



## Simulation of Fouling Phenomenon in Low Density Polyethylene Reactor in Kurdistan Petrochemical Company

S, Karimi<sup>1</sup>, R. Beigzadeh<sup>2\*</sup>

1- M. Sc. in Chemical Engineering, University of Kurdistan

2- Associate Professor of Chemical Engineering, University of Kurdistan

Email addresses: r.beigzadeh@uok.ac.ir

### Abstract

Low-density polyethylene is a subset of polyethylene that is mainly used in the plastics industry. These polymers are formed at high pressures and temperatures using a radical reaction. The fouling phenomenon is the result of the thermodynamic phase separation of polymer and ethylene. This phase separation occurs in the wall area (wall close to the cooling flow) of the tubular reactor, which reduces heat transfer to the reactor jacket, reducing production and in critical cases dangerous decomposition of ethylene. The purpose of this study is to simulate the phenomenon of fouling and its effects on the temperature and pressure of the reactor based on the heat transfer problems. The solved mathematical model is formed based on heat transfer equations to solve the computational fluid dynamics equations which are used to calculate the phase equilibrium data for pressure and temperature: The obtained results show that by increasing the thickness of the fouling, the heat transfer rate decreases. The operating model was used based on the low-density polyethylene with a grade of 2420H. Based on the model, it was found that with increasing the thickness of fouling from 0.1 to 1.2 mm, the outlet temperature of the reactor increases, but does not have a significant effect on the pressure drop inside the reactor: Moreover, 10 °C increase in reaction temperature caused the volume percentage of the second phase (fouling) is reduced from 0.1833 to 0.1818 mm.

Received: 28 November 2021

Accepted: 26 January 2022

Page Number: 52-66

### Keywords:

Low Density Polyethylene,  
Fouling,  
Computational Fluid  
Dynamics,  
Cooling Flow

### Please Cite this Article Using:

Karimi,S., Beigzadeh, R., "Simulation of Fouling Phenomenon in Low Density Polyethylene Reactor in Kurdistan Petrochemical Company", Iranian Chemical Engineering Journal, Vol. 22, No. 128, pp. 52-66, In Persian, (2023).



DOI: 10.22034/ijche.2022.317156.1157



DOR: 20.1001.1.17355400.1402.22.128.3.6



This journal is an open access journal licensed under an Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International license (CC BY-NC-ND 4.0).

## شبهه سازی پدیده رسوب گرفتگی در رآکتور پلی اتیلن سبک پتروشیمی کردستان

سجاد کریمی<sup>۱</sup>، رضا بیگزاده<sup>۲\*</sup>

۱- کارشناس ارشد مهندسی شیمی، دانشگاه کردستان

۲- دانشیار مهندسی شیمی، دانشگاه کردستان

پیام نگار: r.beigzadeh@uok.ac.ir

### چکیده

پلی اتیلن سبک بسیاری از خانواده پلی اتیلن هاست که به طور عمده در صنعت پلاستیک کاربرد دارد؛ این بسپارها در فشارها و دماهای بالا با استفاده از واکنش رادیکالی تشکیل می شوند. پدیده رسوب گرفتگی ناشی از جداسازی فاز ترمودینامیکی بسپار و اتیلن است که این جداسازی فاز در منطقه دیواره رآکتور لوله ای (نزدیک به جریان خنک کننده) رخ می دهد. رسوب گرفتگی باعث کاهش انتقال حرارت به سیال درون رآکتور و موجب کاهش تولید و در موارد بحرانی باعث تجزیه خطرناک اتیلن می شود. هدف این پژوهش شبهه سازی پدیده رسوب و تأثیرهای آن بر روی دما و فشار خروجی رآکتور بر پایه مسائل انتقال حرارت است. مدل ریاضی حل شده بر اساس معادلات انتقال حرارت شکل گرفته و برای محاسبه داده های تعادل فازی با توجه به فشار و دما از معادلات حالت SRK استفاده شده است. در پایان با بهره گیری از شگرد دینامیک سیالات محاسباتی، داده های به دست آمده حل و شبهه سازی شد. نتایج به دست آمده بیانگر نحوه تأثیر مشخصات رسوب ایجاد شده بر روی عملکرد حرارتی رآکتور است. مدل انجام شده در شرایط عملیاتی برای پلی اتیلن سبک با درجه  $H$  ۲۴۲۰ تحت لیسانس شرکت بازل انجام شده است. بر اساس نتایج مدل سازی مشخص شد که با افزایش ضخامت رسوب از ۰/۱ تا ۱/۲ میلی متر، دمای خروجی رآکتور افزایش پیدا می کند؛ اما تأثیر چشمگیری بر میزان افت فشار درون رآکتور ندارد. هم چنین افزایش ۱۰ درجه ای دمای واکنش باعث شد که درصد حجمی فاز دوم (رسوب) از ۰/۱۸۳۳ به ۰/۱۸۱۸ میلی متر کاهش داده شود.

### کلیدواژه ها:

پلی اتیلن سبک،  
پدیده رسوب گرفتگی،  
دینامیک سیالات محاسباتی،  
جریان خنک کننده،  
درصد حجمی

\* کردستان، دانشگاه کردستان، گروه مهندسی شیمی

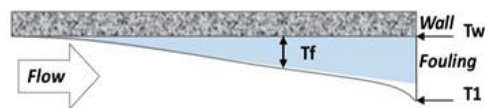
استناد به مقاله:

کریمی، س.، بیگزاده، ر.، "شبهه سازی پدیده رسوب گرفتگی در رآکتور پلی اتیلن سبک پتروشیمی کردستان"، نشریه مهندسی شیمی ایران، سال بیست و دوم، شماره ۱۲۸، صص. ۶۶-۵۲، (۱۴۰۲).

۱. مقدمه

پلی اتیلن یا پلی اتن از ساده‌ترین و ارزان‌ترین بسپارها به شمار می‌رود؛ پلی اتیلن یک جامد مومی شکل و غیرفعال است که از فرایند بسپاری شدن اتیلن حاصل می‌شود. مولکول اتیلن یک بند دوگانه دارد و در این فرایند بند دوگانه هریک از مونومرها شکسته و یک پیوند ساده بین اتم‌های کربن ایجاد می‌شود. محصول ایجادشده یک درشت مولکول است. زمانی که به جای اتم هیدروژن در مونومر اتیلن یک زنجیر خیلی بلند از اتیلن قرار گیرد و این زنجیره طویل در ادامه به زنجیره‌های دیگر بسپاری متصل شود، تشکیل بسپاری با چگالی کم می‌دهد که به آن پلی اتیلن سبک می‌گویند [۱]. پلی اتیلن سبک یکی از انواع مختلف پلی اتیلن‌هاست که در رآکتورهای لوله‌ای و اتوکلاو در فشار و دمای بالا، با استفاده از واکنش‌های رادیکالی تولید می‌شود و دارای چگالی در محدوده  $0.91 \frac{gr}{cm^3} - 0.925 \frac{gr}{cm^3}$  است.

پدیده رسوب گرفتگی در رآکتورهای لوله‌ای تولید پلی اتیلن سبک به علت تجمع نامطلوب فاز غنی از بسپار در دیواره نزدیک به جریان خنک‌کننده اتفاق می‌افتد و باعث می‌شود که میزان انتقال حرارت از جریان گرم درون رآکتور به سیال خنک‌کننده کاهش پیدا کند و نیز موجب کاهش تولید و در شرایط فوق بحرانی تجزیه اتیلن می‌شود. در شکل (۱) نمایی از لایه رسوب نشان داده شده است.



شکل ۱. طرحواره لایه رسوب در امتداد دیواره لوله رآکتور [۲].

Figure 1. Schematic of the fouling layer along the wall of the reactor tube [2].

مدت‌هاست که دینامیک سیالات محاسباتی به ابزاری تبدیل شده که برای پیش‌بینی دینامیک سیال، انتقال حرارت و جرم، هم‌چنین سرعت‌بخشیدن به طراحی تجهیزات و به‌دست‌آوردن درک اساسی از روند فرایندها و جریان سیالات در صنایع مختلف به کار می‌رود [۳، ۴]؛ بنابراین، دینامیک سیالات محاسباتی می‌تواند در راستای طراحی و تجزیه و تحلیل جریان‌های درون رآکتورهای شیمیایی استفاده شود.

پژوهش ارلیش و مورتیمر [۵] جزء نخستین مطالعات در زمینه تعادل فازی در رابطه با واکنش رادیکالی بسپاری شدن اتیلن بود؛ آنان با بررسی شرایط فرایندی در فشار و دمای معمولی حدود ۴۲۳ کلوین و ۵۰ پاسکال، پی بردند که سامانه به‌صورت همگن و تک‌فاز است. آگراوال و هان [۶] اولین پژوهش مدل‌سازی را برای رآکتورهای فشار بالای تولید پلی اتیلن سبک انجام دادند. آن‌ها با استفاده از روش تحلیلی دیفرانسیل غیرخطی با در نظر گرفتن اختلاط محوری در شرایط پایدار، ارتباط و تأثیرپذیری آن بر روی توزیع وزن مولکولی تشریح کردند. چن و همکاران [۷] مدلی ارائه دادند که در آن واکنش در حالت تک‌فاز قرار داشت. آنان به بررسی خصوصیات سینتیکی در شرایطی پرداختند که لایه رسوب در جداره رآکتور (Fouling) مد نظر قرار داده نشده بود. جرجیس و همکاران [۸] محاسبه تعادل فازی مایع و بخار را در دما و فشار بالا با استفاده از معادلات حالت پنگ-رابینسون و معادله واندروالس و بدون در نظر گرفتن تأثیرات دما و غلظت بر شاخص‌های برهم‌کنش انجام دادند. تسای و فاکس [۹] توسط شگرد دینامیک سیالات محاسباتی فرایند پلیمریزاسیون با فشار بالا را در رآکتور لوله‌ای را شبیه‌سازی کردند. مطابق نتایج مدل‌سازی آن‌ها، برخی شرایط، شاخص‌های عملیاتی و هندسه رآکتور تأثیر زیادی روی میزان تبدیل مونومر خواهد داشت.

رد و همکاران [۱۰] با استفاده از مدل‌های قبلی با بهینه‌سازی شاخص‌های عملیاتی و اثر آن شاخص‌ها بر تبدیل مونومر، مدل‌سازی دیگری انجام دادند. لاکون زا و همکاران [۱۱] با استفاده از مدل‌سازی ریاضی گزارش دادند که ضریب انتقال حرارت تأثیر بسیار زیادی در رفتار پلی اتیلن سبک و فرایند تولید دارد. آن‌ها یک مدل پایدار ریاضی برای محاسبه ضریب کلی انتقال حرارت ارائه دادند. در ادامه همین کارها، ژو و همکاران [۱۲] از شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی برای مدل‌سازی یک رآکتور لوله‌ای دوبعدی و یک رآکتور اتوکلاو استفاده کردند. بوچلی و همکاران [۱۳، ۱۴، ۲] برای یک رآکتور لوله‌ای مقدار رسوب و مدت‌زمان رسوب‌زدایی را با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی مدل کردند. آن‌ها تشکیل لایه رسوب را شکل گرفتن دو فاز گاز اتیلن و پلی اتیلن در نظر گرفتند و سپس به محاسبه و بررسی شرایط تعادل فازی پرداختند. آن‌ها دریافتند که مقداری از فاز غنی از پلیمر به‌صورت رسوب در

دیواره رآکتور، فازی جدا تشکیل می‌دهد و این امر عامل اصلی کاهش میزان انتقال حرارت درون رآکتور به جریان خنک‌کننده است. نگي و همکاران [۱۵] با استفاده از داده‌های مقالات پیشین، محدوده فازی را برای پلی اتیلن سبک خطی پیش‌بینی کردند. وانگ [۱۶] برای محاسبات تعادل فازی از قانون اختلاط اصلاح‌شده استفاده کرد، او با بهره‌گرفتن از معادلات حالت و قانون اختلاط اصلاح‌شده، تعادل فازی بخار و مایع را برای سامانه سپار و حلال و ضرایب فعالیت حلال را در ۲۸ محلول پلیمر در دما و فشارهای مختلف حساب کرد که نتایج به‌دست‌آمده دارای درصد خطای کم و قابل قبولی بود. کازی و همکاران [۱۷] فرایند رسوب را به‌طور کلی محصول دو فرایند فرعی و موازی، یعنی فرایند رسوب‌گذاری و حذف در نظر گرفتند و محدوده رسوب‌گذاری و عدم رسوب را در دماها و سرعت‌های مختلف حساب کردند. عزمی و عزیز [۱۸] یک رآکتور لوله‌ای تولید پلی اتیلن با چگالی پایین (LDPE) را با استفاده از نرم‌افزار MATLAB به‌منظور پیش‌بینی مشخصات دما و درصد تبدیل مونومر در طول رآکتور لوله‌ای شبیه‌سازی کردند. آن‌ها دما و فشار ورودی و شاخص‌های مختلف را برای تجزیه و تحلیل بهره‌وری و افزایش تولید در رآکتور بررسی کردند.

باربوسا و همکاران [۱۹] به بررسی شرایط و نحوه تولید رسوب در رآکتورهای لوله‌ای تولید پلی اتیلن سبک پرداختند که در آن میزان کیفیت و کمیت محصول با استفاده از سامانه کنترل نوری تجزیه و تحلیل شد. هولن و همکاران [۲۰] به بررسی رسوب‌گذاری و بیان آن به‌عنوان یک مشکل بزرگ حل‌نشده در انتقال حرارت پرداختند و روش‌های رسوب‌گذاری و رسوب‌زدایی را که برگرفته از مطالعات پیشین و آزمایشگاهی بود بررسی و بیان کردند که رسوب‌گذاری می‌تواند ناشی از چندین واکنش از جمله بسپاری شدن، اکسایش یا تجزیه حرارتی باشد.

در واکنش‌های گرمازا هرچه دمای شروع واکنش پایین تر نگه داشته شود و بتوان کمینه دمایی را پایین آورد، میزان تولید بالاتر خواهد رفت. به همین دلیل جلوگیری از ایجاد رسوب برای انتقال حرارت مناسب، همواره یکی از اولویت‌های واحدهای تولید پلی اتیلن سبک است. در این تحقیق پدیده رسوب‌گرفتگی در رآکتور لوله‌ای فشار بالای تولید پلی اتیلن سبک پتروشیمی کردستان که دارای راندمان تولید تقریباً ۳۰ درصدی است، مطالعه شده است. ارائه مدلی با دقت

مناسب برای پیش‌بینی تأثیر مشخصات رسوب بر عملکرد حرارتی رآکتور تأثیر بسزایی در تعیین شاخص‌های طراحی و بهینه‌سازی آن خواهد داشت.

## ۲. مدل‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی

در رآکتورهای لوله‌ای ابتدا گاز ورودی به رآکتور گرم و سپس به آن وارد می‌شود و این کار به‌دلیل فعال‌شدن آغازگرهای واکنش و تولید رادیکال آزاد به منظور شروع بسپاری شدن رادیکالی است. با توجه به گرم‌آبودن این واکنش از آب خنک‌کننده به‌شکل جریان ناهمسو با جریان داخلی رآکتور برای گرفتن گرمای واکنش استفاده می‌شود. رآکتور پتروشیمی کردستان با دبی ورودی تقریباً  $130 \frac{Ton}{hr}$  دارای چهار رآکتور (بخش) سری و موازی باهم است که گاز ورودی به رآکتور دارای فشار ۲۷۰۰ bar و دمای  $160^\circ C$  است. چهار بخش این رآکتور دارای قطر ثابت اما طول متفاوت هستند که بخش اول دارای طول ۶۷۲ متر و حداکثر دمای واکنش  $300^\circ C$ ، بخش دوم نیز دارای طول ۶۷۲ متر و حداکثر دمای واکنش  $305^\circ C$ ، در بخش سوم طول رآکتور ۵۷۶ متر و حداکثر دمای واکنش در آن  $305^\circ C$  و بخش چهارم رآکتور به طول ۳۸۴ متر که حداکثر دمای واکنش در آن  $300^\circ C$  است. در انتهای رآکتور یک شیر فشارشکن تعبیه شده که به شیر ضربه‌زن نیز معروف است و علاوه بر کنترل فشار رآکتور باعث انجام عمل رسوب‌زدایی مکانیکی در رآکتور با ایجاد ضربه با تغییرات ناگهانی فشار می‌شود.

بسپاری شدن رادیکال آزاد اتیلن را می‌توان با سه سازوکار واکنش اصلی، یعنی شروع، انتشار و خاتمه و واکنش‌های جانبی متعدد توصیف کرد که در جدول (۱) ارائه شده است.

در جدول (۱)، M نشان دهنده مونومر اتیلن و X (اصلاح‌کننده) پروپیونیک آلدهید هستند.  $I_2, V$  (VE 1,2,3,4) انواع آغازگر و رادیکال‌های آغازگر مربوطه را نشان می‌دهد. نماد  $R_i$  زنجیره‌های بسپاری زنده به طول  $i$  را مشخص می‌کند و  $R_i$  زنجیره‌های بسپاری مرده را نشان می‌دهد.

واکنش پایانی به ترتیب به دو شکل ترکیب و تسهیم نامتناسب انجام می‌گیرد. DB نشان‌دهنده غلظت مولکول‌هایی با پیوند دوگانه و P و K به ترتیب زنجیره‌های بدون رادیکال و سرعت سینتیکی واکنش هستند. LCB و SCB واکنش‌های با تشکیل زنجیره‌هایی

جدول ۱. واکنش‌های رادیکالی بسپاری شدن پلی اتیلن سبک [۲۱].

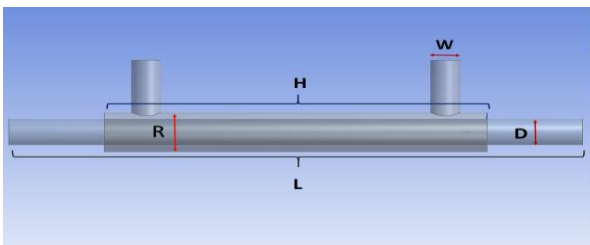
Table 1. Free radical polymerization of LDPE [21].

Initiator decomposition
$I_{2,V} \xrightarrow{K_{IV}} 2R_{IV}$
Initiation
$R_{IV} + M \xrightarrow{K_{P,IV}} R_i$
$R_X + M \xrightarrow{K_{P,X}} R_i$
$3M \xrightarrow{K_{th}} 2R_j + M$
Propagation
$R_i + M \xrightarrow{K_p} R_{i+1}$
Termination
$R_i + R_j \xrightarrow{K_{t,c}} P_{i+j}$
$R_i + R_j \xrightarrow{K_{t,d}} P_i + P_j + DB$
Side reaction
$R_i + M \xrightarrow{K_{tr,M}} P_i + R_1 + DB$
$R_i + P_j \xrightarrow{K_{tr,P}} P_i + P_{sec,j}$
$R_i + X \xrightarrow{K_{tr,X}} P_i + R_X$
$R_{sec,i} + M \xrightarrow{K_{p,sec}} R_{i+1} + LCB$
$R_i \xrightarrow{K_{p,sec}} R_i + SCB$
$R_i + P_j \xrightarrow{K_{tr,P}} P_i + P_{sec,j}$
$R_{sec} \xrightarrow{K_B} P_{i-k} + R_k + \beta - scission$

با توجه به پیچیدگی سینتیک واکنش و این که شاخص های عملیاتی و فرایندی به طور انحصار در اختیار شرکت بازل (لیسانس شرکت پتروشیمی کردستان) است؛ برای استفاده از داده های مربوط به شاخص های مورد نیاز در مورد خصوصیات ترکیب بسپاری و رسوب، از مرجع [۱] استفاده شده است.

در این تحقیق طراحی سه بعدی بخشی از رآکتور مورد مطالعه با شگرد دینامیک سیالات محاسباتی انجام گرفت. برای انجام این طراحی قسمتی از ابتدای بخش اول رآکتور پتروشیمی کردستان (لوله نهم) بر اساس داده های این شرکت همانند شکل (۲) طراحی شد.

رآکتور پتروشیمی کردستان شامل تعدادی لوله با ابعاد یکسان در هر ناحیه است که مهم ترین مسئله برای انتخاب این قسمت اتمام واکنش بسپاری شدن و وجود سنسورهای دمایی و فشاری در ورودی و خروجی لوله و ژاکت رآکتور است. در مدل، فرض بر این شده که تمامی حرارت تولیدشده در بالاترین نقطه دمایی و مربوط به مرحله انتشار است.



شکل ۲. هندسه رآکتور طراحی شده.  
Figure 2. Designed reactor geometry.

در شکل (۲)، D قطر خارجی رآکتور، L طول رآکتور، R قطر لوله مربوط به ژاکت، H طول ژاکت رآکتور و W قطر لوله ورودی به جریان خنک کننده است.

برای ایجاد جریان دوفازی رسوب لایه ای مطابق شکل (۳) (d میزان ضخامت رسوب) طراحی شده است. مدل در شرایطی که ضخامت رسوب از ۰/۱ تا ۱/۲ میلی متر مدنظر بود، طراحی و آماده مش زنی شد.

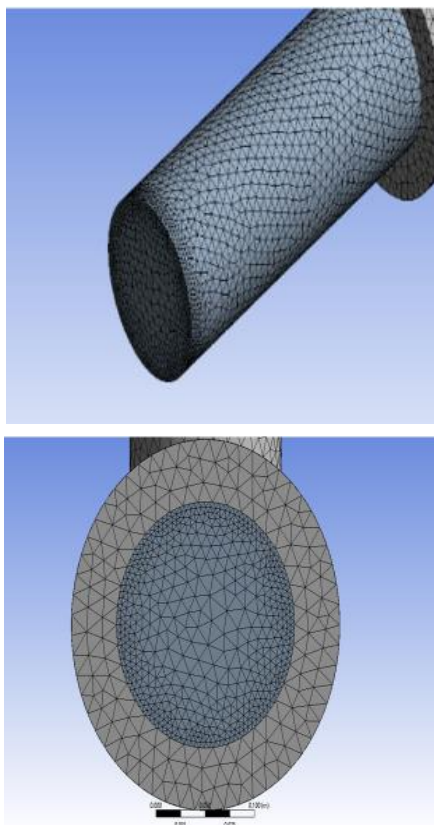
ابعاد طراحی شده مطابق جدول (۲) برای مدل بر اساس ابعاد واقعی موجود در پتروشیمی کردستان تعریف شده است.

با شاخه های بلند و کوتاه هستند.  $\beta - scission$  که در این نوع واکنش پیوند کربن-کربن شکسته می شود و تشکیل دو زنجیره پلیمری کوتاه تر را می دهد. یکی زنجیره پلیمری مرده و دیگری زنجیره زنده رادیکال ثانوی انتهای غیراشباع است. این شکستگی ممکن است در هر نقطه اتفاق بیفتد.

نرخ واکنش های جدول (۱) با قانون آرنیوس (معادله (۱)) توصیف شده است و به دما T و فشار P بستگی دارد. سینتیک کلیه واکنش های انجام شده در اکثر موارد از معادله آرنیوس تبعیت می کند؛ اما در برخی از واکنش ها شامل دو ترم است که ترم اول، معادله آرنیوس و ترم دوم معادله غیرخطی از درصد وزنی بسپار و گران روی است.

$$K_i = K_0 \exp(P - P_0) \frac{dV_i}{RT} \quad (1)$$

تغییرات شدیدتر شاخص‌ها از مش لایه‌مرزی استفاده شد. در شکل (۵) شبکه‌بندی در دو نمای مختلف نمایش داده شده است.

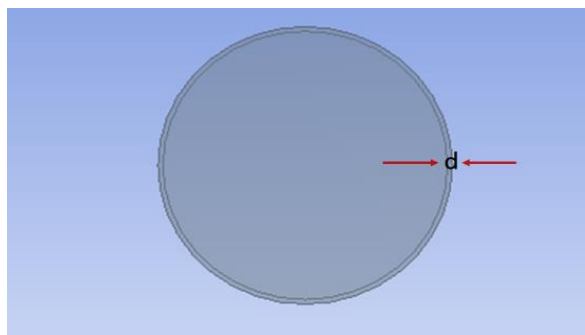


شکل ۵. طرح‌واره‌ای از شبکه‌بندی و مش لایه‌مرزی طراحی شده در ابتدای لوله رآکتور محل ورود ترکیب پلی اتیلن / اتیلن و رسوب.

Figure 5. Schematic of meshing & the boundary layer designed at the inlet of the reactor tube.

در این مطالعه برای ساختن تعداد بهینه شبکه‌ها از روش استقلال از شبکه استفاده شد. چون برای یافتن این مهم، تئوری خاصی وجود ندارد؛ معمولاً راه‌حل آن بررسی یکی از شاخص‌های مدل‌سازی در تعداد مش‌های مختلف است. در این تحقیق دمای خروجی جریان خنک‌کننده ( $T_{OHW}$ ) به‌عنوان شاخصی برای یافتن بهینه‌ترین تعداد مش استفاده شده است.

چنان‌که در شکل (۶) نشان داده شده است، بهترین نقطه برای تعداد شبکه‌ها عدد ۳۳۵۳۳۸ را نشان می‌دهد که دارای دقت محاسبات بالا و سرعت زمانی مناسب حل معادلات (تعداد معادلات بالا با توجه به داشتن جریان دوفازی) است. بر این اساس محدوده بهینه تعداد شبکه در محاسبات ۳۰۰۰۰۰ تا ۳۸۰۰۰۰ در نظر گرفته شد.



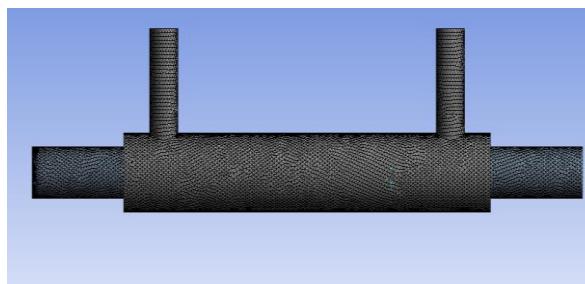
شکل ۳. لایه ایجادشده برای تعریف جریان دوفازی رسوب.  
 Figure 3. Layer to define fouling.

جدول ۲. ابعاد هندسی رآکتور طراحی شده.

Table 2. Geometric dimensions of the designed reactor.

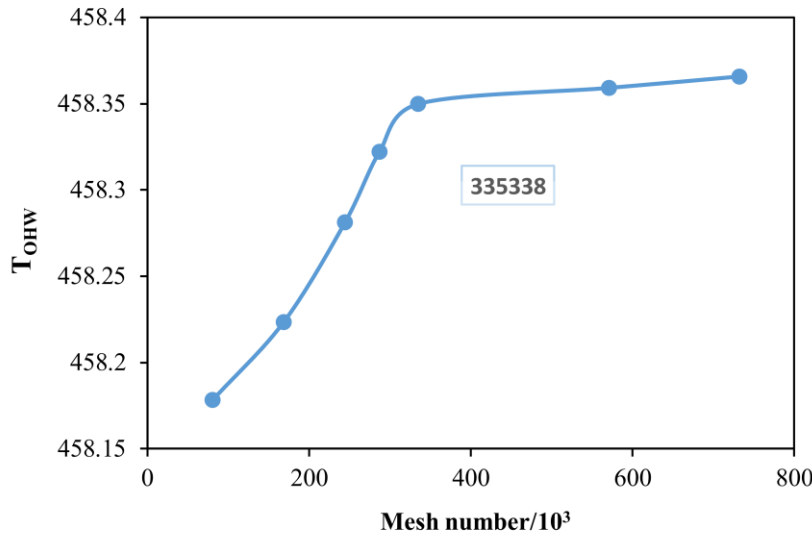
	W(mm)	D(mm)	H(mm)	R(mm)	L(mm)
Real	165	181	6996	284	8000
Model	154	181	7000	273	8000

طراحی انجام‌شده مطابق با داده‌های واقعی است و تنها موردی که صرف نظر شده است، ضخامت ژاکت رآکتور با اندازه ۱۱ میلی‌متر است که با توجه به عایق‌بودن و آدیاباتیک در نظرگرفتن سامانه، صرف نظر شده است. طول ژاکت نیز ۶۹۹۶ میلی‌متر است که در این پژوهش ۷۰۰۰ میلی‌متر در نظر گرفته شده است. شبکه‌بندی سامانه یکی از مراحل مهم در فرایند شبیه‌سازی و کیفیت، تعداد و اندازه مش‌ها بسیار حائز اهمیت است. معمولاً برای بالابردن کیفیت مش‌ها در شبیه‌سازی سه‌بعدی از مش‌های پرکاربرد چهاروجهی و شش‌وجهی استفاده می‌شود؛ با در نظرگرفتن این نکات مش‌بندی مطابق شکل (۴) انجام شد.



شکل ۴. شبکه‌بندی چهاروجهی رآکتور لوله‌ای طراحی شده.  
 Figure 4. Meshed tubular reactor.

برای دقت بیشتر در محاسبات مربوط به مدل‌سازی، در نواحی با



شکل ۶. نمودار استقلال از مش سامانه.

Figure 7. The mesh independency.

مدل سه‌بعدی مربوط به معادلات پیوستگی و حرکت از روش حجم محدود، حل و بر اساس معادلات (۲) و (۳) بیان می‌شود.

$$\mu_{MIX} = (\mu_{et}^{X_{et}})(\mu_{LD}^{(1-X_{et})}) \quad (۴)$$

$$K_{MIX} = X_{et}K_{et} + (1 - X_{et})K_{LD} - 0.72(K_{LD} - K_{et})X_{et} \quad (۵)$$

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (۲)$$

$$C_{P,MIX} = X_{et}C_{P,MIX} + (1 - X_{et})C_{P,LD} \quad (۶)$$

$$\nabla(\rho \mathbf{V} \mathbf{V}) = -\nabla P + \nabla [\mu \nabla \mathbf{V}] + \rho \mathbf{g} \quad (۳)$$

آب خنک‌کننده دارای فشار حدودی ۲۸ bar در ورودی ژاکت رآکتور است که خصوصیات آن با استفاده از رگرسیون در دماهای مختلف از مرجع [۲۲ و ۲۳] استخراج شده است. برای محاسبه دمای رسوب معمولاً از محاسبه گرمای منتقل شده به آب خنک‌کننده استفاده می‌شود.

$$Q = m_{HW}C_{P,HW}(T_{i,HW} - T_{o,HW}) = U_i A_o \Delta T_{LMTD} \quad (۷)$$

$T_{i,HW}$  و  $T_{o,HW}$  به ترتیب دمای آب خنک‌کننده ورودی و خروجی به ژاکت رآکتور است. هم‌چنین برای گرمای منتقل شده چنین معادله‌ای هست:

$$Q = \frac{\Delta T_{W}}{\ln \frac{r_o/r_i + 1}{2K_W \pi L} + \ln \frac{r_i}{r_i - d_{foul}} + \ln \frac{r_i}{2K_{LD} \pi L}} \quad (۸)$$

که به ترتیب  $\mu, V, \rho, g, P$  بردار شتاب جاذبه، چگالی، سرعت متوسط و گران‌روی دینامیکی هستند. مدل k- $\epsilon$  و از نوع Standard برای سامانه در نظر گرفته شد. شرایط مرزی مورد استفاده برای ورودی و خروجی جریان در رآکتور و ژاکت، به ترتیب سرعت ورودی و فشار خروجی هستند. هم‌چنین الگوریتم SIMPLE برای ارتباط سرعت و فشار در نظر گرفته شد. شگرد استاندارد برای معادله فشار و معادله مومنتوم با روش حل درجه دوم استفاده شد. ملاک همگرایی نتایج به دست آمده برای این شبیه‌سازی، خطایی با مقدار  $10^{-5}$  قرار داده شد. خصوصیات جریان‌های ورودی و خروجی مدل مانند گران‌روی، ظرفیت حرارتی ویژه، ضریب هدایت حرارتی باید در شرایط متفاوت دمایی جداگانه حساب شود. برای محاسبه خصوصیات ترکیب پلی اتیلن و اتیلن از معادلات (۴)، (۵) و (۶) استفاده شده که از مرجع [۱۶] به دست آمده است:

در شرایطی که راکتور آدیاباتیک باشد تمامی حرارت تولیدشده موجب افزایش دمای سیال داخل راکتور و جریان خنک‌کننده موجود در ژاکت آن می‌شود. با توجه به این مسئله با محاسبه میزان حرارت منتقل شده می‌توان مطابق معادله (۱۵)، میزان درصد تبدیل هر لوله را حساب کرد:

$$m_{HW} C_{p,HW} (T_{i,HW} - T_{o,HW}) + m_{mix} C_{p,mix} (T_{i,mix} - T_{o,mix}) = (X \times H_r \times E) \quad (15)$$

سرعت جرمی جریان خنک‌کننده ورودی به ژاکت راکتور و سرعت جرمی ترکیب گاز اتیلن و پلی اتیلن به ترتیب  $m_{mix}$  و  $m_{HW}$  ظرفیت گرمایی ویژه آب و ترکیب اتیلن و پلی اتیلن در فشار ثابت  $C_{p,HW}$  و  $C_{p,mix}$ ،  $T_{i,mix}$ ،  $T_{i,HW}$  دمای ورودی ترکیب به لوله و  $T_{o,HW}$  دمای خروجی آب، درصد تبدیل وزنی اتیلن به پلیمر برای هر لوله  $X$ ، گرمای حاصل از تبدیل مونومر  $H_r$  و جریان وزنی اتیلن ورودی به هر لوله  $E$  است. برای به دست آوردن گرمای تبدیل مونومر از معادله (۱۶) استفاده می‌شود [۲۴]:

$$H_r = 0.105P + 0.0209(T - 273.15) + 84.185 \times 10^3 \quad (16)$$

بیشتر جریان داخلی راکتور معمولاً تک‌فاز است؛ اما در نزدیکی دیواره به دلیل پایین بودن دمای آن جریان بسپاری غنی که به شکل مایع است خود را به شکل دوفاز نشان می‌دهد که باعث کاهش انتقال حرارت و کاهش راندمان تولید راکتورهای تولید پلی اتیلن سبک می‌شود. با توجه به این مسئله برای محاسبه حجم رسوب و ضخامت رسوب از محاسبات تعادلی فازی استفاده شده است. معادله (۱۷) برای محاسبه حجم رسوب استفاده می‌شود:

$$V_{foul} = X_{et} l V_{et} + X_p l V_p \quad (17)$$

در رابطه (۱۴)،  $G$  شدت جریان جرمی سیال در واحد سطح است [۲۵]. حرارت تولیدشده به دلیل انجام واکنش گرمای بسپاری شدن، صرف افزایش دمای ترکیب گاز اتیلن و پلیمر همراه آن شده، گرمای اضافی آن به وسیله جریان خنک‌کننده جذب می‌شود. از همین رو

که در آن  $\Gamma_0$  و  $\Gamma_i$  شعاع خارجی و داخلی راکتور و  $L$  طول راکتور است،  $K_W$  ضریب هدایت حرارتی دیواره راکتور،  $h_0$  و  $A_0$  ضریب انتقال حرارت و سطح خارجی دیواره راکتور و  $d_{foul}$  ضخامت رسوب است. در معادله (۸) منظور از  $\Delta T_W$  اختلاف دمای رسوب و میانگین آب خنک‌کننده است:

$$\Delta T_W = T_{foul} - T_{AVE} \quad (9)$$

$$T_{AVE} = \frac{(T_{i,HW} + T_{o,HW})}{2} \quad (10)$$

با استفاده از معادلات (۷) تا (۱۰) دمای سطح رسوب ورودی به هر لوله حساب شده است [۲۴]. برای محاسبه ضرایب انتقال حرارت از روابط (۱۱) و (۱۲) استفاده شد:

$$Nu = \frac{h_o D}{K} = 0.27 \times Pr^{0.33} \times Re^{0.80} \left( \frac{\mu}{\mu_{wall}} \right)^{0.14} \quad (11)$$

$$U_i = \frac{1}{\left( \frac{1}{h_i} + \frac{A_i}{2\pi k_{wall} L} \times \ln \left( \frac{r_0}{r_i} \right) + \frac{A_i}{A_o} \times \frac{1}{h_o} \right)} \quad (12)$$

در این معادله ضریب هدایت  $K$ ، قطر لوله  $D$  و اعداد بی بعد ناسلت  $Nu$ ، رینولدز  $Re$ ، پراتل  $Pr$  هستند؛ گرانروی سیال  $\mu$  و گرانروی آن در دیواره  $\mu_{wall}$  است. اعداد بدون بعد پراتل و رینولدز از معادلات (۱۳) و (۱۴) حساب می‌شوند:

$$Pr = \frac{\mu C_p}{K} \quad (13)$$

$$Re = \frac{G d_{in}}{\mu} \quad (14)$$

در رابطه (۱۴)،  $G$  شدت جریان جرمی سیال در واحد سطح است [۲۵].

حرارت تولیدشده به دلیل انجام واکنش گرمای بسپاری شدن، صرف افزایش دمای ترکیب گاز اتیلن و پلیمر همراه آن شده، گرمای اضافی آن به وسیله جریان خنک‌کننده جذب می‌شود. از همین رو



$$\sum \frac{Z_i}{K_i(1-l)+l} = 1 \quad (18)$$

$Z_i$  ترکیب درصد اتیلن به پلی اتیلن است که با توجه به درصد تبدیل مونومر در رآکتور برای هر لوله مورد استفاده، حساب شده است.  $K_i$  نسبت درصد ترکیب اتیلن و پلی اتیلن در فاز مایع به گاز است که از ارتباط آن با فوگاسیته مطابق معادلات تعادل فازی به دست آمده است [۲۶]:

$$K_p = \frac{\varphi_p(L)}{\varphi_p(V)} = \frac{y_p}{x_p} \quad (19)$$

$$K_{et} = \frac{\varphi_{et}(L)}{\varphi_{et}(V)} = \frac{y_{et}}{x_{et}} \quad (20)$$

برای به دست آوردن فوگاسیته و حجم ویژه پلی اتیلن و اتیلن از معادلات درجه سوم SRK مطابق معادلات (۲۱) و (۲۲) استفاده شده است.

$$P = \frac{RTf_{out}}{v-b} - \frac{a(T)}{V(V+b)} \quad (21)$$

$$\ln \varphi = \frac{b}{b_{mix}} \left( \frac{PV}{RT} - 1 \right) - \left( 2 \frac{\sum_j a_{ij} X_j}{a_{mix}} - \frac{b}{b_{mix}} \right) \left( \frac{a_{mix}}{RTb_{mix}} \right) \ln \left( 1 + \frac{b_{mix}}{V} \right) - \ln \left( \frac{(V-b_{mix})P}{RT} \right) \quad (22)$$

چنان که بیان شد معادله SRK برای ترکیب گاز اتیلن و پلی اتیلن به کار برده شده که  $R$  ثابت عمومی گازها و  $V$  حجم ویژه است [۲۶]. برای به دست آوردن نیروهای جاذبه بین مولکولی  $a_{mix}$  و شاخص‌های حجمی  $b_{mix}$  ترکیب گاز اتیلن و پلی اتیلن از قانون اختلاط واندروالس استفاده شده است [۲۷]:

$$a_{mix} = \sum \sum X_i X_j a_{ij} \quad (23)$$

$$b_{mix} = \sum X_i b_i \quad (24)$$

$X_i$  و  $X_j$  به ترتیب درصد ترکیب گاز اتیلن و پلی اتیلن هستند که مطابق داده‌های تجربی از کارخانه حساب شده است و برای بخش اول رآکتور تقریباً ۱۳/۴۵۸ درصد از گاز اتیلن به سپار است و

$a_{ij}$  ضریب اثر دوتایی متقابل است و مطابق معادله (۲۵) به دست می‌آید:

$$a_{ij} = \frac{1}{2}(a_i + a_j)(1 - K_{ij}) \quad (25)$$

$$K_{ij} = 0.14537 - 2.75 \times 10^{-4} T \quad (26)$$

$a_i$  شاخص جاذبه بین مولکولی گاز اتیلن و  $a_j$  شاخص جاذبه بین مولکولی پلی اتیلن است که از معادلات (۲۷) و (۲۸) به دست می‌آیند:

$$a_i = a_{c,i} a_i(T) \quad (27)$$

$$a_j = a_{c,j} a_j(T_r) \quad (28)$$

$$T_r = e^{CT} \quad (29)$$

برای به دست آوردن شاخص‌های بحرانی گاز اتیلن با توجه به داشتن شاخص‌های دما و فشار بحرانی برای این گاز از معادله (۳۰) استفاده می‌شود؛ اما با توجه به این که امکان محاسبه شاخص‌های بحرانی پلی اتیلن وجود ندارد از داده‌های تجربی PVT مطابق جدول (۳) استفاده شده است [۲۸].

$$a_{c,i} = 0.42748 \frac{R^2 T_{c,i}^2}{P_{c,i}} \quad (30)$$

دمای بحرانی گاز اتیلن  $T_{c,i}$ ، ۲۸۲ کلوین و فشار بحرانی گاز اتیلن  $P_{c,i}$  برابر ۵۰/۴۱ bar است [۲۹]. در رابطه (۲۲)،  $b$  شاخص‌های حجمی گاز اتیلن و حجمی پلی اتیلن است که برای محاسبه فوگاسیته هریک از آن‌ها از معادلات (۳۱) و (۳۲) به دست می‌آیند:

$$b_i = 0.86664 \frac{RT_{c,i}}{P_{c,i}} \quad (31)$$

$$b_j = b_{c,j} \quad (32)$$

جدول ۳. شاخص‌های بحرانی پلی اتیلن با استفاده از داده‌های تجربی PVT.

Table 3. Critical parameters of polyethylene using PVT experimental data.

LDPE	$a_{c,j}(\text{pa.m}^6.\text{mol}^{-2})$	$b_{c,j}(\text{m}^{-1}.\text{mol}^{-1})$	$C(\text{K}^{-1})$
	26.4201	0.0335	-0.0039

### ۳. بحث و بررسی نتایج

با استفاده از اطلاعات حساب شده و تأثیرپذیری ضخامت رسوب و خصوصیات فیزیکی آب و ترکیب گاز اتیلن بر روی شرایط عملیاتی رآکتور، مدل سازی با شگرد دینامیک سیالات محاسباتی انجام شد. شکل (۷) ضخامت لایه رسوب ( $d$ ) یا همان جریان دوفازی رسوب و ترکیب گاز اتیلن و پلی اتیلن را بر روی صفحه عمود بر سطح مقطع لوله نشان می‌دهد. شکل (۷) نشان می‌دهد که جریان دوفازی به چه شکلی در نزدیکی دیواره تشکیل شده است و درصد حجمی فاز دوم در ضخامت‌های مختلف به چه صورت است. در شکل (۸) توزیع دمایی در سطح دیواره رآکتور نمایش داده شده است. چنان‌که در شکل پیداست در جداره دیواره رآکتور که با جریان خنک کننده در ارتباط است، دمای سطح لوله رآکتور پایین است (توزیع دمایی که با رنگ قرمز نشان داده شده است) و دقیقاً این همان جایی که به علت دمای پایین رسوب ایجاد می‌شود.

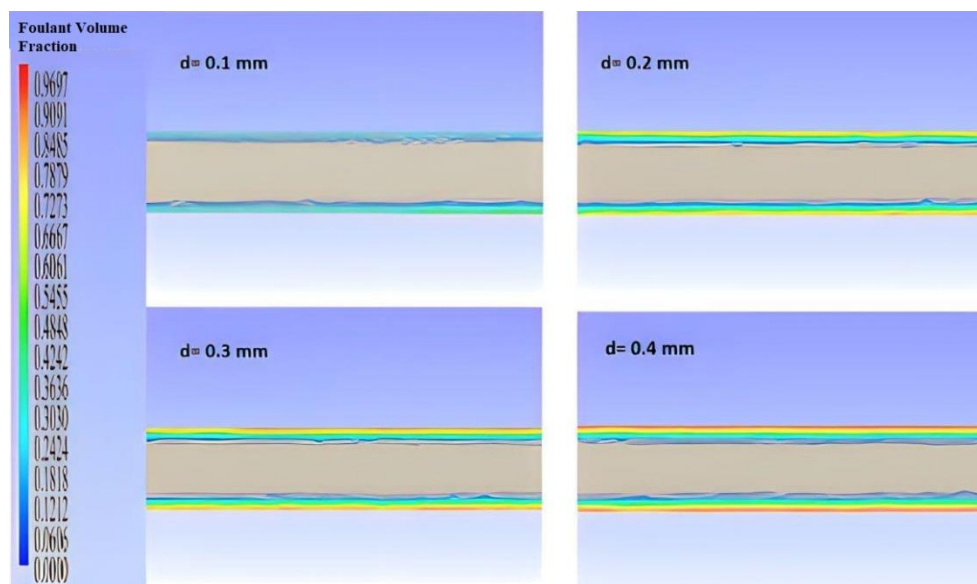
در نهایت با استفاده از محاسبه حجم ویژه رسوب در معادله (۱۷) می‌توان ضخامت رسوب را برای هر یک از لوله‌های رآکتور حساب کرد:

$$d_{foul} = \frac{d_{in}}{2} - \frac{1}{2} \left[ \sqrt{(V_{i,reactor} - V_{foul}) \times \frac{4}{L\pi}} \right] \quad (33)$$

در معادله (۳۳)  $V_{i,reactor}$  حجم لوله داخلی محل عبور جریان است و مطابق معادله (۳۴) به دست می‌آید.

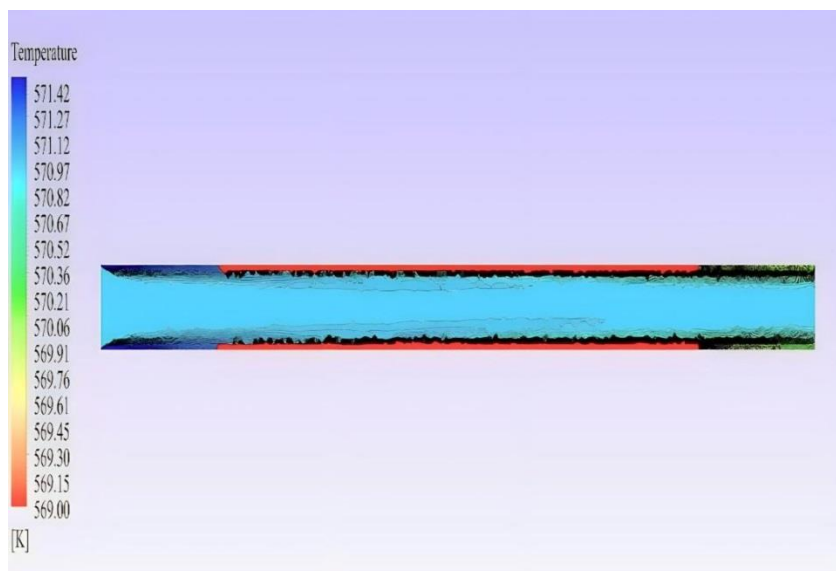
$$V_{i,reactor} = \frac{\pi}{4} d_{in}^2 \quad (34)$$

قابل ذکر است که در کلیه معادلات برای محاسبات تعادل فازی از حالت مکعبی سواو-ردلیچ-وانگ در محدوده وسیعی از دماها و فشارها و نیز از قانون اختلاط واندروالس استفاده شده است.



شکل ۷. درصد حجمی فاز دوم (رسوب) در جداره دیواره رآکتور بر روی صفحه عمود بر سطح مقطع لوله.

Figure 8. Volume fraction of the second phase (fouling) on the wall of the reactor.

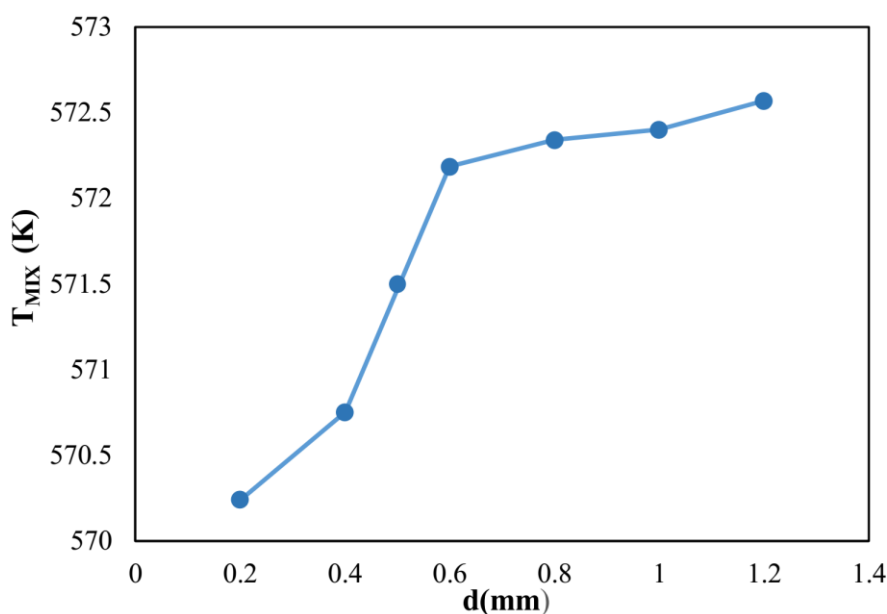


شکل ۸. توزیع دما بر روی صفحه عمود بر سطح مقطع لوله.

Figure 9. Temperature distribution on the surface of the reactor tube.

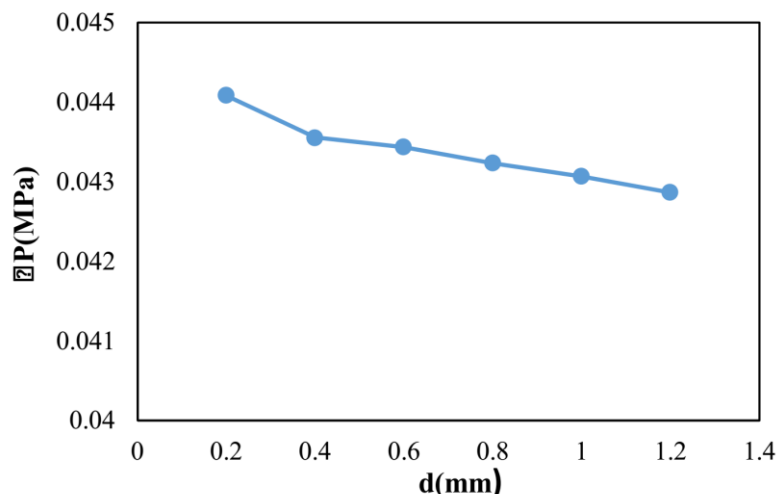
در نتیجه افزایش تولید می‌شود. شکل (۱۰) میزان افت فشار را در طول رآکتور در ضخامت‌های مختلف رسوب نشان می‌دهد. پیداست که تغییرات فشار بسیار ناچیز است و می‌توان گفت که رسوب در رآکتورهای لوله تأثیر زیادی بر روی فشار ندارد.

در این مطالعه، تأثیرهای رسوب بر دمای خروجی رآکتور در شرایطی که ضخامت رسوب در اندازه‌های مختلفی باشد بررسی شد. چنان‌که در شکل (۹) مشخص است با کاهش ضخامت رسوب، کاهش دمای خروجی ترکیب اتیلن و پلی‌اتیلن مشاهده می‌شود که همین دلیل در طول رآکتور باعث کاهش دمای کمینه واکنش و



شکل ۹. تأثیر ضخامت رسوب بر روی دمای ترکیب گاز اتیلن و پلی‌اتیلن خروجی رآکتور.

Figure 10. Influence of fouling thickness on the temperature of the outlet ethylene and polyethylene.

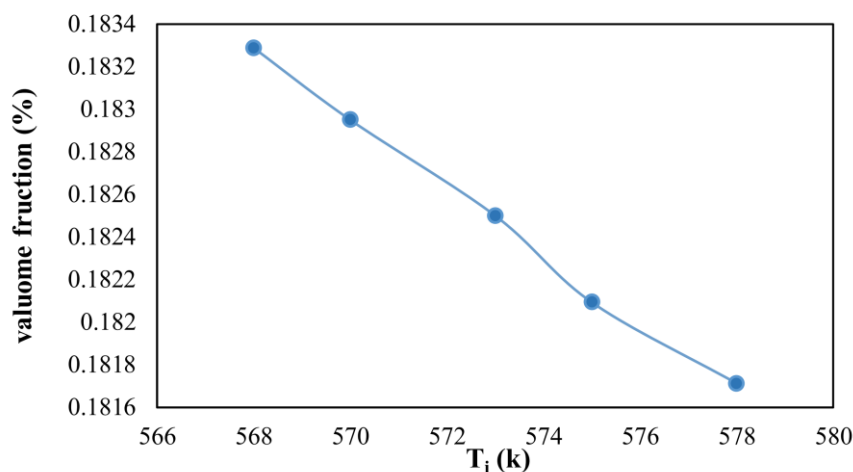


شکل ۱۰. تأثیر ضخامت رسوب بر روی افت فشار درون رآکتور.

Figure 10. Influence of fouling thickness on pressure drop inside the reactor.

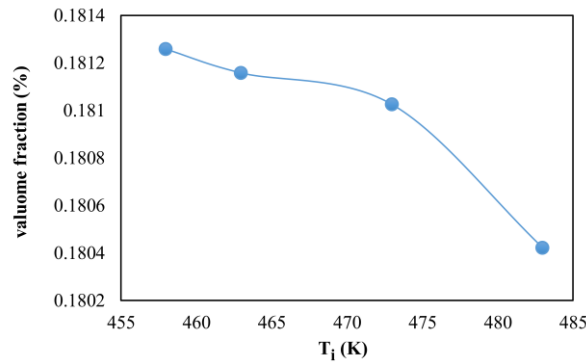
نمی‌توان دما را به میزان دلخواه بالا برد. تجزیه مواد یکی از مواردی است که با افزایش دمای واکنش احتمال وقوع آن افزایش می‌یابد. یکی از مؤثرترین راه‌حل‌های مورد استفاده برای رسوب‌زدایی، بالا نگه داشتن دمای آب خنک‌کننده برای برهم زدن تعادل فازی، کاهش ضخامت رسوب و حجم فاز دوم ایجادشده در دیواره رآکتور است. این مسئله در نتایج شبیه‌سازی به‌خوبی مطابق نمودار شکل (۱۲) نشان داده شد.

مورد دیگر مطالعه در این تحقیق، بررسی تأثیر افزایش دمای رآکتور یا همان دمای واکنش است. افزایش دمای رآکتور به‌واسطه تزریق پراکسید (آغازگر) در ابتدای هر ناحیه انجام می‌شود. در شکل (۱۱) داده‌های حاصل از شبیه‌سازی مربوط به تأثیرات دمای ورودی ترکیب گاز اتیلن و پلی‌اتیلن بر جزء حجمی فاز دوم (رسوب) نشان داده شده است. افزایش دمای گاز ورودی به درون رآکتور که با افزایش دمای واکنش ایجاد شده است، باعث کم‌شدن میزان رسوب می‌شود؛ اما با توجه به شرایط واکنش و محدودبودن این امر



شکل ۱۱. تأثیر دمای ورودی ترکیب گاز اتیلن و پلی‌اتیلن بر روی جزء حجمی فاز دوم (رسوب).

Figure 11. Influence of inlet temperature of ethylene and polyethylene on the volume fraction of the second phase (fouling).



شکل ۱۲: نمودار تأثیرات دمای ورودی جریان خنک‌کننده بر روی جزء حجمی فاز دوم (رسوب).

Figure 12. Influence of inlet temperature of cooling flow on the volume fraction of the second phase (fouling).

جدول ۴. داده‌های خروجی رآکتور از مدل و سنسورهای پتروشیمی کردستان.

Table 4. Reactor output data from model and Kurdistan Petrochemical Company sensors.

$x$ (ton/hr)	$d$ (mm)	CFD( $T_{o,mix}$ )	$T_{o,mix}$ (exp)
29	1.2	572.5721	572.6
30.2	1	572.4001	572.4
31.8	0.8	572.3425	572.3
33.9	0.6	572.1850	572.1
36.1	0.4	570.7512	570.7
43.3	0.2	570.2421	570.2

میزان دمای خروجی رآکتور مدل شده در مقایسه با خروجی رآکتور مورد مطالعه در کارخانه، اختلاف کمی دارد. این اختلاف کم، نشان‌دهنده اعتبار و دقت مدل است.

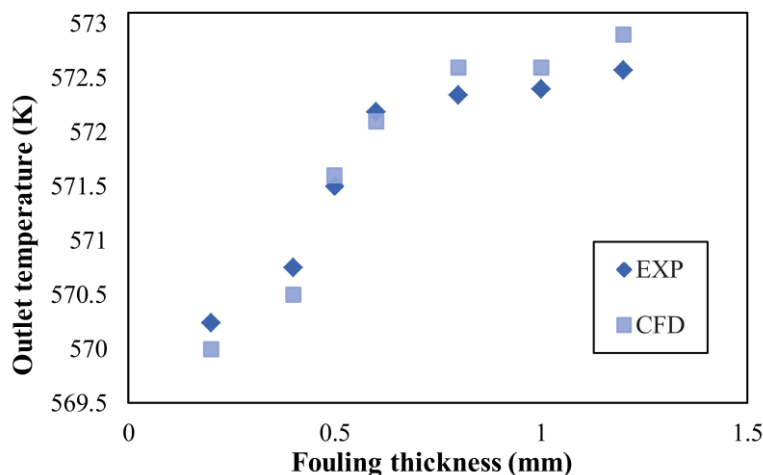
۵. نتیجه‌گیری

استفاده از داده‌های به‌دست‌آمده از مدل‌سازی رآکتور با بهره‌گیری از دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) منجر به کاهش هزینه‌ها و بهره‌وری بیشتر با صرفه‌جویی در زمان خواهد شد. با توجه به مدل‌سازی انجام‌شده مشخص شد که تأثیرات دمای آب خنک‌کننده نسبت به شاخص‌های عملیاتی دیگر بیشتر است. هم‌چنین به‌علت وجود جریان دوفازی در دیواره رآکتور مشخص شد که برای کاهش میزان رسوب و افزایش میزان انتقال حرارت از رآکتور به ژاکت آن

همان‌طور که در شکل (۱۲) مشاهده می‌شود، افزایش دمای آب خنک‌کننده باعث کاهش ضخامت رسوب شده است. با توجه به این‌که واکنش گرم‌مازاست، هرچه دمای جریان خنک‌کننده پایین‌تر باشد، می‌تواند دمای خروجی رآکتور را - به شرطی که رسوب وجود نداشته باشد و مانع انتقال حرارت نشود - کاهش دهد و تولید را بالا ببرد. بالا بردن دمای آب خنک‌کننده تا زمانی ادامه می‌یابد که رسوب‌زدایی به‌شکل مطلوب انجام شود و پس از رسوب‌زدایی دمای آب خنک‌کننده کاهش داده می‌شود.

به‌دلیل نبود داده‌های تجربی، اعتبارسنجی و مقایسه مستقیم خروجی مدل، در همه موارد ممکن نیست. چنان‌که که قبلاً بیان شد و در مدل نیز پیوسته، شاخص‌های مختلفی در شرایط فرایندی به‌طور مستقیم روی میزان رسوب و تولید محصول مؤثر هستند؛ به همین دلیل از دو مجموعه داده، شامل درجه حرارت خروجی اتیلن و پلیمر ثبت‌شده در سنسورهای واقع در رآکتور با توجه به میزان تولید و دماهای خروجی از شبیه‌سازی بهره گرفته شد که در جدول (۴) برخی از این داده‌ها ذکر شده است.

از نتایج به‌دست‌آمده، تنها حالت قابل‌مقایسه با نتایج واقعی که در کارخانه ثبت می‌شود، ارتباط شاخص‌ها از جمله دمای خروجی ترکیب در هر لوله با داده‌های مدل است که در نمودار شکل (۱۳) نشان داده شده است. با توجه به این‌که شرکت پتروشیمی کردستان در طول زمان به‌علت حساسیت و ایمنی بالای این واحد دارای راه‌اندازی‌های مکرر است، گذر از این شرایط بارها و بارها اتفاق افتاده و داده‌های ثبت‌شده با توجه به این مهم قابل قبول است. البته قابل ذکر است که سنسورهای موجود دارای خطای کمتر از ۱٪ هستند.



شکل ۱۳. تأثیر ضخامت رسوب بر دمای خروجی ترکیب اتیلن و پلی اتیلن در کارخانه و مدل.

Figure 11. Effect of fouling thickness on the outlet temperature of ethylene and polyethylene in the factory and model

### مراجع

- [1] Kiparissides, C., Verros, G., Macgregor, J. F., "Mathematical modeling, optimization, and quality control of high-pressure ethylene polymerization reactors", *Journal of Macromolecular Science, Part C: Polymer Reviews*, 33, pp. 437-527, (1993).
- [2] Buchelli, A., Call, M. L., Brown, A. L., "Modeling fouling effects in LDPE tubular polymerization reactors, 2, Heat transfer, computational fluid dynamics, and phase equilibria", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 44, pp. 1480-1492, (2005).
- [3] Shojaee, S., Hosseini, S. H., Rafati, A., Ahmadi, G., "Prediction of the effective area in structured packings by computational fluid dynamics", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 50, pp. 10833-10842, (2011).
- [4] Fourcade, E., Wadley, R., Hoefsloot, H. C., Green, A., Iedema, P. D., "CFD calculation of laminar striation thinning in static mixer reactors", *Chemical Engineering Science*, 56, pp. 6729-6741, (2001).
- [5] Ehrlich, P., "Fundamentals of the Free-radical Polymerization of Ethylene", *Advances in Polymer Science*, 7, pp. 336-345, (1971).
- [6] Agrawal, S., Han, C. D., "Analysis of the high pressure polyethylene tubular reactor with axial mixing", *AIChE Journal*, 21, pp. 449-465, (1975).
- [7] Chen, C. H., Vermeychuk, J. G., Howell, J. A., Ehrlich, P., "Computer model for tubular high-pressure polyethylene reactors. *AIChE Journal*, 22, pp. 463-471, (1976).

باید شرایط تعادل فازی را در راستای کاهش فاز غنی از بسپار با استفاده از افزایش دمای دیواره رآکتور تغییر داد که این امر با استفاده از افزایش دمای جریان خنک کننده و دمای ترکیب به واسطه افزایش دمای واکنش قابل انجام است. در مدل سازی مشخص شد که افزایش ضخامت فاز رسوب چگونه باعث کاهش انتقال حرارت و بالارفتن دمای دره (Valley) و در نهایت کاهش تولید محصول می شود. در مورد مقایسه پیش بینی های مدل با داده های کارخانه و نتایج ضخامت رسوب مشخص است که با یک بررسی گذرا از معادلات مدل، مشاهده می شود که کنترل شاخص های مختلفی در شرایط فرایندی به طور مستقیم روی میزان رسوب و در نتیجه تولید مؤثر است. یک برتری آشکار این مدل، انعطاف پذیری بیشتر برای کنترل دما و بررسی رسوب در شرایط مختلف است. در کل، پیش بینی رسوب را به طور سیستماتیک نمی توان فرموله کرد و از داده های تئوری برای بهینه سازی، کمتر می توان بهره برد. هنگامی که کیفیت محصول خروجی خارج از محدوده قابل قبول باشد، شاخص های فرایند به صورت دستی تنظیم می شوند تا بر رسوب غلبه کند و کیفیت محصول قابل قبولی را به دست آورد. این عملکرد دستی معمولاً منجر به تأخیر و کارایی کمتر می شود. بهترین روش این است که هر محقق در صنایع مختلف بتواند پیش بینی کند که رسوب در تجهیزات و رآکتورهای انتقال حرارت در چه زمانی و به چه مقداری در شرایط مختلف عملیاتی رخ می دهد.

- [8] Saraiva, A., Kontogeorgis, G.M., Harismiadis, V. J., Fredenslund, A., Tassios, D. P., "Application of the van der Waals equation of state to polymers IV. Correlation and prediction of lower critical solution temperatures for polymer solutions", *Fluid Phase Equilibria*, 115, pp. 73-93, (1996)
- [9] Tsai, K., Fox, R. O., "PDF modeling of turbulent-mixing effects on initiator efficiency in a tubular LDPE reactor", *AIChE journal*, 42, pp. 2926-2940, (1996).
- [10] Read, N. K., Zhang, S. X., Ray, W. H., "Simulations of a LDPE reactor using computational fluid dynamics", *AIChE journal*, 43, pp. 104-117, (1997).
- [11] Lacunza, M. H., Ugrin, P. E., Brandolin, A., Capiati, N. J., "Heat transfer coefficient in a high pressure tubular reactor for ethylene polymerization", *Polymer Engineering & Science*, 38, pp. 992-1013, (1998).
- [12] Zhou, W., Marshall, E., Oshinowo, L., "Modeling LDPE tubular and autoclave reactors", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 40, pp. 5533-5542, (2001).
- [13] Buchelli, A., Call, M. L., Brown, A. L., "Modeling fouling effects in LDPE tubular polymerization reactors, 3, Computational fluid dynamics Analysis of a reacting", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 44, pp. 1493-1505, (2005).
- [14] Buchelli, A., Call, M. L., Brown, A. L., "Modeling Fouling Effects in LDPE Tubular Polymerization Reactors, 1, Fouling Thickness Determination", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 44, pp. 1474-1479, (2005).
- [15] Nagy, I., de Loos, T. W., Krenz, R. A., Heidemann, R. A., "High pressure phase equilibria in the systems linear low density polyethylene+ n-hexane and linear low density polyethylene+ n-hexane+ ethylene, Experimental results and modelling with the Sanchez-Lacombe equation of state", *The Journal of Supercritical Fluids*, 37, pp. 115-124, (2006).
- [16] Wang, L. S., "Calculation of vapor-liquid equilibria of polymer solutions and gas solubilities in molten polymers based on PSRK equation of state", *Fluid Phase Equilibria*, 260, pp. 105-112, (2007).
- [17] Kazi, S. N., Duffy, G. G., Chen, X. D., "Fouling and fouling mitigation on different heat exchanging surfaces," In *Proceedings of International Conference on Heat Exchanger Fouling and Cleaning*, Schladming, Austria, pp. 14-19, (2009).
- [18] Azmi, A., Aziz, N., "Simulation studies of low-density polyethylene production in a tubular reactor", *Procedia Engineering*, 148, pp.1170-1176, (2016).
- [19] Barbosa, L. A., Dreger, A. A., Santana, R. M. C., Schneider, E. L., Morisso, F. D. P., "Influence of reaction temperature on the generation of gels during EVA production in tubular reactor", *Matéria*, 23, pp. 367-377, (2018).
- [20] Hohlen, A., Augustin, W., Scholl, S., "Quantification of Polymer Fouling on Heat Transfer Surfaces During Synthesis ", *Macromolecular Reaction Engineering*, 14, pp. 1-10, (2020).
- [21] Van Erdeghem, P. M., Logist, F., Vallerio, M., Dittrich, C., Van Impe, J. F., "Model based optimisation of tubular reactors for LDPE production", *IFAC Proceedings Volumes*, 45, pp. 786-791, (2012).
- [22] He, M., Su, C., Liu, X., Qi, X., Lv, N., "Measurement of isobaric heat capacity of pure water up to supercritical conditions", *The Journal of Supercritical Fluids*, 100, pp.1-6, (2015).
- [23] Assael, M. J., Bekou, E., Giakoumakis, D., Friend, D. G., Killeen, M. A., Millat, J., Nagashima, A., "Experimental data for the viscosity and thermal conductivity of water and steam", *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 29, pp. 141-166, (2000).
- [24] Khazraei, P. K. F., Dhib, R., "Modeling of ethylene polymerization with difunctional initiators in tubular reactors", *Journal of Applied Polymer Science*, 109, pp. 3908-3922, (2008).
- [25] Holman, J. P., "Heat Transfer", Tenth edition, McGraw-Hill Book Company, New York, p. 235, (2009).
- [26] Soave, G., Gamba, S., Pellegrini, L. A., "SRK equation of state: Predicting binary interaction parameters of hydrocarbons and related compounds", *Fluid Phase Equilibria*, 299, pp. 285-293, (2010).
- [27] Weirong, J. I., "Modeling VLE and GLE of systems involving polymers by using SRK equation of state", *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 15, pp. 221-227, (2007).
- [28] Rodgers, P. A., "Pressure-volume-temperature relationships for polymeric liquids: A review of equations of state and their characteristic parameters for 56 polymers", *Journal of Applied Polymer Science*, 48, pp. 1061-1080, (1993).
- [29] Meyer, T., Keurentjes, J. T., "Handbook of polymer reaction engineering", First edition, Wiley-VCH, Michigan, p. 721, (2005).