



مؤسسه آموزش عالی غیر دولتی غیر انتفاعی انرژی

شبیه سازی و بهینه سازی چند معیاره فرایند تولید ایزوپروپیل بنزن (کیومن) توسط نرم افزار Aspen Hysys

پایان نامه یا رساله برای دریافت درجه کارشناسی ارشد
در رشته مهندسی مکانیک-تبدیل انرژی

نام دانشجو

سعید قربانزاده

استادان راهنما:

جناب آقای دکتر واصفی

جناب آقای دکتر مداح

فروردین ماه ۱۴۰۰

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

تأییدیه‌ی صحت و اصالت نتایج

باسمه تعالی

اینجانب سعید قربانزاده به شماره دانشجویی ۹۸۱۳۵۲۸۰۰۵ دانشجوی رشته مهندسی مکانیک/گرایش تبدیل انرژی مقطع تحصیلی کارشناسی ارشد تأیید می‌نمایم که کلیه‌ی نتایج این پایان‌نامه/رساله حاصل کار اینجانب و بدون هرگونه دخل و تصرف است و موارد نسخه‌برداری‌شده از آثار دیگران را با ذکر کامل مشخصات منبع ذکر کرده‌ام. در صورت اثبات خلاف مندرجات فوق، به تشخیص دانشگاه مطابق با ضوابط و مقررات حاکم (قانون حمایت از حقوق مؤلفان و مصنفان و قانون ترجمه و تکثیر کتب و نشریات و آثار صوتی، ضوابط و مقررات آموزشی، پژوهشی و انضباطی ...) با اینجانب رفتار خواهد شد و حق هرگونه اعتراض در خصوص احقاق حقوق مکتسب و تشخیص و تعیین تخلف و مجازات را از خویش سلب می‌نمایم. در ضمن، مسئولیت هرگونه پاسخگویی به اشخاص اعم از حقیقی و حقوقی و مراجع ذی‌صلاح (اعم از اداری و قضایی) به عهده‌ی اینجانب خواهد بود و دانشگاه هیچ‌گونه مسئولیتی در این خصوص نخواهد داشت.

نام و نام خانوادگی: سعید قربانزاده

امضا و تاریخ:

مجوز بهره‌برداری از پایان‌نامه

بهره‌برداری از این پایان‌نامه در چهارچوب مقررات کتابخانه و با توجه به محدودیتی که توسط استاد راهنما به شرح زیر تعیین می‌شود، بلامانع است:

- ☐ بهره‌برداری از این پایان‌نامه/ رساله برای همگان بلامانع است.
- ☐ بهره‌برداری از این پایان‌نامه/ رساله با اخذ مجوز از استاد راهنما، بلامانع است.
- ☐ بهره‌برداری از این پایان‌نامه/ رساله تا تاریخممنوع است.

نام اساتید راهنما: دکتر واصفی

دکترمداح

تاریخ:

امضا:

تقديم به: (اختياري)

.....

تشکر و قدردانی: (اختیاری)

.....

چکیده

یکی از فرایندهای مورد استفاده در صنعت، فرایند تولید ایزو پروپیل بنزن (کومن) است. در این مطالعه از نرم افزار hysys ورژن ۱۰ استفاده شده است. در فرایند شبیه سازی از تجهیزات بسیاری استفاده شده است که از اصلی ترین تجهیزات، می توان به راکتور لوله ای و دو عدد برج تقطیر اشاره کرد.

مشخصاً در این فرایند ترکیبی از بنزن و پروپن به همراه مقدار خیلی کم از پروپان با یکدیگر وارد راکتور شده و درون راکتور از کاتالیست زئولیت استفاده شده و در نهایت محصول مورد نظر تولید شده است.

بررسی های صورت گرفته در این مثال بر یک طراحی مرسوم بر اساس کمینه سازی هزینه کلی برای مقادیر اسمی (بدون اعمال اغتشاش) پارامترهای غیر قطعی مبتنی است. به دلیل پرهزینه بودن آزمایش، با افزایش توان محاسباتی، اهمیت مدل سازی، شبیه سازی و بهینه سازی افزایش یافته است. در اغلب این مدل ها، چند پارامتر غیرقطعی وجود دارد، به عنوان مثال عدم قطعیت پارامترهای ناشی از واریانس زیاد در داده های تجربی مورد استفاده در تخمین آنها. روش های بررسی اثر پارامترهای غیرقطعی مدل بر شبیه سازی و یک توسعه جدید از یک روش بهینه سازی چندمعیاره انطباقی برای منظور کردن این عدم قطعیت ها بر اساس یک فرایند کومن تشریح و نشان داده شده است.

لازم به ذکر است برای اینکه مهندس به درک خوبی از موقعیت برسد و ایده آل ترین تصمیم را اتخاذ نماید در بخش آنالیز حساسیت از گزینه های مختلف استفاده می شود و بهینه سازی چند معیاره تعداد زیادی شبیه سازی مختلف تولید می کند که ارزش بالایی از نظر پشتیبانی تصمیم برای مهندس را دارد.

واژه های کلیدی: پشتیبانی تصمیم گیری، بهینه سازی چندمعیاره، بهینه سازی استوار، آنالیز حساسیت، بهینه سازی تصادف

فهرست مطالب

۱	فصل ۱: مقدمه
۲	۱-۱- مقدمه
۷	فصل ۲: مروری بر منابع و کارهای انجام شده
۸	۲-۱- مروری بر منابع
۱۶	فصل ۳: روش تحقیق
۱۷	۳-۱- شبیه سازی فرایند
۵۷	۳-۲- آنالیز حساسیت
۶۰	۳-۳- بهینه سازی چند معیاره تحت عدم قطعیت
۶۰	۳-۳-۱- بهینه سازی استوار
۶۶	۳-۳-۲- بهینه سازی تصادفی
۶۷	فصل ۴: نتایج و تفسیر آنها
۶۸	۴-۱- نتایج شبیه سازی
۸۸	۴-۲- مثال فرایند کومن
۹۲	۴-۳- استفاده از آنالیز حساسیت
۹۵	۴-۴- بکارگیری بهینه سازی تحت عدم قطعیت
۹۹	فصل ۵: جمع بندی و پیشنهادها
۱۰۰	۵-۱- نتیجه گیری
۱۰۴	مراجع

فهرست اشکال

شکل (۱-۱) اجزای برج تقطیر.....	۳
شکل (۲-۱) برج تقطیر سینی دار	۴
شکل (۱-۲) طرح شبیه سازی و بهینه سازی	۹
شکل (۱-۳) ترکیبات موجود در فرایند	۱۷
شکل (۲-۳) پکیج سیالاتی	۱۸
شکل (۳-۳) تعریف واکنش ها	۱۹
شکل (۴-۳) دیگر واکنش رخ داده	۲۰
شکل (۵-۳) جریان مربوط به بنزن	۲۱
شکل (۶-۳) خصوصیات ترمودینامیکی جریان مربوط به بنزن	۲۱
شکل (۷-۳) ترکیب درصد جریانات	۲۲
شکل (۸-۳) خصوصیات جریان حاوی پروپن	۲۳
شکل (۹-۳) دیگر خصوصیات جریان پروپن	۲۴
شکل (۱۰-۳) ترکیب درصد جریان پروپن	۲۴
شکل (۱۱-۳) خصوصیات جریانات حاکم بر پمپ	۲۶
شکل (۱۲-۳) دیگر خصوصیات جریانات حاکم بر پمپ	۲۷
شکل (۱۳-۳) پارامترهای پمپ	۲۸
شکل (۱۴-۳) پمپ مربوط به جریان پروپن	۲۹
شکل (۱۵-۳) دیگر خصوصیات جریانات عبوری از پمپ پروپن	۲۹
شکل (۱۶-۳) (پارامترهای پمپ پروپن	۳۰
شکل (۱۷-۳) خصوصیات جریان اختلاطی	۳۱
شکل (۱۸-۳) ترکیب درصد مواد در جریان اختلاطی	۳۱
شکل (۱۹-۳) خصوصیات هیتر	۳۲
شکل (۲۰-۳) (خصوصیات ترمودینامیکی	۳۳
شکل (۲۱-۳) شرایط عملکردی هیتر ثانویه	۳۳
شکل (۲۲-۳) دیگر خصوصیات ترمودیکی هیتر ثانویه	۳۴
شکل (۲۳-۳) پارامترهای هیتر ثانویه	۳۵
شکل (۲۴-۳) (شرایط عملکردی جریانات حاکم بر راکتور	۳۶
شکل (۲۵-۳) دیگر خصوصیات ترمودینامیکی جریانات حاکم بر راکتور	۳۷
شکل (۲۶-۳) ترکیب درصد در جریانات حاکم در راکتور	۳۸
شکل (۲۷-۳) پارامترهای موجود در راکتور	۳۸
شکل (۲۸-۳) دیگر مشخصات راکتور	۳۹

- شکل (۳-۲۹) مشخصات جریانات حاکم بر خنک کننده ۴۰
- شکل (۳-۳۰) دیگر خصوصیات ترمودینامیکی جریانات حاکم بر خنک کننده ۴۱
- شکل (۳-۳۱) پارامترهای موجود در خنک کننده ۴۲
- شکل (۳-۳۲) شرایط عملکردی جداکننده ۴۳
- شکل (۳-۳۳) سایر خصوصیات جریانات در جداکننده ۴۴
- شکل (۳-۳۴) ترکیب درصد مواد در جریانات در جداکننده ۴۵
- شکل (۳-۳۵) برج تقطیر اولیه ۴۶
- شکل (۳-۳۶) خصوصیات برج تقطیر اولیه ۴۶
- شکل (۳-۳۷) شرایط عملکردی جریانات در برج تقطیر اولیه ۴۷
- شکل (۳-۳۸) سایر خصوصیات ترمودینامیکی در برج تقطیر اولیه ۴۸
- شکل (۳-۳۹) جریان خروجی از بالای برج ۴۹
- شکل (۳-۴۰) شرایط عملکردی جریانات حاکم بر پمپ ۵۰
- شکل (۳-۴۱) سایر خصوصیات ترمودینامیکی جریانات حاکم بر پمپ ۵۱
- شکل (۳-۴۲) پارامترها پمپ ۵۲
- شکل (۳-۴۳) برج تقطیر ثانویه ۵۳
- شکل (۳-۴۴) شرایط عملکردی جریانات حاکم بر برج تقطیر ثانویه ۵۴
- شکل (۳-۴۵) سایر خصوصیات ترمودینامیکی جریانات ۵۵
- شکل (۳-۴۶) نمای کلی از فرایند شبیه سازی شده ۵۶
- شکل (۴-۲) دما در هر مرحله از برج تقطیر ۷۵
- شکل (۴-۳) فشار در هر مرحله از برج تقطیر ۷۶
- شکل (۴-۴) دبی مولی در هر مرحله از برج تقطیر ۷۷
- شکل (۴-۵) دبی مولی در هر مرحله از برج تقطیر اولیه ۷۷
- شکل (۴-۶) ترکیب درصد در هر مرحله از برج تقطیر ۷۸
- شکل (۴-۷) تغییرات دما در هر مرحله از برج تقطیر ثانویه ۸۲
- شکل (۴-۸) تغییرات فشار در هر مرحله از برج تقطیر ثانویه ۸۳
- شکل (۴-۹) تغییرات دبی مولی در هر مرحله از برج تقطیر ثانویه ۸۴
- شکل (۴-۱۰) تغییرات دانسیته در هر مرحله از برج تقطیر ثانویه ۸۴
- شکل (۴-۱۱) کسر مولی ترکیبات در هر مرحله از برج تقطیر ثانویه ۸۵
- شکل (۴-۱۲) اصول فرایند کومن ۹۰

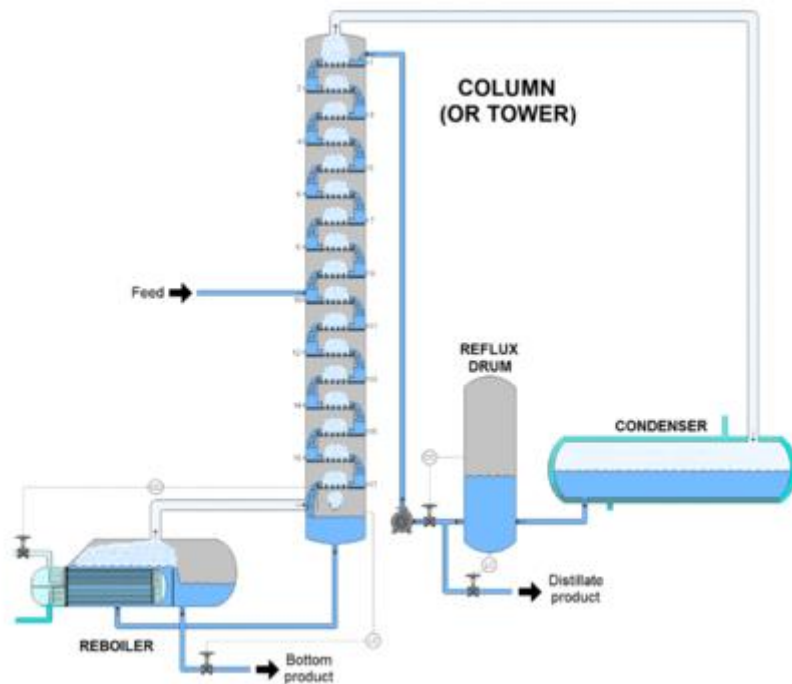
فصل ۱:

مقدمه

یکی از مهم ترین تجهیزات در شبیه سازی فرایند برج تقطیر است که عملیات جداسازی را انجام می دهد. برج تقطیر وسیله ای برای جداسازی فیزیکی و تقطیر مخلوط های مایع است که بر پایه اختلاف در نقطه جوش مایعات مختلف موجود در مخلوط، این عمل انجام می شود. در این فرآیند مایعات بر طبق میزان فراریت خود به اجزای سازنده خود تفکیک می شوند. در این مقاله نشریه جهان شیمی فیزیک به انواع برج های تقطیر و اساس کار آن ها می پردازیم.

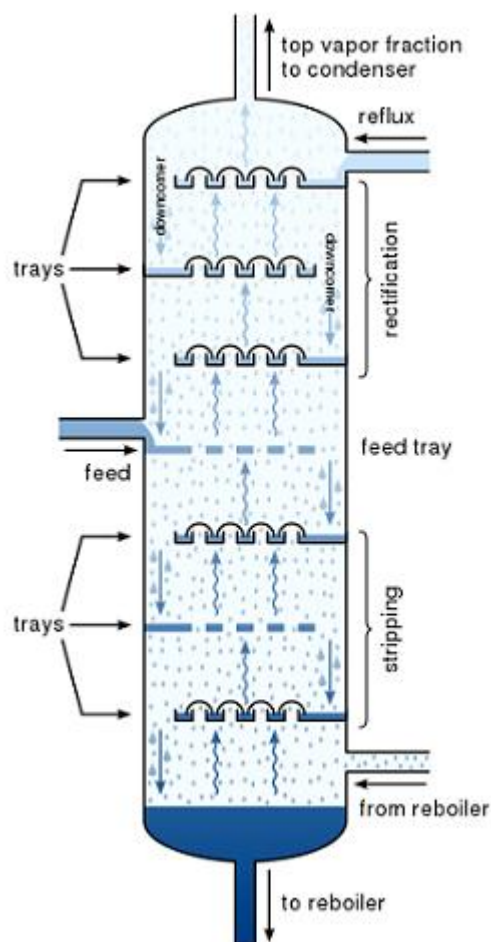
برج تقطیر یا برج جداسازی وسیله ای است که وقتی یک محلول با اجزای مختلف مانند نفت در آن ریخته شود، بر اساس اختلاف در نقطه جوش اجزای تشکیل دهنده آن، اجزای آن از هم جدا می شوند. این برج در دو مقیاس کوچک آزمایشگاهی و مقیاس بزرگ صنعتی در پالایشگاه ها ساخته می شود. نوع آزمایشگاهی برای مقادیر کم مواد و از جنس شیشه ساخته می شود. اما نوع صنعتی برای فرآیندهای پتروشیمی، نفت، گاز طبیعی، تخمیر و فرآیند قطران زغال سنگ تهیه می شود. مهم ترین استفاده برج تقطیر در صنایع نفت و برای جداکردن هیدروکربن های مختلف آن بر پایه میزان فراریت است چون نفت خام ترکیب پیچیده ی چند جزئی است. هیدروکربن سنگین تر نقطه جوش بالا داشته و هیدروکربن سبک با نقطه جوش پایین زودتر از برج خارج می شود.

برج تقطیر صنعتی، ستون های استوانه ای عمودی با قطر بین ۶۵ سانتی متر تا ۶ متر و ارتفاع حدود ۶ متر تا ۶۰ متر می باشد. این ستون جداسازی شامل قسمت های زیر است.



شکل (۱-۱) اجزا برج تقطیر

دو دسته برج ، برج های سینی دار و پرشده وجود دارد. جداسازی در برج های سینی دار، روی سینی ها (صفحات سوراخ دار فلزی) انجام می شود و تعداد و اندازه و حتی طرز قرار گرفتن سینی ها به میزان فراریت محلولی که جدا می شود بستگی دارد. در این سینی ها مایعات و گازها خلاف جهت هم باهم در تماس هستند. طوریکه مایع روی سینی حرکت کرده و با ناودون هایی به سینی پایین منتقل می شود و گازها به شکل حباب از طریق منافذ به سمت بالا حرکت کرده از میان مایع عبور کرده و توسط کندانسور مایع می شوند. در این برج ها باید تعداد سینی، ارتفاع برج، دمای برج و فاصله سینی ها تنظیم شود. برج های سینی دار به شکل های مختلف دریچه ای، کلاهکی، غربالی و فورانی استفاده می شود.



شکل (۲-۱) برج تقطیر سینی دار

اما در نوع دیگر برج ها یعنی پرشده، به جای سینی از پرکن (اجسامی با شکل معین) که به جز تقطیر کار جذب را هم انجام می دهد، استفاده می شود. این برج ها ارتفاع کمی داشته و مانند برج های سینی دار در آن ها، مایع از بالا و گاز از پایین وارد می شود. در این جا بخار مایع از روی سطح پرشده ای که با مایع مرطوب شده است عبور می کند. توزیع مایع در این برج ها مهم است، چون اگر قسمتی از بستر خشک بماند بازده تماس گاز - مایع کاهش می یابد. همچنین برای حفظ بستر پرکن دو سینی در بالا و پایین برج های پرکن می گذارند.

سیستم جوش آور در انتهای برج تقطیر قرار دارد و گرما و حرارت لازم برای محلول را فراهم می کند که در برج های سینی دار سیستم جوش آور یک سینی است. در انتخاب سیستم جوش آور مناسب باید نکاتی چون خواص فیزیکی سیال مثل چگالی، فشار عملیات، روش قرار گرفتن وسایل، سرعت انتقال، سهولت نگه داری، زمان اقامت سیال در فرآیند و هزینه ها در نظر گرفته شود.

سیستم چگالنده یا کندانسور کار میعان بخارات حاصل از گرما دادن محلول را انجام می دهد. وقتی کار میعان کامل شده که همه بخار ایجاد شده، مایع شود و مقداری از آن وارد مخزن ذخیره شود و مقداری دیگر نیز به برج برگردد به این چگالنده ها کامل می گویند. اما با کندانسور جزئی بخشی از این بخار به جای مایع شدن از برج خارج می شود.

به مخلوط مایع یا گازی که وارد برج تقطیر می شود خوراک می گویند که می تواند مخلوط گاز و مایع باشد. محل ورودی خوراک که در نقطه مشخصی از برج است که به دما، حالت فیزیکی و کسر مولی خوراک بستگی دارد. در برج های سینی دار یک سینی خوراک وجود دارد که خوراک مایع همراه با مایع ورودی از بالا، داخل آن می شوند. اما خوراک گازی از زیر سینی خوراک داخل می شود. مخلوط گاز و مایع اول جداسازی می شوند بعد وارد برج می شوند.

آن محصولی که از بالای برج خارج می شود و حامل جزئی است که نقطه جوش کمی دارد محصول بالاسری نام دارد. اما ماده خارج شده از پایین برج که سرشار از جزء سنگین با نقطه جوش بالاتر است محصول ته مانده نام دارد.

به نسبت مایع برگشت شده بر حسب مول یا وزن درون برج به مایع یا بخار خارج شده از برج نسبت برگشتی (R) می گویند. وقتی نسبت برگشتی بزرگ باشد تعداد سینی های مورد نیاز کم و اما سطوح گرمایی مورد نیاز و مقدار مایع و بخار در برج و سطح مقطع برج زیاد می شود. زیاد بودن مقدار نسبت برگشتی به معنای برگشت تمام محصول به برج و کم بودن طول برج و مراحل است (برگشت کامل). کمتر بودن R به معنای کم

بودن تعداد مراحل و طول برج و ناقص بودن تفکیک است. مقدار مناسب R بین این دو حالت حداقل و حداکثر است.

همان طور که گفته شد برج های سینی دار تعداد سینی هایی متناسب با نوع محلول خود دارند. در ابتدا خوراک گازی، مایع یا مخلوطی از هر دو وارد برج تقطیر می شود. بعد سیستم ریبویلر به خوراک وارد شده گرما می دهد و آن را تبخیر می کند. بخار حاصل به سمت بالا در برج می رود و با مایع ورودی از بالا تماس پیدا می کند و دمای مایع ورودی از بالای برج تقطیر را بالا می برد. این دما وقتی به دمای حباب رسید، ذرات بخاری که غنی از جزء با نقطه جوش پایین است، تشکیل می شود. بخار تشکیل شده به سمت بالا رفته و سرد می شود و ماده با دمای جوش بالا مایع شده، به قسمت پایین برج می رود.

اگر سطح تماس بین دو فاز مایع و بخار بیشتر باشد جداسازی با بازده بهتری انجام می شود. استفاده از سینی های کلاهکی در برج های تقطیر صنعتی برای افزایش سطح تماس دو فاز مایع و بخار، معمول است. همچنین برای بالا بردن بازده در برج های تقطیر صنعتی، بخار سرد و مایع شده به برج برگشته می شود تا بیشتر مورد تفکیک قرار گیرد. این مایع بخارهای بالا رفته را سرد می کند و راندمان را بالا می برد.

این برج ها به جز مواردی که اختلال در خوراک، دمای محیط و سیستم گرمایشی پیش بیاید، به طور ممتد کار می کنند. مقدار خوراکی که به یک برج تقطیر وارد می شود با مقدار محصولی که از آن خارج می شود برابر است. همچنین حرارت ورودی به خوراک توسط ریبویلر با مقدار حرارت خارج شده توسط سیستم چگالنده بالاسری و محصولات برابر است. حرارت کم یا زیاد در ستون می تواند باعث تولید کف، حباب، اشک و یا سررفتن شود.

فصل ۲:

مروری بر منابع

استفاده از مدل‌های شبیه‌سازی برای بهینه‌سازی با توجه به معیارهای پایداری، مطابق شکل ۱ مستلزم ترکیبی از یک شبیه‌سازی فرایند ترمودینامیکی با یک ارزیابی پایداری (تخمین هزینه و ارزیابی چرخ عمر) است. علاوه بر پارامترهای فرایند که شامل پارامترهای طراحی و عملکردی می‌شود، پارامترهای مدل (به عنوان نمونه پارامترهای اندرکنشی مدل‌های تعادل فازی، پارامترهای سینتیکی یا ثابت‌های تعادل واکنش‌ها) و همچنین پارامترهای ارزیابی (مانند هزینه مواد خام) باید داده شود.

بسیاری از این پارامترها معمولاً به طور دقیق معلوم نیستند و عدم قطعیت دارند. اثرات این عدم قطعیت‌ها بر نتایج شبیه‌سازی به‌ویژه بر مهم‌ترین اهدافی که در بهینه‌سازی استفاده می‌شوند، مورد توجه است. از آنجایی که معمولاً وابستگی اهداف بهینه‌سازی به پارامترهای غیرقطعی معلوم نیست، بررسی اثرات آن‌ها شبیه طراحی آزمایش‌ها است.

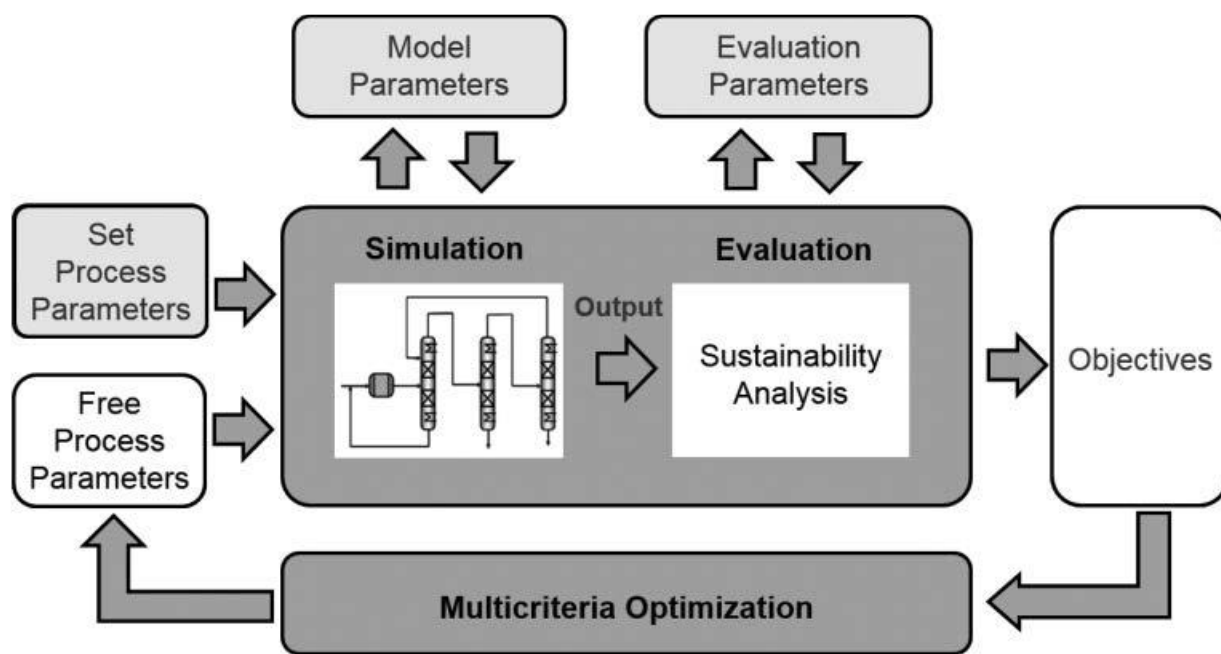
یک روش که به سادگی در یک نرم‌افزار شبیه‌سازی فرایند قابل پیاده‌سازی است، کاربرد نقاط نمونه در بازه تغییرات پارامترهای غیرقطعی است. نقاط نمونه، مجموعه‌هایی از پارامترهای غیرقطعی است که از این پس سناریو نامیده می‌شود. بنابراین در این مطالعه، تعداد محدودی سناریو برای بهینه‌سازی تحت تأثیر عدم قطعیت مدنظر قرار می‌گیرد. تعداد سناریوی نامحدود می‌تواند منجر به مشکلات برنامه‌نویسی نیمه‌بینهایت شود (به عنوان نمونه ریمتسن^۱ و همکاران [۱]) که در این مطالعه مدنظر نیست.

یک جایگزین برای تکنیک‌های نمونه‌برداری، استفاده از مشتق‌گیری الگوریتمی (یا خودکار) (برای نمونه گریوانک و همکاران^۲ [۲]) برای تخمین اثرات پارامترهای غیرقطعی بر نتایج شبیه‌سازی با استفاده از یک

^۱ Reemtsen

^۲ Griewank

خطی‌سازی مناسب است. با این وجود، این روش به دلیل ساختار پیچیده برای نرم‌افزار شبیه‌سازی فرایند به سادگی قابل‌استفاده نیست و در نتیجه در اینجا استفاده نشده است.



شکل (۱-۲) طرح شبیه‌سازی و بهینه‌سازی فرایند و پارامترهای موردنیاز. اثر پارامترهای غیرقطعی θ (قابل‌انتخاب از پارامترهای ثابت فرایند، پارامترهای مدل و همچنین پارامترهای ارزیابی) بر نتایج شبیه‌سازی و بهینه‌سازی می‌شود. پارامترهای فرایند آزاد پارامترهای p مسئله بهینه‌سازی هستند.

چالش عمده به دست آوردن حداکثر اطلاعات با تلاش محدود (تعداد نقاط نمونه) است. روش‌های مختلف و متعددی برای این آنالیز حساسیت وجود دارد (برای نمونه ساتلی^۱ و همکاران [۳]) که اختلاف زیادی در دقت و هزینه دارند. درحالی‌که می‌توان از این روش‌های متنوع برای بررسی اثرات عدم قطعیت بر شبیه‌سازی استفاده

^۱ Satelli

کرد، پیاده‌سازی آن‌ها در بهینه‌سازی به دلیل اندازه مسئله و تعداد دفعات محاسبات، غالباً به روش‌هایی با تعداد نمونه بسیار پایین محدود می‌شود.

برای بهبود جریان کار مدل‌سازی، شبیه‌سازی و بهینه‌سازی در طول توسعه فرایند، اخیراً ابزارهای متعددی در ابزار شبیه‌سازی داخلی BASF یعنی CHEMASIM به دلیل در دسترس بودن کد منبع اعمال شد. با این حال تجربه مربوط به پیاده‌سازی، قابلیت استفاده و عملکرد به دست آمده به انتخاب شبیه‌ساز فرایند یا محیط کارخانه وابسته نیست و در نتیجه به‌طور عمومی مورد توجه است. یک توصیف جامع از امکانات CHEMASIM با چند نمونه کاربرد آن در آسپیرون و همکاران [۴] داده شده است.

برای کارهای ذکر شده برای بررسی اثرات عدم قطعیت دو گزینه مورد توجه است: (۱) آنالیز حساسیت که بررسی وابستگی اهداف دلخواه (قابل انتخاب از خروجی‌های شبیه‌سازی) به پارامترهای غیرقطعی به ازای ورودی‌های مختلف شبیه‌سازی را پشتیبانی می‌کند (به عنوان نمونه بازتاب شرایط عملیاتی مختلف). (۲) روش بهینه‌سازی چندمعیاره موجود با طرح نمونه‌برداری مرز پارتو^۱ (بهینه‌سازی چندمعیاره بورتز^۲ و همکاران [۵]، برگر^۳ و همکاران [۶]) که برای بهینه‌سازی استوار و بهینه‌سازی تصادفی موارد کاربردی توسعه داده شد. این روش‌ها عدم قطعیت‌ها را در طول بهینه‌سازی مدنظر قرار می‌دهند.

همان‌طور که در شکل (۱-۲) نشان داده شد، می‌توان اثر عدم قطعیت پارامترهای متعدد بر نتایج شبیه‌سازی و بهینه‌سازی را مورد بررسی قرار داد. برای نمونه، پارامترهای ثابت فرایند مانند پارامترهای کاری (دماها، فشارها، جریان‌های جرم، غلظت‌ها و ...) و پارامترهای طراحی (تعداد تئوری طبقه‌های یک ستون و غیره) و همچنین پارامترهای مدل می‌تواند به صورت غیرقطعی تعریف شود.

^۱ Pareto

^۲ Multicriteria optimization (MCO)

^۳ Bortz

^۴ Burger

در اینجا یک رابط به خواص فیزیکی (ضرایب فعالیت، فشار بخارها، انتالپی ها و ...) در CHEMASIM پیاده شده است. با استفاده از این رابط، عدم قطعیت خواص فیزیکی به صورت مستقیم تعریف می شود به عنوان مثال محدود کردن ضریب فعالیت یا فشارهای بخار به جای پارامترهای برهم کنشی یا پارامترهای فشار بخار (برگر و همکاران [۷]).

علاوه بر این می توان برای آنالیز حساسیت با اعمال ضرایبی بر سایر پارامترهای مدل مانند پارامترهای واکنش (ثابت های تعادل و واکنش) و ضرایب انتقال جرم و همچنین ضرایب افزایش اغتشاش ایجاد کرد. علاوه بر این، پارامترهای ارزیابی مانند هزینه ها و برخی ورودی های پایداری را نیز می توان به عنوان پارامترهای غیرقطعی برای بررسی انتخاب کرد.

در ادامه برخی اصول پایه ای این روش ها تشریح شده و سپس استفاده از آن در فرایند تولید کومن برخی از کارکردها و استفاده آن ها در توسعه فرایند را نشان می دهد.

آنالیز حساسیت یک بسط طبیعی از تغییر پارامترها است به حالتی است که مجموعه پارامترهای شمارش شده^۱ نوعی عدم قطعیت دارند - چه در خود این پارامترهای شمارش شده و چه در سایر پارامترهای مدل. بنابراین، این روش به شکل تغییر پارامترها پیاده سازی می شود. نتایج در یک رابط کاربری گرافیکی به همراه المان های فیلتر تعاملی و اطلاعات آماری نمایش داده می شود.

علاوه بر این مورد کاربردی مرسوم، آنالیز حساسیت امکان بررسی اثر پارامترهای غیرقطعی در اهداف مختلف را فراهم می کند که می تواند پس از اجرای آنالیز حساسیت از مجموعه کامل خواص جریان، جریان های گرما یا توابع خود تعریف انتخاب شود. در آنالیز حساسیت شرایط کاری مختلف را می توان با شمارش جداگانه تحلیل کرد که می توانند بازتاب شرایط کاری مختلف به عنوان مثال بارهای مختلف در یک نیروگاه شیمیایی باشند.

^۱ Enumerated parameter

تجربه نشان می‌دهد که مقایسه طرح‌های مختلف نمونه‌برداری پارامترهای غیرقطعی برای به دست آوردن نتایج قابل اطمینان از آنالیز حساسیت ضروری است. بنابراین، روش‌های مختلفی برای تخمین اثرات پارامترهای غیرقطعی به کار گرفته شده است. از آنجایی که یک وابستگی تابعی ساده بین اهداف و پارامترهای غیرقطعی وجود ندارد، اثرات آن‌ها باید با نمونه‌برداری از کل بازه عدم قطعیت تخمین زده شود. به طور کلی دو دسته روش برای این کار وجود دارد: (۱) روش‌هایی که با تعریف تفاضل محدود، اثرات پارامترها بر هدف را به طور مجزا و مستقیم تخمین می‌زنند و (۲) روش‌هایی که سهم هر یک از پارامترهای مختلف را در واریانس (یعنی مربع انحراف معیار یک توزیع) تخمین می‌زنند.

در حالی که دسته اول روش‌ها همواره معین و قطعی هستند، در دسته دوم هم روش‌های تصادفی و هم روش‌های قطعی وجود دارد.

نتایج دو دسته روش‌ها به طور مستقیم قابل مقایسه نیست. در حالی که روش‌های اول ممکن است مقادیر منفی نیز داشته باشند (اثر معکوس)، روش‌های تصادفی زمانی که عدم قطعیت تغییرات زیادی تولید کند، تنها سهم‌های مثبت با مقادیر بزرگ تولید می‌کنند.

جزئیات مربوط به روش‌های مختلف نمونه‌برداری در ساتلی [۳] موجود است. جدول ۱ انتخاب‌های مختلف که در CHEMASIM پیاده شده است را نشان می‌دهد. روش انتگرال‌گیری عددی با استفاده از نقاط سیگما بر نقاط سیگما مبتنی است که با استفاده از فرمول‌های انتگرال‌گیری عددی کاملاً متقارن محاسبه شده است [۸].

نتایج در یک پیمایشگر حساسیت قابل بررسی است که در آن خواصی که حساسیت آن‌ها باید تخمین زده شود، قابل انتخاب است. گزینه‌های مختلفی برای تحلیل داده‌های تولیدشده وجود دارد:

- تصویرهای دوبعدی متعدد (نمودارهای پراکندگی، مشابه نمونه موجود در پیمایشگر MCO که توسط برگر و همکاران [۶] تشریح شده است) با امکان انتخاب یک خاصیت سوم به عنوان کد رنگ برای نقاط موردبررسی.

با این کار به طور مثال می‌توان تغییرات یک هدف برای نقاط شمارش شده مختلف را نشان داد. برای مثال اگر این نقاط، نقاط کاری مختلف را نشان دهند، می‌توان داده‌های آزمایشی را به این تصویر دوبعدی اضافه کرد.

جدول (۱-۲) روش‌های مختلف قابل انتخاب برای آنالیز حساسیت در CHEMASIM.

روش	کلاس
تک به تک [۳]	تفاضل محدود
طراحی عاملی کامل و کسری [۳]	
روش اثر ابتدایی [۳]	
شبه‌مونت کارلو (دنباله سوبول) [۳]	اندیس مبتنی بر واریانس
انتگرال‌گیری عددی با استفاده از نقاط سیگما [۸]	

- یک نمای لغزنده که امکان بررسی نتایج آنالیز حساسیت را با محدود کردن مقادیر یا پیمایش (لغزنده‌های متحرک)، مشابه MCO [۶] می‌دهد.

- نمودار میله‌ای حساسیت برای هر یک از اهداف انتخاب شده مورد بررسی: در اینجا در مورد روش‌های نمونه‌برداری مبتنی بر تفاضل محدود، برای هر پارامتر غیرقطعی دو مقدار حساسیت مختلف نشان داده می‌شود. علاوه بر این، یک نمودار جعبه-خط (نمودار جعبه‌ای) برای نمایش کل بازه، چارک‌ها، مقادیر میانگین و مقدار مرجع (یا مقدار اسمی) در نظر گرفته می‌شود.

- برای خواص برداری به طور مثال پروفیل‌های دمای ستون‌ها می‌توان حساسیت را برای کل بردار دید. این کار به عنوان مثال امکان انتخاب موقعیت قرارگیری حسگر دما در یک ستون تقطیر را بر اساس بیشترین حساسیت در نوسانات فرایند مشابه آنچه در اولدنبرگ^۱ و همکاران [۹] آمده، فراهم می‌کند.

- در پیمایشگر حساسیت امکان محاسبه آرایه بهره نسبی وجود دارد که می‌توان با استفاده از آن ترکیب‌های ممکن مناسب متغیرهای دستکاری‌شده و کنترل‌شده را تعیین کرد (به عنوان مثال به اسکوگستاد^۲ [۱۰] مراجعه کنید).

یک ابزار بهینه‌سازی چندمعیاره موجود مبتنی بر یک روش انطباقی برای محاسبه نقاط پارتو (بورتز و همکاران [۵]) برای منظور کردن عدم‌قطعیت‌ها در بهینه‌سازی بسط داده شد. همان‌طور که ذکر شد، در این جا تنها تعداد محدودی سناریو (نمونه‌برداری) در نظر گرفته می‌شود.

در اولین پیاده‌سازی به عنوان روش نمونه‌برداری برای بررسی اثر عدم‌قطعیت از طراحی عاملی استفاده شد. در اصل می‌توان کاربرد را به سایر روش‌ها بسط داد، البته این خطر وجود دارد که پیچیدگی ناشی از روش‌های مختلف پیش آید و تعداد اجراهای شبیه‌سازی و بهینه‌سازی بسیار افزایش یابد. بنابراین در اینجا یک روش با هزینه محاسباتی نسبتاً کم از نظر تعداد نمونه‌برداری‌ها انتخاب شد. دو راه مختلف برای منظور کردن سناریوهای مختلف نمونه‌برداری وجود دارد.

تمرکز بر بدترین حالت و تلاش در جهت بهینه کردن آن که در بهینه‌سازی استوار انجام می‌شود (برای نمونه به [۱۱] و [۱۲] رجوع کنید) یا این که سناریوهای مختلف ارزیابی شود تا یک مقدار میانگین (یا مقدار مورد انتظار) و یک واریانس محاسبه شود تا از آن‌ها به عنوان اهداف در بهینه‌سازی چندمعیاره استفاده شود که این کار در بهینه‌سازی تصادفی انجام می‌شود (به طور مثال به [۱۳] و [۱۴] رجوع کنید).

^۱ Oldenburg

^۲ Skogestad

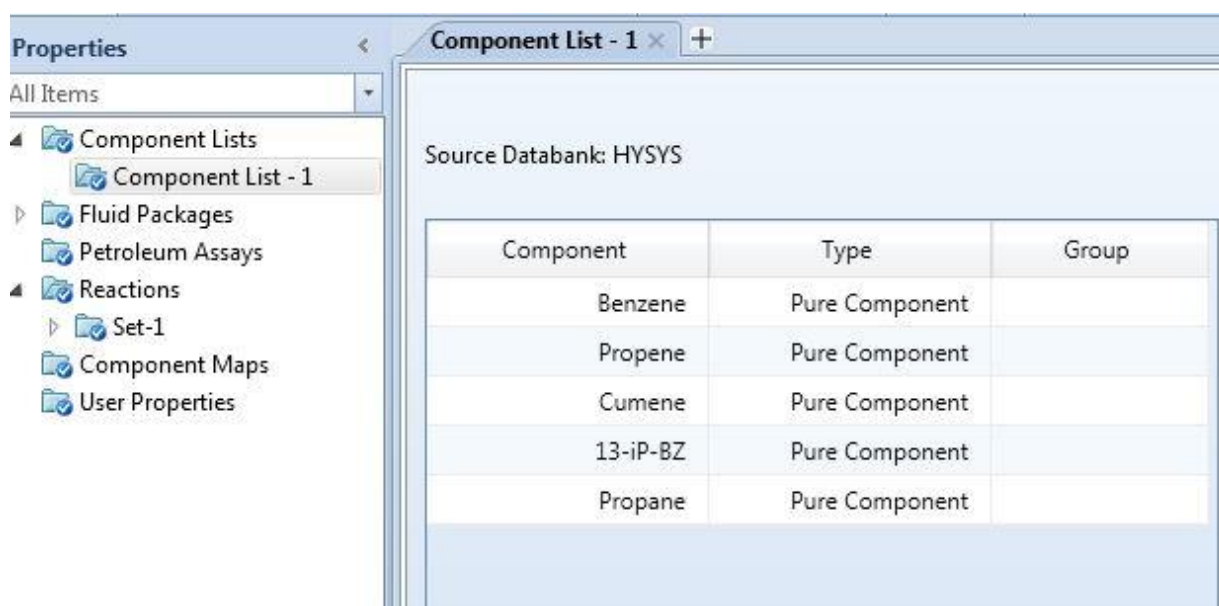
فصل ۳

روش تحقیق

۳-۱- شبیه سازی فرایند

برای شبیه سازی واحد ایزوپروپیل بنزن (کیومن) از نرم افزار هایسیس ورژن ۱۰ استفاده شده است. اولین قدم در شبیه سازی واحد انتخاب نمودن ترکیبات و مواد موجود در فرایند است. این فرایند واکنش هایی را درون راکتور را در بر میگیرد. بنابراین لازم است ابتدا مواد شامل شده در واکنش ها را در بخش ابتدایی نرم افزار معرفی نماییم.

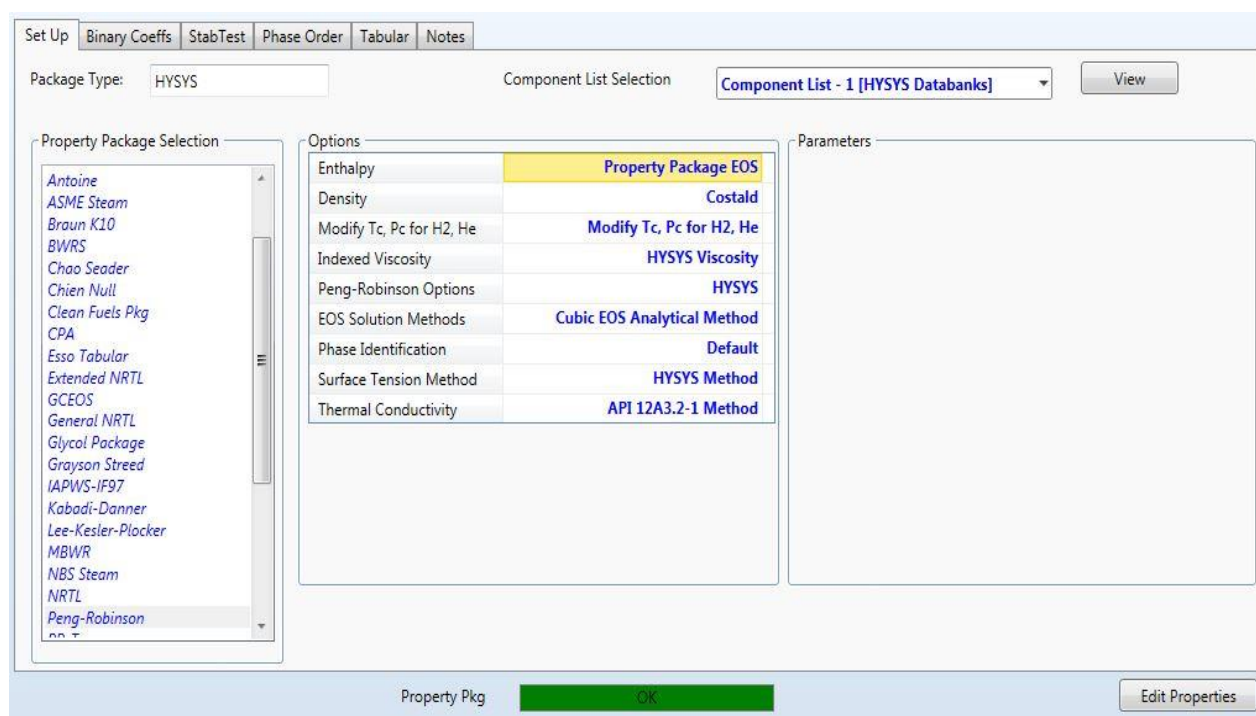
بنزن، پروپن، ایزوپروپیل بنزن، پروپان مواد این واکنش را تشکیل می دهند. تعدادی از این مواد در ابتدای فرایند شبیه سازی وجود ندارند و در درون راکتور در اثر انجام واکنش های مربوطه بوجود می آیند، ولی لازم است که در این قسمت تعریف شود. همانطور که در میبینید ترکیبات مورد نظر از میان ترکیبات موجود در کتابخانه نرم افزار انتخاب می شوند.



شکل (۳-۱) ترکیبات موجود در فرایند

کتاب خانه نرم افزار هایسیس تعدا زیادی از مواد و ترکیبات را با تمامی مشخصات آنها در دسترس کاربرد قرار داده است. اگر ماده ی مورد نظر در کتابخانه در دسترس نباشد، کاربر می تواند خود آنرا تعریف کرده و خصوصیات لازم را به آن بدهد. مواد با توجه به فرمول آن ها پیدا و انتخاب گردیدند.

فرمول پروپن C_3H_6 ، ایزوپروپیل بنزن C_9H_{12} ، پروپان C_3H_8 است. پس از انتخاب ترکیبات موجود در فرایند، به انتخاب بسته ترمودینامیکی لازم پرداخته شده است. نرم افزار با توجه به ماهیت فرایند بسته ترمودینامیکی خود را جهت انجام محاسبات ترمودینامیکی لازم دارد. اگر بسته ترمودینامیکی با ماهیت فرایند همخوانی نداشته باشد، این قسمت به رنگ سبز به معنای RUN شدن در نمی آید. همانطور که در قابل مشا| اهده است، بسته ترمودینامیکی Peng rabinson انتخاب گردیده است.



شکل (۲-۳) پکیج سیالاتی

واکنش هایی که قرار در در قسمت شبیه سازی درون راکتور معرفی شود، ابتدا باید درون قسمت reaction صفحه ابتدایی هایسیس معرفی شود. بنابراین ابتدا در قسمت واکنش ها، به تعریف واکنش های مربوطه می پردازیم. ضرایب استوکیومتری و دیگر جزییات طبق شکل ... تعریف شده است و این واکنش ها تعریف گردیده اند.

Component	Mole Wt.	Stoich Coeff	Fwd Order	Rev Order
Propene	42.081	-1.000	1.00	0.00
Benzene	78.110	-1.000	1.00	0.00
Cumene	120.194	1.000	0.00	1.00
Add Comp				

Balance Error: 0.00000
Reaction Heat (25 C): -2.4e+04 kcal/kgmole

Basis: Molar Conc'n
Base Component: Propene
Rxn Phase: VapourPhase
Min. Temperature: -273.1 C
Max Temperature: 3000 C
Basis Units: kgmole/m3
Rate Units: kgmole/m3-s

Forward Reaction:
A: 6510.0
E: 12585
b: <empty>

Reverse Reaction:
A': <empty>
E': <empty>
b': <empty>

Equation Help:

$$r = k \cdot f(\text{Basis}) - k' \cdot f(\text{Basis})$$

$$k = A \cdot \exp \left\{ -E / RT \right\} \cdot T^b$$

$$k' = A' \cdot \exp \left\{ -E' / RT \right\} \cdot T^{b'}$$
 T in Kelvin

شکل (۳-۳) تعریف واکنش ها

در این مجموعه واکنش ها پروپن و بنزن با یکدیگر واکنش داده اند، به این واکنش چون ضرایب استوکیومتری آنها در واکنش ۱ است و در قسمت واکنش دهنده ها هستند، مقدار ضریب آنها ۱- انتخاب شده است. در اثر واکنش این دو ماده در حضور کاتالیت با یکدیگر، ایزوپروپیل بنزن (کیومن) تولید شده است که ضریب آن ۱ است و چون در قسمت فراورده است ضریب آن ۱ در نظر گرفته شده است.

واکنش دیگری که تعریف شده است واکنش کیومن تولید شده با مقداری از پروپن است که $C_{12}H_{18}$ تولید کرده است. حال با تعریف مقدمات شبیه سازی، وارد قسمت اصلی فرایند که محیط شبیه سازی است، می شویم. در این قسمت تمامی تجهیزات مورد نظر که برای شبیه سازی مورد نیاز است در دسترس است و می توان از آنها برای شبیه سازی استفاده نمود. با یکپارچه کردن این تجهیزات با یکدیگر می توان فرایند مذکور را انجام داد.

Component	Mole Wt.	Stoich Coeff	Fwd Order	Rev Order
Cumene	120.194	-1.000	1.00	0.00
Propene	42.081	-1.000	1.00	0.00
13-iP-BZ	162.274	1.000	0.00	1.00
Add Comp				

Basis	
Basis	Molar Conc'n
Base Component	Cumene
Rxn Phase	VapourPhase
Min. Temperature	-273.1 C
Max Temperature	3000 C
Basis Units	kgmole/m3
Rate Units	kgmole/m3-s

Forward Reaction		Reverse Reaction	
A	450.00	A'	<empty>
E	13145	E'	<empty>
b	<empty>	b'	<empty>

Equation Help
 $r = k \cdot f(\text{Basis}) - k' \cdot f'(\text{Basis})$
 $k = A \cdot \exp \{ -E / RT \} \cdot T^b$
 $k' = A' \cdot \exp \{ -E' / RT \} \cdot T^{b'}$
 T in Kelvin

Balance Error: 0.00000
 Reaction Heat (25 C): -2.4e+04 kcal/kgmole

Ready

شکل (۳-۴) دیگر واکنش رخ داده

در ابتدا جریان مربوط به بنزن تعریف شده است. این جریان که از یک شیر کنترل عبور میکند. این شیر وظیفه کنترل میزان ورود بنزن را بر عهده دارد. همانطور که در شکل میبینید دمای این جریان برابر با ۲۵ درجه سانتیگراد است.

Material Stream: 1			
Worksheet Attachments Dynamics			
Worksheet	Stream Name	1	Liquid Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0.0000	1.0000
Properties	Temperature [C]	25.00	25.00
Composition	Pressure [bar]	1.000	1.000
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	105.5	105.5
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/s]	2.290	2.290
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	9.344	9.344
User Variables	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	1.199e+004	1.199e+004
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-145.6	-145.6
Cost Parameters	Heat Flow [kcal/h]	1.265e+006	1.265e+006
Normalized Yields	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	9.337	9.337
	Fluid Package	Basis-1	
	Utility Type		

شکل (۵-۳) جریان مربوط به بنزن

Material Stream: 1			
Worksheet Attachments Dynamics			
Worksheet	Stream Name	1	Liquid Phase
Conditions	Molecular Weight	78.11	78.11
Properties	Molar Density [kgmole/m3]	11.17	11.17
Composition	Mass Density [kg/m3]	872.2	872.2
Oil & Gas Feed	Act. Volume Flow [m3/h]	9.451	9.451
Petroleum Assay	Mass Enthalpy [kcal/kg]	153.5	153.5
K Value	Mass Entropy [kJ/kg-C]	-1.865	-1.865
User Variables	Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	118.7	118.7
Notes	Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	1.520	1.520
Cost Parameters	LHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	7.579e+005	7.579e+005
Normalized Yields	HHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	7.873e+005	7.873e+005
	HHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	1.008e+004	1.008e+004
	CO2 Loading	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Mole Conc. [kgmole/m3]	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Wt. Conc. [kgmol/kg]	<empty>	<empty>
	LHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	9703	9703
	Phase Fraction [Vol. Basis]	0.0000	1.000
	Phase Fraction [Mass Basis]	0.0000	1.000
	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	0.0000	1.000
	Mass Exergy [kcal/kg]	-3.515e-004	<empty>
	Partial Pressure of CO2 [bar]	0.0000	<empty>
	Cost Based on Flow [Cost/s]	0.0000	0.0000
	Act. Gas Flow [ACT_m3/h]	<empty>	<empty>
	Avg. Liq. Density [kgmole/m3]	11.29	11.29
	Specific Heat [kJ/kgmole-C]	118.7	118.7
	Std. Gas Flow [STD_m3/h]	2495	2495

شکل (۳-۶) خصوصیات ترمودینامیکی جریان مربوط به بنزن

فشار این جریان برابر با ۱ bar می باشد. برای تعریف ترکیبات تشکیل دهنده این جریان در قسمت composition مقدار کسر مولی را به بنزن ۱ داده ایم. به این معنی که تماماً از بنزن تشکیل شده است.

	Mass Fractions	Liquid Phase
Benzene	1.0000	1.0000
Propene	0.0000	0.0000
Cumene	0.0000	0.0000
13-iP-BZ	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.0000

Total 1.00000

Edit... View Properties... Basis...

OK

شکل (۳-۷) ترکیب درصد جریان

در جریان دیگر مقدار پروپن تعریف شده است. دمای این جریان نیز برابر با ۲۵ درجه سانتیگراد در نظر گرفته شده است که برابر با جریان بنزن باشد. فشار این جریان ۱۱,۶ bar است. دبی مولی این جریان مقداری برابر با ۴۶۶۰ kg/hr می باشد. همانطور که در شکل قابل مشاهده است، ترکیب درصد این جریان ۹۵ درصد از پروپن و ۵ درصد از پروپان تشکیل شده است.

Material Stream: 2		
Worksheet	Attachments	Dynamics
Worksheet	Stream Name	2 Liquid Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0.0000 1.0000
Properties	Temperature [C]	25.00 25.00
Composition	Pressure [bar]	11.60 11.60
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	110.5 110.5
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/s]	1.294 1.294
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	8.958 8.958
User Variables	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-346.7 -346.7
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	23.83 23.83
Cost Parameters	Heat Flow [kcal/h]	-3.830e+004 -3.830e+004
Normalized Yields	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	8.920 8.920
	Fluid Package	Basis-1
	Utility Type	

شکل (۸-۳) خصوصیات جریان حاوی پروپن

Material Stream: 2

Worksheet Attachments Dynamics

Worksheet

Conditions
Properties
Composition
Oil & Gas Feed
Petroleum Assay
K Value
User Variables
Notes
Cost Parameters
Normalized Yields

Stream Name	2	Liquid Phase
Molecular Weight	42.18	42.18
Molar Density [kgmole/m3]	12.00	12.00
Mass Density [kg/m3]	506.1	506.1
Act. Volume Flow [m3/h]	9.207	9.207
Mass Enthalpy [kcal/kg]	-8.219	-8.219
Mass Entropy [kJ/kg-C]	0.5649	0.5649
Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	116.7	116.7
Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	2.767	2.767
LHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	4.621e+005	4.621e+005
HHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	4.919e+005	4.919e+005
HHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	1.166e+004	1.166e+004
CO2 Loading	<empty>	<empty>
CO2 Apparent Mole Conc. [kgmole/m3]	<empty>	<empty>
CO2 Apparent Wt. Conc. [kgmol/kg]	<empty>	<empty>
LHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	1.095e+004	1.095e+004
Phase Fraction [Vol. Basis]	0.0000	1.000
Phase Fraction [Mass Basis]	0.0000	1.000
Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	0.0000	1.000
Mass Exergy [kcal/kg]	31.74	<empty>
Partial Pressure of CO2 [bar]	0.0000	<empty>
Cost Based on Flow [Cost/s]	0.0000	0.0000
Act. Gas Flow [ACT_m3/h]	<empty>	<empty>

Property Correlation Controls

Preference Option: Active

OK

شکل (۹-۳) دیگر خصوصیات جریان پروپن

Material Stream: 2

Worksheet Attachments Dynamics

Worksheet

Conditions
Properties
Composition
Oil & Gas Feed
Petroleum Assay
K Value
User Variables
Notes
Cost Parameters
Normalized Yields

	Mole Fractions	Liquid Phase
Benzene	0.0000	0.0000
Propene	0.9500	0.9500
Cumene	0.0000	0.0000
13-iP-BZ	0.0000	0.0000
Propane	0.0500	0.0500

Total 1.00000

Edit... View Properties... Basis...

OK

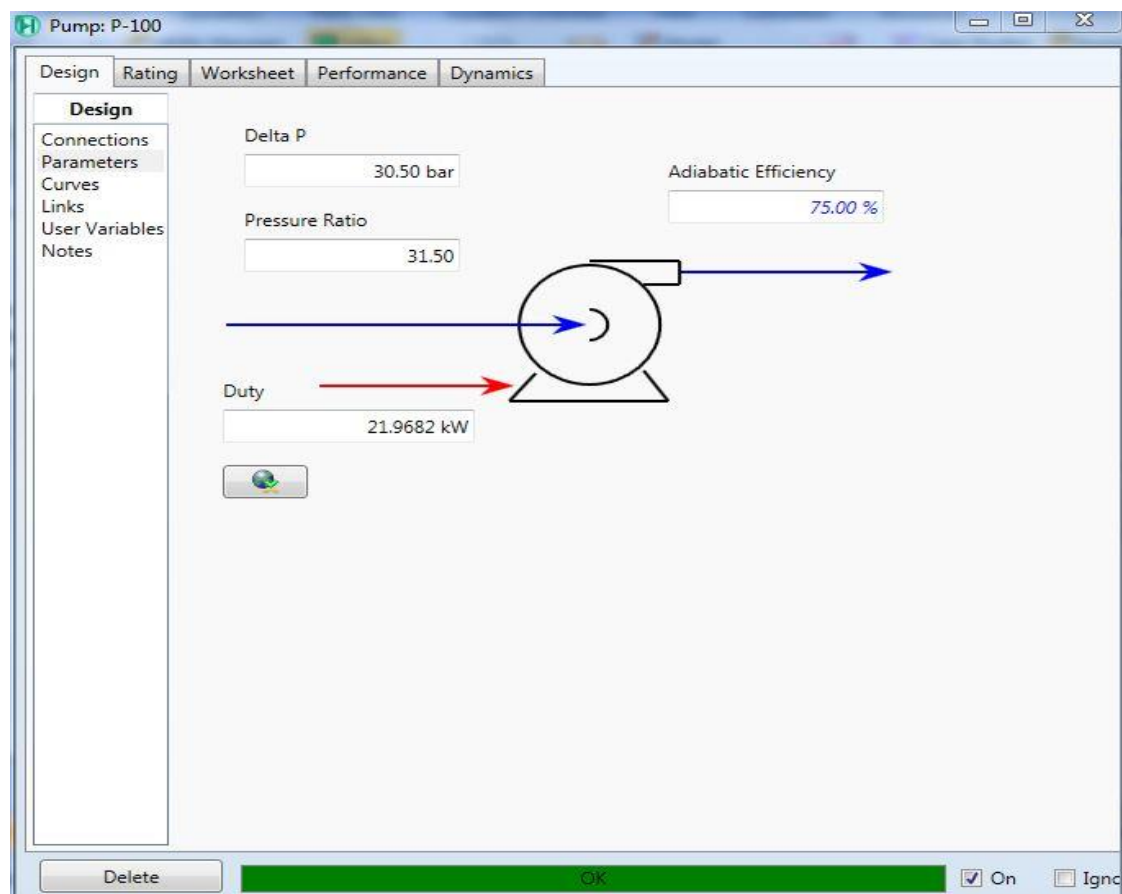
جریان بنزن در ادامه وارد یک Mixer میشود و با بنزن برگشتی از برج تقطیر اولیه ترکیب می شود. در این فرایند میزان ورود خوراک بنزن با به حدی در نظر گرفته اند که در مجموع با بنزن برگشتی از فرایند، مقدار تقریباً برابر با 200 kgmol/hr تشکیل دهد. این جریان وارد یک پمپ می شود. همانطور که در شکل مشاهده می شود فشار و دمای خروجی از پمپ به ترتیب برابر با $31,5 \text{ bar}$ و $36,69$ درجه سانتیگراد است. با توجه به شکل تغییر فشاری که در این پمپ بوجود آمده است برابر $30,5 \text{ bar}$ است. همچنین برای حصول این افزایش فشار مقدار $21,96 \text{ KW}$ توان مصرف شده است.

Pump: P-100				
Design Rating Worksheet Performance Dynamics				
Worksheet	Name	3	4	e1
Conditions	Vapour	0.0000	0.0000	<empty>
Properties	Temperature [C]	35.14	36.69	<empty>
Composition	Pressure [bar]	1.000	31.50	<empty>
PF Specs	Molar Flow [kgmole/h]	215.0	215.0	<empty>
	Mass Flow [kg/s]	4.599	4.599	<empty>
	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	19.02	19.02	<empty>
	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	1.121e+004	1.130e+004	<empty>
	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-133.4	-133.1	<empty>
	Heat Flow [kcal/h]	2.411e+006	2.430e+006	1.890e+004

شکل (۱۱-۳) خصوصیات جریانات حاکم بر پمپ

H Pump: P-100				
Design	Rating	Worksheet	Performance	Dynamics
Worksheet		Name	3	4
Conditions		Molecular Weight	77.01	77.01
Properties		Molar Density [kgmole/m3]	11.06	11.06
Composition		Mass Density [kg/m3]	851.4	851.6
PF Specs		Act. Volume Flow [m3/h]	19.45	19.44
		Mass Enthalpy [kcal/kg]	145.6	146.8
		Mass Entropy [kJ/kg-C]	-1.733	-1.728
		Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	121.8	121.8
		Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	1.582	1.582
		LHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	7.491e+005	7.491e+005
		HHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	7.787e+005	7.787e+005
		HHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	1.011e+004	1.011e+004
		CO2 Loading	<empty>	<empty>
		CO2 Apparent Mole Conc. [kgmole/m3]	<empty>	<empty>
		CO2 Apparent Wt. Conc. [kgmol/kg]	<empty>	<empty>
		LHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	9727	9727
		Phase Fraction [Vol. Basis]	0.0000	0.0000
		Phase Fraction [Mass Basis]	0.0000	0.0000
		Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	0.0000	0.0000
		Mass Exergy [kcal/kg]	6.281e-002	0.8985
		Partial Pressure of CO2 [bar]	0.0000	0.0000
		Cost Based on Flow [Cost/s]	0.0000	0.0000
		Act. Gas Flow [ACT_m3/h]	<empty>	<empty>
		Avg. Liq. Density [kgmole/m3]	11.31	11.31
		Specific Heat [kJ/kgmole-C]	121.8	121.8
		Std. Gas Flow [STD_m3/h]	5084	5084
		Std. Ideal Liq. Mass Density [kg/m3]	870.7	870.7
		Act. Liq. Flow [m3/s]	5.402e-003	5.400e-003
Delete		OK		<input checked="" type="checkbox"/> On <input type="checkbox"/> Ignd

شکل (۳-۱۲) دیگر خصوصیات جریانات حاکم بر پمپ



شکل (۳-۱۳) پارامترهای پمپ

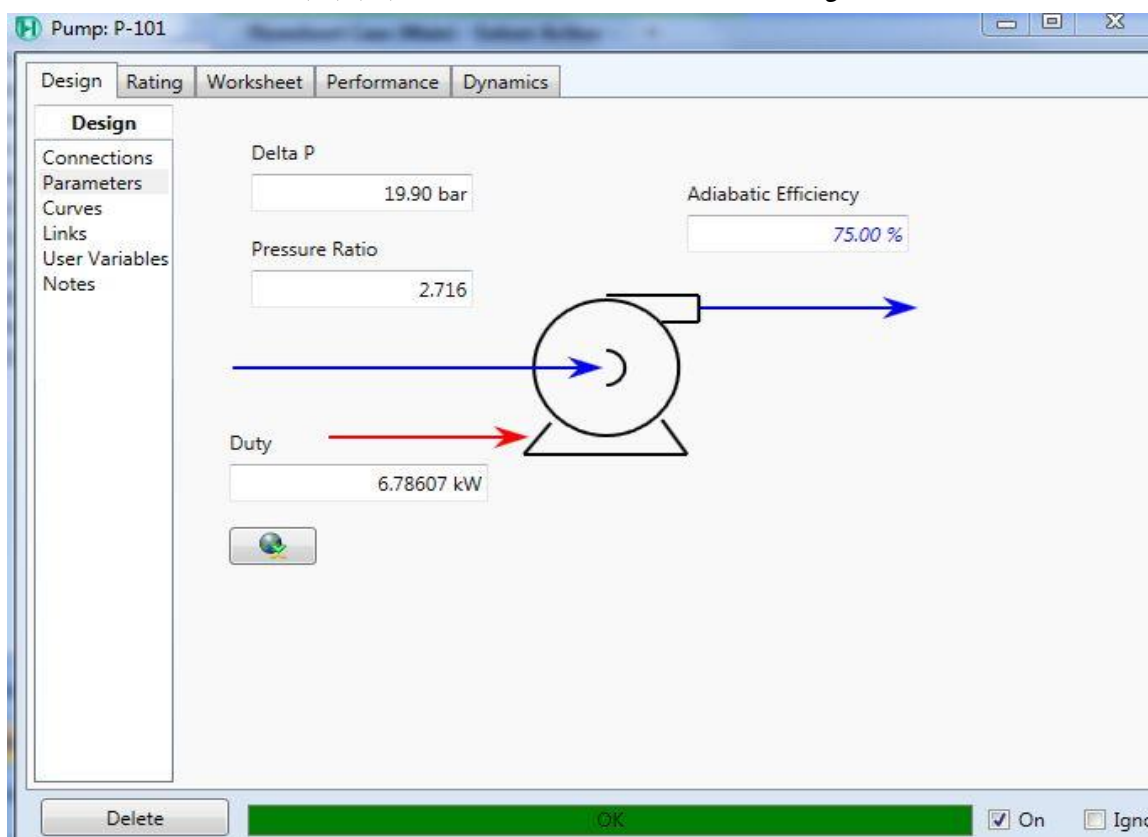
همچنین جریان پروپن نیز وارد یک پمپ شده است. خصوصیات جریانات حاکم بر این پمپ در شکل ارائه شده است. این پمپ نیز فشار جریان را به مقدار ۳۱,۵ bar می رساند و در نتیجه دمای جریان خروجی به مقدار ۲۷,۴ درجه سانتیگراد رسیده است. با توجه به شکل مشاهده می شود که تغییرات فشار در این پمپ برابر با ۱۹,۹۰ bar است که به توانی برابر با ۶,۷۸ KW نیاز دارد.

Pump: P-101				
Design Rating Worksheet Performance Dynamics				
Worksheet	Name	2	5	e2
Conditions	Vapour	0.0000	0.0000	<empty>
Properties	Temperature [C]	25.00	27.40	<empty>
Composition	Pressure [bar]	11.60	31.50	<empty>
PF Specs	Molar Flow [kgmole/h]	110.5	110.5	<empty>
	Mass Flow [kg/s]	1.294	1.294	<empty>
	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	8.958	8.958	<empty>
	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-346.7	-293.8	<empty>
	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	23.83	24.04	<empty>
	Heat Flow [kcal/h]	-3.830e+004	-3.246e+004	5839
Delete OK <input checked="" type="checkbox"/> On <input type="checkbox"/> Ign				

شکل (۱۴-۳) پمپ مربوط به جریان پروپن

Pump: P-101				
Design Rating Worksheet Performance Dynamics				
Worksheet	Name	2	5	
Conditions	Molecular Weight	42.18	42.18	
Properties	Molar Density [kgmole/m3]	12.00	12.05	
Composition	Mass Density [kg/m3]	506.1	508.4	
PF Specs	Act. Volume Flow [m3/h]	9.207	9.166	
	Mass Enthalpy [kcal/kg]	-8.219	-6.966	
	Mass Entropy [kJ/kg-C]	0.5649	0.5699	
	Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	116.7	113.9	
	Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	2.767	2.700	
	LHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	4.621e+005	4.621e+005	
	HHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	4.919e+005	4.919e+005	
	HHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	1.166e+004	1.166e+004	
	CO2 Loading	<empty>	<empty>	
	CO2 Apparent Mole Conc. [kgmole/m3]	<empty>	<empty>	
	CO2 Apparent Wt. Conc. [kgmol/kg]	<empty>	<empty>	
	LHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	1.095e+004	1.095e+004	
	Phase Fraction [Vol. Basis]	0.0000	0.0000	
	Phase Fraction [Mass Basis]	0.0000	0.0000	
	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	0.0000	0.0000	
	Mass Exergy [kcal/kg]	31.74	32.64	
	Partial Pressure of CO2 [bar]	0.0000	0.0000	
	Cost Based on Flow [Cost/s]	0.0000	0.0000	
	Act. Gas Flow [ACT_m3/h]	<empty>	<empty>	
	Avg. Liq. Density [kgmole/m3]	12.33	12.33	
	Specific Heat [kJ/kgmole-C]	116.7	113.9	
	Std. Gas Flow [STD_m3/h]	2612	2612	
	Std. Ideal Liq. Mass Density [kg/m3]	520.2	520.2	
	Act. Liq. Flow [m3/s]	2.558e-003	2.546e-003	
	Z Factor	3.900e-002	0.1046	
	Watson K	14.21	14.21	
Delete OK <input checked="" type="checkbox"/> On <input type="checkbox"/> Ign				

شکل (۱۵-۳) درگر خصوصیات جریانات عبوری از پمپ پروپن



شکل (۱۶-۳) پارمترهای پمپ پروپن

دو جریان خروجی از پمپ ها که هم فشار هستند در یک Mixer با یکدیگر مخلوط می شوند. وظیفه دو پمپ این است که دو جریان را در یک فشار مشخصی نگه دارد و این دو جریان با فشار یکسانی با یکدیگر مخلوط شوند. جریان حاصل از اختلاط این دو جریان دارای خصوصیات مختلفی است. همانطور که در شکل ... قابل مشاهده است، این جریان دارای ترکیب درصدی از ۳ ماده پروپن، پروپان، بنزن شده است که دارای ۶۳،۹۵ درصد از بنزن، ۳۲،۷۶ درصد پروپن و ۳،۳ درصد پروپان است.

Material Stream: 6

Worksheet Attachments Dynamics

Worksheet

Stream Name	6	Liquid Phase
Vapour / Phase Fraction	0.0000	1.0000
Temperature [C]	35.12	35.12
Pressure [bar]	31.50	31.50
Molar Flow [kgmole/h]	325.5	325.5
Mass Flow [kg/s]	5.894	5.894
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	27.97	27.97
Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	7365	7365
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-75.58	-75.58
Heat Flow [kcal/h]	2.397e+006	2.397e+006
Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	27.39	27.39
Fluid Package	Basis-1	
Utility Type		

OK

شکل (۳-۱۷) خصوصیات جریان اختلاطی

Material Stream: 6

Worksheet Attachments Dynamics

Worksheet

	Mole Fractions	Liquid Phase
Benzene	0.6395	0.6395
Propene	0.3276	0.3276
Cumene	0.0000	0.0000
13-iP-BZ	0.0000	0.0000
Propane	0.0330	0.0330

Total 1.00000

Edit... View Properties... Basis...

OK

شکل (۳-۱۸) ترکیب درصد مواد در جریان اختلاطی

جریان در ادامه مسیر وارد یک هیتر شده است. خصوصیات جریانات حاکم بر هیتر در شکل ... آورده شده است. ملاحظه می گردد که وظیفه این هیتر این است که دمای جریان را به مقدار ۲۱۴ درجه سانتیگراد برساند. مقدار تغییرات دمایی این هیتر برابر با ۱۷۸,۹ درجه سانتیگراد است.

همچنین یک هیتر دیگر مورد استفاده قرار گرفته است تا دما را به میزان ۳۵۰ درجه سانتیگراد برساند. مشخصات هیتر در شکل ها ... آورده شده است و دیده می شود که افت فشار حاکم در هیتر برابر با ۰,۲ bar است. بنابراین فشار در خروجی از هیتر به میزان ۳۱,۳ bar رسیده است.

	6	7	e3
Name			
Vapour	0.0000	0.9772	<empty>
Temperature [C]	35.12	214.0	<empty>
Pressure [bar]	31.50	31.50	<empty>
Molar Flow [kgmole/h]	325.5	325.5	<empty>
Mass Flow [kg/s]	5.894	5.894	<empty>
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	27.97	27.97	<empty>
Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	7365	1.687e+004	<empty>
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-75.58	19.84	<empty>
Heat Flow [kcal/h]	2.397e+006	5.491e+006	3.093e+006

شکل (۳-۱۹) خصوصیات هیتر

Heater: E-100				
Design Rating Worksheet Performance Dynamics				
Worksheet	Name	6	7	
Conditions	Molecular Weight	65.19	65.19	
Properties	Molar Density [kgmole/m3]	11.57	1.147	
Composition	Mass Density [kg/m3]	754.0	74.78	
PF Specs	Act. Volume Flow [m3/h]	28.14	283.7	
	Mass Enthalpy [kcal/kg]	113.0	258.8	
	Mass Entropy [kJ/kg-C]	-1.159	0.3044	
	Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	115.0	148.4	
	Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	1.764	2.277	
	LHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	6.516e+005	6.516e+005	
	HHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	6.814e+005	6.814e+005	
	HHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	1.045e+004	1.045e+004	
	CO2 Loading	<empty>	<empty>	
	CO2 Apparent Mole Conc. [kgmole/m3]	<empty>	<empty>	
	CO2 Apparent Wt. Conc. [kgmol/kg]	<empty>	<empty>	
	LHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	9997	9997	
	Phase Fraction [Vol. Basis]	0.0000	0.9768	
	Phase Fraction [Mass Basis]	0.0000	0.9742	
	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	0.0000	0.9966	
	Mass Exergy [kcal/kg]	4.082	45.58	
	Partial Pressure of CO2 [bar]	0.0000	0.0000	
	Cost Based on Flow [Cost/s]	0.0000	0.0000	
	Act. Gas Flow [ACT_m3/h]	<empty>	282.8	
	Avg. Liq. Density [kgmole/m3]	11.63	11.63	
	Specific Heat [kJ/kgmole-C]	115.0	148.4	
	Std. Gas Flow [STD_m3/h]	7696	7696	
	Std. Ideal Liq. Mass Density [kg/m3]	758.4	758.4	
Delete		OK		Ignore

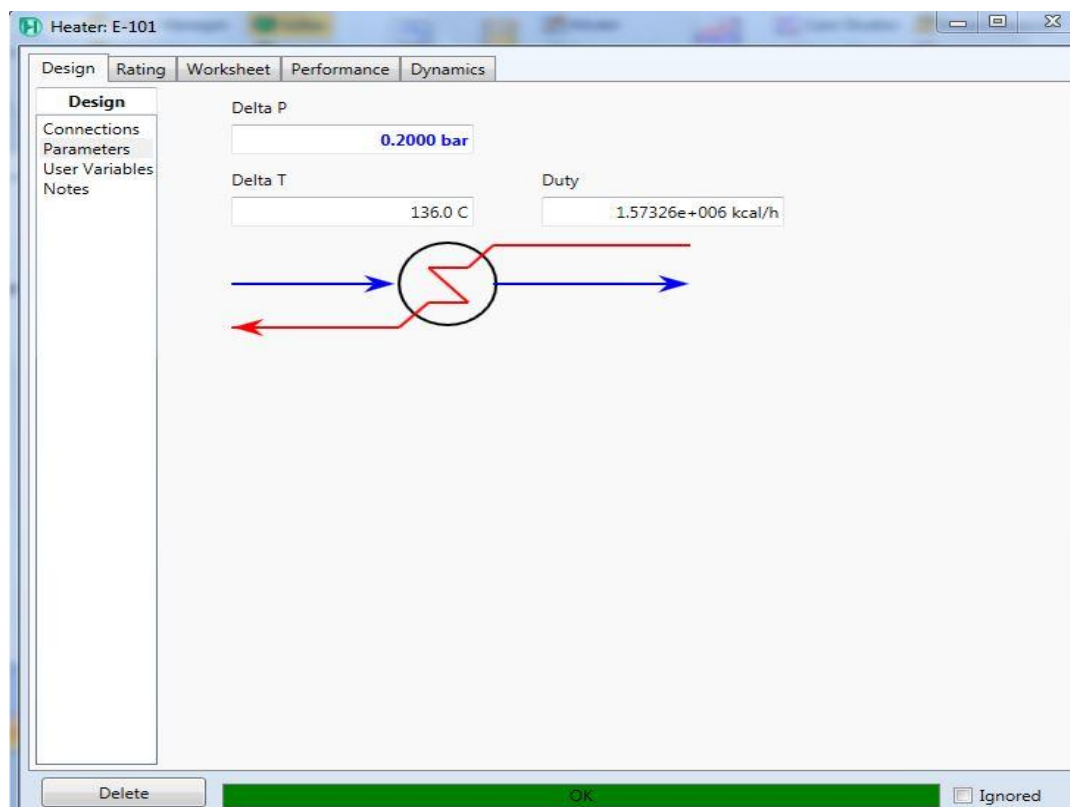
شکل (۳-۲۰) خصوصیات ترمودینامیکی دیگر هیتز

Heater: E-101				
Design Rating Worksheet Performance Dynamics				
Worksheet	Name	7	8	e4
Conditions	Vapour	0.9772	1.0000	<empty>
Properties	Temperature [C]	214.0	350.0	<empty>
Composition	Pressure [bar]	31.50	31.30	<empty>
PF Specs	Molar Flow [kgmole/h]	325.5	325.5	<empty>
	Mass Flow [kg/s]	5.894	5.894	<empty>
	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	27.97	27.97	<empty>
	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	1.687e+004	2.170e+004	<empty>
	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	19.84	56.55	<empty>
	Heat Flow [kcal/h]	5.491e+006	7.064e+006	1.573e+006
Delete		OK		Ignored

شکل (۳-۲۱) شرایط عملکردی هیتر ثانویه

Heater: E-101			
Design Rating Worksheet Performance Dynamics			
Worksheet	Name	7	8
Conditions	Molecular Weight	65.19	65.19
Properties	Molar Density [kgmole/m3]	1.147	0.6832
Composition	Mass Density [kg/m3]	74.78	44.54
PF Specs	Act. Volume Flow [m3/h]	283.7	476.4
	Mass Enthalpy [kcal/kg]	258.8	332.9
	Mass Entropy [kJ/kg-C]	0.3044	0.8676
	Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	148.4	151.3
	Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	2.277	2.321
	LHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	6.516e+005	6.516e+005
	HHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	6.814e+005	6.814e+005
	HHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	1.045e+004	1.045e+004
	CO2 Loading	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Mole Conc. [kgmole/m3]	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Wt. Conc. [kgmol/kg]	<empty>	<empty>
	LHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	9997	9997
	Phase Fraction [Vol. Basis]	0.9768	1.000
	Phase Fraction [Mass Basis]	0.9742	1.000
	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	0.9966	1.000
	Mass Exergy [kcal/kg]	45.58	79.60
	Partial Pressure of CO2 [bar]	0.0000	0.0000
	Cost Based on Flow [Cost/s]	0.0000	0.0000
	Act. Gas Flow [ACT_m3/h]	282.8	476.4
	Avg. Liq. Density [kgmole/m3]	11.63	11.63
	Specific Heat [kJ/kgmole-C]	148.4	151.3
	Std. Gas Flow [STD_m3/h]	7696	7696
	Std. Ideal Liq. Mass Density [kg/m3]	758.4	758.4
	Act. Liq. Flow [m3/s]	2.647e-004	<empty>

شکل (۳-۲۲) دیگر خصوصیات ترمودینامیکی هیتر ثانویه



شکل (۳-۲۳) پارامترهای هیتر ثانویه

جریانی که قرار است وارد راکتور شود و واکنش لازم بر روی آن انجام شود، باید به دمای مورد نظر واکنش رسیده باشد. راکتور مورد استفاده در این فرایند راکتور **plug flow** است. این راکتور که یک راکتور لوله ای است، به صورت یک لوله بلند که جریان مواد واکنش دهنده در آن بصورت پیوسته است تصور می شود. این راکتور در فاز گازی کاربرد دارد. از این راکتور بصورت عمده در مواردی که دما بالا، واکنش های سریع، تولید محصول زیاد و واکنش هاس همگن و ناهمگن است، استفاده می شود.

حال که جریان به دما و فشار مورد نظر واکنش رسیده است. وارد راکتور می شود و واکنش های مربوطه درون آن انجام می گردد. مشخصات کلی راکتور و جریانات درون آن در شکل های ارائه شده است.

Plug Flow Reactor: PFR-100 - Set-1			
Design Reactions Rating Worksheet Performance Dynamics			
Worksheet	Name	8	9
Conditions	Molecular Weight	65.19	95.42
Properties	Molar Density [kgmole/m3]	0.6832	0.8182
Composition	Mass Density [kg/m3]	44.54	78.07
PF Specs	Act. Volume Flow [m3/h]	476.4	271.8
	Mass Enthalpy [kcal/kg]	332.9	216.8
	Mass Entropy [kJ/kg-C]	0.8676	1.088
	Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	151.3	242.1
	Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	2.321	2.537
	LHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	6.516e+005	9.427e+005
	HHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	6.814e+005	9.862e+005
	HHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	1.045e+004	1.034e+004
	CO2 Loading	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Mole Conc. [kgmole/m3]	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Wt. Conc. [kgmol/kg]	<empty>	<empty>
	LHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	9997	9880
	Phase Fraction [Vol. Basis]	1.000	1.000
	Phase Fraction [Mass Basis]	1.000	1.000
	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	1.000	1.000
	Mass Exergy [kcal/kg]	79.60	80.54
	Partial Pressure of CO2 [bar]	0.0000	0.0000
	Cost Based on Flow [Cost/s]	0.0000	0.0000
	Act. Gas Flow [ACT_m3/h]	476.4	271.8
	Avg. Liq. Density [kgmole/m3]	11.63	8.950
	Specific Heat [kJ/kgmole-C]	151.3	242.1
	Std. Gas Flow [STD_m3/h]	7696	5258
	Std. Ideal Liq. Mass Density [kg/m3]	758.4	854.0
Delete		OK	
		Ignore	

شکل (۳-۲۵) دیگر خصوصیات ترمودینامیکی جریان‌ها حاکم بر راکتور

Plug Flow Reactor: PFR-100 - Set-1

Design Reactions Rating Worksheet Performance Dynamics

Worksheet

		8	9
Conditions	Benzene	0.6395	0.4802
Properties	Propene	0.3276	0.0157
Composition	Cumene	0.0000	0.4478
PF Specs	13-iP-BZ	0.0000	0.0079
	Propane	0.0330	0.0483

Delete OK Ignored

شکل (۳-۲۶) ترکیب درصد ترکیبات در جریان‌ات حاکم در راکتور

Plug Flow Reactor: PFR-100 - Set-1

Design Reactions Rating Worksheet Performance Dynamics

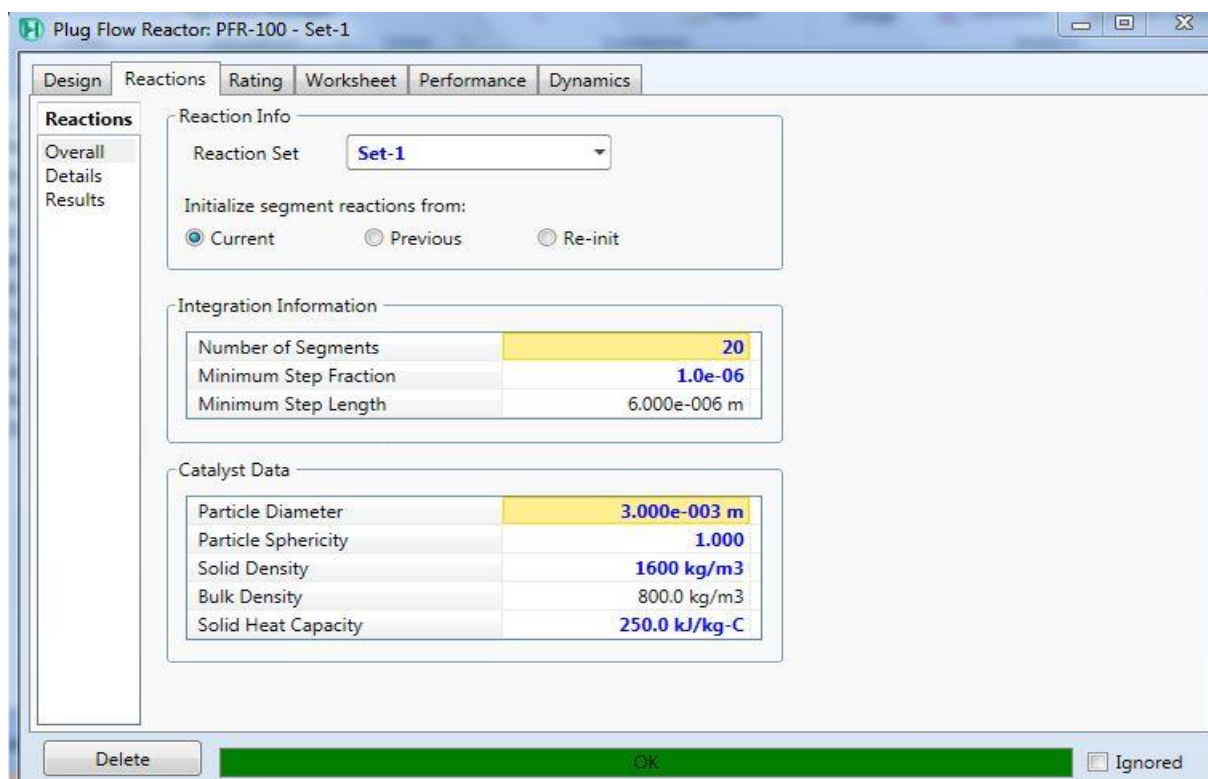
Rating

Sizing Nozzles

Tube Dimensions	
Total Volume	6.403 m3
Length	6.000 m
Diameter	7.620e-002 m
Number of Tubes	234
Wall Thickness	5.000e-003 m
Tube Packing	
Void Fraction	0.500
Void Volume	3.201 m3

Delete OK Ignored

شکل (۳-۲۷) پارامترهای موجود در راکتور



شکل (۳-۲۸) دیگر مشخصات راکتور

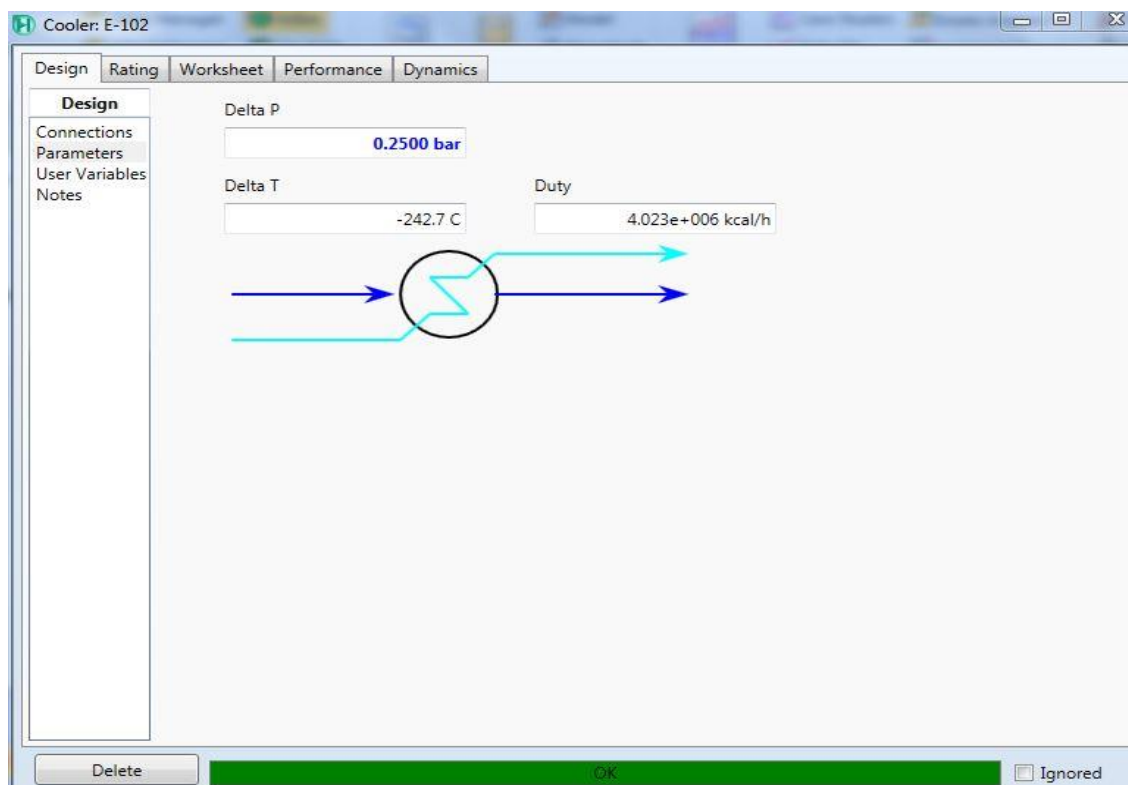
میزان افت فشار درون راکتور ۰,۵ bar است. کل حجم راکتور برابر با ۶,۴ m³ است و میزان طول لوله ۶ متر در نظر گرفته شده است. تعداد لوله ها ۲۳۴ عدد معرفی شده است. ضخامت دیواره نیز ۵ میلی متر است. دیگر مشخصات نیز در شکل ... قابل مشاهده است. جریان با دمای ۳۵۰ درجه سانتیگراد و فشار ۳۰,۸ bar از راکتور خارج شده است و به یک ولو وارد می شود. جریان خروجی از ولو دارای فشار ۲ bar است. این باعث شده است فشار به ۲۷,۷ رسیده باشد. در ادامه نیاز است که دمای جریان کاهش نماید. به این دلیل جریان وارد یک خنک کننده شده است. مشخصات خنک کننده و جریانات حاکم در آن در شکل ... آورده شده است.

Cooler: E-102				
Design Rating Worksheet Performance Dynamics				
Worksheet	Name	10	11	e6
Conditions	Vapour	1.0000	0.0533	<empty>
Properties	Temperature [C]	327.7	85.00	<empty>
Composition	Pressure [bar]	2.000	1.750	<empty>
PF Specs	Molar Flow [kgmole/h]	222.4	222.4	<empty>
	Mass Flow [kg/s]	5.894	5.894	<empty>
	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	24.84	24.84	<empty>
	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	2.069e+004	2591	<empty>
	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	124.4	-45.86	<empty>
	Heat Flow [kcal/h]	4.600e+006	5.761e+005	4.023e+006

شکل (۳-۲۹) مشخصات جریان‌ات حاکم بر خنک کننده

Cooler: E-102				
Design	Rating	Worksheet	Performance	Dynamics
Worksheet		Name	10	11
Conditions		Molecular Weight	95.42	95.42
Properties		Molar Density [kgmole/m3]	4.076e-002	1.004
Composition		Mass Density [kg/m3]	3.889	95.82
PF Specs		Act. Volume Flow [m3/h]	5455	221.4
		Mass Enthalpy [kcal/kg]	216.8	27.15
		Mass Entropy [kJ/kg-C]	1.304	-0.4806
		Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	212.2	178.7
		Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	2.224	1.873
		LHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	9.427e+005	9.427e+005
		HHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	9.862e+005	9.862e+005
		HHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	1.034e+004	1.034e+004
		CO2 Loading	<empty>	<empty>
		CO2 Apparent Mole Conc. [kgmole/m3]	<empty>	<empty>
		CO2 Apparent Wt. Conc. [kgmol/kg]	<empty>	<empty>
		LHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	9880	9880
		Phase Fraction [Vol. Basis]	1.000	4.215e-002
		Phase Fraction [Mass Basis]	1.000	3.246e-002
		Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	1.000	0.8850
		Mass Exergy [kcal/kg]	65.16	2.700
		Partial Pressure of CO2 [bar]	0.0000	0.0000
		Cost Based on Flow [Cost/s]	0.0000	0.0000
		Act. Gas Flow [ACT_m3/h]	5455	196.0
		Avg. Liq. Density [kgmole/m3]	8.950	8.950
		Specific Heat [kJ/kgmole-C]	212.2	178.7
		Std. Gas Flow [STD_m3/h]	5258	5258
Delete OK Ignored				

شکل (۳-۳۰) دیگر خصوصیات ترمودینامیکی جریانات حاکم بر خنک کننده



شکل (۳-۳۱) پارامترهای موجود در خنک کننده

مطابق با شکل ها مشاهده شده است که دمای خروجی از خنک کننده برابر با ۸۵ درجه سانتیگراد رسیده است و فشار به ۱,۷bar است. مقدار تغییر دما در خنک کننده برابر با ۲۴۳ درجه سانتیگراد بوده است. مقدار کار خنک کننده ۴,۷۶۶۶ kcal/hr است. این افت دمایی باعث می شود که جریان به دو فاز تبدیل شود. این جریان دو فازی برای جداسازی از هم وارد جداکننده شده است. جریان مایع جدا شده از پایین جداکننده به ادامه مسیر ادامه داده است. خصوصیات جریان خروجی از پایین جدا کننده در شکل ها ارائه شده است.

Separator: V-100				
Design Reactions Rating Worksheet Dynamics				
Worksheet	Name	11	liq	v
Conditions	Vapour	0.0533	0.0000	1.0000
Properties	Temperature [C]	85.00	85.00	85.00
Composition	Pressure [bar]	1.750	1.750	1.750
PF Specs	Molar Flow [kgmole/h]	222.4	210.5	11.85
	Mass Flow [kg/s]	5.894	5.702	0.1913
	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	24.84	23.80	1.047
	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	2591	2894	-2785
	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-45.86	-53.69	93.32
	Heat Flow [kcal/h]	5.761e+005	6.091e+005	-3.300e+004
Delete OK Ignored				

شکل (۳-۳۲) شرایط عملکردی جداکننده

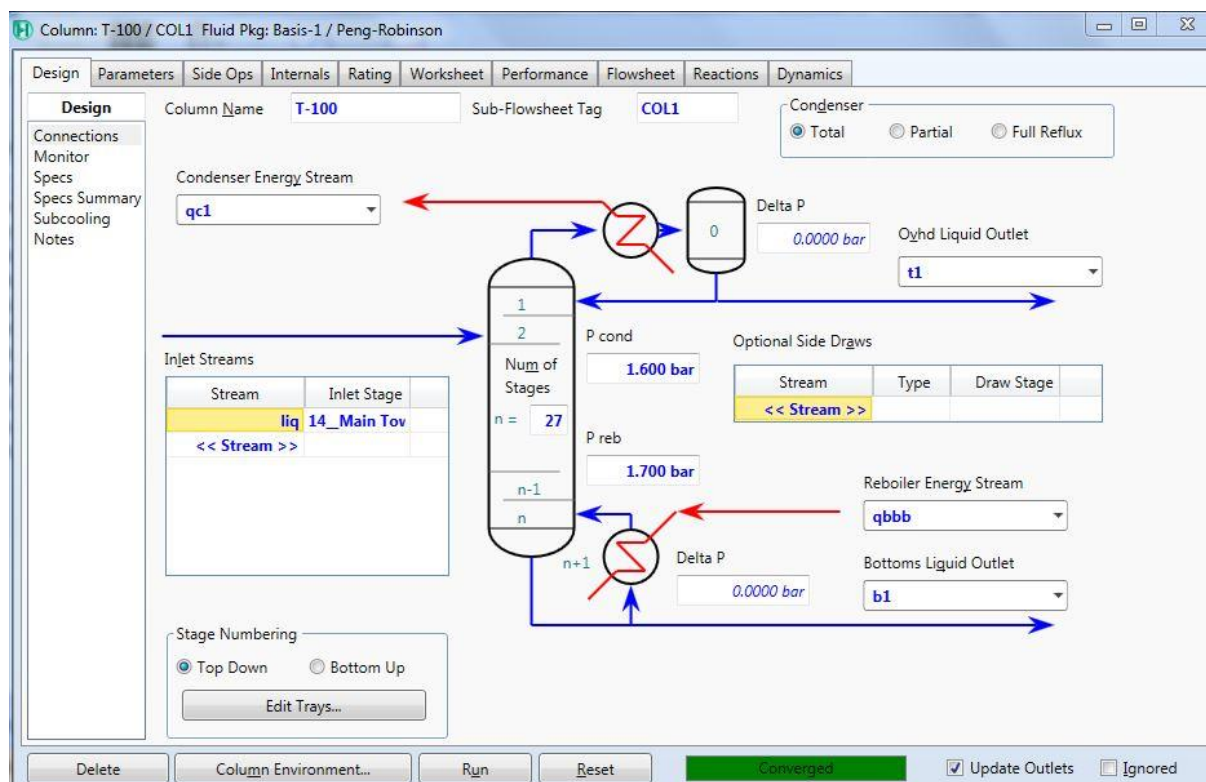
Separator: V-100				
Design Reactions Rating Worksheet Dynamics				
Worksheet	Name	11	liq	v
Conditions	Molecular Weight	95.42	97.52	58.12
Properties	Molar Density [kgmole/m3]	1.004	8.266	6.047e-002
Composition	Mass Density [kg/m3]	95.82	806.1	3.514
PF Specs	Act. Volume Flow [m3/h]	221.4	25.47	196.0
	Mass Enthalpy [kcal/kg]	27.15	29.67	-47.92
	Mass Entropy [kJ/kg-C]	-0.4806	-0.5506	1.606
	Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	178.7	183.5	93.45
	Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	1.873	1.882	1.608
	LHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	9.427e+005	9.619e+005	6.014e+005
	HHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	9.862e+005	1.006e+006	6.364e+005
	HHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	1.034e+004	1.032e+004	1.095e+004
	CO2 Loading	<empty>	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Mole Conc. [kgmole/m3]	<empty>	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Wt. Conc. [kgmol/kg]	<empty>	<empty>	<empty>
	LHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	9880	9864	1.035e+004
	Phase Fraction [Vol. Basis]	4.215e-002	<empty>	1.000
	Phase Fraction [Mass Basis]	3.246e-002	0.0000	1.000
	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	0.8850	0.0000	1.000
	Mass Exergy [kcal/kg]	2.700	2.303	10.28
	Partial Pressure of CO2 [bar]	0.0000	0.0000	0.0000
	Cost Based on Flow [Cost/s]	0.0000	0.0000	0.0000
	Act. Gas Flow [ACT_m3/h]	196.0	<empty>	196.0
	Avg. Liq. Density [kgmole/m3]	8.950	8.846	11.31
	Specific Heat [kJ/kgmole-C]	178.7	183.5	93.45
	Std. Gas Flow [STD_m3/h]	5258	4977	280.2
Delete OK Ignored				

شکل (۳-۳۳) سایر خصوصیات جریانات در جداکننده

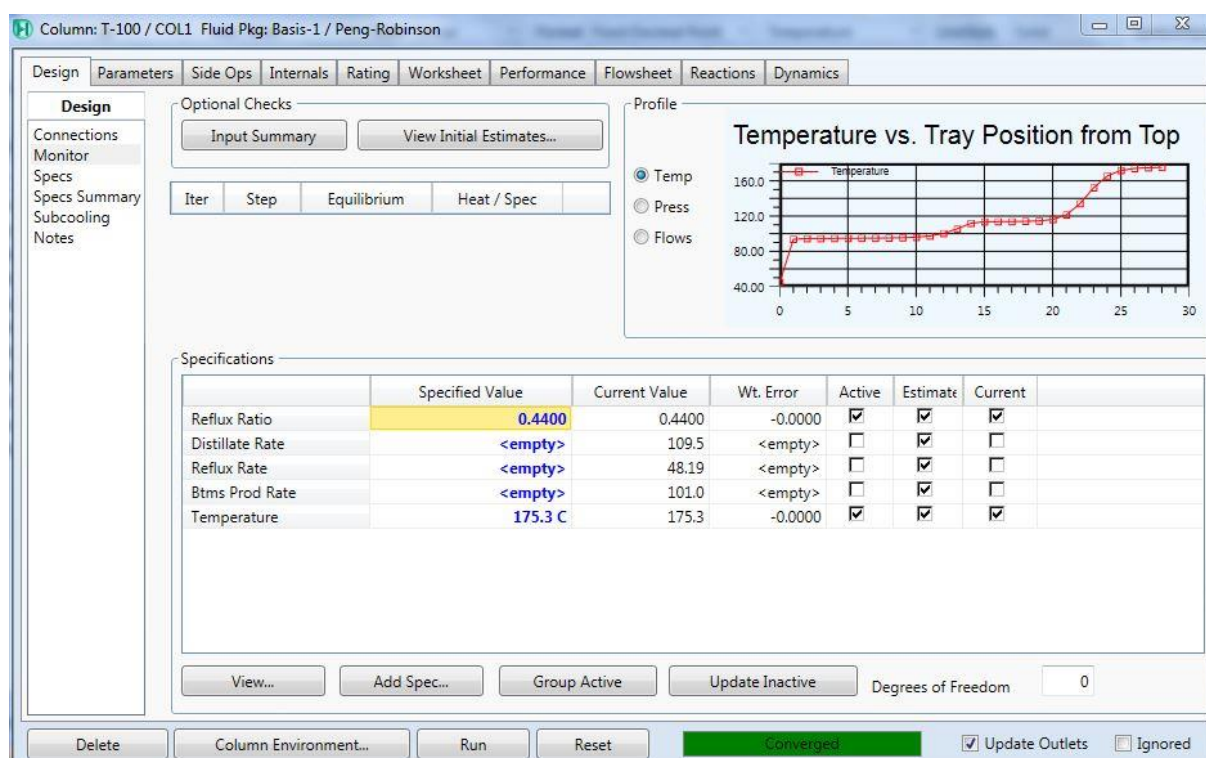
	11	liq	v
Benzene	0.4802	0.4879	0.3441
Propene	0.0157	0.0079	0.1556
Cumene	0.4478	0.4711	0.0344
13-iP-BZ	0.0079	0.0084	0.0002
Propane	0.0483	0.0248	0.4659

شکل (۳-۳۴) ترکیب درصد مواد در جریانات در جداکننده

جریان خروجی از پایین جداکننده همانطور که در شکل ... دیده می شود از بنزن و ایزوپروپیل بنزن تشکیل شده است. لازم است تا بنزن موجود در ترکیب جدا شود. برای این منظور جریان وارد یک برج تقطیر شده است. برج تقطیر تجهیزاتی است که با کمک آن می توانیم دو ماده را با انجام عمل حرارت دهی و کندانس کردن از هم جدا کنیم. اساس کار برج تقطیر این است که با توجه به اختلاف در نقطه جوش مواد و انجام عمل حرارت دهی به آن ها آنها را از هم جدا می نماید. همانطور که در شکل ... دیده می شود نقطه جوش بنزن برابر با ۸۰,۱ درجه سانتیگراد است و نقطه جوش ایزوپروپیل بنزن برابر با ۱۵۲ درجه سانتیگراد است. این اختلاف در نقطه جوش عامل جدا شدن این دو ترکیب درون برج تقطیر اولیه است. جریان وارد برج تقطیر شده است. در شکل ... نمای کلی از برج دیده شده است.



شکل (۳-۳۵) برج تقطیر اولیه



شکل (۳-۳۶) خصوصیات برج تقطیر اولیه

Column: T-100 / COL1 Fluid Pkg: Basis-1 / Peng-Robinson				
Design	Parameters	Side Ops	Internals	Rating
Worksheet	Performance	Flowsheet	Reactions	Dynamics
Worksheet	Name	liq	b1	t1
Conditions	Molecular Weight	97.52	120.9	75.95
Properties	Molar Density [kgmole/m3]	8.266	5.956	10.94
Compositions	Mass Density [kg/m3]	806.1	720.1	831.2
PF Specs	Act. Volume Flow [m3/h]	25.47	16.96	10.01
	Mass Enthalpy [kcal/kg]	29.67	-10.63	137.8
	Mass Entropy [kJ/kg-C]	-0.5506	0.3966	-1.608
	Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	183.5	279.2	124.8
	Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	1.882	2.309	1.643
	LHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	9.619e+005	1.202e+006	7.406e+005
	HHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	1.006e+006	1.261e+006	7.705e+005
	HHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	1.032e+004	1.043e+004	1.014e+004
	CO2 Loading	<empty>	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Mole Conc. [kgmole/m3]	<empty>	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Wt. Conc. [kgmol/kg]	<empty>	<empty>	<empty>
	LHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	9864	9941	9751
	Phase Fraction [Vol. Basis]	<empty>	0.0000	0.0000
	Phase Fraction [Mass Basis]	0.0000	0.0000	0.0000
	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	0.0000	0.0000	0.0000
	Mass Exergy [kcal/kg]	2.303	14.22	0.2572
	Partial Pressure of CO2 [bar]	0.0000	0.0000	0.0000
	Cost Based on Flow [Cost/s]	0.0000	0.0000	0.0000
	Act. Gas Flow [ACT_m3/h]	<empty>	<empty>	<empty>
	Avg. Liq. Density [kgmole/m3]	8.846	7.152	11.32
	Specific Heat [kJ/kgmole-C]	183.5	279.2	124.8
	Std. Gas Flow [STD_m3/h]	4977	2388	2590

شکل (۳-۳۸) سایر خصوصیات ترمودینامیکی در برج تقطیر اولیه

این برج از تعداد ۲۷ عدد سینی تشکیل شده است که از بالا به پایین شماره گذاری شده است. جریان خوراک بر روی سینی شماره ۱۴ وارد شده است. فشار در کندانسور برابر با ۱,۶ bar و در بویلر برابر با ۱,۷ bar است. در فرایند از افت فشار در بویلر و کندانسور صرف نظر شده است. یکی از خصوصیات که تعریف شده است دما در بویلر است که مقدار ۱۷۵ درجه سانتیگراد تعریف شده است. جریان که وارد برج شده است بر روی سینی ها می غلطد و هر چه به سمت پایین برج می آید حرارت دریافت می نماید و به این ترتیب عمل جداسازی انجام شده است. دما و فشار در هر سینی متفاوت است. نتایج مربوط به این برج در قسمت ۴ آورده خواهد شد. همانطور که در شکل ... مشاهده می شود، جریان خروجی از بالای برج که قسمت عمده آن بنزن است که ابتدای فرایند رفته و با بنزن ورودی به فرایند در Mixer مخلوط می شود.

Material Stream: t1

Worksheet Attachments Dynamics

Worksheet	Mole Fractions		Liquid Phase
Conditions	Benzene	0.9373	0.9373
Properties	Propene	0.0151	0.0151
Composition	Cumene	0.0000	0.0000
Oil & Gas Feed	13-iP-BZ	0.0000	0.0000
Petroleum Assay	Propane	0.0476	0.0476
K Value			
User Variables			
Notes			
Cost Parameters			
Normalized Yields			

Total 1.00000

Edit... View Properties... Basis...

OK

شکل (۳-۳۹) جریان خروجی از بالای برج

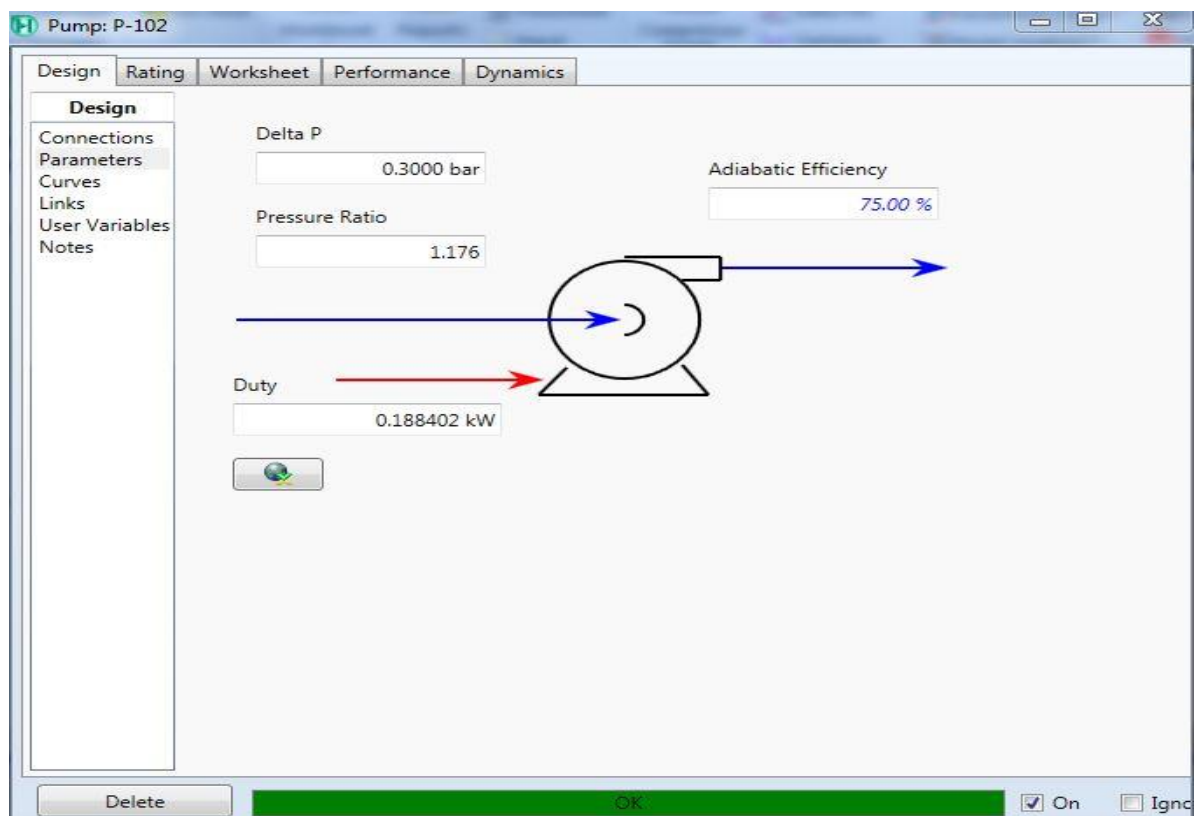
ایزوپروپیل بنزن نیز با دیگر ترکیبات از پایین برج خارج شده و ادامه مسیر را طی می کند تا ایزوپروپیل بنزن (کیومن) از جریان جدا شود و خروجی کار را به ما دهد. جریان خروجی از پایین برج تقطیر دارای فشار ۱,۷ bar است. به این دلیل وارد یک پمپ می شود تا فشار آن به ۲ bar برسد. مشخصات پمپ و جریانات حاکم بر پمپ در شکل ... ارائه شده است.

Worksheet	Name	b1	14	e14
Conditions	Vapour	0.0000	0.0000	<empty>
Properties	Temperature [C]	175.3	175.3	<empty>
Composition	Pressure [bar]	1.700	2.000	<empty>
PF Specs	Molar Flow [kgmole/h]	101.0	101.0	<empty>
	Mass Flow [kg/s]	3.392	3.392	<empty>
	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	14.12	14.12	<empty>
	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-1286	-1284	<empty>
	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	47.96	47.96	<empty>
	Heat Flow [kcal/h]	-1.299e+005	-1.297e+005	162.1

شکل (۳-۴) شرایط عملکردی جریانات حاکم بر پمپ

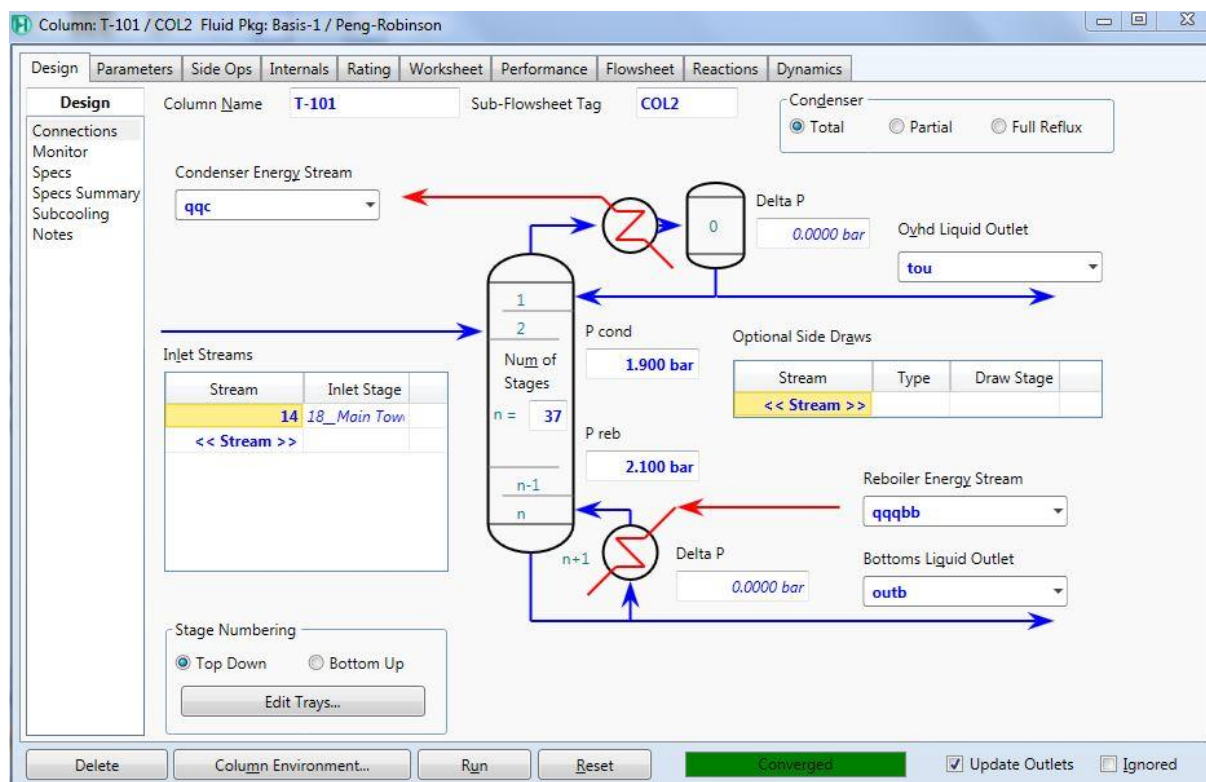
Pump: P-102			
Design Rating Worksheet Performance Dynamics			
Worksheet	Name	b1	14
Conditions	Molecular Weight	120.9	120.9
Properties	Molar Density [kgmole/m3]	5.956	5.956
Composition	Mass Density [kg/m3]	720.1	720.1
PF Specs	Act. Volume Flow [m3/h]	16.96	16.96
	Mass Enthalpy [kcal/kg]	-10.63	-10.62
	Mass Entropy [kJ/kg-C]	0.3966	0.3967
	Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	279.2	279.2
	Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	2.309	2.309
	LHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	1.202e+006	1.202e+006
	HHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	1.261e+006	1.261e+006
	HHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	1.043e+004	1.043e+004
	CO2 Loading	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Mole Conc. [kgmole/m3]	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Wt. Conc. [kgmol/kg]	<empty>	<empty>
	LHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	9941	9941
	Phase Fraction [Vol. Basis]	0.0000	0.0000
	Phase Fraction [Mass Basis]	0.0000	0.0000
	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	0.0000	0.0000
	Mass Exergy [kcal/kg]	14.22	14.23
	Partial Pressure of CO2 [bar]	0.0000	0.0000
	Cost Based on Flow [Cost/s]	0.0000	0.0000
	Act. Gas Flow [ACT_m3/h]	<empty>	<empty>
	Avg. Liq. Density [kgmole/m3]	7.152	7.152
	Specific Heat [kJ/kgmole-C]	279.2	279.2
	Std. Gas Flow [STD_m3/h]	2388	2388
Delete OK On Ign			

شکل (۳-۴۱) سایر خصوصیات ترمودینامیکی جریانات حاکم بر پمپ



شکل (۳-۴۲) پارامترهای پمپ

همانطور که در شکل ... دیده می شود برای حصول این فشار مقدار 0.18 kW توان مصرف شده است. دمای جریان خروجی نیز به مقدار نیز تقریباً 175 درجه سانتیگراد است. جریان خروجی از پمپ به برج تقطیر ثانویه وارد شده است تا مقدار ایزوپروپیل بنزن آن جدا شود. این برج از تعداد 37 عدد سینی تشکیل شده است که همانطور که در شکل ... دیده می شود جریان بر روی سینی شماره ... وارد شده است. فشار در کندانسور برابر با 1.9 bar و فشار در بویلر برابر با 2.1 bar است. نتایج حاصل از این برج نیز در بخش ۴ آورده شده است.



شکل (۳-۴۳) برج تقطیر ثانویه

Column: T-101 / COL2 Fluid Pkg: Basis-1 / Peng-Robinson

Design Parameters Side Ops Internals Rating Worksheet Performance Flowsheet Reactions Dynamics				
Worksheet				
Name	14 @COL2	tou @COL2	outb @COL2	
Vapour	0.0000	0.0000	0.0000	
Temperature [C]	175.3	179.6	238.1	
Pressure [bar]	2.000	1.900	2.100	
Molar Flow [kgmole/h]	101.0	99.24	1.742	
Mass Flow [kg/s]	3.392	3.313	7.850e-002	
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	14.12	13.79	0.3278	
Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-1284	-688.8	-1.311e+004	
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	47.96	49.69	110.5	
Heat Flow [kcal/h]	-1.297e+005	-6.835e+004	-2.282e+004	

☒ Update Outlets
 ☐ Ignored

شکل (۳-۴۴) شرایط عملکردی جرانات حاکم بر برج تقطیر ثانویه

Column: T-101 / COL2 Fluid Pkg: Basis-1 / Peng-Robinson				
Design	Parameters	Side Ops	Internals	Rating
Worksheet	Performance	Flowsheet	Reactions	Dynamics
Worksheet	Name	14	outb	tou
Conditions	Molecular Weight	120.9	162.3	120.2
Properties	Molar Density [kgmole/m3]	5.956	4.166	5.950
Compositions	Mass Density [kg/m3]	720.1	676.0	715.1
PF Specs	Act. Volume Flow [m3/h]	16.96	0.4181	16.68
	Mass Enthalpy [kcal/kg]	-10.62	-80.76	-5.731
	Mass Entropy [kJ/kg-C]	0.3967	0.6807	0.4135
	Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	279.2	411.7	280.0
	Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	2.309	2.537	2.330
	LHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	1.202e+006	1.618e+006	1.195e+006
	HHV Molar Basis (Std) [kcal/kgmole]	1.261e+006	1.706e+006	1.253e+006
	HHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	1.043e+004	1.051e+004	1.043e+004
	CO2 Loading	<empty>	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Mole Conc. [kgmole/m3]	<empty>	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Wt. Conc. [kgmol/kg]	<empty>	<empty>	<empty>
	LHV Mass Basis (Std) [kcal/kg]	9941	9971	9940
	Phase Fraction [Vol. Basis]	0.0000	0.0000	0.0000
	Phase Fraction [Mass Basis]	0.0000	0.0000	0.0000
	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	0.0000	0.0000	0.0000
	Mass Exergy [kcal/kg]	14.23	27.81	15.04
	Partial Pressure of CO2 [bar]	0.0000	0.0000	0.0000
	Cost Based on Flow [Cost/s]	0.0000	0.0000	0.0000
	Act. Gas Flow [ACT_m3/h]	<empty>	<empty>	<empty>
	Avg. Liq. Density [kgmole/m3]	7.152	5.312	7.195
	Specific Heat [kJ/kgmole-C]	279.2	411.7	280.0
	Std. Gas Flow [STD_m3/h]	2388	41.18	2347
	Std. Ideal Liq. Mass Density [kg/m3]	864.7	862.1	864.8
	Act. Liq. Flow [m3/s]	4.710e-003	1.161e-004	4.633e-003
<div> Delete Column Environment... Run Reset Converged <input checked="" type="checkbox"/> Update Outlets <input type="checkbox"/> Ignored </div>				

شکل (۳-۴) سایر خصوصیات ترمودینامیکی جریانات

۳-۲- آنالیز حساسیت

آنالیز حساسیت یک بسط طبیعی از تغییر پارامترها است به حالتی است که مجموعه پارامترهای شمارش شده^۱ نوعی عدم قطعیت دارند -چه در خود این پارامترهای شمارش شده و چه در سایر پارامترهای مدل. بنابراین، این روش به شکل تغییر پارامترها پیاده سازی می شود. نتایج در یک رابط کاربری گرافیکی به همراه المان های فیلتر تعاملی و اطلاعات آماری نمایش داده می شود.

علاوه بر این مورد کاربردی مرسوم، آنالیز حساسیت امکان بررسی اثر پارامترهای غیرقطعی در اهداف مختلف را فراهم می کند که می تواند پس از اجرای آنالیز حساسیت از مجموعه کامل خواص جریان، جریان های گرما یا توابع خودتعریف انتخاب شود. در آنالیز حساسیت شرایط کاری مختلف را می توان با شمارش جداگانه تحلیل کرد که می توانند بازتاب شرایط کاری مختلف به عنوان مثال بارهای مختلف در یک نیروگاه شیمیایی باشند. تجربه نشان می دهد که مقایسه طرح های مختلف نمونه برداری پارامترهای غیرقطعی برای به دست آوردن نتایج قابل اطمینان از آنالیز حساسیت ضروری است. بنابراین، روش های مختلفی برای تخمین اثرات پارامترهای غیرقطعی به کار گرفته شده است. از آنجایی که یک وابستگی تابعی ساده بین اهداف و پارامترهای غیرقطعی وجود ندارد، اثرات آنها باید با نمونه برداری از کل بازه عدم قطعیت تخمین زده شود. به طور کلی دو دسته روش برای این کار وجود دارد: (۱) روش هایی که با تعریف تفاضل محدود، اثرات پارامترها بر هدف را به طور مجزا و مستقیم تخمین می زنند و (۲) روش هایی که سهم هر یک از پارامترهای مختلف را در واریانس (یعنی مربع انحراف معیار یک توزیع) تخمین می زنند.

^۱ Enumerated parameter

در حالی که دسته اول روش‌ها همواره معین و قطعی هستند، در دسته دوم هم روش‌های تصادفی و هم روش‌های قطعی وجود دارد.

نتایج دو دسته روش‌ها به طور مستقیم قابل مقایسه نیست. در حالی که روش‌های اول ممکن است مقادیر منفی نیز داشته باشند (اثر معکوس)، روش‌های تصادفی زمانی که عدم قطعیت تغییرات زیادی تولید کند، تنها سهم‌های مثبت با مقادیر بزرگ تولید می‌کنند.

جزئیات مربوط به روش‌های مختلف نمونه‌برداری در ساتلی [۳] موجود است. جدول ۱ انتخاب‌های مختلف که در CHEMASIM پیاده شده است را نشان می‌دهد. روش انتگرال‌گیری عددی با استفاده از نقاط سیگما بر نقاط سیگما مبتنی است که با استفاده از فرمول‌های انتگرال‌گیری عددی کاملاً متقارن محاسبه شده است [۸].

نتایج در یک پیمایشگر حساسیت قابل بررسی است که در آن خواصی که حساسیت آن‌ها باید تخمین زده شود، قابل انتخاب است. گزینه‌های مختلفی برای تحلیل داده‌های تولیدشده وجود دارد:

- تصویرهای دوبعدی متعدد (نمودارهای پراکندگی، مشابه نمونه موجود در پیمایشگر MCO که توسط برگر و همکاران [۶] تشریح شده است) با امکان انتخاب یک خاصیت سوم به عنوان کد رنگ برای نقاط موردبررسی. با این کار به طور مثال می‌توان تغییرات یک هدف برای نقاط شمارش‌شده مختلف را نشان داد. برای مثال اگر این نقاط، نقاط کاری مختلف را نشان دهند، می‌توان داده‌های آزمایشی را به این تصویر دوبعدی اضافه کرد.

جدول (۴-۱) روش‌های مختلف قابل انتخاب برای آنالیز حساسیت در CHEMASIM.

روش	کلاس
تک به تک [۳]	تفاضل محدود

طراحی عاملی کامل و کسری [۳]

روش اثر ابتدایی [۳]

شبه‌مونت کارلو (دنباله سوپول) [۳] اندیس مبتنی بر واریانس

انتگرال‌گیری عددی با استفاده از نقاط سیگما

[۸]

- یک نمای لغزنده که امکان بررسی نتایج آنالیز حساسیت را با محدود کردن مقادیر یا پیمایش (لغزنده‌های متحرک)، مشابه MCO [۶] می‌دهد.

- نمودار میله‌ای حساسیت برای هر یک از اهداف انتخاب‌شده موردبررسی: در اینجا در مورد روش‌های نمونه‌برداری مبتنی بر تفاضل محدود، برای هر پارامتر غیرقطعی دو مقدار حساسیت مختلف نشان داده می‌شود. علاوه‌براین، یک نمودار جعبه-خط (نمودار جعبه‌ای) برای نمایش کل بازه، چارک‌ها، مقادیر میانگین و مقدار مرجع (یا مقدار اسمی) در نظر گرفته می‌شود.

- برای خواص برداری به طور مثال پروفیل‌های دمای ستون‌ها می‌توان حساسیت را برای کل بردار دید. این کار به عنوان مثال امکان انتخاب موقعیت قرارگیری حسگر دما در یک ستون تقطیر را بر اساس بیشترین حساسیت در نوسانات فرایند مشابه آنچه در اولدنبرگ^۱ و همکاران [۹] آمده، فراهم می‌کند.

- در پیمایشگر حساسیت امکان محاسبه آرایه بهره نسبی وجود دارد که می‌توان با استفاده از آن ترکیب‌های ممکن مناسب متغیرهای دستکاری‌شده و کنترل‌شده را تعیین کرد (به عنوان مثال به اسکوگستاد^۱ [۱۰] مراجعه کنید).

۳-۳- بهینه‌سازی چندمعیاره تحت عدم قطعیت

یک ابزار بهینه‌سازی چندمعیاره موجود مبتنی بر یک روش انطباقی برای محاسبه نقاط پارتو (بورتز و همکاران [۵]) برای منظور کردن عدم قطعیت‌ها در بهینه‌سازی بسط داده شد. همان‌طور که ذکر شد، در این جا تنها تعداد محدودی سناریو (نمونه‌برداری) در نظر گرفته می‌شود. در اولین پیاده‌سازی به عنوان روش نمونه‌برداری برای بررسی اثر عدم قطعیت از طراحی عاملی استفاده شد. در اصل می‌توان کاربرد را به سایر روش‌ها بسط داد، البته این خطر وجود دارد که پیچیدگی ناشی از روش‌های مختلف پیش آید و تعداد اجراهای شبیه‌سازی و بهینه‌سازی بسیار افزایش یابد. بنابراین در اینجا یک روش با هزینه محاسباتی نسبتاً کم از نظر تعداد نمونه‌برداری‌ها انتخاب شد. دو راه مختلف برای منظور کردن سناریوهای مختلف نمونه‌برداری وجود دارد. تمرکز بر بدترین حالت و تلاش در جهت بهینه کردن آن که در بهینه‌سازی استوار انجام می‌شود (برای نمونه به [۱۱] و [۱۲] رجوع کنید) یا این که سناریوهای مختلف ارزیابی شود تا یک مقدار میانگین (یا مقدار مورد انتظار) و یک واریانس محاسبه شود تا از آن‌ها به عنوان اهداف در بهینه‌سازی چندمعیاره استفاده شود که این کار در بهینه‌سازی تصادفی انجام می‌شود (به طور مثال به [۱۳] و [۱۴] رجوع کنید).

۳-۳-۱- بهینه‌سازی استوار

هدف بهینه‌سازی استوار تعیین یک طراحی محافظه‌کار است که برای تمام سناریوها کار کند، بدون این که برای هر سناریو یک بهینه‌سازی مجزا (بهینه‌سازی پارامتری، بخش ۳-۱-۲ را ببینید) صورت گیرد. از این نظر،

^۱ Skogestad

محافظه کاری نتیجه خوبی دارد چرا که هیچ یک از سناریوهای موردنظر منجر به یک طراحی بدتر نمی شود. در ادامه تنها این استواری کمینه-بیشینه مدنظر قرار می گیرد. برای سایر انواع استواری به [۱۵] مراجعه کنید. بر اساس قیود مسئله بهینه سازی، بهینه سازی استوار می تواند منجر به حل های بدتری نسبت به سناریوهای مجزا شود. این امر می تواند منجر به طراحی های فوق محافظه کار شود که پرهزینه تر است.

بهینه سازی استوار نامقید

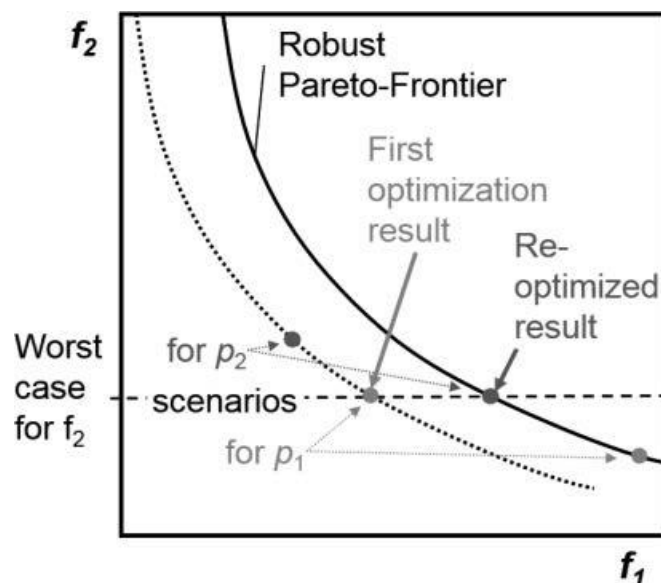
با تعریف بدترین موارد، سؤالاتی به ویژه در زمینه بهینه سازی چندمعیاره به وجود می آید. یک مسئله بهینه سازی تک هدفه نامقید که در آن هدف f_2 باید مینیمم شود، در نظر گرفته شده است. اگر p بردار پارامترهای مسئله بهینه سازی و θ_s بردار پارامترهای غیرقطعی برای سناریوی s (ارائه شده با روش نمونه برداری) را نشان دهد، سپس با

$$f_{i,s} = f_i(p, \theta_s) \quad (۱)$$

مسئله بهینه سازی را می توان به شکل زیر فرموله کرد:

$$\min_p \max_s f_{2,s} \quad (۲)$$

بنابراین در طول بهینه سازی (در این جا کمینه کردن)، حداکثر مقدار f_2 در تمام سناریوها باید تعیین شود. این مقدار حداکثر در مورد بهینه سازی تک هدفه یک مقدار یکتا است (سناریویی با بالاترین مقدار f_2) ولی ممکن است در بهینه سازی چندهدفه این گونه نباشد. این مسئله در شکل ۲ برای مسئله ای با دو هدف f_1 و f_2 نشان داده شده است. دو حل با مقدار یکسان $f_{2,s}^* = \min_p \max_s f_{2,s}$ وجود دارد که در مقدار f_1 متفاوت هستند. اگر هدف کمینه کردن بدترین مقدار f_1 هم بود، بدترین سناریو موردی است که بالاترین مقدار f_1 را دارد.



شکل (۳-۴۷) مسئله‌ای با بدترین حالت f_2 در بهینه‌سازی چندمعیاره: حل‌های متعددی وجود دارد. استفاده از بهینه‌سازی

مجدد برای بهبود حل‌های مصالحه حدی^۱ شناسایی بدترین حالت f_2 در مقدار ثابت بدترین حالت f_2 .

در CHEMASIM یک رویکرد ترکیبی برای بهینه‌سازی چندمعیاره استفاده می‌شود (به بورتز و همکاران [۵] رجوع کنید). این کار با شناسایی مصالحه حدی (یعنی کمینه‌سازی تک‌هدفه اهداف مختلف) آغاز می‌شود. از آن‌جاکه در این موارد ممکن است دقیقاً مسئله نشان داده شده در شکل ۲ رخ دهد، یک روش برای بهینه‌سازی مجدد معرفی می‌شود. با شروع از این نقطه، یک بهینه‌سازی ثانویه آغاز می‌شود که باید $f_{2,s}^*$ را به عنوان حد بالایی داشته باشد (به عنوان قید برای تمام حل‌ها):

$$\min_p \max_s f_{1,s} \quad (۳)$$

$$\text{s. t.: } f_{2,s}^* \geq f_{2,s} \forall s \quad (۴)$$

مسئله بهینه‌سازی مجدد مشابه پس از تعیین مصالحه حدی (یعنی بهینه‌سازی تابع) برای f_1 حل می‌شود.

^۱extreme compromises

در مواردی که بیش از دو هدف وجود دارد، جهت این بهینه‌سازی مجدد یکتا نیست. در این جا مسیر با وزن‌دهی برابر استفاده می‌شود. بنابراین برای بهینه‌سازی مجدد پس از بهینه‌سازی استوار f_i مسئله زیر حل می‌شود:

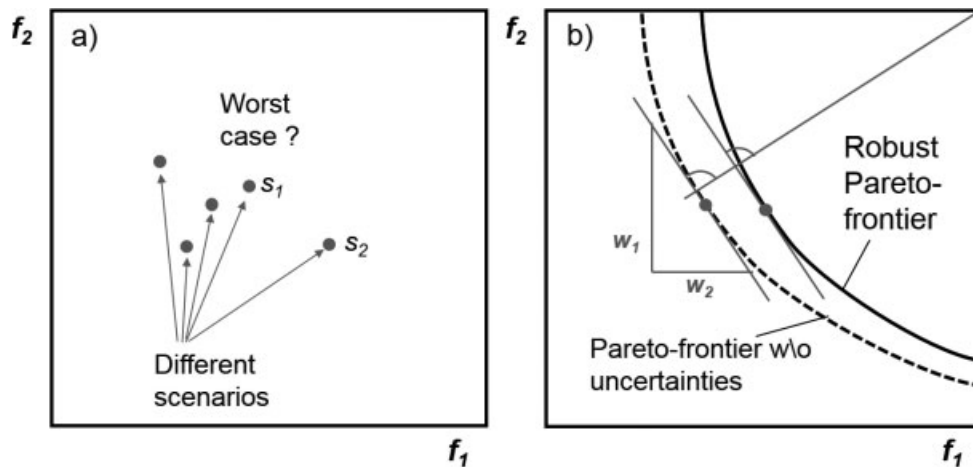
$$\min_p \max_s \sum_{i \neq j} f_{i,s} \quad (5)$$

$$\text{s. t.: } f_{j,s^*} \geq f_{j,s} \forall s \quad (6)$$

بهینه‌سازی مجدد همچنین برای مسائل MCO نرمال سودمند است اگر به عنوان مثال یک هدف از یک پارامتر مستقل باشد. پس از بهینه‌سازی این هدف تکی، آن پارامتر ممکن است یک مقدار دلخواه داشته باشد. در این صورت بهینه‌سازی مجدد می‌تواند از شروع استراتژی حل انطباقی از یک حل غالب جلوگیری کند. هیچ تضمینی وجود ندارد که این بهترین حل باشد اما اگر حل بهتری ظاهر شود، روش انطباقی حل غالب را حذف می‌کند.

در یک بهینه‌سازی چندمعیاره مطابق شکل ۳ نحوه شناسایی بدترین حالت باید مشخص شود چرا که یک معیار واحد برای تعیین رتبه‌بندی حالت‌ها مشابه بهینه‌سازی تک‌هدفه وجود ندارد. مقایسه سناریوی s_1 با s_2 در شکل نشان می‌دهد که s_1 در مقایسه با s_2 در f_2 بدتر ولی در f_1 بهتر است. در رویکرد انطباقی برای جبهه‌های محدب پارتو معمولاً یک رویکرد ساندویچی (بورتز و همکاران [۵]) استفاده می‌شود که جهت ضخیم‌ترین بخش ساندویچ را تعیین می‌کند. این جهت وزن w_i برای هر هدف f_i را تعریف می‌کند و در فرایند انطباقی، نقطه بعدی جبهه پارتو با بهینه‌سازی تک‌هدفه این مجموع وزن‌دار تعیین می‌شود. بنابراین در بهینه‌سازی استوار، بیشینه مجموع وزن‌دار تمام سناریوها همان طور که توسط ارگات^۱ و همکاران [۱۶] نشان داده شده، باید استفاده شود.

$$\min_p \max_s \sum_i w_i f_{i,s} \quad (Y)$$



شکل (۳-۴۸) الف) تعریف بدترین سناریو در بهینه‌سازی چندمعیاره: سناریوی S_1 در مقایسه با S_2 در f_2 بدتر ولی در f_1 بهتر است. ب) تعیین نقاط پارتوی استوار با کمینه‌سازی و بیشینه‌سازی مجموع وزن‌دار تمام سناریوها در رویکرد ساندویچی.

بنابراین در اینجا مجموع وزن‌دار به عنوان یک معیار برای رتبه‌بندی سناریوها استفاده می‌شود. در کمینه‌سازی، حداکثر مقدار نشان‌دهنده بدترین حالت است (شکل ۳-۳). برای حالت جبهه‌های محدب پارتو، روش پاسکولتی^۱-سرافینی^۲ استفاده می‌شود که برای آن می‌توان از رویکردی مشابه استفاده کرد.

بهینه‌سازی/استوار مقید

در ادامه تنها قیود نامساوی در نظر گرفته می‌شود. قیود نامساوی، بازه عملی برای بهینه‌سازی را محدود می‌کند. اگر قیود بعد از اجرای بهینه‌سازی فعال باشند که به معنی برقرار بودن تساوی است، نتایج اهداف به طور کلی با حالت نامقید متفاوت خواهد بود. بنابراین، قیود معمولاً بر نتیجه بهینه‌سازی تأثیر خواهد داشت.

^۱ Pascoletti

^۲ Serafini

معمولاً در نظر گرفتن قیود بدترین سناریوی واقعی که در ادامه بهینه می‌شود، کافی نیست. چرا که مشخص نیست که کدام سناریو در نهایت (یعنی در انتهای بهینه‌سازی) بدترین سناریو خواهد بود. یک رویکرد استوار، افزودن قیود تمامی سناریوها به مسئله بهینه‌سازی است. این کار تضمین می‌کند که (در صورت امکان) تمامی قیود با بدترین سناریو ارضا می‌شود. این نوع کار با قیود عموماً به یک حل نسبتاً فوق‌محافظة کار منجر می‌شود [۱۵].

یک دیدگاه دیگر از این حقیقت نشأت می‌گیرد که غالباً سناریوهای مختلف مستقل از هم هستند و عینیت یک سناریو به طور معمول از عینیت سناریوی دیگر جلوگیری می‌کند. بنابراین این که قیود تمام سناریوها همزمان برآورده شود، واقع‌بینانه نیست. حتی ممکن است هیچ حلی با هم‌پوشانی محدود بین بازه‌های ممکن تعریف‌شده با قیود سناریوهای مختلف وجود نداشته باشد. در این حالت باید برای هر سناریو یک بهینه‌سازی چندمعیاره کامل انجام شود و این تنها یک احتمال پیشین برای تصمیم‌گیری در مورد بدترین حالت است. این کار معمولاً با عنوان بهینه‌سازی پارامتری شناخته می‌شود (برای مثال [۱۷] را ببینید). شمارش خودکار سناریوهای مختلف از طریق بهینه‌سازی چندمعیاره ممکن است. برای این کار پارامترهای غیرقطعی باید شمارش شود. برای داشتن یک طراحی عاملی کامل، اندازه گام برای هر پارامتر غیرقطعی باید با فاصله بین حدود بالایی و پایینی این پارامتر برابر باشد.

اگر محدوده‌های موجود در قیود هم غیرقطعی باشد، شمارش آن‌ها می‌تواند برای بررسی اثرات این محدوده‌ها بر نتایج بهینه‌سازی چندمعیاره مورد استفاده قرار گیرد.

در میان روش‌های اعمال شده برای در نظر گرفتن قیود سناریوهای مختلف در بهینه‌سازی تصادفی، روشی برای تعریف احتمال برآورده شدن قیود با نام رویکرد شانس-قید [۱۴] وجود دارد که در این جا استفاده نشده است.

در بهینه‌سازی تصادفی اهداف سناریوهای مختلف باید بر اساس احتمال آن‌ها وزن‌دهی شود تا مقدار مورد انتظار ($E[...]$) تعیین شود. از آنجا که معمولاً توزیع احتمال معلوم نیست، اغلب وزن مساوی (توزیع یکنواخت) یا توزیع برای نرمال سناریوهای مختلف انتخاب می‌شود که مقدار میانگین برای هدف را نتیجه می‌دهد. یک گزینه این است که یک هدف با میانگین آن در کل سناریوهای عدم قطعیت جایگزین شود. در برخی موارد کاهش واریانس (مربع انحراف معیار) توزیع می‌تواند مدنظر باشد. بنابراین در تنظیم بهینه‌سازی تصادفی یک گزینه جایگزین می‌تواند جایگزین کردن هدف با انحراف معیار آن باشد.

فصل چهارم

نتایج و تفسیر آنها

۴-۱- نتایج شبیه سازی

یکی از فرایندهای مورد استفاده در صنعت، فرایند تولید ایزوپروپیل بنزن (کیومن) است. در این مطالعه از نرم افزار مهندسی hysys ورژن ۱۰ استفاده شده است. در فرایند شبیه سازی واحد تولید ایزوپروپیل بنزن از تجهیزات بسیاری استفاده شده است. اصلی ترین قسمت های این فرایند را راکتور لوله ای مورد استفاده و دو عدد برج تقطیر تشکیل داده است. در فصل ۳ مراحل شبیه سازی فرایند به طور کامل ذکر گردید. در ادامه نتایج حاصل از تمامی بخش های مهم ارائه داده شده است.

همانطور که در قسمت ۳ گفته شد، ترکیبی از بنزن و پروپن به همراه مقداری خیلی کم از پروپان با یکدیگر وارد راکتور شدند. نتیجه حاصل از واکنش درون راکتور که از کاتالیست زئولیت استفاده شد، جریان شماره ۹ است. همان طور که در جدول (۴-۱) مشاهده می شود، در اثر واکنش ایزوپروپیل بنزن تشکیل شده است. علاوه بر این دی ایزوپروپیل بنزن به همراه پروپان نیز وجود دارد.

جدول (۴-۱) ترکیب درصد ترکیبات

material	9	8
Benzene	0.480	0.639
Propene	1.572e-002	0.327
Cumene	0.447	0.00
13-IP-BZ	7.946e-003	0.00
Propane	4.826e-002	3.297e-002

بعد از انجام این واکنش و تولید ترکیبات مورد نظر نیاز است تا عمل جداسازی انجام شود و ایزوپروپیل بنزن مورد نظر (کیومن) تولید شود. بنابراین این جریان به سمت برج تقطیر حرکت می نماید.

بنزن موجود در جریان که با پروپان واکنش نمود و ایزوپروپیل بنزن (کیومن) را تولید کرد، در خروج از راکتور، مقداری از آن باقی مانده است. نیاز است تا این ترکیب از جریان جدا گردد. بنابراین وارد برج تقطیر اولیه گردید.

دمای جوش بنزن تقریباً برابر با ۸۰ درجه سانتیگراد و دمای جوش ایزوپروپیل بنزن تقریباً برابر با ۱۵۲ درجه سانتیگراد است. این تفاوت در دمای جوش باعث گردید تا این دو ترکیب از هم جداگردند. ترکیب درصد مواد در ورودی و خروجی های برج تقطیر اولیه در جدول (۴-۲) ارائه شده است.

جدول (۴-۲) ترکیب درصد ترکیبات در ورودی و خروجی های برج تقطیر

material	b1	t1	liq
Benzene	0.00	0.937	0.487
Propene	0.00	1.509e-002	7.855e-003
Cumene	0.982	0.00	0.471
13-IP-BZ	0.018	0.00	8.385e-003
Propane	0.00	4.759e-002	2.476e-002

همانگونه که در جدول (۴-۲) نیز قابل مشاهده است، جریان liq که ورودی به برج است دارای تقریباً ۴۸٪ بنزن و ۴۷٪ ایزوپروپیل بنزن (کیومن) است. پس از عملیات تقطیر از بالای برج جریان t1 خارج شده است. این جریان تقریباً کاملاً از بنزن تشکیل شده است. دلیل آن این است که همانطور که گفته شد به دلیل دارا بودن نقطه جوش پایین تر نسبت به سایر ترکیبات، زودتر به جوش آمده و از بالای برج خارج شده است. این ترکیب به ابتدای فرایند برگردانده شده و با بنزن ورودی ترکیب می شود و بار دیگر وارد چرخه فرایند

می گردد.

از پایین برج تقطیر اولیه جریان b1 که حاوی ایزوپروپیل بنزن و دی ایزوپروپیل بنزن است خارج شده است. این جریان دارای ۹۸,۲٪ از ایزوپروپیل بنزن و ۱,۸٪ از ایزوپروپیل بنزن است. این دو ترکیب بایستی از یکدیگر جدا گردند. به همین دلیل به سمت برج تقطیر دیگری می روند

برج تقطیر اولیه از تعدا ۲۹ مرحله تشکیل شده است که مرحله صفر آن کندانسور و مرحله ۲۸ آن ریویلر است و تعداد ۲۷ سینی را نیز شامل شده است. شرایط فیزیکی و عملیاتی در هر مرحله متفاوت است. برای مثال هر سینی دارای دما، فشار و ... متفاوتی است. همچنین ترکیب درصد مواد در هر مرحله متفاوت است. برج تقطیر پس دریافت شرایط اولیه محاسبات ترمودینامیکی را انجام داده است و همگرا شده است. جریان خوراک در این برج روی سینی شماره ۱۴ وارد شده است و بنابراین دبی در هر سینی مقدار متفاوتی را خواهد داشت.

جدول (۳-۴) دما، فشار، دبی مولی مایع و دبی مولی بخار را در هر مرحله نشان می دهد. همانطور که از این جدول قابل مشاهده است، با حرکت به سمت پایین برج، میزان دبی مولی مایع در سینی شماره ۱۴ جهشی را داشته است که دلیل آن ورود خوراک به روی این سینی است.

جدول (۳-۴) خصوصیات فیزیکی در هر مرحله برج تقطیر اولیه

	stage	Pressure	Temperature	Molar Flow-Liq	Molar Flow-Vap
Condenser	0	1.600	44.741	48.192	7.892e-006
1_main tower	1	1.600	93.607	56.598	157.721
2_main tower	2	1.603	94.480	56.759	166.126
3_main tower	3	1.607	94.578	56.739	166.288
4_main tower	4	1.611	94.666	56.715	166.268
5_main tower	5	1.615	94.755	56.686	166.244
6_main tower	6	1.619	94.851	56.646	166.215
7_main tower	7	1.623	94.965	56.574	166.175
8_main tower	8	1.626	95.126	56.419	166.103
9_main tower	9	1.630	95.409	56.053	165.948
10_main tower	10	1.634	96.008	55.174	165.582
11_main tower	11	1.638	97.367	53.236	164.703
12_main tower	12	1.642	100.298	49.800	162.765
13_main tower	13	1.646	105.454	45.629	159.329
14_main tower	14	1.650	111.836	289.095	155.158

جدول (۴-۴) خصوصیات فیزیکی در هر مرحله برج تقطیر اولیه

	stage	Pressure	Temperature	Molar Flow-Liq	Molar Flow-Vap
Condenser	15	1.653	113.498	291.778	188.111
15_main tower	16	1.657	113.678	291.998	190.795
16_main tower	17	1.661	113.800	292.029	191.015
17_main tower	18	1.665	114.002	291.838	191.045
18_main tower	19	1.669	114.517	290.873	190.855
19_main tower	20	1.673	116.169	287.516	189.890
20_main tower	21	1.676	121.407	279.724	186.533
21_main tower	22	1.680	134.112	272.756	178.741
22_main tower	23	1.684	152.110	278.405	171.773
23_main tower	24	1.688	165.578	290.679	177.422
24_main tower	25	1.692	171.761	298.394	189.696
25_main tower	26	1.696	174.012	301.453	197.411
26_main tower	27	1.700	174.849	302.431	200.470
27_main tower	28	1.700	175.299	100.983	201.447

جدول (۴-۵) خصوصیات فیزیکی در هر مرحله برج تقطیر اولیه

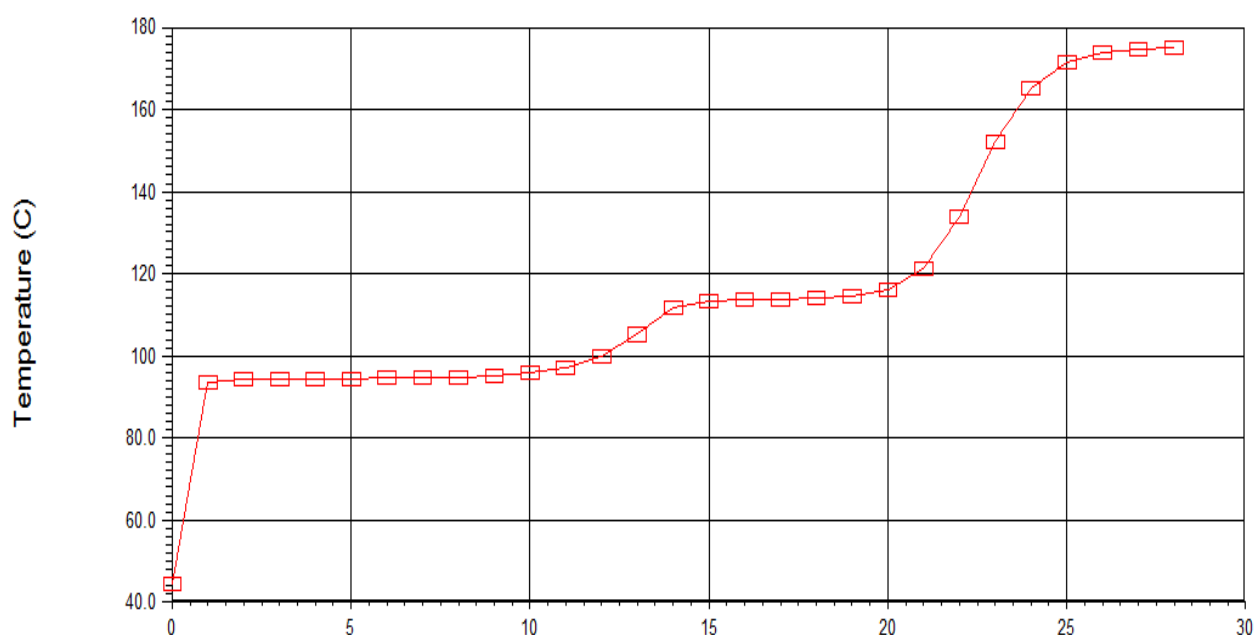
	stage	Pressure	Temperature	Molar Flow-Liq	Molar Flow-Vap
Condenser	0	1.600	44.741	1.096e-007	1.016
1_main tower	1	1.600	93.607	3.327	1.226
2_main tower	2	1.603	94.480	3.537	1.230
3_main tower	3	1.607	94.578	3.541	1.230
4_main tower	4	1.611	94.666	3.540	1.229
5_main tower	5	1.615	94.755	3.540	1.229
6_main tower	6	1.619	94.851	3.539	1.228
7_main tower	7	1.623	94.965	3.539	1.227
8_main tower	8	1.626	95.126	3.538	1.225
9_main tower	9	1.630	95.409	3.536	1.221
10_main tower	10	1.634	96.008	3.532	1.212
11_main tower	11	1.638	97.367	3.523	1.193
12_main tower	12	1.642	100.298	3.504	1.163
13_main tower	13	1.646	105.454	3.474	1.134
14_main tower	14	1.650	111.836	3.445	7.652

جدول (۴-۶) خصوصیات فیزیکی در هر مرحله برج تقطیر اولیه

	stage	Pressure	Temperature	Mass Flow-Liq	Mass Flow-Vap
15_main tower	15	1.653	113.498	4.261	7.718
16_main tower	16	1.657	113.678	4.326	7.724
17_main tower	17	1.661	113.800	4.332	7.726
18_main tower	18	1.665	114.002	4.334	7.728
19_main tower	19	1.669	114.517	4.336	7.729
20_main tower	20	1.673	116.169	4.338	7.736
21_main tower	21	1.676	121.407	4.344	7.805
22_main tower	22	1.680	134.112	4.413	8.137
23_main tower	23	1.684	152.110	4.745	8.845
24_main tower	24	1.688	165.578	5.453	9.548
25_main tower	25	1.692	171.761	6.156	9.928
26_main tower	26	1.696	174.012	6.536	10.074
27_main tower	27	1.700	174.849	6.682	10.126
reboiler	28	1.700	175.299	6.734	3.391

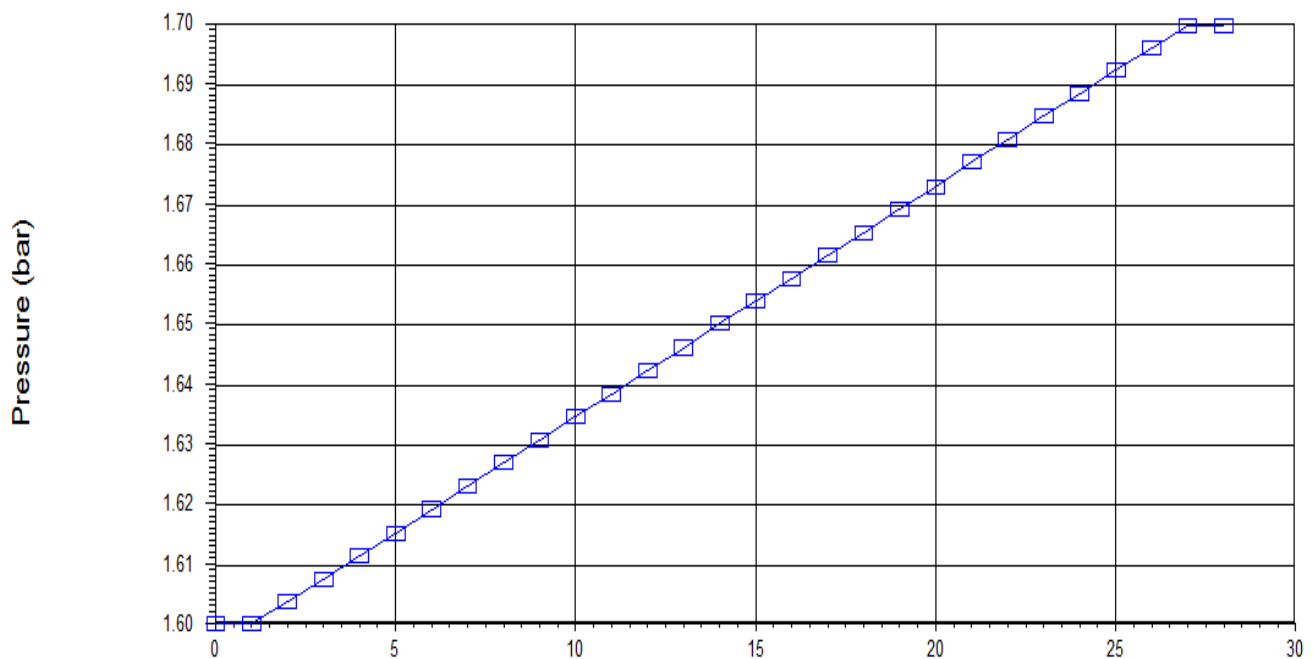
همانطور که اشاره شد یکی از چشمگیر ترین پارامترهایی که در برج تقطیر اهمیت دارد، دما است. دما در هر مرحله متفاوت است. جریانات با حرکت روی هر سینی که دمای منحصر به فرد خود را دارد، حرارت را دریافت کرده و عملیات جداسازی را انجام داده است و از یکدیگر جدا شده اند. با توجه به این، دما در هر مرحله در شکل (۱-۴) قابل مشاهده است.

شکل (۲-۴) دما در هر مرحله از برج تقطیر اولیه

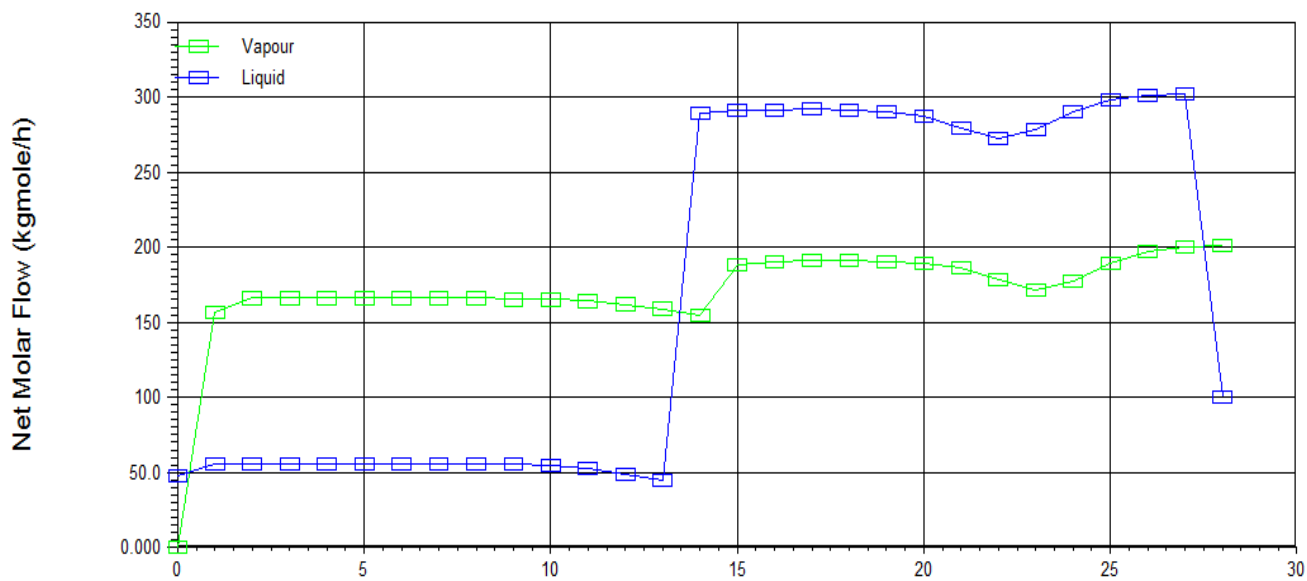


همانطور که در شکل بالا دیده می شود، هر چه به سمت مراحل انتهایی که ریبویلر ما قرار دارد رفته ایم، دما رو به افزایش رفته است که این امر منطقی به منظر هم می رسد. زیرا ریبویلر منبع تولید حرارت ما است. بنابراین انتظار داریم که مواد هر چه به سمت ریبویلر که دارای حرارت بالاتری هستند می روند از یکدیگر جدا شوند. میزان حرارت در سینی ها را به حدی در نظر میگیرند که ما بین دو ترکیب باشد و بتوان آنها را با اختلاف در نقطه جوششان جدا نمود.

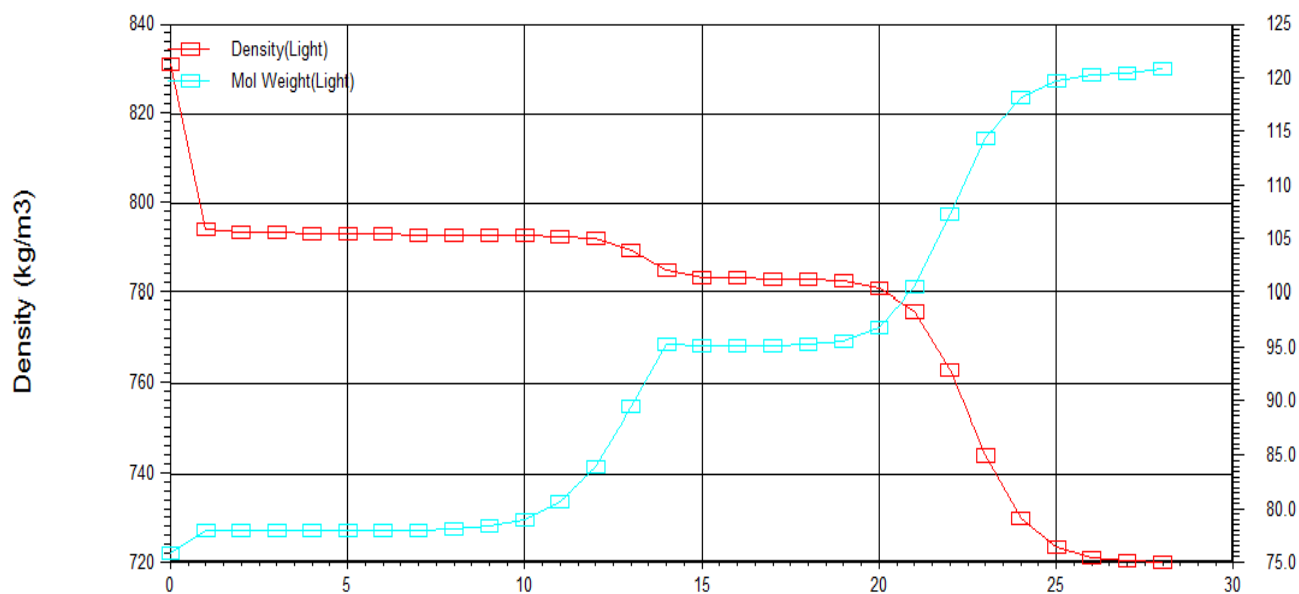
شکل (۳-۴) فشار در هر مرحله از برج تقطیر اولیه



فشار نیز به مانند دما در هر مرحله از برج تقطیر متفاوت است. این مقدار فشار در هر مرحله از برج تقطیر با محاسبات توسط نرم افزار حاصل شده است. که شرایط اولیه آن تعریف فشار برای بویلر و کندانسور بوده است. فشار در ریبویلر برابر با ۱۷۰ کیلوپاسکال و در کندانسور برابر با ۱۶۰ کیلوپاسکال است. متناسب با این دما و فشار درون برج تقطیر و در تمامی مراحل، سایر پارامترها و خصوصیات فیزیکی نیز تعریف شده است که در ادامه آورده شده است.

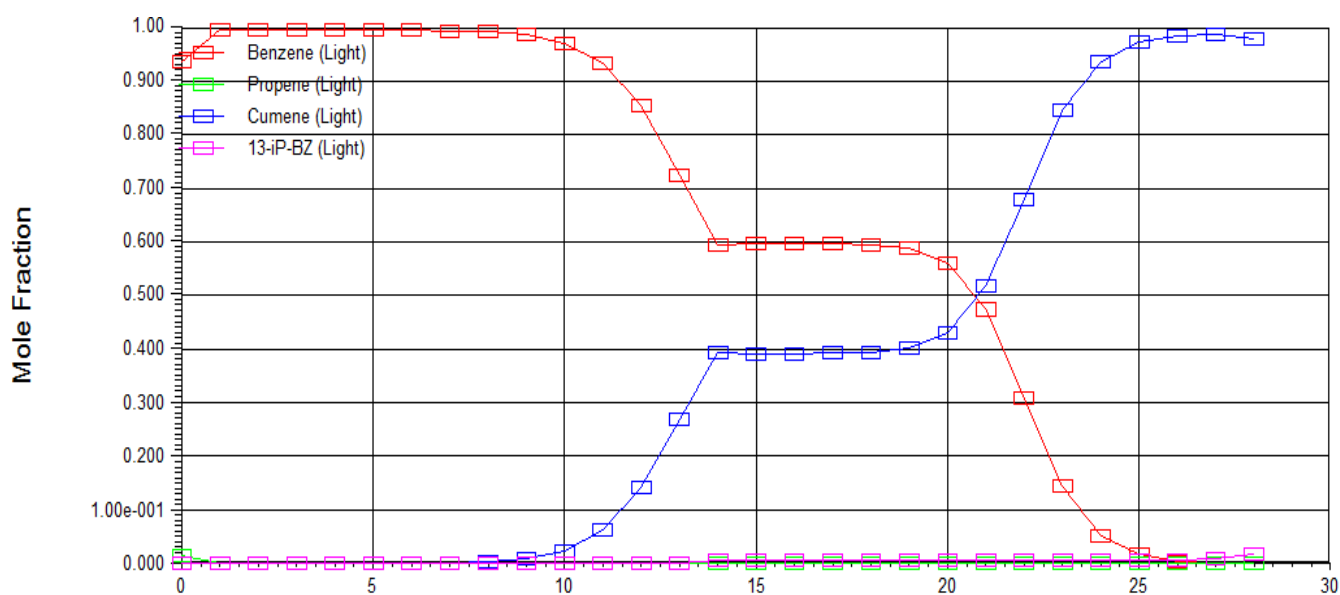


شکل (۴-۴) دبی مولی در هر مرحله از برج تقطیر اولیه



شکل (۵-۴) دبی مولی در هر مرحله از برج تقطیر اولیه

همانطور که در شکل.... دیده می شود، هر چه به سمت مراحل انتهایی می رویم که بویلر قرار دارد، مقدار دانسیته کاهش یافته است. دلیل این امر توده ای از حرارت است که در پایین برج برقرار است. با افزایش حرارت مقدار دانسته کاهش می یابد. با تمامی این توصیفات و اعمال حرارتی ترکیب درصد مواد در هر مرحله محاسبه شده است و در شکل... قابل مشاهده است.



شکل (۴-۶) ترکیب درصد ترکیبات در هر مرحله از برج تقطیر اولیه

همانگونه که دیده می شود، بنزن که دارای دمای جوش کمتری است، رودتر به جوش آمده است و هر چه به سمت بالای برج و مراحل ابتدایی رفته ایم، به ترکیب درصد آن اضافه شده است و کمترین مقدار آن در پایین برج که حرارت زیادی وجود دارد، موجود است. زیرا حرارت زیاد تمامی آن را به فاز بخار تبدیل کرده است. از طرف دیگر ایزوپروپیل بنزن که دمای جوش بالاتری نسبت به بنزن دارد، هر چه به سمت بالای برج می رویم، کمترین مقدار را دارا می باشد و بالعکس هرچه به سمت پایین رفته ایم، بیشترین ترکیب درصد از ایزوپروپیل بنزن (کیومن) موجود است.

پس از انجام عمل جداسازی درون برج تقطیر اولیه، جریان پایین برج تقطیر به سمت برج تقطیر ثانویه رفته است. این جریان شامل ایزوپروپیل بنزن و دی ایزوپروپیل بنزن است و باید عمل جداسازی آنها نیز انجام شود. برج تقطیر ثانویه از تعداد ۳۸ مرحله تشکیل شده است که مرحله صفر آن کندانسور و مرحله ۳۸ آن ریویلر است. از ۳۷ عدد سینی تشکیل شده است. در ادامه برخی از مشخصات برج تقطیر آورده شده است.

همانطور که در جدول ... ارائه شده است، دما و فشار در هر سینی آورده شده است و در کنار آنها دبی مولی مایع و بخار نیز آورده شده است.

مقدار خوراک روی سینی شماره ۱۸ وارد شده است و شروع به عملیات نموده است. به همین دلیل در سینی شماره ۱۸ مشاهده می نمایم که دبی یک جهش را در خود دیده است. این جریان خوراک پس از ورود بر روی سینی ها حرکت کرده است و حرارت را دریافت کرده است و عمل جداسازی را انجام داده است.

همچنین در جدول در کنار دما و فشار در هر سینی، دبی جرمی مایع و بخار نیز آورده شد است که دقیقاً همان رفتار دبی مولی را در هر مرحله از خود نشان داده است. تمامی این مشخصات در هر مرحله توسط نرم افزار هایسیس محاسبه گردیده است و بعنوان نتیجه ارائه شده است. با این محاسبات می توان شرایط فیزیکی در هر مرحله را مشاهده کرد.

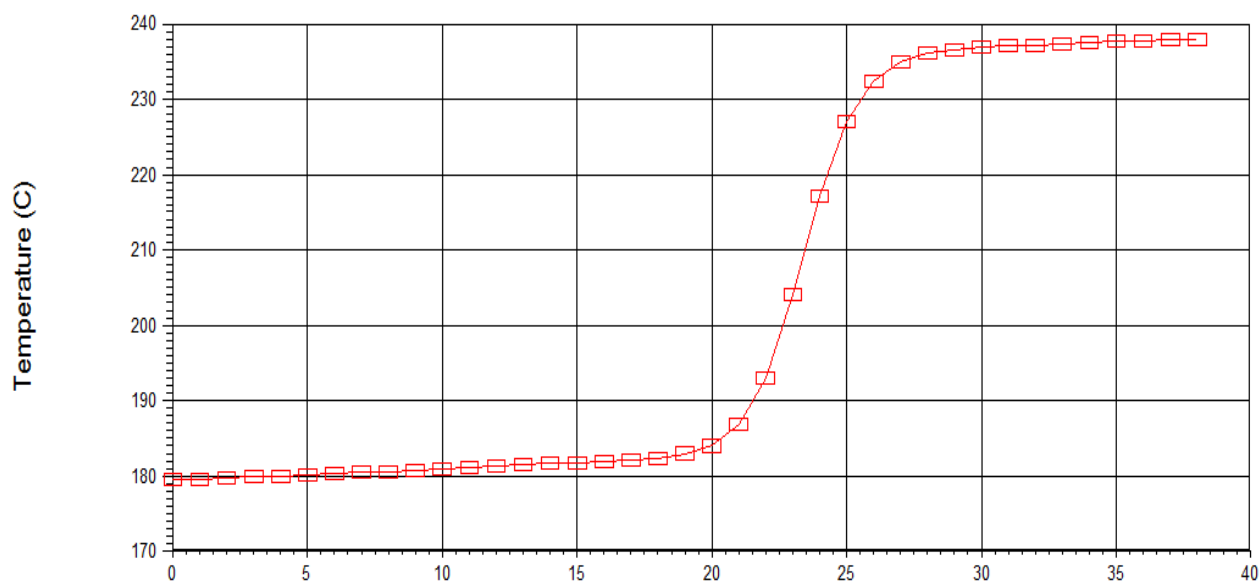
جدول (۷-۴) خصوصیات فیزیکی در هر مرحله برج تقطیر اولیه

	stage	Pressure	Temperature	Molar Flow- Liq	Molar Flow- Vap
Condenser	0	1.90	179.645	62.522	1.649e-007
1_main tower	1	1.90	179.723	62.404	161.764
2_main tower	2	1.90	179.874	62.330	161.646
3_main tower	3	1.91	180.022	62.253	161.572
4_main tower	4	1.91	180.172	62.174	161.495
5_main tower	5	1.92	180.323	62.093	161.416
6_main tower	6	1.92	180.477	62.010	161.335
7_main tower	7	1.93	180.634	61.925	161.252
8_main tower	8	1.93	180.793	61.837	161.167
9_main tower	9	1.94	180.955	61.746	161.079
10_main tower	10	1.95	181.120	61.653	160.988
11_main tower	11	1.95	181.289	61.557	160.895
12_main tower	12	1.96	181.461	61.457	160.799
13_main tower	13	1.96	181.636	61.355	160.699
14_main tower	14	1.97	181.816	61.249	160.597
15_main tower	15	1.97	181.999	61.140	160.491
16_main tower	16	1.98	182.186	61.028	160.382
17_main tower	17	1.98	182.377	60.913	160.270

جدول (۴-۸) خصوصیات فیزیکی در هر مرحله برج تقطیر اولیه

	stage	Pressure	Temperature	Mass Flow-Liq	Mass Flow-Vap
18_main tower	18	1.994	182.571	167.196	160.155
19_main tower	19	2.000	183.058	166.440	165.455
20_main tower	20	2.005	184.165	164.381	164.699
21_main tower	21	2.011	186.888	159.709	162.639
22_main tower	22	2.016	193.098	152.273	157.967
23_main tower	23	2.022	204.156	146.418	150.531
24_main tower	24	2.0277	217.231	146.863	144.677
25_main tower	25	2.033	227.147	150.973	145.121
26_main tower	26	2.038	232.571	154.391	149.232
27_main tower	27	2.044	235.082	156.230	152.650
28_main tower	28	2.050	236.200	157.073	154.489
29_main tower	29	2.055	236.730	157.447	155.331
30_main tower	30	2.061	237.022	157.624	155.705
31_main tower	31	2.066	237.221	157.722	155.882
32_main tower	32	2.072	237.383	157.790	155.981
33_main tower	33	2.077	237.531	157.845	156.048
34_main tower	34	2.083	237.672	157.895	156.103
35_main tower	35	2.088	237.812	157.944	156.154
36_main tower	36	2.094	237.950	157.992	156.202
37_main tower	37	2.100	238.087	158.228	156.250
reboiler	38	2.100	238.087	1.741	156.486

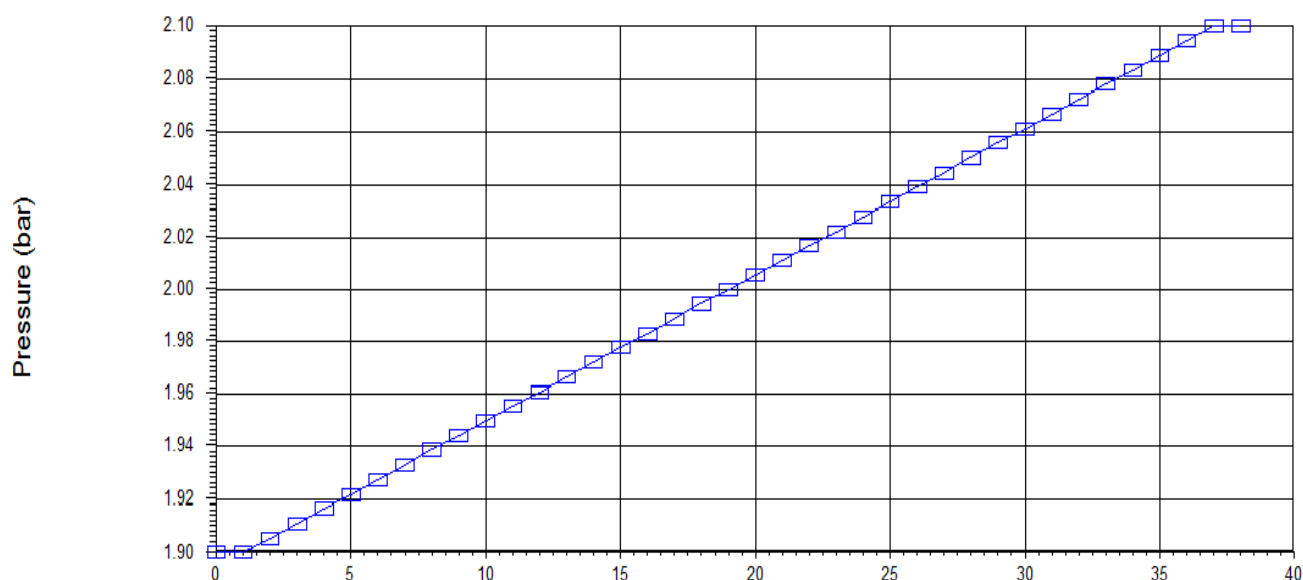
همانطور که در مورد برج تقطیر اولیه گفته شد، یکی از مهم ترین پارامترهایی که در برج تقطیر اهمیت دارد، دما است. دما در هر مرحله متفاوت است. جریانات با حرکت روی هر سینی که دمای منحصر به فرد خود را دارد، حرارت را دریافت کرده و عملیات جداسازی را انجام داده است و از یکدیگر جدا شده اند. با توجه به این، دما در هر مرحله در شکل (۴-۱) قابل مشاهده است.



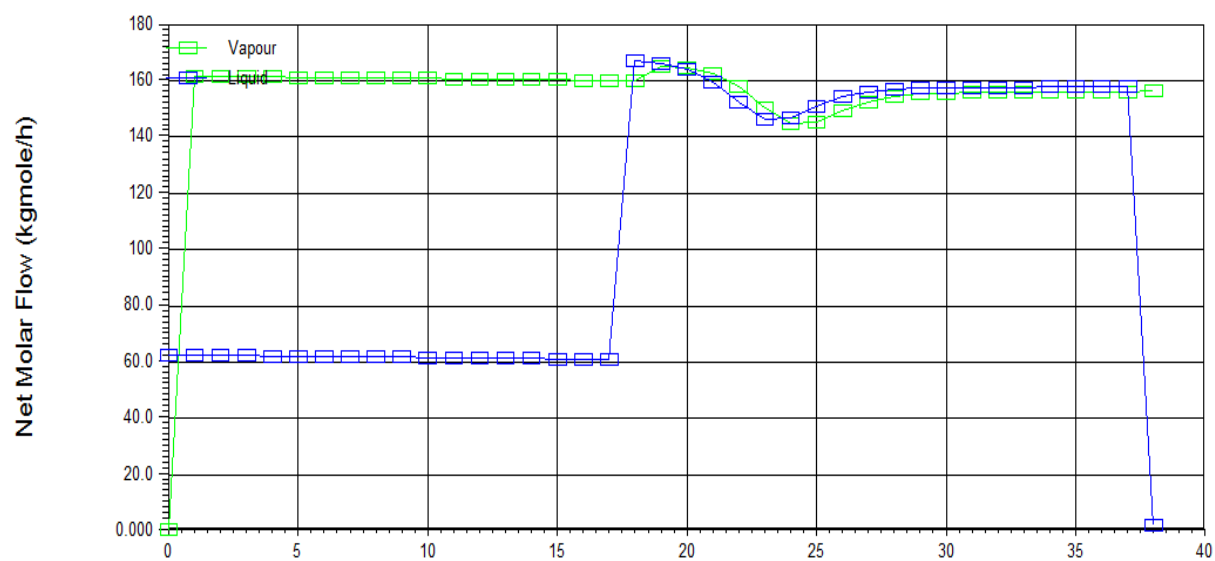
شکل (۴-۷) تغییرات دما در هر مرحله از برج تقطیر ثانویه

همانطور که در شکل بالا دیده می شود، هر چه به سمت مراحل انتهایی که ریبویلر ما در مرحله ۳۸ قرار دارد رفته ایم، دما رو به افزایش رفته است که این امر منطقی به نظر هم می رسد. زیرا ریبویلر منبع تولید حرارت ما است. بنابراین انتظار داریم که مواد هر چه به سمت ریبویلر که دارای حرارت بالاتری هستند می روند از یکدیگر جدا شوند. میزان حرارت در سینی ها را به حدی در نظر میگیرند که ما بین دو ترکیب باشد و بتوان آنها را با اختلاف در نقطه جوششان جدا نمود.

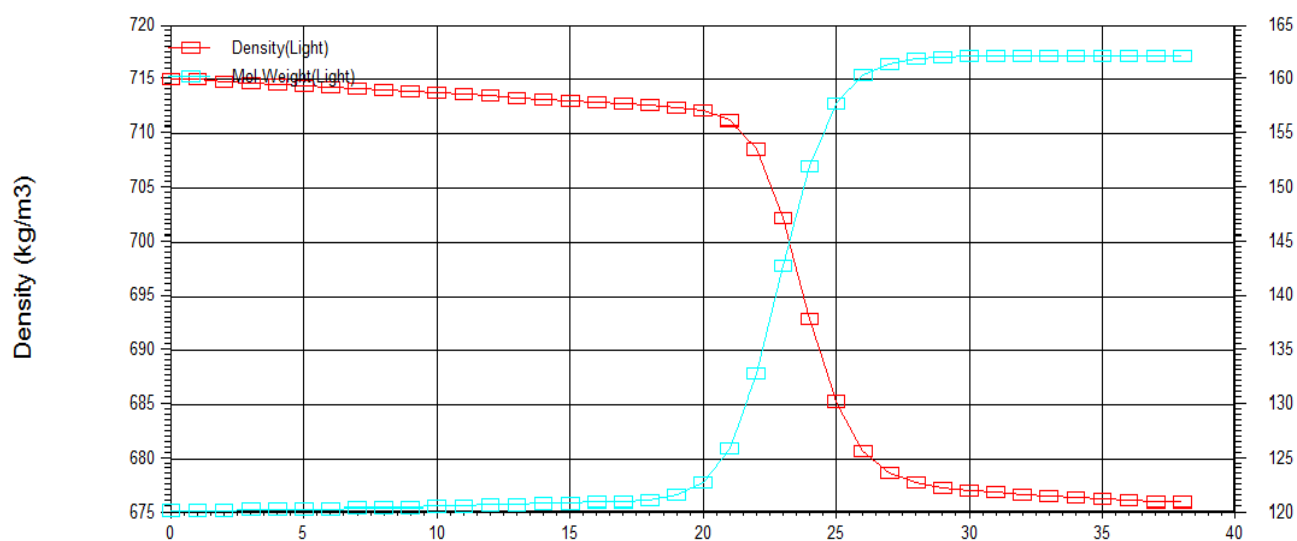
فشار نیز به مانند دما در هر مرحله از برج تقطیر متفاوت است. این مقدار فشار در هر مرحله از برج تقطیر با محاسبات توسط نرم افزار حاصل شده است. که شرایط اولیه آن تعریف فشار برای بویلر و کندانسور بوده است. فشار در ریبویلر برابر با ۲۱۰ کیلوپاسکال و در کندانسور برابر با ۱۹۰ کیلوپاسکال است. متناسب با این دما و فشار درون برج تقطیر و در تمامی مراحل، سایر پارامترها و خصوصیات فیزیکی نیز تعریف شده است که در ادامه آورده شده است.



شکل (۴-۸) تغییرات فشار در هر مرحله از برج تقطیر ثانویه

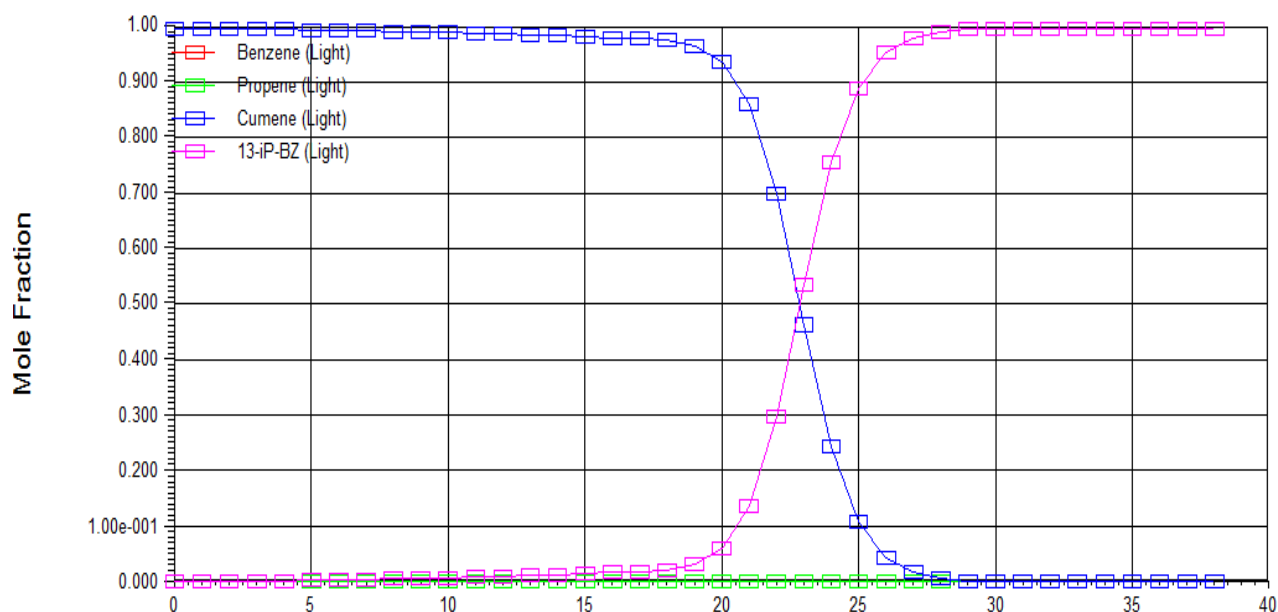


شکل (۴-۹) تغییرات دبی مولی در هر مرحله از برج تقطیر ثانویه



شکل (۴-۱۰) تغییرات دانسیته در هر مرحله از برج تقطیر ثانویه

همانطور که در شکل.... دیده می شود، هر چه به سمت مراحل انتهایی می رویم که بویلر قرار دارد، مقدار دانسیته کاهش یافته است. دلیل این امر توده ای از حرارت است که در پایین برج برقرار است. با افزایش حرارت مقدار دانسته کاهش می یابد. با تمامی این توصیفات و اعمال حرارتی ترکیب درصد مواد در هر مرحله محاسبه شده است و در شکل... قابل مشاهده است.



شکل (۴-۱۱) کسر مولی ترکیبات در هر مرحله از برج تقطیر ثانویه

همانطور که دیده می شود، ایزوپروپیل بنزن (کیومن) که دارای دمای جوش کمتری است، و در شکل با رنگ آبی نشان داده شده است، رودتر به جوش آمده است و هر چه به سمت بالای برج و مراحل ابتدایی رفته ایم، به ترکیب درصد آن اضافه شده است و کمترین مقدار آن در پایین برج که حرارت زیادی وجود دارد، موجود است. زیرا حرارت زیاد تمامی آن را به فاز بخار تبدیل کرده است.

از طرف دیگر دی ایزوپروپیل بنزن که دمای جوش بالاتری نسبت به کیومن دارد، و در شکل با رنگ بنفش نشان داده شده است، هر چه به سمت بالای برج می رویم، کمترین مقدار را دارا می باشد و بالعکس هر چه به سمت پایین رفته ایم، بیشترین ترکیب درصد از دی ایزوپروپیل بنزن موجود است.

جدول (۹-۴) خصوصیات فیزیکی در هر مرحله برج تقطیر اولیه

	stage	Propane	13-IP-BZ	Cumene	Propene	Benzene
Condenser	0	0.00	2.32e-004	0.99	0.00	4.52e-004
1_main tower	1	0.00	6.93e-004	0.999	0.00	9.57e-005
2_main tower	2	0.00	1.20e-003	0.998	0.00	6.66e-005
3_main tower	3	0.00	1.78e-003	0.998	0.00	6.43e-005
4_main tower	4	0.00	2.42e-003	0.997	0.00	6.41e-005
5_main tower	5	0.00	3.14e-003	0.996	0.00	6.42e-005
6_main tower	6	0.00	3.94e-003	0.995	0.00	6.42e-005
7_main tower	7	0.00	4.83e-003	0.995	0.00	6.43e-005
8_main tower	8	0.00	5.81e-003	0.994	0.00	6.43e-005
9_main tower	9	0.00	6.89e-003	0.993	0.00	6.44e-005
10_main tower	10	0.00	8.08e-003	0.991	0.00	6.45e-005
11_main tower	11	0.00	9.37e-003	0.990	0.00	6.45e-005
12_main tower	12	0.00	1.07e-002	0.989	0.00	6.45e-005
13_main tower	13	0.00	1.23e-002	0.987	0.00	6.46e-005
14_main tower	14	0.00	1.39e-002	0.985	0.00	6.46e-005
15_main tower	15	0.00	1.57e-002	0.984	0.00	6.47e-005
16_main tower	16	0.00	1.76e-002	0.982	0.00	6.47e-005
17_main tower	17	0.00	1.96e-002	0.980	0.00	6.43e-005

جدول (۴-۱۰) خصوصیات فیزیکی در هر مرحله برج تقطیر اولیه

	stage	Propane	13-IP-BZ	Cumene	Propene	Benzene
18_main tower	18	0.00	2.18e-002	0.978	0.00	6.47e-005
19_main tower	19	0.00	3.26e-002	0.967	0.00	1.38e-005
20_main tower	20	0.00	6.24e-002	0.937	0.00	2.90e-006
21_main tower	21	0.00	0.138	0.861	0.00	5.86e-007
22_main tower	22	0.00	0.298	0.701	0.00	1.08e-007
23_main tower	23	0.00	0.536	0.463	0.00	1.71e-008
24_main tower	24	0.00	0.756	0.243	0.00	2.31e-009
25_main tower	25	0.00	0.890	0.109	0.00	2.80e-010
26_main tower	26	0.00	0.954	4.51e-002	0.00	3.22e-011
27_main tower	27	0.00	0.981	1.80e-002	0.00	3.62e-012
28_main tower	28	0.00	0.992	7.07e-003	0.00	4.03e-013
29_main tower	29	0.00	0.997	2.76e-003	0.00	4.47e-014
30_main tower	30	0.00	0.998	1.08e-003	0.00	4.97e-015
31_main tower	31	0.00	0.999	4.21e-004	0.00	5.52e-016
32_main tower	32	0.00	0.999	1.64e-004	0.00	6.14e-017
33_main tower	33	0.00	0.999	6.42e-005	0.00	6.84e-018
34_main tower	34	0.00	0.999	2.50e-005	0.00	7.63e-019
35_main tower	35	0.00	0.99999	9.79e-006	0.00	8.52e-020
36_main tower	36	0.00	0.99999	3.82e-006	0.00	9.52e-021
37_main tower	37	0.00	0.99999	1.49e-006	0.00	1.06e-021
reboiler	38	0.00	0.999999	5.81e-007	0.00	1.19e-022

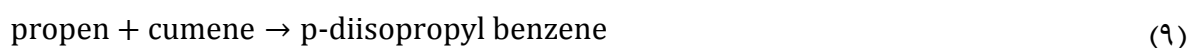
جدول (۴-۱۱) ترکیب درصد مواد در جریانات برج تقطیر

material	outb	tout	14
Benzene	0.00	0.00	0.00
Propene	0.00	0.00	0.00
Cumene	0.00	1.00	0.982
13-IP-BZ	1.00	0.00	1.747e-002
Propane	0.00	0.00	0.00

همانطور که در جدول آورده شده است و نتیجه نهایی شبیه سازی است، مشاهده می شود که جریان بالای برج که tout است، به طور کامل از ایزوپروپیل بنزن (کیومن) تشکیل شده است. این جریان محصول فرایند را شامل شده است. بنابراین با انجام واکنش های لازم در فرایند و به کمک دو برج تقطیر موجود، محصول مورد نظر با خلوص لازم فراهم گردید.

۴-۲- مثال فرایند کومن

طرحی از فرایند کومن در شکل (۴-۱) نشان داده شده است. بنزن و پروپن با ۵٪ مولی پروپان به عنوان ماده خام استفاده می شوند. خوراک ها با بنزن بازیافتی و عمدتاً تبدیل نشده ترکیب شده و به یک محفظه تبخیر تغذیه می شوند. سپس این مخلوط در یک مبادله گر گرمای تغذیه-خروجی گرم شده و سپس تا دماهای بالاتر از ۳۳۰ °C گرما می گیرد. رآکتور یک رآکتور پوسته-لوله است. لوله ها با کاتالیزور پر شده و واکنش های زیر در آن رخ می دهد:



مدل سرعت واکنش به شکل زیر است:

$$r_1 = k_1 c_{\text{propene}} c_{\text{benzene}} \quad (10)$$

$$r_2 = k_2 c_{\text{propene}} c_{\text{cumene}} \quad (11)$$

ثابت‌های واکنش‌ها با معادله آرنیوس داده می‌شود:

$$k_i = k_{0,i} \exp\left(\frac{E_{A,i}}{RT}\right) \quad (12)$$

که در آن:

$$k_{0,1} = 2.8 \cdot 10^7 \text{ L mol}^{-1}, E_{A,1} = 104251 \text{ J mol}^{-1} \quad (13)$$

$$k_{0,2} = 2.32 \cdot 10^9 \text{ L mol}^{-1}, E_{A,2} = 146873 \text{ J mol}^{-1} \quad (14)$$

گرمای واکنش برای تولید بخار با فشار نسبی ۴۰ bar استفاده می‌شود. خروجی رآکتور سرد و فلش می‌شود. پروپان به وسیله فوقانی فلش حذف می‌شود. در اولین ستون واکنش، بنزن تبدیل نشده حذف شده و به بخش تغذیه رآکتور بازیابی می‌شود. باقیمانده‌ها به ستون دوم تغذیه می‌شود که در آن کومن محصول نهایی با خلوص مطلوب ۹۹٫۹٪ مولی است. ظرفیت طراحی هدف ۹۸ kt در سال است. محصول نامطلوب ستون حاوی محصول جانبی p-دی‌ایزوپروپیل‌بنزن (p-dipb) است.

جزئیات مربوط به واکنش کومن توسط لویین^۱ [۱۸] داده شده است. خواص سیال در سیستم با معادله حالت سو-ردلیش-کوانگ^۲ با تصحیح حجمی پنلوکس^۳ مدل می‌شود [۱۹]. پارامترهای این مدل در جدول ۲ داده شده است. بر اساس کمینه‌سازی هزینه کل (برای ۱۰a با تنزیل هزینه‌های عملیاتی، نرخ تنزیل ۱۱٪) طراحی

^۱ Luyben

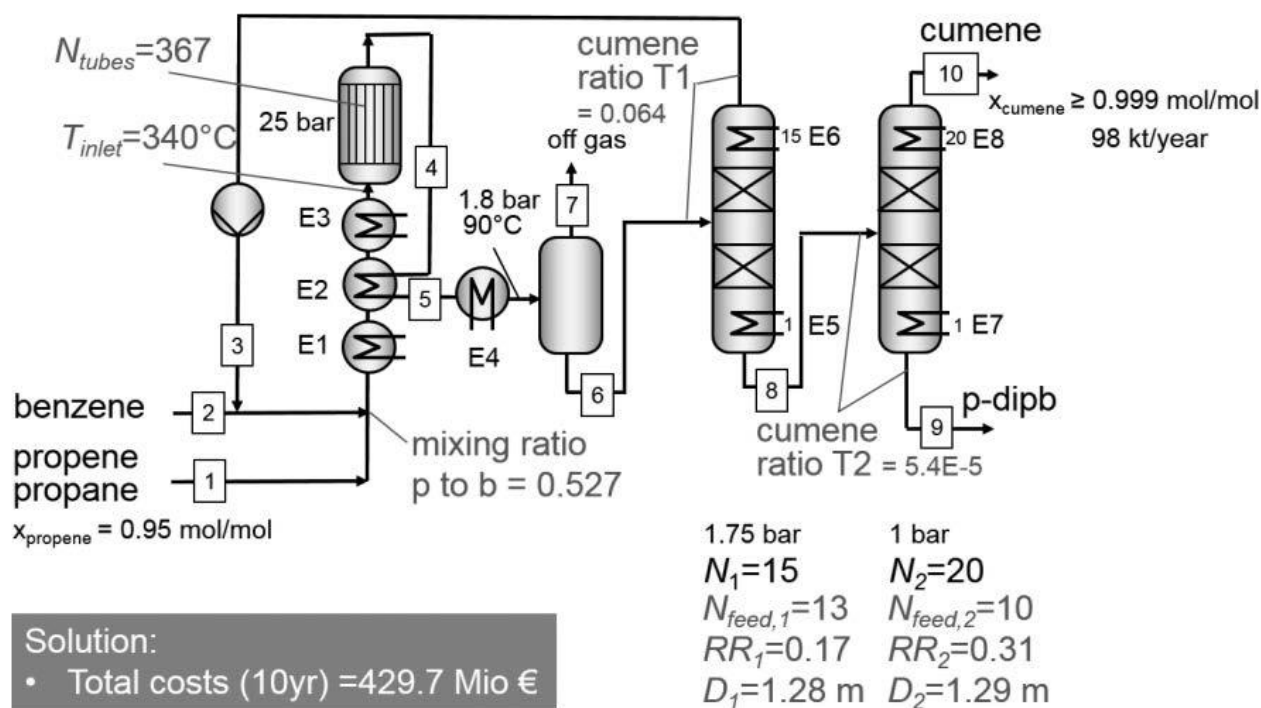
^۲ Soave-Redlich-Kwong (SRK)

^۳ Peneloux

فرایند که در شکل ۴ آمده تعیین می‌شود، پارامترهای خاکستری اعدادی هستند که اصلاح شده‌اند و پارامترهای سیاه در طول بهینه‌سازی ثابت بوده‌اند.

جدول (۴-۱۲) پارامترهای مدل معادله حالت سو-ردلیش-کوانگ برای سیستم دوتایی کومن+p-دی‌ایزوپروپیل‌بنزن. پارامتر اندرکنش برابر است با $k_{ij} = 0$.

	p_c [bar]	T_c [K]	ω [-]
cumene	32.00	638.35	0.3444
p-diisopropylbenzene	24.50	684.00	0.3587



شکل (۴-۱۲) اصول فرایند کومن به همراه نتایج بهینه‌سازی طراحی بر اساس مدل VLE2. پارامترهای کمینه‌سازی هزینه کل به رنگ خاکستری نشان داده شده است. مقادیر سیاه در طول بهینه‌سازی ثابت بوده است.

فرضیات زیر به عنوان پایه این طراحی در نظر گرفته شده است. مبادله‌گرهای گرما، پمپ‌ها و ستون‌ها برای بار ۱۲۰٪ طراحی می‌شوند، ابعاد طراحی رآکتور برای بار ۱۰۵٪ در نظر گرفته می‌شود و قطر و طول لوله‌های رآکتور مشابه آنچه توسط لویبن [۱۸] تشریح شده، ساخته می‌شود. ضریب انتقال حرارت در مبادله‌گر گرما (مقادیر U) برای گاز برابر $60 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ و برای موارد دیگر $1 \text{ kW m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ ، ارتفاع ستون (دو طبقه در هر $m + m$) و قطر ستون ($F_{\max} = 2 \text{ Pa}^{0.5}$) و هزینه کاتالیزور $9,2 \text{ € kg}^{-1}$ ، بنزن 957 € m^{-3} ، پروپن 192 € t^{-1} ، بخار $7,3 \text{ € t}^{-1}$ ، آب خنک‌کن $1,8 \text{ ct m}^{-3}$ ، برق $7,3 \text{ € MWh}^{-1}$ ، سوخت گاز 20 € MWh^{-1} و آب تغذیه بویلر $0,275 \text{ € m}^{-3}$ فرض شده است. عمر کاتالیزور ۲a فرض شده است: پرکردن اولیه در سرمایه‌گذاری و پرکردن مجدد در هزینه عملیاتی لحاظ شده و ارزش حرارتی (به [۱۸] رجوع کنید) بخار ۷ و ۹ به حساب آمده است.

جدول ۳ نتایج مربوط به اندازه مبادله‌گرهای گرما را نشان می‌دهد. جدول بخار برای این طراحی در جدول ۴ آمده است. با در نظر گرفتن این طراحی، عدم قطعیت‌هایی در استفاده از مدل درست تعادل بخار-مایع^۱ و ثوابت سرعت واکنش وجود دارد. در شکل ۵ دو مدل مختلف (VLE1 و VLE2) برای توصیف داده‌های تجربی تعادل بخار-مایع در مخلوط‌های دوتایی کومن/بنزن و کومن-p-دی‌ایزوپروپیل‌بنزن نشان داده شده است. دو مدل VLE در بیش از یک پارامتر مدل تفاوت دارند ولی در یک پارامتر مدل جایگزین ترکیب شده‌اند تا تعداد

^۱ (VLE) Vapor-liquid equilibrium

سناریوها در طول بهینه‌سازی تحت اثر عدم قطعیت کاهش یابد. در ادامه عدم قطعیت ثوابت سرعت واکنش و مدل VLE و اثرات آنها بر شبیه‌سازی و بهینه‌سازی بررسی می‌شود.

جدول (۴-۱۳) نتایج مربوط به مبادله گر گرما برای طراحی فرایند کومن بر اساس مدل VLE2.

Heat exchanger	Area [m ²]	Utility	Heat Duty [kW]	T _{out} [°C]
E ₁	138	بخار ۴۰ bar(g)	3448	215.2
E ₂	705	-	1511	331.8
E ₃	15	برق	104	340
E ₄	33	آب خنک کن ۲۵ °C	3320	90
E ₅	66	بخار ۴۰ bar(g)	1656	175.4
E ₆	30	آب خنک کن ۲۵ °C	1219	52.5
E ₇	47	بخار ۴۰ bar(g)	1174	217
E ₈	13	آب خنک کن ۲۵ °C	1330	151.6

۴-۳- استفاده از آنالیز حساسیت

طراحی نشان داده شده در شکل ۴ بر اساس مدل VLE2 است. در آنالیز حساسیت سه عدم قطعیت در نظر گرفته می‌شود:

- مدل VLE: مدل VLE1 یا VLE2.

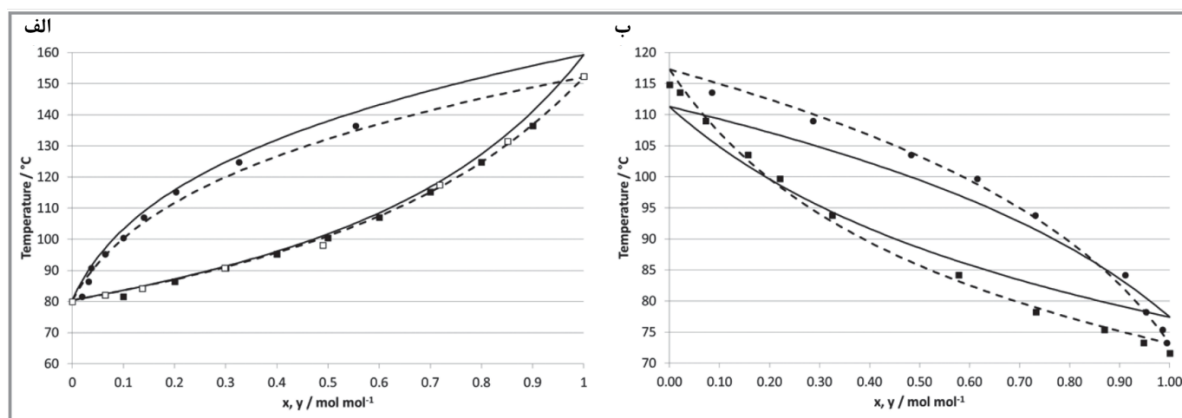
- عدم قطعیت در ثابت سینتیکی $k_{0,1} \pm 10\%$.

- عدم قطعیت در ثابت سینتیکی $k_{0,2} \pm 10\%$.

و نتایج با حالت اسمی پایه یعنی مدل VLE2 و ثوابت سینتیکی در مقادیر اسمی آن‌ها مقایسه می‌شود.

جدول (۴-۱۴) جدول بخار برای طراحی فرایند کومن بر اساس مدل VLE2.

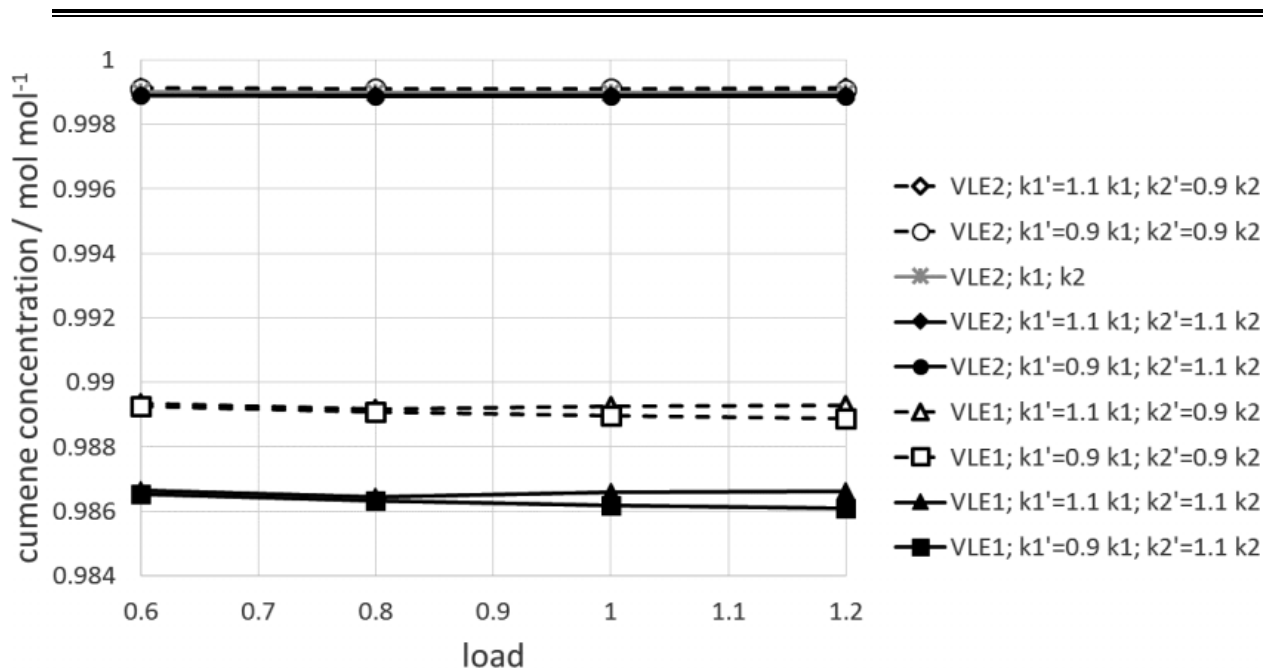
Steam	$T [^{\circ}\text{C}]$	$p [\text{bar}]$	$n [\text{kmol h}^{-1}]$	Mole fractions				
				propane	propene	benzene	Cumene	p-dipb
1	25.0	25.2	104.4	0.05	0.95	-	-	-
2	20.0	25.2	99.1	-	-	1.000	-	-
3	53.6	25.2	99.2	0.0582	0.0059	0.8719	0.0639	0.0001
4	376.5	25	204.1	0.0539	0.0057	0.4396	0.4874	0.0136
5	234.0	1.9	204.1	0.0539	0.0057	0.4396	0.4874	0.0136
6	90.0	1.8	194.7	0.0297	0.003	0.4443	0.5089	0.0142
7	90.0	1.8	9.4	0.5557	0.061	0.3419	0.0412	0.0002
8	175.3	1.9	95.5	-	-	-	0.9711	0.0288
9	217.0	1.1	2.6	-	-	-	0.0019	0.9981
10	151.6	1	92.8	-	-	-	0.999	0.001



شکل (۱۳-۴) تعادل بخار-مایع برای الف) کومن و بنزن در ۱ bar و ب) کومن و p-دی‌ایزوپروپیل‌بنزن در ۶۷ mbar. نقاط: داده‌های تجربی، خطوط: مدل SRK از ASPEN (مدل VLE1)، خط‌چین‌ها: مدل اصلاح‌شده با فوگاسیته تصحیح‌شده عناصر خالص (۲۰٪ افزایش کومن، ۲۰٪ کاهش p-دی‌ایزوپروپیل‌بنزن، مدل VLE2).

یک طرح عاملی به عنوان روش نمونه‌برداری انتخاب می‌شود. از آن جا ۳ پارامتر و به ازای هر یک ۲ مقدار مختلف در نظر گرفته می‌شود، ۸ (2^3) سناریو باید ارزیابی شود. علاوه بر این، تغییرات بار با اعمال ضریب بار بر ظرفیت هدف منظور می‌گردد که مقدار آن می‌تواند ۰٫۶، ۰٫۸، ۱، ۱٫۲ و ۱٫۴ باشد. همان طور که در شکل ۶ مشاهده می‌شود برای تمامی مقادیر بار، غلظت کومن نزدیک به مقدار هدف ۹۹٫۹٪ مولی است. در این جا هیچ تطبیقی برای شرایط کاری صورت نگرفته اما هیچ یک از محدودیت‌های نیروگاه طراحی‌شده نیز در نظر گرفته نشده است که ممکن است تصویر مسئله را تغییر دهد.

برای مدل در تمام سناریوها غلظت کومن به حد قابل‌توجهی پایین‌تر است و مشخص نیست بتوان با تغییر شرایط کاری در محدوده‌های نیروگاه طراحی‌شده به کیفیت محصول مدنظر دست یافت. این سؤال باید با بهینه‌سازی تحت عدم قطعیت (بخش بعد) پاسخ داده شود.



شکل (۴-۱۴) نتایج آنالیز حساسیت با استفاده از طراحی عاملی بر اساس مجموعه پارامترهای گرفته شده از نتایج طراحی فرایند (مقایسه با شکل ۴) برای بارهای مختلف. پارامترهای غیرقطعی شامل مدل VLE (۱) یا (۲) و ثوابت سینتیکی ($\pm 10\%$) بود.

۴-۴- به کارگیری بهینه سازی تحت عدم قطعیت

برای فرایند کومن که تشریح شد، تغییر شرایط کاری با عدم قطعیت‌های داده شده برای رسیدن به خلوص مطلوب محصول یعنی ۹۹٫۹٪ مولی در صورت امکان بررسی می‌شود.

برای این مسئله بهینه سازی قیود عملی شدنی متعددی معرفی شد: (۱) اختلاف دمای لگاریتمی در محفظه های تبخیر $K > 30$ تا از جوشش لایه ای جلوگیری شود، (۲) حداکثر مقدار فاکتور F در ستون ها کمتر از $Pa^{0.5}$ تا ۲٫۱ از سیلابی شدن جلوگیری شود و بازده جداسازی حفظ شود، (۳) بار مایع در ستون ها در بالا و در طبقه تغذیه بین ۶۰ تا ۱۲۰٪ بار طراحی است تا بازه معمول کاری توزیع مایع حفظ شود و (۴) کمترین اختلاف

دما در مبادله گر گرمای تغذیه-خروجی^۱ و کندانسور ستون اول به عنوان حدی برای محاسبه اختلاف دمای لگاریتمی بزرگ تر از K ۱ است.

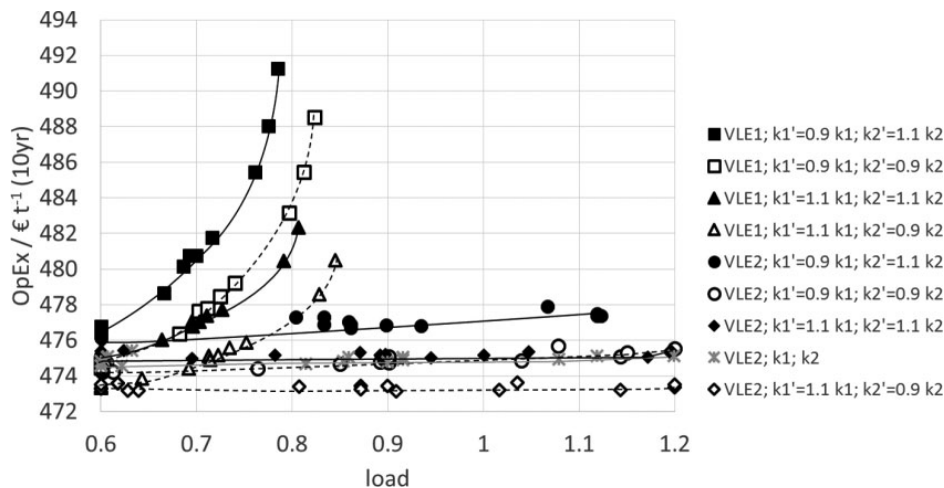
اهدافی که برای بهینه سازی انتخاب شده است عبارتند از: (۱) حداقل کردن هزینه های عملیاتی (تنزیل برای $10a$) نسبت به مقدار کومن تولید شده (OpEx)، (۲) حداقل کردن پتانسیل گرمایش جهانی^۲، (۳) حداقل کردن بار و (۴) حداکثر کردن ظرفیت.

OpEx و GWP معیارهای معمول پایداری هستند. GWP (در کنار مواردی همچون تقاضای منابع و مصرف آب و ...) نتیجه ای از ارزیابی چرخه عمر است (برای مثال [۲۰] را ببینید).

دو هدف آخر بررسی همزمان حداقل و حداکثر بار قابل دستیابی (= نسبت بار به بار اسمی) را ممکن می کند. در این جا لازم نیست قیود تمامی سناریوها همزمان ارضا شود، بنابراین هر سناریو باید به صورت مجزا بهینه شود. همان طور که ذکر شد، در محیط جدید MCO، اجرای مجزای MCO برای سناریوهای متعدد پشتیبانی می شود. شکل ۷ یک تصویر دوبعدی از جبهه های پارتو برای سناریوهای مختلف را نشان می دهد. همان طور که مشاهده می شود برای حالت های با مدل VLE1، رسیدن به یک حل بر روی کل بازه بار نشان داده شده، ممکن نیست. برای بدترین سناریو (VLE1، $k'_1 = 0.9k_1$ ، $k'_2 = 1.1k_2$) تنها کمتر از ۸۰٪ از ظرفیت نامی قابل دستیابی است. نتایج مربوط به پتانسیل گرمایش جهانی روند مشابهی را نشان می دهد و در این جا نشان داده نمی شود.

^۱ feed-effluent heat exchanger

^۲ potential (GWP) global warming



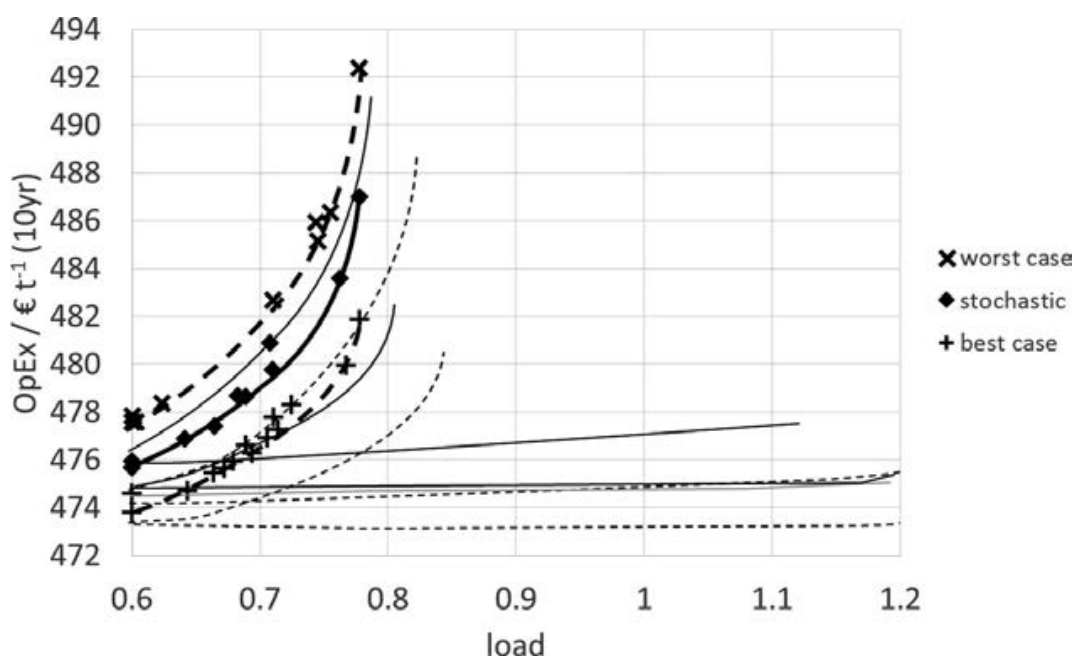
شکل (۴-۱۵) تصویر دوبعدی (هزینه عملیاتی) تنزیل شده برای ۱۰ سال به ازای هر تن محصول (OpEx) بر حسب بار) جبهه پارتو. نتایج شمارش شده MCO برای بهینه‌سازی تحت عدم قطعیت برای مثال فرایند کومن استفاده شده است: MCO شمارش شده (علائم بزرگ)، بهینه‌سازی استوار و تصادفی. خطوط تنها برای بصری‌سازی هستند (پوش محدب پایین).

در شکل ۸ این نتایج با نتایج یک بهینه‌سازی استوار مقایسه می‌شود که در آن این محدودیت وجود دارد که قیود تمام سناریوها باید برای هر یک از مجموعه پارامترها برآورده شود. علاوه بر این، این نتایج با استفاده از میانگین‌های هزینه عملیاتی و پتانسیل گرمایش جهانی با یک بهینه‌سازی تصادفی مقایسه می‌شود. برای بار و ظرفیت هم می‌توان از مقادیر میانگین استفاده کرد، اما از آنجاکه این پارامترها به پارامترهای بهینه‌سازی مرتبط هستند، میانگین با مقدار پارامتر برابر است.

مقایسه روش‌های بهینه‌سازی مختلف (شکل‌های ۷ و ۸ را ببینید) نشان می‌دهد که بهینه‌سازی استوار که در آن برای پارامترهای کاری p مشابه، قیود تمام سناریوهای s باید ارضا شود، فوق‌محافظه‌کارانه و پرهزینه‌ترین حل است. بهینه‌سازی تصادفی با استفاده از مقادیر میانگین در این حالت نزدیک به بدترین حالت از حل‌های MCO است. علت این مسئله احتمالاً غالب بودن قیود سناریوی VLE1، $k_1' = 0.9k_1$ ، $k_2' = 1.1k_2$ است و ممکن است در مسائل دیگر متفاوت باشد. اهمیت قیود با توجه به نتایج کمینه‌سازی بهترین حالت تأیید

می‌شود که در آن نیز برای مجموعه پارامتر مشابه p ، قیود تمام سناریوهای s باید ارضا شود. همچنین در این جا، این بهترین حالت به میزان قابل توجهی به حالت‌های بدتر مدل VLE1 نزدیک‌تر است تا به بهترین حالت

اجزای مجزای MCO یعنی $(k'_2 = 0.9k_2, k'_1 = 1.1k_1, \text{VLE2})$.



شکل (۴-۱۶) تصویر دوبعدی (OpEx بر حسب بار) جبهه پارتو. در این جا روش‌های مختلفی برای بهینه‌سازی تحت عدم قطعیت برای فرایند کومن استفاده شده است: MCO شمارش شده (خطوط، به شکل ۷ رجوع کنید)، بهینه‌سازی استوار (بدترین حالت)، بهینه‌سازی تصادفی و بهینه‌سازی بهترین حالت. خطوط تنها برای بصری‌سازی هستند (پوش محدب پایین).

فصل پنجم

نتیجه گیری و پیشنهادات

طراحی و سناریوهای بحث شده در فرایند کومن تا حدی غیرواقعی است، اما بیشتر باید استفاده از روش‌ها برای لحاظ کردن عدم قطعیت را نشان دهد تا این که خطوط مشی نحوه طراحی فرایند کومن را بدهد. لیست زیر مرور مختصری بر مسائل عمده که باعث می‌شود که مثال استفاده شده حقیقی نباشد، دارد:

- عدم قطعیت در مدل VLE: شکل ۵ پیشنهاد می‌کند که مدل VLE2 بسیار بهتر از مدل VLE1 است. این مسئله برای توصیف دیاگرام‌های VLE صحیح است، اما اصلاح مدل منجر به فشار بخار کمتر برای p -دی‌ایزوپروپیل‌بنزن در فشار ۱ bar می‌شود که با اندازه‌گیری‌ها همخوانی ندارد و بیشتر به فرایند مرتبط است. بنابراین برای مدل VLE2 جداسازی در آخرین ستون تقطیر برای خالص‌سازی کومن تا خلوص بالا (بالتر از ۹۹,۹٪ مولی) نسبت به واقعیت ساده‌تر است. از آنجاکه طراحی بر اساس این مدل صورت می‌گیرد، ستون، یک عامل محدودکننده برای مدل VLE1 با فشار بخار واقعی‌تر برای p -دی‌ایزوپروپیل‌بنزن در فشار ۱ bar است.

- انتخاب نوع مدل: در طراحی معمول فرایند برای بخش جداسازی در فشار پایین غالباً یک مدل دقیق‌تر بر اساس انرژی گیبس (برای مثال مدل NRTL) به جای یک معادله حالت یا یک اصلاح مشابه مدل VLE2 استفاده می‌شود.

- قیود: قیود پخش‌کننده‌ها غالباً محدودکننده هستند. به ویژه در بخش بالایی ستون اول بارهای مایع بسیار پایین وجود دارد. در این جا سینی‌هایی استفاده می‌شوند که یک بازه بارگذاری بزرگ‌تری برای بارهای مایع کوچک‌تر را ممکن کنند.

در مثال بحث شده به نظر می‌رسد که ستون خالص‌سازی گلوگاه این طراحی باشد. عدم قطعیت در ثوابت سینتیکی با بازه‌های بارگذاری بخش تقطیر و بازیابی قابل جبران است.

بررسی‌های صورت گرفته در این مثال بر یک طراحی مرسوم بر اساس کمینه‌سازی هزینه کلی برای مقادیر اسمی (بدون اعمال اغتشاش) پارامترهای غیرقطعی مبتنی است. از آنجاکه یک طراحی باید برای تمامی مقادیر

ممکن عدم قطعیت کار کند، یک طراحی استوار نیز قابل استفاده است. یک مسئله در این حالت این است که قواعد طراحی اندازه تجهیزات که پایه تخمین هزینه را شکل می دهد، معمولاً محافظه کارانه است تا تمام عدم قطعیت ها را پوشش دهد. بنابراین استفاده از بهینه سازی طراحی استوار، مستلزم قواعد طراحی جدید است.

علاوه بر این، بهینه سازی استوار غالباً منجر به یک طراحی پرهزینه و فوق محافظه کار می شود. ملزومات طراحی استوار یک نیروگاه ارتباط نزدیکی به امکان اصلاح پارامترهای کاری برای یک طرح انتخاب شده برای لحاظ کردن عدم قطعیت دارد. در این جا این امکان وجود دارد که بهینه سازی استوار در آینده به یک برنامه نویسی تصادفی دومرحله ای با فرموله سازی بازگشتی بسط داده شود مانند استینمل^۱ و انگل^۲ [۲۱]: «[...] سنتز فرایند و مسائل طراحی با پارامترهای غیرقطعی معمولاً منجر به مسائل تصادفی دومرحله ای می شود چرا که پارامترهای طراحی باید ثابت باشند در حالی که پارامترهای کاری می تواند برای تجسم پارامترهای غیرقطعی مطابقت پیدا کنند. ایده اصلی پشت برنامه نویسی تصادفی دومرحله ای، بهینه کردن تصمیمات مرحله اول (در این جا پارامترهای طراحی) برای یک تابع هزینه مناسب است که برای یک انتخاب بهینه از متغیرهای مرحله دوم در هر سناریو محاسبه می شود. بنابراین، گزینه مقابله با عدم قطعیت ها در تصمیم گیری پیش بینی شده است، که میزان محافظه کاری نتیجه را به عنوان مثال از یک طراحی بدترین حالت بسیار کمتر می کند. طراحی باید برای تمام مقادیر حقیقی عدم قطعیت ممکن باشد، هر چند تنها پس از تطبیق متغیرهای مرحله دوم (پارامترهای کاری).» اما در این جا قواعد طراحی جدیدی نیز لازم است.

بهبودهای بیشتر در راه اندازی و اجرای بهینه سازی چندمعیاره تحت عدم قطعیت عبارتند از:

^۱Steinmel

^۲Engell

- لحاظ کردن اجراهای امکان‌سنجی که این اطمینان را بدهد که هر یک از اجراهای اولیه در طول بهینه‌سازی مبتنی بر یک مجموعه پارامتر عملی است.

- در برخی موارد ممکن است مشکلاتی در مورد حلگر پیش‌آید که احتمالاً به دلیل بستگی خطی گرادیان‌های قیود است. این مورد با استفاده از نرم کردن انتروپی بهبود می‌یابد (به [۲۲] و [۲۳] رجوع کنید).

امکان تحلیل اثر عدم قطعیت بر شبیه‌سازی و بهینه‌سازی در زمینه‌های زیادی مفید است.

(۱) برای بررسی اثر عدم قطعیت بر شبیه‌سازی:

- نشان دادن تغییرات نتایج شبیه‌سازی،

- شناسایی پارامترهایی که باید با عدم قطعیت کمتری تعیین شوند،

- شناسایی پارامترهای مهم برای اصلاح یا بهینه‌سازی مدل،

- بررسی جنبه‌های کنترلی مختلف برای نوسانات فرایند (اولدنبرگ و همکاران [۹])،

- جایابی حسگرها (اولدنبرگ و همکاران [۹]).

(۲) برای استفاده در بهینه‌سازی:

- نشان دادن تغییرات نتایج بهینه‌سازی،

- بهینه‌سازی تصادفی و/یا استوار،

- طراحی بهینه آزمایش‌ها.

استفاده از گزینه‌های مختلف در آنالیز حساسیت و بهینه‌سازی چندمعیاره تعداد زیادی شبیه‌سازی مختلف تولید می‌کند که ارزش بالایی از نظر پشتیبانی تصمیم برای مهندس دارد. تنها با مقایسه حل‌ها و گزینه‌های مختلف، مهندس به درک خوبی از موقعیت می‌رسد و می‌تواند تصمیم خوبی بگیرد.

مراجع

مراجع

- [1] Semi-Infinite Programming (Eds: R. Reemtsen, J.-J. Rußmann), Springer, Berlin 1998.
- [2] A. Griewank, A. Walther, Evaluating Derivatives: Principles and Techniques of Algorithmic Differentiation, 2nd ed., Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA 2008.
- [3] A. Saltelli, M. Ratto, T. Andres, F. Campolongo, J. Cariboni, D. Gatelli, M. Saisana, S. Tarantola, Global Sensitivity Analysis: The Primer, Wiley, Chichester, UK 2008.
- [4] N. Asprion, R. Benfer, S. Blagov, R. Boßcher, M. Bortz, M. Berezhnyi, J. Burger, E. von Harbou, K.-H. Kußer, H. Hasse, Chem. Ing. Tech. 2015, 87 (12), 1810 – 1825.
- [5] M. Bortz, J. Burger, N. Asprion, S. Blagov, R. Boßcher, U. Nowak, A. Scheithauer, R. Welke, K.-H. Kußer, H. Hasse, Comput. Chem. Eng. 2014, 60, 354 – 363.
- [6] J. Burger, N. Asprion, S. Blagov, R. Boßcher, U. Nowak, M. Bortz, R. Welke, K.-H. Kußer, H. Hasse, Chem. Ing. Tech. 2014, 86 (7), 1 – 9. DOI: 10.1002/cite.201400008
- [7] J. Burger, N. Asprion, S. Blagov, M. Bortz, J. Chem. Eng. Data 2016, in press. DOI: 10.1021/acs.jced.6b00633
- [8] J. McNamee, F. Stenger, Numerische Math. 1967, 10, 327 – 344. DOI: 10.1007/BF02162032
- [9] J. Oldenburg, H.-J. Pallasch, C. Carroll, V. Hagenmeyer, S. Arora, K. Jacobsen, J. Birk, A. Polt, P. van den Abeel, in Computer Aided Chemical Engineering, (Eds: B. Braunschweig, X. Joulia), Elsevier, Amsterdam 2008, 973 – 978.
- [10] S. Skogestad, J. Process Control 2000, 10, 487 – 507.
- [11] A. Ben Tal, L. El Ghaoui, A. Nemirovski, Robust Optimization, Princeton University Press, Princeton, NJ 2009.
- [12] D. Bertsimas, D. B. Brown, C. Caramanis, SIAM Rev. 2011, 53 (3), 464 – 501.
- [13] N. V. Sahinidis, Comput. Chem. Eng. 2004, 28, 971 – 983.
- [14] R. Henrion, P. Li, A. Möller, M. C. Steinbach, M. Wendt, G. Wozny, in Online Optimization of Large Scale Systems (Eds: M. Grötschel, S. O. Krumke, J. Rambau), Springer, Berlin 2001, 457 – 478.
- [15] J. Ide, A. Schöbel, OR Spectrum 2016, 38, 235 – 271.
- [16] M. Ehrgott, J. Ide, A. Schöbel, Eur. J. Oper. Res. 2014, 239, 17 – 31.
- [17] E. N. Pistikopoulos, A. Galindo, V. Dua, Multi-Parametric Programming Volume 1: Theorie, Algorithms and Applications, Wiley-VCH, Weinheim 2007.
- [18] W. Luyben, Ind. Eng. Chem. Res. 2010, 49, 719 – 734.
- [19] A. Péneloux, E. Rauzy, R. Freze, Fluid Phase Equilib. 1982, 8, 7 – 23.
- [20] B. Uhlman, T. Laginess, D. Green, D. Steinmetz, P. Saling, NSF protocol 352 Validation and Verification of Eco-efficiency Analysis, Part A, Florham Park, NJ 2013.

-
- [21] J. Steinmel, S. Engell, Comput. Chem. Eng. 2015, 81, 200 – 217.
- [22] J. Schwientek, Ph.D. Thesis, Technische Universita't Kaiserlautern 2012.
- [23] X.-S. Li, S.-C. Fang, Math. Methods Oper. Res. 1997, 46, 119 – 130.



Energy Institute of Higher Education

**Multi-criteria simulation and optimization of
isopropyl benzene production process (Kiuman) by
Aspen Hysys software**

By:

Saeid ghorban zadeh

Supervisor:

Dr. Vasefi

Dr. Maddah

november 2020