به الگوریتم نیوتون-رافسون داده می‌شوند تا جواب‌های نهایی حاصل شوند. در شکل (۳) روند نمای حل نیوتون-رافسون را مشاهده می‌کنید.

در پژوهش حاضر یک ستون تقطیر برای جداسازی یک مخلوط چندجزئی به روش تعادلی، ابتدا مدل و سپس بهینه شده است. اجزای کلیدی در مخلوط (اجزایی که هدف ما جداسازی مؤثر و مطلوب آن‌هاست)، نرمال بوتان ( $nC_4$ ) و ایزوپنتان ( $iC_5$ ) هستند، به طوری که باید غلظت  $nC_4$  در محصول پایینی و غلظت  $iC_5$  در محصول بالایی به کمترین حد ممکن برسد. ستون دارای ۱۱ مرحله



شکل ۳. روند نمای حل مجموعه معادلات مدل تعادلی به روش نیوتون-رافسون.

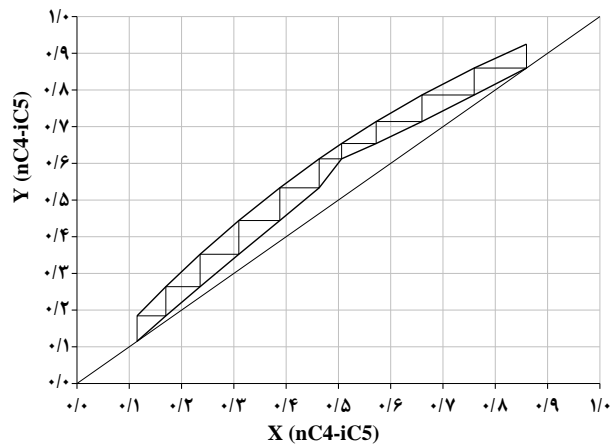


شکل ۴. مشخصات ستون تقطیر چندجزئی اولیه در حالت پایه [۱].

## ۴. نتایج و تحلیل

## ۱.۴ بهینه‌سازی ستون تقطیر

ابتدا، ستون تقطیر موجود به روش مرحله تعادلی مدل‌سازی شده است. برای ارزیابی کیفیت جداسازی اجزای کلیدی یک نمودار مک‌کیب-تیل شبه دوجزئی برای این سیستم چندجزئی به صورت شکل (۵) ترسیم شده است.



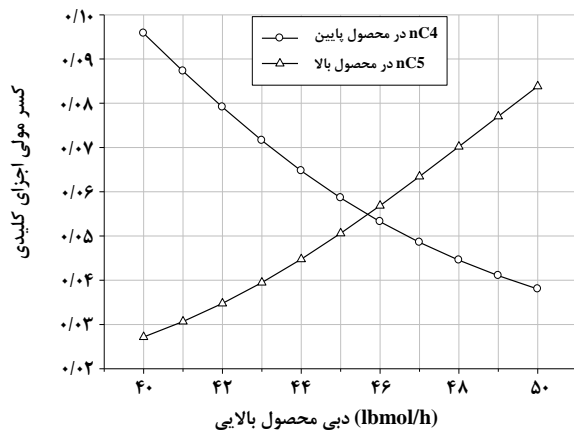
شکل ۵. نمودار مک‌کیب-تیل چندجزئی برای ستون تقطیر در حالت پایه.

در این شکل، منحنی تعادلی بر مبنای کسرهای مولی نسبی جزء کلیدی سبک ترسیم شده است:

$$X = \frac{x_{lk}}{x_{lk} + x_{hk}}, \quad Y = \frac{y_{lk}}{y_{lk} + y_{hk}} \quad (16)$$

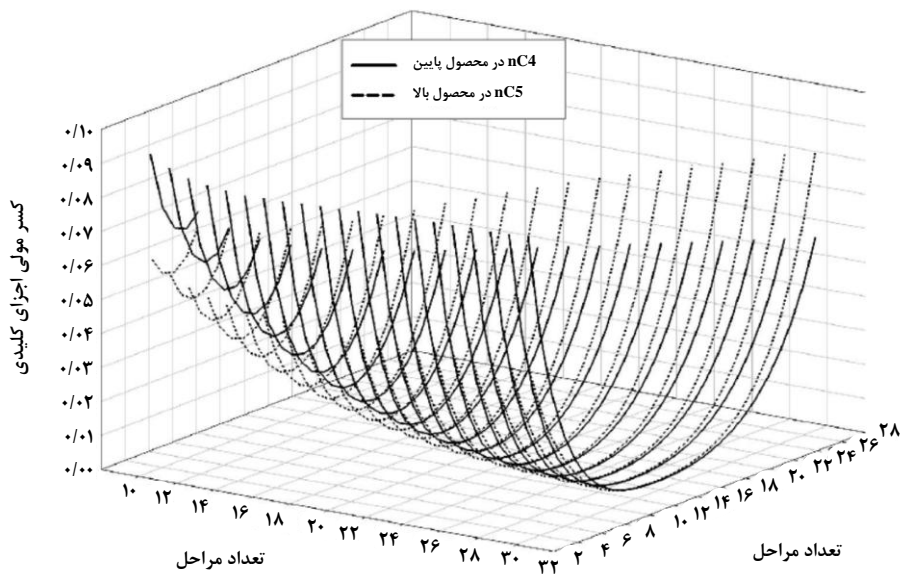
در اینجا، زیرنویس  $lk$  جزء کلیدی سبک ( $nC_4$ ) و  $hk$  جزء کلیدی سنگین ( $iC_5$ ) را بیان می‌کنند. پله‌های ترسیم شده معادل با مراحل تعادلی اند. در شکل، می‌توان مشاهده کرد که خطوط عملیاتی به دلیل بهینه نبودن موقعیت ورود خوراک هموار نیستند. این موضوع که پله‌ها تا نزدیکی گوشه‌های نمودار ( $X = Y = 0$  و  $X = Y = 1$ ) نرسیده‌اند، به معنای جداسازی نامطلوب اجزای کلیدی است. برای بهبود بخشیدن جداسازی در این ستون، باید پارامترهای عملیاتی مؤثر بهینه شوند. تعداد مراحل جداسازی، موقعیت ورود خوراک، نسبت جریان برگشتی و دبی محصول بالایی (یا دبی جریان برگشتی) پارامترهای تأثیرگذار در کیفیت جداسازی به‌شمار می‌آیند. بنابراین، در این بخش سعی می‌شود تا مقادیر بهینه هر یک از این متغیرها با هدف بیشینه‌سازی میزان جداسازی اجزای کلیدی تعیین شود.

در شکل (۶)، روند تغییرات کسرهای مولی  $iC_5$  در محصول بالا و  $nC_4$  در محصول پایین نسبت به تغییر دبی محصول بالایی با ثابت نگه داشتن تمام پارامترهای دیگر نشان داده شده است. همان‌طور که دیده می‌شود، برای پایین بودن کسر مولی جزء کلیدی سنگین ( $iC_5$ ) در بالای ستون، باید دبی محصول بالایی کم باشد، در حالی که پایین بودن کسر مولی جزء کلیدی سبک ( $nC_4$ ) در پایین ستون مستلزم زیاد بودن دبی محصول بالایی است. هر دو مقدار نمی‌توانند به طور همزمان پایین باشند. می‌توان دید که بهترین خلوص محصول وقتی به دست می‌آید که دبی محصول بالایی حدود  $45 \text{ lbmol/h}$  باشد. این نتیجه مورد انتظار است، چرا که مجموع دبی‌های جزء کلیدی سبک و اجزای سبک‌تر از آن در خوراک ورودی برابر همین مقدار است.



شکل ۶. روند تغییرات خلوص اجزای کلیدی در محصولات با دبی محصول بالایی.

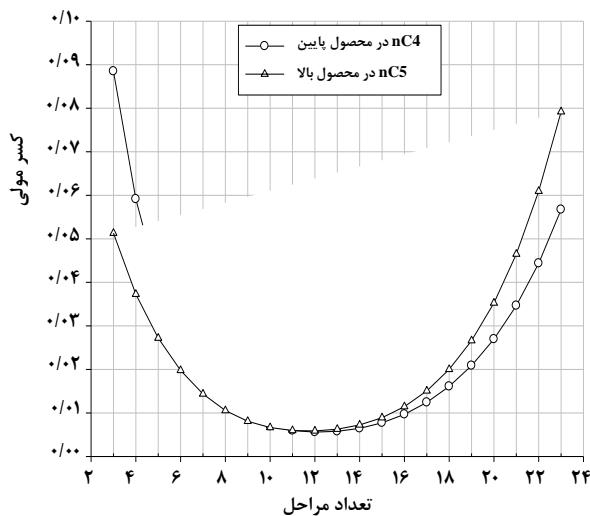
یکی دیگر از مشخصه‌های اساسی در طراحی یک فرایند تقطیر، تعداد کل مراحل جداسازی و موقعیت ورود خوراک به ستون است. بدیهی است که افزایش تعداد مراحل جداسازی به بهبود روند جداسازی کمک خواهد کرد، اما تعیین بهترین تعداد مراحل برای رسیدن به جداسازی مورد نظر بسیار مهم است، زیرا افزایش تعداد مراحل باعث افزایش مستقیم هزینه‌های سرمایه‌گذاری نیز خواهد شد. در شکل (۷)، روند تغییرات خلوص محصولات بالایی و پایینی را با تغییر تعداد مراحل مشاهده می‌کنید. در هر مقدار معین از تعداد مراحل، موقعیت سینی خوراک هم تغییر کرده تا همزمان بتوان بهترین محل برای ورود خوراک را نیز برگزید.



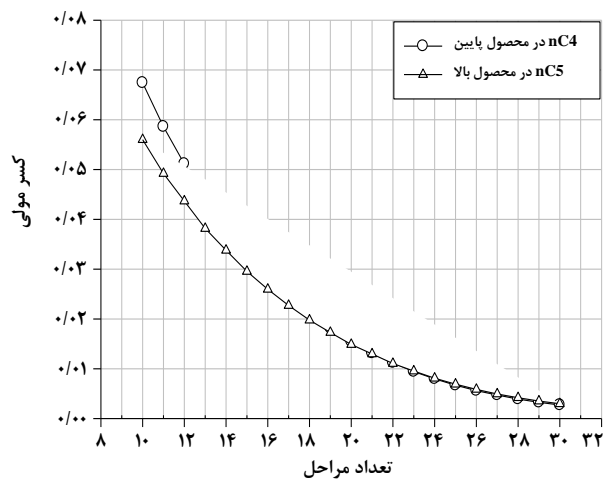
شکل ۷. روند تغییرات خلوص اجزای کلیدی در محصولات با تغییر تعداد سینی‌ها و محل ورود خوراک.

به حالت قبل تغییر چشمگیری نمی‌کند. برای ستونی با ۲۶ مرحله جداسازی، شکل (۸-ب) نشان می‌دهد که مرحله ۱۲ بهترین مکان برای ورود خوراک است.

مکان هندسی نقاط کمینه منحنی‌های شکل (۷) در شکل (۸-الف) ترسیم شده است. می‌توان مشاهده کرد که افزایش تعداد مراحل تا ۲۶ مرحله می‌تواند خلوص محصولات را تا بالاتر از ۹۹٪ افزایش دهد. در تعداد مراحل بالاتر، خلوص محصولات نسبت



(ب)



(الف)

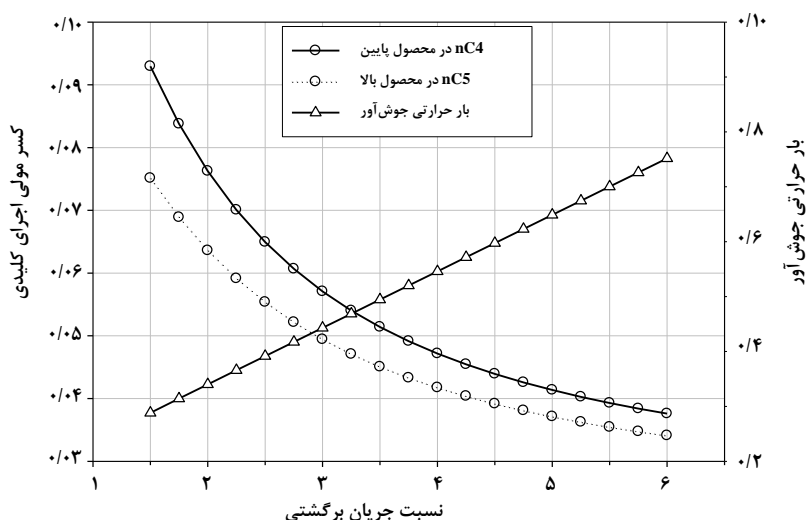
شکل ۸. مشخص کردن بهترین تعداد مراحل جداسازی و مناسب‌ترین محل برای ورود خوراک به ستون: (الف) روند تغییرات خلوص محصولات با افزایش تعداد مراحل، و (ب) تغییرات خلوص محصولات با تغییر محل ورود خوراک برای ۲۶ مرحله.



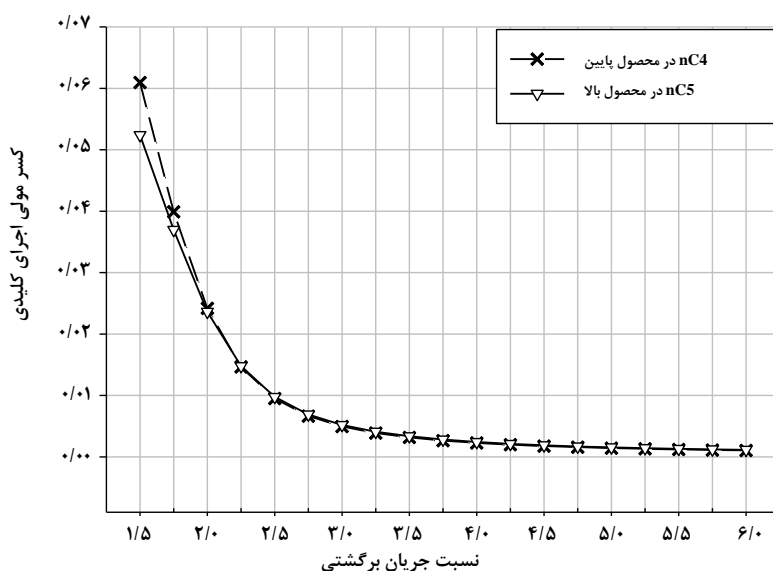
اولیه به واسطه بزرگ تر شدن ستون مورد نیاز برای جا دادن جریان‌های داخلی، افزایش خواهد یافت. تجسم این موضوع را به وضوح در شکل (۹) می‌توان مشاهده کرد.

برای ستون بهینه‌ای شامل ۲۶ مرحله جداسازی با مرحله خوراک ۱۲ و دبی محصول بالایی  $45 \text{ lbmol/h}$ ، در شکل (۱۰) مشاهده می‌شود که بهترین نسبت جریان برگشتی حدود  $3/5$  است. در این شکل، الگوی تغییرات کسرهای مولی اجزای کلیدی در محصولات خروجی برحسب نسبت جریان برگشتی ترسیم شده است.

در شکل (۹) روند تغییرات خلوص اجزای کلیدی در محصولات بالا و پایین برحسب تغییر نسبت جریان برگشتی برای ستونی با ۱۱ مرحله جداسازی و دبی محصول بالایی  $45 \text{ lbmol/h}$  را مشاهده می‌کنید. در حالت پایه (بدون انجام بهینه‌سازی) نسبت جریان برگشتی  $2/58$  بوده است. معلوم می‌شود که افزایش نسبت جریان برگشتی اثر مطلوبی روی بهبود خلوص محصولات دارد، اما این بهبود همراه با افزایش هزینه‌های عملیاتی ناشی از افزایش بار گرمایی جوش‌آور از یک سو، و افزایش هزینه‌های سرمایه‌گذاری



شکل ۹. روند تغییرات خلوص اجزای کلیدی در محصولات با نسبت جریان برگشتی برای حالت پایه.



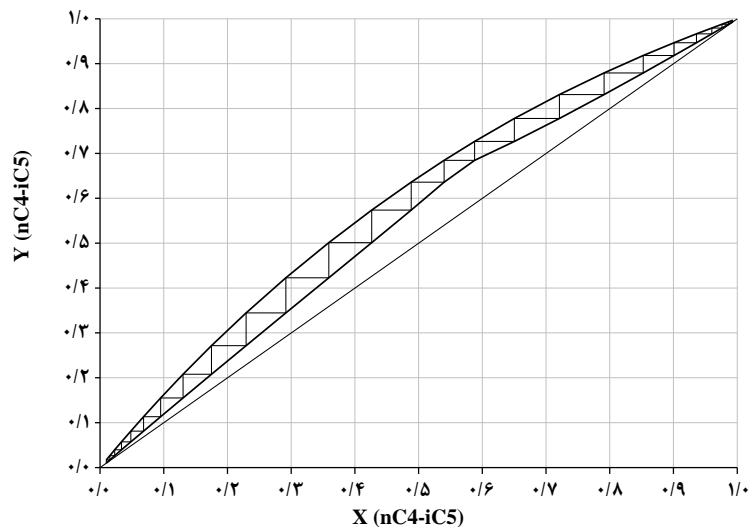
شکل ۱۰. روند تغییرات خلوص اجزای کلیدی در محصولات با نسبت جریان برگشتی برای حالت بهینه.

#### ۲.۴ مدل‌سازی ستون تقطیر بهینه شده

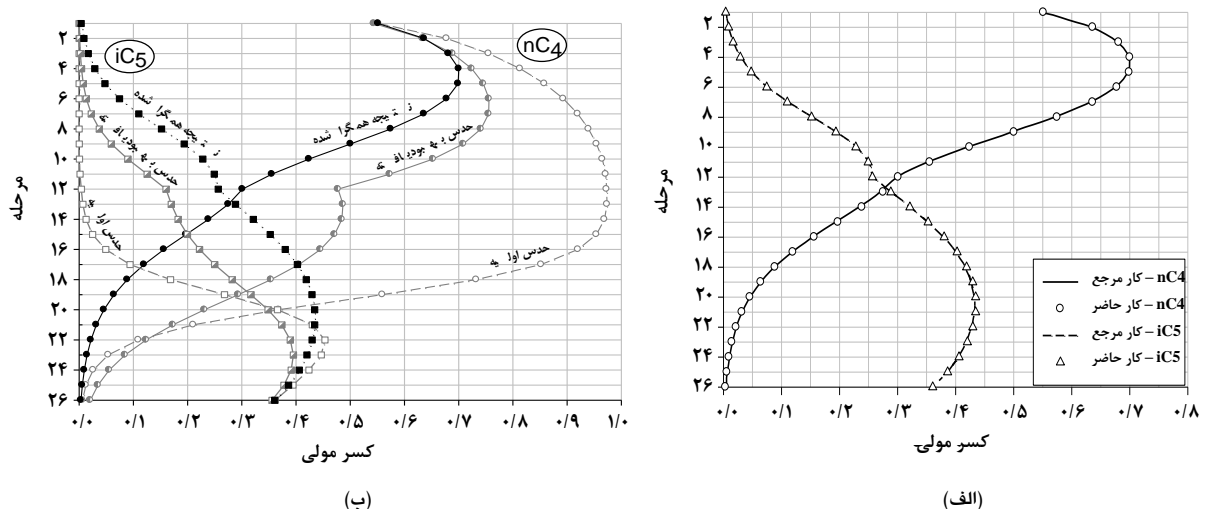
جداسازی و افزایش خلوص محصولات در ستون تقطیر بهینه شده است.

در شکل (۱۲) روند تغییرات کسر مولی اجزای کلیدی در راستای ستون را مشاهده می‌کنید. دیده می‌شود که غلظت  $nC_4$  به‌عنوان جزء کلیدی فرار در بالای ستون افزایش یافته و در پایین ستون بسیار ناچیز است. در مقابل، غلظت جزء کلیدی سنگین یعنی  $iC_5$  در بالای ستون کمینه شده اما در پایین ستون افزایش یافته است.

در این بخش، نتایج مدل‌سازی تعادلی برای ستون بهینه شده شامل ۲۶ مرحله تعادلی با ورود خوراک به مرحله ۱۲ و دبی محصول بالایی  $45 \text{ lbmol/h}$  و نسبت جریان برگشتی  $3/33$  ارائه می‌شود. برای ارزیابی کیفیت جداسازی اجزای کلیدی در این ستون نمودار مک‌کیب-تیل شبه دو جزئی در شکل (۱۱) ترسیم شده است. می‌توان دید که خطوط عملیاتی هموار و پله‌ها تا نزدیکی گوشه‌های نمودار کشیده شده‌اند که این به معنای بهبود چشمگیر کیفیت



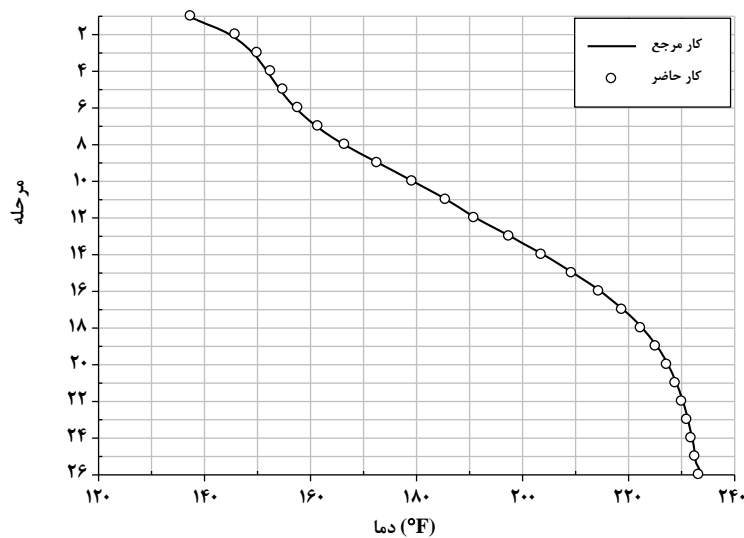
شکل ۱۱. نمودار مک‌کیب-تیل چندجزئی برای ستون تقطیر بهینه شده.



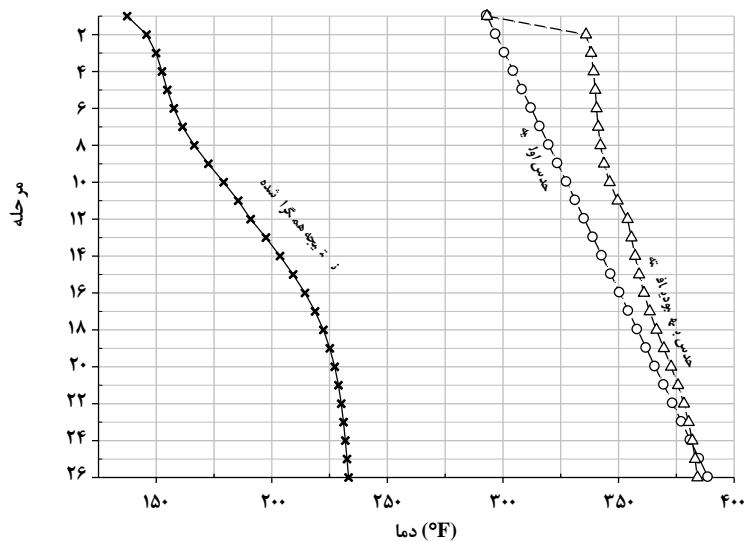
شکل ۱۲. الگوی تغییرات کسر مولی اجزای کلیدی برای فاز مایع در راستای ستون: (الف) مقایسه تحقیق حاضر با کار مرجع [۱]; (ب) نتایج در سه حالت حدس اولیه، حدس تصحیح شده و همگرا شده.

در شکل (۱۳) نحوه تغییرات دمای مراحل از بالا تا پایین ستون نمایش داده شده است. مطابق انتظار، دمای ستون به طرف پایین و نزدیک شدن به جوش آور افزایش می‌یابد. از آنجا که دما در پایین بیشترین مقدار و در بالا کمترین مقدار است، بنابراین اجزای سنگین با دمای جوش بالاتر و فراریت کمتر در انتهای ستون و اجزای سبک با دمای جوش پایین‌تر و فراریت بیشتر در بالای ستون تجمع بیشتری می‌یابند.

در شکل (۱۲-الف)، نتایج شبیه‌سازی تحقیق حاضر با نتایج کار مرجع [۱] مقایسه شده است که انطباق کاملی میان این دو کار دیده می‌شود. در شکل (۱۲-ب) هم تأثیر مثبت تصحیح حدس‌های اولیه با مقایسه میان سه الگوی تغییرات در حالت‌های حدس اولیه، حدس بهبودیافته، و نتیجه همگرا شده مشاهده می‌شود. همان‌طور که مشخص است، الگوی تغییرات با اعمال اصلاحات روی حدس‌های اولیه به الگوی نهایی نزدیک شده است.



(الف)



(ب)

شکل ۱۳. الگوی تغییرات دما در راستای ستون تقطیر: (الف) مقایسه پژوهش حاضر و کار مرجع [۱]; (ب) نتایج در سه حالت حدس اولیه، حدس تصحیح شده، و همگرا شده.

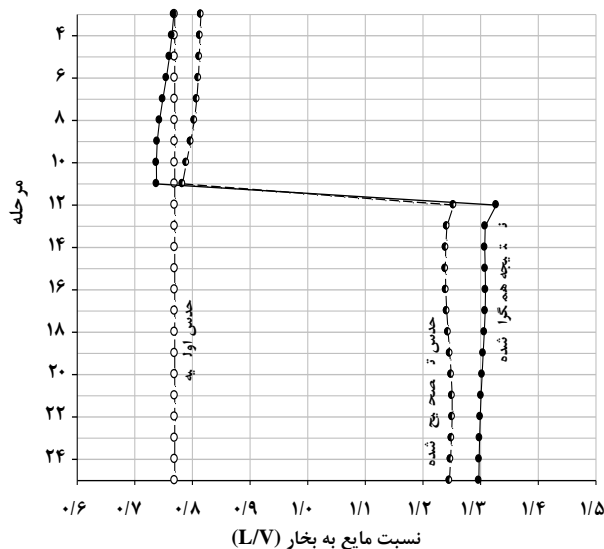
مایع در بخش غنی‌سازی به بخار تبدیل و به بخار بالارونده اضافه می‌شود. در شکل (۱۴-الف) نتایج این کار مرجع [۱] هم ارائه شده است. اختلاف کمی میان نتایج این دو کار دیده می‌شود که این می‌تواند ناشی از تفاوت شرط همگرایی در دو تحقیق باشد. در شکل (۱۴-ب) تغییرات نسبت مایع به بخار در ستون را برای سه حالت حدس اولیه، حدس تصحیح شده، و نتیجه همگرا شده مشاهده می‌کنید. حدس‌های اولیه برای دبی جریان‌های داخلی بخار و مایع در تمام مراحل مشابه در نظر گرفته شده‌اند. به طور مشخص دیده می‌شود که تصحیح این حدس‌ها ما را به پاسخ نهایی نزدیک کرده و این امر همگرایی روش حل را تضمین می‌کند.

#### ۳.۴ ارزیابی بهبود روش حل

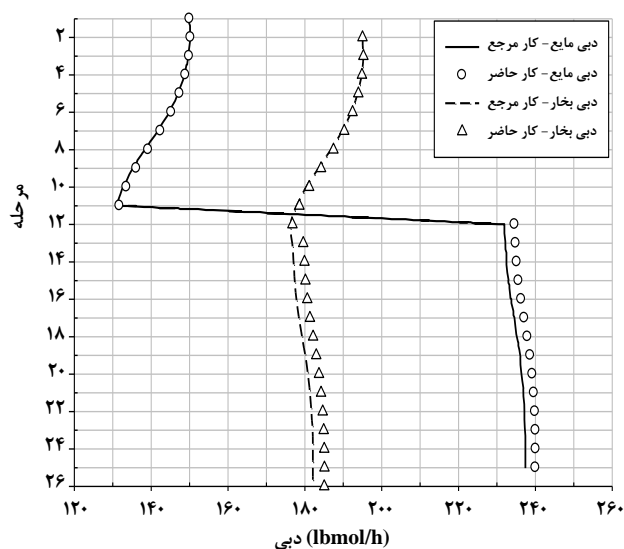
روش نیوتون-رافسون برای حل دستگاه معادلات غیرخطی روشی بسیار کارآمد و سریع محسوب می‌شود؛ اما توفیق این روش تا حدود زیادی به حدس‌های اولیه ورودی وابسته است، به طوری که نامناسب بودن حدس‌های اولیه می‌تواند منجر به کندی همگرایی یا حتی واگرایی روند حل شود.

برای ارزیابی دقت نتایج، الگوی تغییرات حاصل از کار مرجع [۱] هم در شکل (۱۳-الف) ترسیم شده است که مشاهده می‌شود نتایج حاصل کاملاً بر این الگو انطباق دارد. الگوهای مربوط به حدس اولیه، حدس تصحیح شده و نتیجه همگرا شده در شکل (۱۳-ب) در کنار هم نشان داده شده‌اند. حدس اولیه دمای مراحل در راستای ستون به صورت یک الگوی خطی میان بالا و پایین زده شده است، به طوری که دمای بالای ستون معادل با دمای اشباع سبک‌ترین جزء، و دمای پایین ستون برابر با دمای اشباع سنگین‌ترین جزء حدس زده شده است. همان‌طور که دیده می‌شود، این الگوی خطی اولیه تا حدی بهبود یافته و در نهایت به الگوی نهایی شده انجامیده است. به روشنی می‌توان دید که الگوی نهایی کاملاً با الگوی خطی اولیه متفاوت است.

در شکل (۱۴) تغییرات دبی جریان‌های داخلی مایع و بخار در ستون را مشاهده می‌کنید. می‌توان دید که در مرحله ورود خوراک (مرحله ۱۲) یک تغییر ناگهانی در دبی مایع پدید آمده است که این امر به خاطر مایع بودن خوراک است. دبی جریان بخار در بخش تهی‌سازی تقریباً بدون تغییر است، اما در بخش غنی‌سازی تا حدودی مقدار آن افزایش می‌یابد، چون بخشی از جریان رو به پایین

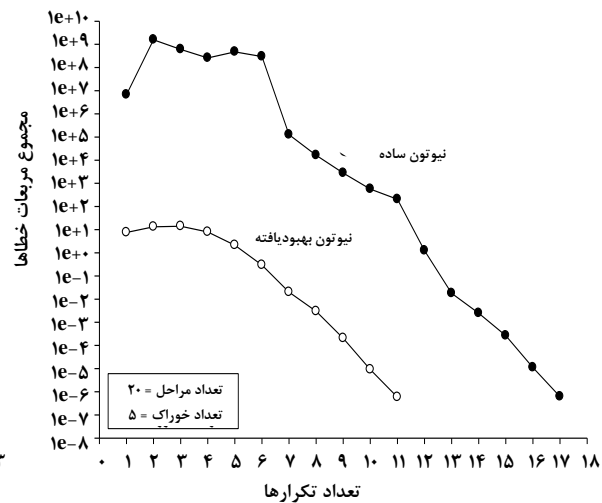
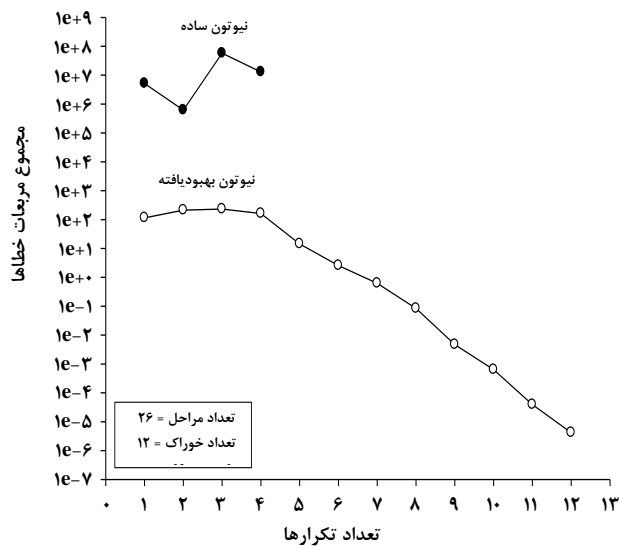
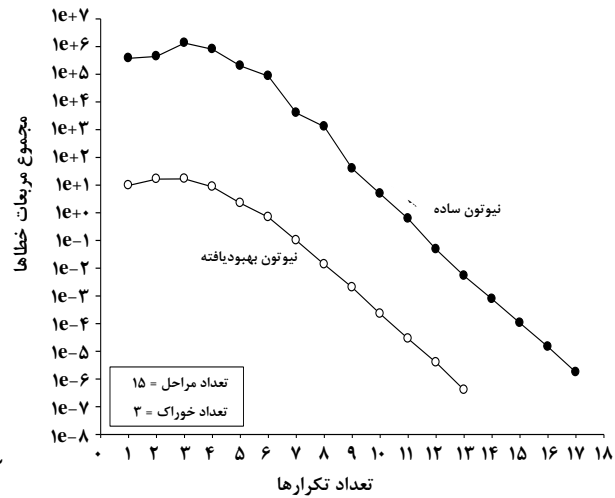
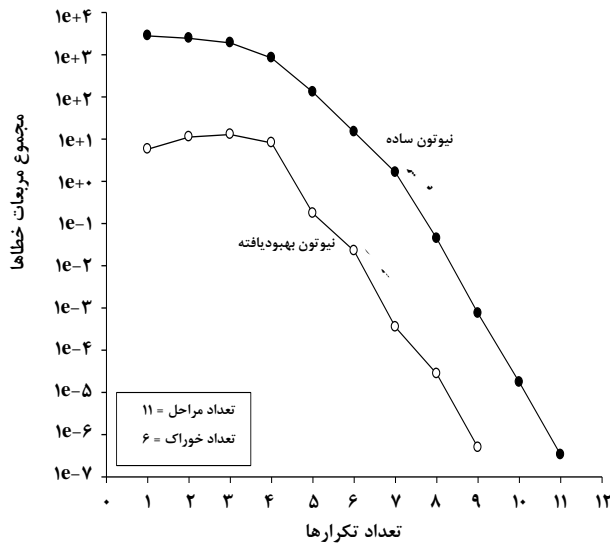


(ب)



(الف)

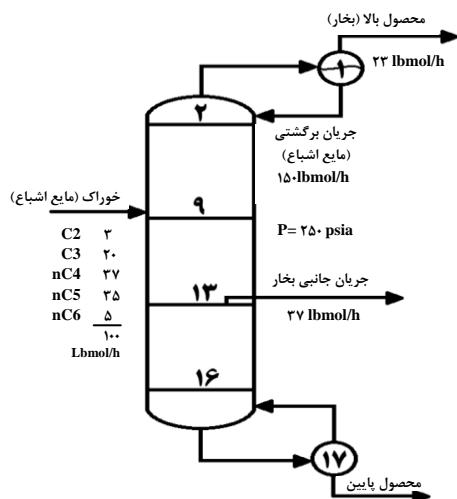
شکل ۱۴. روند تغییرات جریان‌های داخلی مایع و بخار در راستای ستون: (الف) مقایسه کار حاضر و کار مرجع [۱]؛ (ب) نتایج در سه حالت حدس اولیه، حدس تصحیح شده و همگرا شده.



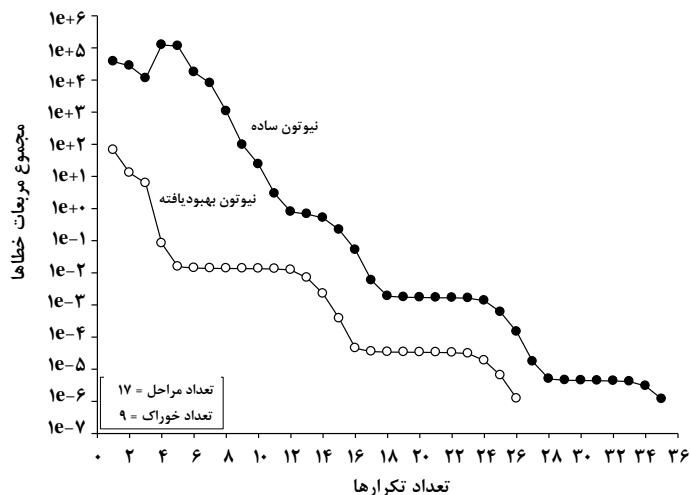
شکل ۱۵. مقایسه روند همگرایی روش‌های نیوتون ساده و نیوتون بهبود یافته برای اجراهای مختلف.

است. علاوه بر این، مشاهده می‌شود که در برخی اجراها، روش نیوتون ساده واگرا شده است. برای اطمینان از کارامدی الگوی ارائه شده، مدل‌سازی روی یک ستون دیگر هم انجام شده است. در شکل (۱۶) مشخصات ستون یادشده همراه با نتایج مدل‌سازی انجام شده را ارائه می‌کند. می‌توان دید که نتیجه‌گیری قبلی در اینجا هم برقرار و کارایی الگوی پیشنهادی اثبات شده است.

به همین جهت، در کار حاضر سعی شده تا برای رفع این معضل ابتدا حدس‌های اولیه بهبود یابند و سپس این مقادیر به عنوان ورودی به روش نیوتون-رافسون داده شوند. در شکل (۱۵) مقایسه‌ای میان روش نیوتون ساده و روش نیوتون بهبود یافته برای مراحل مختلف اجرا انجام شده است. همان طور که دیده می‌شود، در اغلب موارد سرعت همگرایی روش نیوتون بهبود یافته بهتر بوده



(ب)



(الف)

شکل ۱۶. مقایسه روند همگرایی روش‌های نیوتون ساده و نیوتون بهبودیافته برای یک ستون تقطیر دیگر (الف) مقایسه روند همگرایی (ب) مشخصات ستون تقطیر مدل شده [۱].

## مراجع

- [1] Maloney, J. O., "Perry's chemical engineers handbook", McGraw-Hill, New York, 8th edition, p. 13-30-13-55, (2007).
- [2] Wesselingh, J. A., "Non-equilibrium modeling of distillation", Trans IChemE, vol. 75, p. 529-538, (1997).
- [3] Gunorubon, J., Diepriye, O., "Simulation of a multi-component crude distillation column", American journal of science and industrial research, Vol. 4, p. 366-377, (2013).
- [4] Taylor, R., Krishna, R., Kooijman, H., "Real-world modeling of distillation", CEPmagazine, Reactions and Separations, p. 28-39, (2003).
- [5] Zamel, M., "Mathematical modeling and simulation for production of MTBE by reactive distillation", Master of science thesis, Iraq University of technology, p. 46-64, (2009).
- [6] Danesh, A., "PVT and phase behavior petroleum reservoir fluids", ELSEVIER, Amsterdam, 3rd impression, p. 167-179, (2003).
- [7] Poling, B. E., Prausnitz, J. M., O'Connell, J. P., "The properties of gases & liquids", McGraw-Hill, New York, 5th edition, p. A.5-A60, (2001).
- [8] Henley, E. J., Seader, J. D., "Equilibrium-stage separation operations in chemical engineering", John Wiley, New York, 1st edition, p. 556-623, (1981).
- [9] Rao, S. S., "Engineering optimization, theory and practice", John Wiley, New York, 4th edition, p. 263-267, (2009).

## ۵. نتیجه‌گیری کلی

در این تحقیق از روش مرحله تعادلی برای مدل‌سازی و طراحی یک ستون تقطیر چندجزئی استفاده شد. برای حل معادلات مدل، روش نیوتون-رافسون به کار گرفته شد که یک روش کارآمد برای حل مجموعه معادلات غیرخطی وابسته است. برای رفع معضل حساسیت روش نیوتون به حدس‌های اولیه پیشنهاد شد که ابتدا حدس‌های اولیه از طریق یک الگوریتم، تصحیح، و سپس به عنوان ورودی به روش حل اصلی داده شوند. نتایج حل عددی نشان دادند که این کار باعث اطمینان از همگرایی روش حل نیوتون و نیز افزایش سرعت رسیدن به جواب‌های نهایی می‌شود. بر اساس این الگوی پیشنهادی، ستون تقطیر موجود بازطراحی و مشخص شد که برای جداسازی مؤثر و مطلوب مخلوط داده شده ستونی شامل ۲۶ مرحله با ورود خوراک به مرحله ۱۲ با دبی ۴۵ lbmol/h برای محصول بالا و نسبت جریان برگشتی ۳/۳۳ مناسب است. مقایسه نتایج مدل‌سازی پژوهش حاضر با یک کار مرجع، صحت نتایج به دست آمده را تأیید کرد.