



دانشگاه آزاد اسلامی
واحد تهران جنوب
دانشکده تحصیلات تکمیلی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد "M.Sc"
مهندسی شیمی - فرایند

عنوان :

شبیه سازی دینامیکی فرایند استریفیکاسیون به روش تقطیر واکنشی

استاد راهنما :

استاد مشاور:

نگارش:

فهرست مطالب

شماره صفحه

عنوان مطالب

۱	چکیده
۲	مقدمه
۳	فصل اول : تقطیر واکنشی
۴	۱-۱ - تقطیر واکنشی چیست؟
۸	۱-۲ - مزایای استفاده از ستونهای تقطیر واکنشی
۹	۱-۳ - محدودیتها و مشکلات در استفاده از تقطیر واکنشی
۹	۱-۴ - پیچیدگیهای تقطیر واکنشی
۱۱	۱-۵ - ملاحظات عملی طراحی
۱۱	۱-۵-۱) نصب، کنترل و حرکت دادن کاتالیست
۱۱	۱-۵-۲) تماس مؤثر مایع با ذرات کاتالیست
۱۲	۱-۵-۳) تماس خوب مایع و بخار در لایه واکنشی
۱۲	۱-۵-۴) افت فشار کم در بخش واکنشی محتوی کاتالیست
۱۲	۱-۵-۵) انباشتگی مناسب مایع در بخش واکنشی
۱۲	۱-۵-۶) غیر فعال شدن کاتالیست
۱۳	۱-۶-۱) جنبه های سخت افزاری
۱۳	۱-۶-۲) ستونهای پر شده تقطیر واکنشی با پرکنها کاتالیستی
۱۷	۱-۶-۳) ذرات کاتالیستی در سینی ها یا ناودانیها
۲۰	فصل دوم : ترمودینامیک در تقطیر واکنشی
۲۱	۱-۲) آزئوتروپی
۲۶	۲-۲) منحنیهای باقیمانده

۲۹	۳-۲) مرزهای تقطیر ساده
۳۰	۴-۲) برجهای تقطیر
۳۱	۵-۲) خطوط تقطیر
۳۳	۶-۲) مرزهای خط تقطیر و ترکیبات ممکن محصول
۳۵	۷-۲) ترمودینامیک تقطیر واکنشی
۳۸	فصل سوم: انواع مدلها برای مدلسازی برجهای تقطیر واکنشی
۳۹	۱-۳) مدل تعادلی
۴۱	۱-۱-۳) چندگانگی حالت‌های یکنواخت در مدل تعادلی
۴۳	۲-۱-۳) مدل‌های دینامیکی تعادلی مهم
۴۵	۳-۱-۳) استفاده از بازده‌ها در مدل‌های تعادلی
۴۶	۲-۳) انتقال جرم
۴۹	۳-۳) مدل غیر تعادلی
۵۲	۱-۳-۳) مدل‌های غیر تعادلی مهم
۵۶	۲-۳-۳) مدل غیرتعادلی سل
۶۰	۳-۳-۳) مدل غیرتعادلی هموزن کاذب در برابر هتروزن
۶۱	۴-۳-۳) توسعه مدل دینامیکی غیرتعادلی
۶۲	۱-۴-۳-۳) انتقالهای جرم و انرژی از فصل مشترک
۶۴	۲-۴-۳-۳) ویژگیهای هیدرودینامیک و انتقال جرم
۶۶	۵-۳-۳) دینامیک ستونهای RD با سینی غربالی
۷۱	فصل چهارم: شبیه سازی استاتیکی برج تقطیر واکنشی
۷۲	۱-۴) شبیه سازی استاتیکی برج تقطیر واکنشی اتیل استات با فرض تعادلی بودن واکنش

۷۲	۱-۱-۴) انتخاب معادله حالت مناسب و اصلاح پارامترهای آن
۷۴	۲-۱-۴) شبیه سازی پایا
۷۵	۳-۱-۴) بهینه سازی مدل جهت سازگاری با نتایج واقعی
۷۸	۴-۱-۴) ارائه نتایج حاصل از شبیه سازی
۷۹	۴-۲-۴) شبیه سازی استاتیکی برج تقطیر واکنشی اتيل استات با فرض کینتیکی بودن واکنش
۸۲	فصل پنجم: شبیه سازی دینامیکی
۸۵	۱-۵) اهداف قابل دسترس از شبیه سازی دینامیکی
۸۵	۱-۱-۵) ایمنی فرآیند
۸۵	۲-۱-۵) مشخصات محصول
۸۵	۳-۱-۵) قوانین زیست محیطی
۸۵	۴-۱-۵) اقتصاد فرآیند
۸۶	۵-۱-۵) انتخاب نقطه بهینه
۸۶	۶-۱-۵) Start up, Shut down
۸۶	۷-۱-۵) بهینه نمودن طراحی واحد
۸۷	۸-۱-۵) بهینه نمودن نحوه کنترل واحد
۸۷	۹-۱-۵) بهینه نمودن میزان سوددهی واحد
۸۸	۱۰-۱-۵) بررسی عیوب و مشکلات بوجود آمده در کنترل فرآیند
۸۸	۲-۱-۵) شبیه سازی دینامیکی برج تقطیر واکنشی برای تولید اتيل استات
۸۹	۱-۲-۵) شبیه سازی دینامیکی اغتشاشات وارد بر سیستم
۹۷	۲-۲-۵) شبیه سازی دینامیکی مرحله Shut down

فصل ششم: نتیجه گیری و پیشنهادات

- ۱۰۰
۱۰۱ نتیجه گیری
۱۰۴ پیشنهادات
۱۰۵ فهرست عالم
۱۰۶ پیوستها
پیوست الف
پیوست ب
پیوست ج
۱۰۷ منابع و مآخذ
۱۰۸ فهرست منابع لاتین
۱۰۹ سایتهاي اطلاع رسانی
۱۱۰ چکیده انگلیسي

فهرست جداول ها

عنوان	شماره صفحه
-------	------------

۱-۳ : روابط هیدرودینامیک و انتقال جرم برای سینی های غربالی و پرکنها در مدل دینامیکی غیر تعادلی Baur	۶۵
۲-۳ : معادلات مدل برای یک مرحله مدل غیر تعادلی	۶۶
۱-۴ : پارامترهای تداخل برای مدل NRTL	۷۳
۲-۴ : نتایج مدل و نتایج تجربی	۷۵
۳-۴ : نتایج مدل پس از بهینه سازی و نتایج تجربی	۷۵
۴-۴ : ویژگیها و ابعاد سینی	۷۹

فهرست نمودارها

عنوان	شماره صفحه
۱-۲ : دیاگرامهای فاز برای مخلوط بنزن-تولوئن در دمای ۹۰ درجه سانتیگراد الف-دیاگرام $y - x$ در $P - y$ ب-دیاگرام $y - x$ در $P - y$	۲۲
۲-۲: دیاگرامهای فاز برای دو جزئی ایزوپروپیل الکل-ایزوپروپیل اتر الف - دیاگرام $y - x$ در ۷۰ درجه سانتیگراد ب- دیاگرام $y - x$ در $P - y$	۲۴
۱۰۱ کیلو پاسکال ج-دیاگرام $y - x$ در $T - y$ در ۱۰۱ کیلو پاسکال	
۳-۲ : دیاگرامهای فاز برای دو جزئی استن-کلروفرم الف-دیاگرام $y - x$ در $P - y$ در دمای ۶۰ درجه سانتیگراد ب- دیاگرام $y - x$ در ۱۰۱ کیلو پاسکال ج-دیاگرام $y - x$ در $T - y$ در ۱۰۱ کیلو پاسکال	۲۵
۴-۲ : دیاگرام فازی دو جزئی در فشار ثابت برای آرئوتروب هتروژن	۲۶
۱-۳ : الف : حالت‌های یکنواخت چندگانه در تولید TAME ب: پاسخ ستون TAME به تزریق TAME خالص در خوراک در فاصله زمانی ۸۶۰ تا ۹۲۰ دقیقه	۴۳
بازده های	
۲-۳: بازده های جزئی برای اتیلن اکساید، آب ، اتیلن گلایکول و دی	۴۶

اتیلن گلایکول برای عملیات واکنشی و غیر واکنشی برای ستون شکل ۲-۳-

الف

۵۹ ۳-۳: تاثیر سخت افزار ستون و تعداد سلها بر تشکیل محصول جانبی دی

اتیلن گلایکول برای ستون شکل ۲-۳-الف

۶۰ ۴-۳: مقایسه نتایج سه مدل مختلف برای تبدیل ایزوبوتن الف: هموژن کاذب،

ب: مدل سال غباری بدون در نظر گرفتن جمله نفوذ نودسون ، ج: مدل سیال

غباری با در نظر گرفتن جمله نفوذ نودسون

۶۸ ۵-۳ : تاثیر مدل‌های مختلف بر شدت جریان محصول انتهایی در جزء مولیهای

مختلف MTBE در جریان محصول انتهایی

۶۹ ۶-۳: پاسخ دینامیکی مدل‌های تعادلی و غیر تعادلی به یک افزایش پنج

درصدی در خوراک متانول

۷۰ ۷-۳: پاسخ دینامیکی مدل‌های بازده معادل ، تعادلی و غیر تعادلی به یک

افزایش هفت درصدی در خوراک متانول الف : جزء مولی MTBE در جریان

انتهایی ب: دما در جریان انتهایی

۷۶ ۱-۴: پروفایل جزء مولی فاز مایع در نتایج مدل پس از بهینه سازی

۲-۴: پروفایل جزء مولی فاز مایع در حالت تجربی

سازی

- ۴-۴: پروفایل شدت جریان مولی اتیل استات در نتایج مدل پس از بهینه ۷۷
- ۴-۴: شدت جریان مولی اتیل استات در حالت تجربی ۷۷
- ۴-۵: پروفایل فراریت نسبی ۷۸
- ۴-۶: پروفایل ترکیب مایع با فرض سینتیکی بودن واکنش ۸۰
- ۴-۷: پروفایل جریان مولی اتیل استات ۸۰
- ۵-۱: ترکیب محصول مقطر ۹۰
- ۵-۲: شدت جریان مولی اجزاء مختلف در محصول مقطر ۹۰
- ۵-۳: پروفیل دما در داخل برج ۹۱
- ۵-۴: ترکیب محصول انتهایی ۹۱
- ۵-۵: شدت جریان مولی اجزاء مختلف در محصول انتهایی ۹۲
- ۵-۶: ترکیب محصول مقطر در اثر کاهش غلظت اتانول در خوراک دوم ۹۳
- ۵-۷-۱: شدت جریان مولی اجزاء مختلف در محصول مقطر (کاهش غلظت اتانول) ۹۳
- ۵-۸-۱: ترکیب محصول انتهایی در اثر کاهش غلظت اتانول در خوراک دوم ۹۴
- ۵-۹-۱: شدت جریان مولی اجزاء مختلف در محصول انتهایی (کاهش غلظت اتانول) ۹۴
- ۵-۱۰-۱: پروفیل دما در داخل برج در اثر کاهش غلظت اتانول در خوراک دوم ۹۵
- ۵-۱۱-۱: ترکیب محصول مقطر پس از کاهش دمای خوراک اول ۹۵
- ۵-۱۲-۱: شدت جریان مولی اجزاء مختلف در محصول مقطر (کاهش دمای

خوراک اول)

۹۶

۱۳-۵- ترکیب محصول انتهایی در اثر کاهش دمای خوراک اول

۹۶

۱۴-۵- شدت جریان مولی اجزاء مختلف در محصول انتهایی (کاهش دمای

خوراک اول)

۹۷

۱۵-۵- پروفیل دما در داخل برج در اثر کاهش دمای خوراک اول

۹۹

۱۶-۵- تغییرات شدت جریان bb طی مرحله از کار اندازی سیستم

۹۹

۱۷-۵- تغییرات فشار کندانسور طی مرحله از کار اندازی سیستم

فهرست شکل‌ها

عنوان	شماره صفحه
۱-۱ : طرح فرایند برای یک واکنش نظری $A + B \leftrightarrow C + D$ الف:	۵
شماه سنتی راکتور و جداساز ب: ستونهای تقطیر واکنشی	
۲-۱ : الف : تقطیر واکنشی برای سنتز MTBE ب : تقطیر واکنشی	۶
برای هیدراسیون اتیلن اکساید به اتیلن گلایکول ج : تقطیر واکنشی برای	
تولید کیومن د : تقطیر واکنشی برای تولید پروپیلن اکساید	
۳-۱ : هایدرودسولفوریزاسیون گازهای نفتی در الف : راکتور trickle-bed	۸
همجهت و ب : ستونهای تقطیر واکنشی	
۴-۱ : فرایندهای انتقال در تقطیر واکنشی الف : واکنشهای هموژن ب	۱۰
: واکنشهای هتروژن	
۵-۱ : مقیاسهای زمانی و طولی در تقطیر واکنشی	۱۱
۶-۱ : طرحهای مختلف کاتالیستی	۱۴
۷-۱ : طرحهای مختلف مشبک کاتالیستی	۱۴
۸-۱ : بالهای کاتالیستی	۱۵
۹-۱ : ساختارهای مختلف کاتالیست ساندویچی	۱۶

۱۷

۱۰-۱: انواع دیگر ساختارهای کاتالیست

۱۷

۱۱-۱: بسته های کاتالیستی جاسازی شده در طول مسیر جریان مایع

۱۸

۱۲-۱: تماس غیر هم جهت بخار - مایع - کاتالیست در ستونهای سینی دار

با جا سازیهای مختلف کاتالیست

۲۳

۱-۲: الف: شمای یک مرحله تعادلی ب: ستون تقطیر چند مرحله ای

۲۶

۱-۲: ظرف تقطیر ساده

۲۸

۲-۲: منحنیهای باقیمانده یک سیستم سه جزئی با یک آزئوتروپ دو

جزئی حداقل نقطه جوش

۲۸

۲-۳: پایداری منحنیهای باقیمانده برای یک سیستم سه جزئی در مجاورت

یک آزئوتروپ دو جزئی

۲۹

۴-۲: نقشه های منحنیهای باقیمانده یا خطوط تقطیر الف - سیستم

بدون آزئوتروپ ب - سیستم دارای آزئوتروپهای دو جزئی ج - سیستم دارای

آزئوتروپهای دو جزئی و سه جزئی

۳۰

۵-۲: شمایی از ناحیه جذب یک ستون تقطیر

۳۱

۶-۲ - خط تقطیر و خطوط رابطش

۳۲

۷-۲ - منحنی باقیمانده و خط تقطیر (که در نقطه P با یکدیگر تلاقی

می کنند)

۳۲

۸-۲ - رابطه هندسی بین خطوط تقطیر و منحنیهای باقیمانده

۳۴

۹-۲ - خط موازن جرم کلی با یک کندانسور جزئی / کامل

- ۱۰-۲- نواحی ترکیبات محصول مقتدر و انتهایی امکان پذیر (نواحی سایه خورده) الف- سیستم بدون آزئوتروپ ب- سیستم با دو آزئوتروپ دو جزئی ج - سیستم با آزئوتروپهای دو جزئی و سه جزئی
- ۱۱-۲- منحنیهای باقیمانده برای تولید MTBE با کاتالیستهای هموژن و هتروژن
- ۱۲- الف: شمای یک مرحله تعادلی ب: ستون تقطیر چند مرحله ای
- ۱۳- الف: آرایش ستون تقطیر واکنشی برای تولید MTBE ب: تاثیر مرحله خوارک متانول بر میزان تبدیل در مدلهای تعادلی و غیر تعادلی
- ۱۴- یک مرحله غیر تعادلی برای واکنش هموژن در فاز مایع
- ۱۵- الف : آرایش ستون تقطیر واکنشی برای هیدراسیون اتیلن اکساید به اتیلن گلایکول ب: محاسبات مدل تعادلی برای فرایند اتیلن گلایکول
- ۱۶- ج: محاسبات مدل غیر تعادلی برای تولید اتیلن گلایکول
- ۱۷- مدل غیر تعادلی سل
- ۱۸- ۳- جزئیات جریانهای ورودی و خروجی سلهای چندگانه برای مدل کردن هیدرودینامیک ستونهای سینی دار
- ۱۹- ۳- ۷- مدل غیر تعادلی برای واکنشهای کاتالیستی هتروژن
- ۲۰- ۸- ۳- نمای شماتیک از یک مرحله غیر تعادلی
- ۲۱- ۹- ۳- مقایسه پروفیلهای دما در فیلمهای بخار و مایع
- ۲۲- ۱- ۴- منحنیهای باقیمانده برای سیستم چهار جزئی آب - اتیل استات -

اسید استیک - اتانول در فشار یک اتمسفر

۸۹

۱-۵ - طرح کنترلی سیستم برای کنترل اغتشاشات

۹۸

۲-۵ - شمای سیستم کنترل برای از کار اندازی سیستم

چکیده :

مسائل طراحی و عملیاتی ستونهای تقطیر واکنشی بسیار دشوارتر و پیچیده تر از سیستم‌های مرسوم راکتور- جداکننده میباشد . بدیهی است وقوع تقطیر در لایه واکنش تداخلهای پیچیده ای بین تعادل بخار - مایع، انتقال جرم بخار- مایع ، نفوذ کاتالیستی (در صورت هتروژن بودن کاتالیست) و کینتیکهای شیمیایی بوجود خواهد آورد. چنین تداخلهایی به پدیده چندگانگی حالت‌های یکنواخت و دینامیک پیچیده منجر خواهد شد ؛ بنابراین مطالعه رفتار دینامیکی این سیستمها از اهمیت بسیاری برخوردار است . در این پروژه ، در ابتدا شبیه سازی یک برج تقطیر واکنشی برای تولید اتیل استات (که از لحاظ صنعتی از اهمیت بسیاری برخوردار است و در صنایع غذایی ، دارویی و کشاورزی مورد استفاده قرار میگیرد) در حالت استاتیک مورد مطالعه قرار میگیرد سپس به شبیه سازی دینامیکی آن برای بررسی رفتار سیستم در اثر اغتشاشات وارد و نیز در هنگام از کار اندازی سیستم ، پرداخته میشود .