شبیه سازی و بهینه سازی واحد استیرن

Styrene Plant Simulation and Optimization

K.M.Sundaram,H.Sardina, J.M.Fernandez-Baujin and J.M.Hildreth, ABB Lummus Crest Inc. Bloomfield, N.J.

ترجمه: حسن دبیری اصفهانی ،آذر محمدلوی عباسی

دانشگاه صنعت نفت

چکیده

شبیه سازی و بهینه سازی واحد استیرن با استفاده از کامپیوترهای سریع و ارزانقیمت امروزی موضوع مورد بحث این مقاله است.با استفاده از این روش ،که با فرضهای مناسب به مدلی ساده منجر می‌شود ،ضمن حفظ دقت مدلهای پیچیده زمان محاسبه کاهش می‌یابد.معادله‌های نمونه به روش عددی حل می‌شوند.در بهینه سازی همه محدودیتها مورد بررسی قرار می‌گیرند ،آن گاه بحث روی یک واحد حقیقی متمرکز می‌شود.

با استفاده از کامپیوترهای شخصی کارکرد فرایندهای مختلف را می‌توان به دقت پیش‌بینی کرد و در نتیجه از اشکالهای احتمالی جلوگیری به عمل آورد.

بدین ترتیب ،با استفاده از نرم‌افزارهایی که با قیمتهای مناسب در دسترس همگان قرار دارد می‌توان هزینه‌های جاری را کاهش داد.

واژه‌های کلیدی :استیرن ،شبیه سازی ،بهینه سازی ،کامپیوترهای شخصی ،معادله های پیوستگی

Key Words: styrene, simulation, optimization, personal computers, continuity equations

مقدمه

شبیه سازیهای پیچیده و بهینه سازی کل واحدها را می‌توان با استفاده از کامپیوترهای سریع و ارزان امروزی، یعنی کامپیوترهای شخصی ،انجام داد.

در این مقاله درباره شبیه سازی و بهینه سازی واحد استیرن بحث می‌شود.مدل ریاضی راکتور مرکب از معادله‌های پیوستگی برای هر جزء شیمیایی ،معادله‌های موازنه گرمایی و موازنه مقدار حرکت ،است.این مدل شامل هر دو واکنش همگن و ناهمگن می‌شود.با اینکه تمام تجهیزات قسمت بازیابی منظور شده است ،نتیجه فرضیات معقول یک مدل بازیابی ساده شده است که دقت مدل پیچیده را حفظ می‌کند و زمان محاسبه را کاهش می‌دهد.معادله‌های مدل برحسب عدد حل می‌شوند.تابع هدف کلی هر دو هزینه متغیر و ثابت تولید را منظور می دارد.بهینه سازی با استفاده از یک الگوریتم جستجوی مستقیم که تمام محدودیتهای واحد را در نظر می‌گیرد ،اجرا می‌شود.استفاده از مدل برای یک مورد واحد واقعی بحث می‌شود.

با ظهور کامپیوترهای سریع ،مدلهای پیچیده زیادی برای پیش‌بینی دقیق عملکرد تجهیزات مختلف واحد فرایند پیشنهاد شده‌اند. اغلب استفاده از این قبیل مدلها به برخی گروههای تخصصی محدود می‌شود.با معرفی کامپیوترهای شخصی ،هزینه‌های محاسبه به طور جدی کاهش یافته و بسته‌های نرم‌افزار زیادی با قیمتهای مناسبی در دسترس قرار گرفته‌اند.

متغیرهای اقتصادی و فرایندی

استیرن و اتیلن هر دو در زمینه مواد شیمیایی ساخته شده در رده بالایی قرار می‌گیرند.ظرفیت متوسط این واحدها بیش از ۱۰۰،۰۰۰ تن متری در

سال (mtpy) است و واحدهایی با ظرفیت بالاتر تا mtpy ۴۰۰،۰۰۰ و کم نیستند.بنابراین ،نه تنها هزینه سرمایه‌گذاری بالا است ،بلکه اندک پیشرفتی در عملیات واحد اغلب می‌تواند به درآمدهای نسبتا زیادی منجر شود.ولی ،بسیاری از شرکتهای در حال کار تردید دارند که شرایط عملیات سنتی را تغییر دهند ،زیرا درکشان از برهم کنشهای بین متغیرهای اقتصادی و فرایند ناقص است.نرم‌افزارهایی با مدلهای اساسی درجه بندی نشده به صورت تجاری برای واحدهای بازیابی محصول در دسترس‌اند.با اینکه راکتور قلب یک واحد است ،تنها چند مدل وجود دارد که مخصوص انواع معینی از راکتورهاست.

پژوهشهای جاری بر توسعه مدلهای اساسی‌تر و پیچیده‌تر متمرکز شده است ،هرچند که به ندرت در موقعیتهای تجاری به کار می روند. درباره شبیه سازی واحد استیرن به طور مفصل در زیر بحث خواهد شد.

موارد استفاده شبیه سازها

یک شبیه‌ساز فرایند به راههای مختلفی برای اپراتورهای واحد مفید است.توانایی شبیه‌سازی عملیات جاری یک واحد قابلیتی مهم است.یک شبیه‌ساز می‌تواند اطلاعات فراوانی راکه از دستگاههای کنترل به سادگی قابل دستیابی نیست ،فراهم آورد.شبیه ساز این اطلاعات را به شکل قابل فهم ساده‌ای هم برای اپراتورها و هم مهندسان واحد آماده می‌کند. شبیه‌سازهای پیشرفته اطلاعات را به صورت ترسیمی با استفاده از تصویرهای نمودارهای جریان فرایند برای انتقال شرایط عملیات ارائه می‌دهند.این کار مقایسه ساده شرایط نمودار جریان را ممکن می‌کند.نتایج شبیه سازی را می‌توان برای نظارت برکارکرد واقعی واحد در برابر کارکرد پیش‌بینی شده به کار برد.بدین ترتیب ،دستگاههای خراب ،تجهیزات عملیاتی ضعیف و هر مسئله دیگر عملیاتی را می توان به آسانی کشف کرد.

از شبیه‌سازها در ترکیب با نرم افزارهای بهینه ساز می‌توان برای بهینه‌سازی عملیاتی یک واحد فرایند استفاده کرد.با به دست آوردن تابعهای هدف چندگانه می‌توان واحدها را برای طرحهای عملیاتی متنوعی بهینه ساخت که (۱) حداکثر تولید ،(۲) حداکثر سود یا (۳) حداقل هزینه تولید از آن جمله‌اند.از این رو ،یک واحد می‌تواند به بهترین روش ،بدون توجه به شرایط اقتصادی اداره شود که می‌تواند برای کارفرما سود فوری برحسب پول ذخیره شده یا درآمد تولید شده اضافی به دنبال داشته باشد.به علاوه ،کارفرما مطمئن است که واحد او در شرایط "بهینه" واقعی در حال کار است.وقتی سیستمهای کنترل کامپیوتری پیشرفته نیز در نظر گرفته شوند ،مزایای پیش گفته حتی سریعتر مشخص می‌شوند.بهینه ساز مزیت دیگری دارد و آن پی بردن به اشکالهای اساسی واحد است و همچنین قابلیت محدودی برای انجام مطالعات در جهت برطرف کردن اشکالها دارد.

شبیه سازها در مواقعی که عملیات مورد نظر است نیز مفیدند.شبیه سازها را می‌توان در آزمایش شرایط جدید عملیاتی به کاربرد یا بااستفاده‌ازآنها خط مشیهای تغییر عملیات را با حداقل فشار بر تولید طرح کرد.باکمک شبیه سازها ،اپراتورها می‌توانند از اثر تغییرات آگاهی یابند و برای انجام اصلاحات مربوط در نقاط تعیین شده دستگاه آماده شوند.در نتیجه، عملیات طی مراحل انتقالی یکنواخت تر خواهد بود و این مراحل را می‌توان سریعتر انجام داد.

شبیه سازهایی که مدلهای سینتیکی پیشرفته را به کار می‌گیرند ، می‌توانند به ویژه در طراحی چرخه تعویض کاتالیزورها مفید باشند.در هر زمان کارفرما می‌تواند اثر تعویض کاتالیزور را باکاتالیزور تازه یاکاتالیزور دیگر ارزیابی کند.سپس او می‌تواند زمان تعویض بهینه و طبق آن تعطیل عملیات را مشخص کند یا در مورد اینکه کاتالیزور دیگری برای شرایط اقتصادی جاری مفیدتر است ،تصمیم بگیرد.

سرانجام ،از شبیه سازها می‌توان برای آموزش اپراتورهای جدید یا بازآموزی اپراتورهای قدیمی استفاده کرد.با استفاده از شبیه سازها، "دانشجویان" می‌توانند بیاموزند که واحد چگونه رفتار می‌کند ،متغیرهای کلیدی و اثر آنها بر عملیات چیست و بیاموزند که در شرایط طرحهای عملیاتی مختلف چه انتظاراتی باید داشته باشند.برای این کاربرد استفاده از خروجی ترسیمی مناسبت ویژه دارد.بدین ترتیب ،تجربه عملیاتی معادل با چندین سال کار را می‌توان طی زمان نسبتا کوتاهی به دست آورد.مزایا رامی‌توان هم در عملیات یکنواخت تر و هم ایمنتر مشاهده کرد.

مدل واحد استیرن

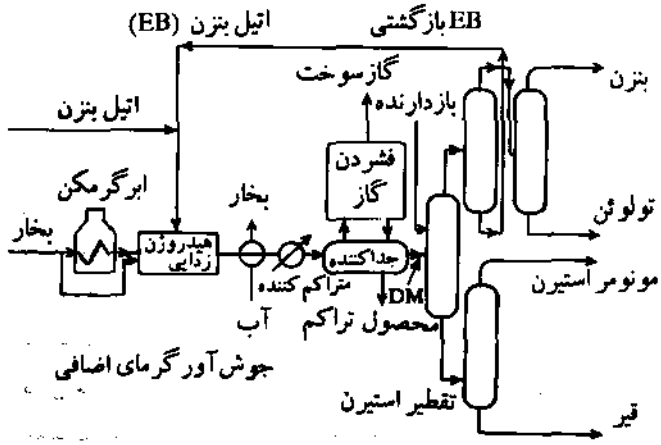
در دنیا مقدار عمده استیرن از هیدروژن زدایی اتیل بنزن روی کاتالیزوری مناسب تهیه می‌شود.یک نمودار جریان اجمالی از واحد استیرن در شکل ۱ نشان داده شده است.تجهیزات مهم آن عبارت‌اند از:

راکتور هیدروژن زدایی
داغ کننده بخار
مبدل حرارتی ضایعات
کمپرسور گازهای خروجی
برجهای اتیل بنزن /استیرن

دربین این واحدها، راکتورمهمتر از همه است. راکتور بر رابطه‌های اقتصادی کلی عملیات واحد غالب است.

راکتور هیدروژن زدایی

خوراک هیدورکربن راکتور ،اتیل بنزن تازه مخلوط با اتیل بنزن تبدیل نشده بازگشتی است.خوراک هیدروکربن ،قبل از ورود به راکتور با بخار داغ مخلوط می‌شود که بخار نه تنها به عنوان یک محیط گرم کننده عمل می‌کند بلکه نقش یک رقیق کننده نیز دارد. تبدیل اتیل بنزن به‌استیرن



DM = مخلوط هیدروژن زدوده (Debhydrogenated mixture)

شکل ۱ - نمودار اجمالی فرایند استیرن کرست(Crest) مونسانتو و لوماس

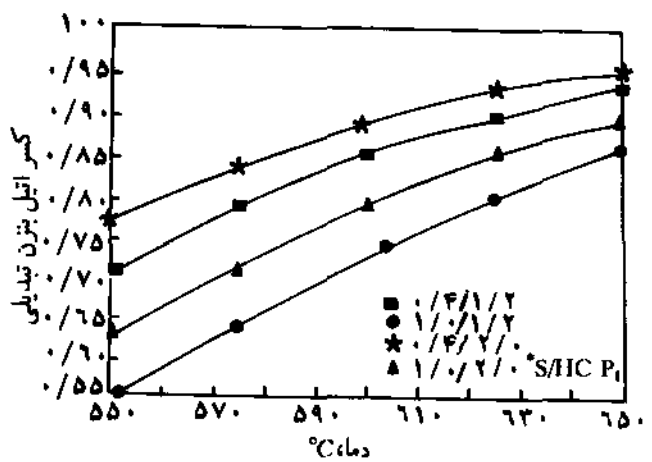
گرماگیر است و در راکتورهای دارای بسترهای شعاعی چندگانه انجام می‌شود.این راکتورها با کاتالیزورهای اختصاصی (مثلا Girdler 641 , Shell 105 و غیره) پر شده‌اند.کاتالیزورهای نمونه مصرفی در صنعت بوسیله ویلیامز خلاصه شده‌اند [۱].بسترهای شعاعی برای به حداقل رساندن افت فشار در همه جای راکتور به کار گرفته می‌شوند.چون واکنش گرماگیر است ،مخلوط واکنش بین راکتورها دوباره گرم می‌شود.

مهمترین واکنش عبارت است از:

(۱) هیدروژن + استیرن ⟷ اتیل بنزن

(SM) (EB)

برای به حداکثر رساندن تبدیل تعادلی ترمودینامیکی ،راکتور تحت خلاء عمل می‌کند.تبدیل تعادلی ترمودینامیکی در شرایط معمولی عملیات کاملا" زیر ۱۰۰ % است.آثار نسبت بخار به EB ،دما و فشار بر تبدیل تعادلی در شکل ۲ نشان داده شده است.



* S/HC نسبت بخار به هیدروکربن ،P، = فشار کلی(Kg/cm^2 مطلق)

شکل ۲ - هیدروژن زدایی اتیل بنزن

برای محاسبه ثابت تعادل از انرژیهای آزاد گازهای ایده‌آل استفاده می‌شود[۲].تبدیل تعادلی برمبنای واکنش معادله ۱ ،عبارت است از :

$$K_p = XP_t \ (1-X)(1+X+D) \qquad (۲)$$

که D نسبت رقت مولی (مول بخار برمول خوراک EB) است. درکاربردهای تجاری ،تبدیل تعادلی به ندرت از ۸۵% تجاوز می‌کند، مگر آنکه تکنولوژی گرمایش مجدد اکسیژن به کار گرفته شود.بنابراین، انتخاب دما ،فشار و نسبت بخار به EB در تعیین رابطه‌های اقتصادی واحد بحرانی است.به علاوه ،چون دمای ورودی بالاست ،مقداری شکستن مولکولی (cracking) گرمایی رخ می‌دهد.مهمترین واکنشهای گرمایی و کاتالیزوری در جدول ۱ خلاصه شده است.ولی ،همه واکنشهای گرمایی و کاتالیزوری باید در یک مدل واقعی در نظر گرفته شوند.

جدول ۱ - کاتالیزور نمونه و واکنشهای گرمایی

	انرژی فعالساز cal/mol	
	کاتالیزوری	گرمایی
۱) $C_8H_{10} \rightleftharpoons C_8H_8 + H_2$	۲۹،۳۴۰	۱۷،۹۳۰
۲) $C_8H_{10} + 2H_2O \rightarrow C_6H_6 + CO_2 + 3H_2$	۳۲،۹۵۰	۳۰،۰۰۰
۳) $C_8H_{10} + 2H_2O \rightarrow C_6H_6 + 2H_2 + CO_2 + CH_4$	۳۰،۰۰۰	۲۲،۳۵۰

برای مثال: سرعت واکنش کاتالیزوری

$$r_1 = K_1 (P_{EB} - P_{SM} P_H K_P) / (K_A + K_B P_{EB} + K_C P_{SM})$$

معادله‌های پیوستگی برای هرگونه ،موازنه انرژی و معادلات افت فشار درجدول ۲ نشان داده شده است.واکنش به طور آدیاباتیک انجام می‌شود.با اینکه عبارتهای سرعت تجربی برای سرعتهای واکنش کاتالیزوری به کار می رود ،ولی آنها به عبارتهای سرعت لانگ مویر - هنشل وود - هوگن و واتسون ،(Langmuir -Hinshelwood- Hougen- Watson) LHHW ،شباهت دارند.وقتی واکنشهای مولکولی به درستی فرمولبندی شوند ،تقریب خوبی برای واکنشهای رادیکال آزادند که در واقع واکنشهای حقیقی در فرایند شکستن مولکولی گرمایی می باشند [۳].از این رو ،واکنشهای مولکولی که منجر به معادله‌های دیفرانسیلی تقریبی (non-stiff) می‌شوند برای ارائه شکستن مولکولی گرمایی مورد استفاده قرار می‌گیرند.رابطه‌های سینتیکی از داده‌های راکتور تجارتی و واحد پیلوت (pilot plant) به دست می آیند.انرژیهای فعالسازی نوعی که برای کاتالیزوراختصاصی به کار گرفته شده نیز در جدول ۱ نشان داده شده است.

جدول ۲ - معادله‌های حاکم برای راکتور با بستر شعاعی، مدل تک بعدی همگن

معادله پیوستگی برای گونه J - ام :

$$-U_s \frac{dC_j}{dy} = \rho_b \sum_i S_{ij} r_i$$

موازنه انرژی، (راکتور آدیاباتیک):

$$U_s \rho_g C_p \frac{dT}{dy} = \rho_b \sum_i (-\Delta H)_i r_i$$

معادله افت فشار:

$$\Delta P = \Delta P(\text{لوله}) + \Delta P(\text{توزیع کننده}) + \Delta P(\text{بستر})$$

$$\frac{\Delta P(\text{بستر})}{\Delta Y} = -f \frac{G^2}{g \rho_K d_p}$$

شرایط اولیه و مرزی:

$$Z = o,\ C_j = C_{j_0},\ T = T_0$$
$$Y = L,\ P_t = P_{te}$$

معادله‌های حاکم غیرخطی هستند واز این رو ،به طور عددی انتگرال‌گیری می‌شوند.برای تمام شبیه سازهای راکتور تجارتی، فشارمکش در کمپرسور گاز خروجی (off-gas) و درنتیجه فشار خروجی راکتور معلوم است.بنابراین ،سیستم درگیر مسئله مقدارمرزی (boundary value) می‌شود.یک روش تکراری (iterative procedure) به کار می رود و معمولا طی دو تا سه مرحله تکرار به همگرایی می رسد.

فعالیت کاتالیزوز

مانند بسیاری از کاتالیزورهای تجارتی مصرفی در فرایندهای مختلف، کاتالیزور هیدروژن زدایی فعالیت خود را از دست می دهد.اغلب ،افت فعالیت کاتالیزور به ترسیب کک روی کاتالیزورنسبت داده می‌شود [۴]. مکانیسم مشابهی نیز در برخی کاتالیزورهای هیدروژن زدایی برای هیدروژن زدایی بوتن به بوتادی ان روی کاتالیزور اکسید آلومینیوم کروم عمل می‌کند [۵]. ولی ،درتولید استیرن تجربه نشان می‌دهد که علاوه بر ترسیب کک، کاهش ماده فعال به طور قابل توجهی در افت فعالیت سهیم است.یک معادله تجربی که این اثر را منظور می دارد ،مورد استفاده قرار گرفته است.

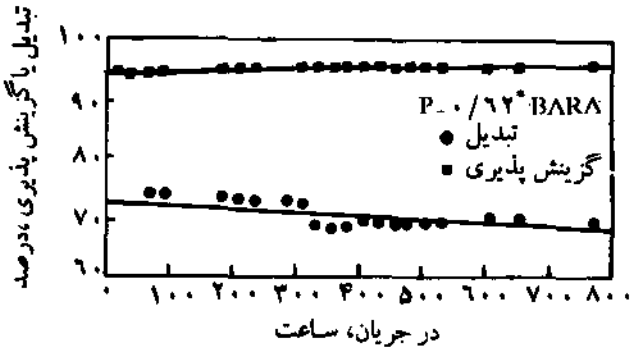
$$a = f(x,T,Ca,t) \qquad (۳)$$

معادله تجربی ۳ در واقع حاصلضرب دو جمله است ،یکی برای ترسیب کک و دیگری برای کاهش جزء فعال.به ندرت دیده می‌شود که راکتور در شرایط ثابت برای تمام چرخه عمل کند.با استفاده از زمان پنداری ،t ،(fictitious time) نیازی به ذخیره تاریخچه عملیات قبلی راکتور نیست.با استفاده از این رهیافت ،برمبنای داده‌های عملیاتی جاری ، یک زمان پنداری محاسبه خواهد شد که با فعالیت جاری کاتالیزور با استفاده از معادله ۳ جور است.طول دور عملیاتی (runlength) راکتور با ماکسیمم دمای مجاز راکتور تعیین می‌گردد.فرض می‌شود که برای بقیه طول چرخه تبدیل ثابت نگه داشته شده است.با این فرض برای هر شرایط عملیات انتخابی توسط استفاده کننده یا بهینه ساز بقیه طول دور عملیاتی را با استفاده از معادله ۳ می‌توان مشخص کرد.

فعالیت نمونه کاتالیزور به عنوان تابعی از زمان در جریان (onstream) در شکل ۳ نشان داده شده است.در این شکل ،تبدیل به عنوان تابعی از روزهای در جریان و گزینش پذیری نسبت به استیرن نشان داده شده است.برای این کاتالیزور ،فعالیت بر گزینش پذیری اثر مهمی نداشت.مثال دیگری که از واحد متفاوتی در طول چرخه بسیار طولانی تر (بیش از ۱۸ ماه) گرفته شده در شکل ۴ نشان داده شده است و این نتیجه را اثبات می‌کند.احتمال دارد که نوعی محل انفرادی در همه این واکنشها درگیر باشد و از این رو ،هرگونه تغییری در محلها به علت کاهش فعالیت به طور یکنواخت بر تمام واکنشها اثر بگذارد.باوجود این ،گزینش پذیری در تبدیلهای پایین ،بالاست.

ابرگرمکن

قسمت انتگرالی شبیه سازی راکتور ،شبیه سازی مبدل گرمایی ضایعات و ابرگرمکن بخار (steam superheater) است.در این واحدها واکنش شیمیایی مهمی وجود ندارد.بنابراین ،فقط معادله‌های موازنه انرژی و افت فشار بررسی می‌شوند.چون مشابه سازی وسایل تجهیزاتی موجود براساس این معادله‌ها صورت می‌گیرد ،به شکلهای ساده تر یک مدل می‌توان



*BARA: بار مطلق

شکل ۳ - فعالیت کاتالیزور در برابر زمان

دست یافت.برای مثال مبدل گرمایی را می‌توان به طور قابل قبولی به صورت زیر مدلسازی کرد:

$$Q = UA\Delta T = M_t (h_{ti} - h_{to}) = M_s (h_{st} - h_{so}) \qquad (۴)$$

$$T_1 = T_{ti} - T_{si} , T_2 = T_{to} - T_{so}$$

$$\Delta T = T_1 - T_2 / Ln (T_1 / T_2) \qquad (۵)$$

که به ترتیب h_tوT_t آنتالپی و دمای سیال طرف لوله ،h_sوT_s آنتالپی و دمای سیال طرف پوسته‌اند.بسته به شرایط عملیاتی واحد و منطقه نصب آن، ضریب کلی انتقال گرما U را می‌توان به طور دقیق به دست آورد. پس برای هر سرعت جریان دیگری ،U کلی را می‌توان با روشهای استاندارد بسته به مقاومت کنترل کننده برآورد کرد [۶].معلوم شده است که این روش ساده شده برای ارائه داده‌های کارکرد واقعی در دامنه وسیعی از شرایط جریان با خطایی کمتر از ۱٪ مناسب است.وقتی یک تغییر فاز وجود دارد ،معادله ۴ برای هر منطقه ،به طور جداگانه به کار می رود. بنابراین ،سایر تجهیزات بجز راکتورها برحسب تعدادی معادله‌های جبری مدلسازی می شوند که ضرایب آنها از داده‌های واحدواقعی داده‌های طراحی در ارتباط با نظریه مناسب گرفته شده‌اند.مدلها برای مقاصد زیر ساخته می‌شوند:

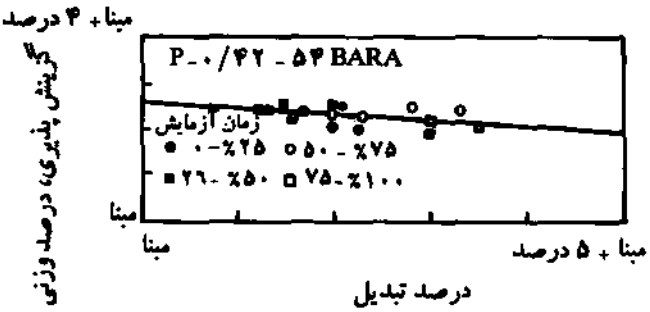
محاسبه مصرف انرژی

نظارت بر محدودیتهای ظرفیت

روشن است که برای شرایط عملیاتی مشخص ،هرگونه تخلفی از حد ظرفیت (مثلا ،نیروی بخار محاسبه شده از ظرفیت مشعل تجاوز کند) دلالت بر آن دارد که چنین شرایط عملیاتی معقول نیست و نتایج پیش‌بینی شده استفاده عملی ندارند.

قسمت بازیابی

بحرانی ترین واحدها در قسمت بازیابی ،برجهای تقطیر، به ویژه جداکننده اتیل بنزن /استیرن است.این برج می‌تواند تا ۱۰۰ مرحله نظری داشته



شکل ۴ - گزینش پذیری کاتالیزور با زمان در جریان

بهینه ساز /شبیه ساز SM* GAIN

شبیه ساز(۱) /بهینه ساز (۲یا۳)۲	شروع	پایین	بالا	تابع هدف ۱
خوراک هیدورکربن (تازه ،بازگشتی)، T/HR	۳۵	۳۳	۴۳	۱=حداکثرسود
بخارکلی /روغن،وزنی /وزنی	۱/۶۵	۱/۳	۲	۲=حداکثرظرفیت
خروجی راکتور۲ P,KCA	۰/۵۳	۰/۲۵	۰/۷	۳=حداقل VCOP
خروجی راکتور۱ T,C	۶۳۵	۶۲۰	۶۴۵	
ورودی راکتور۲ T,C	۶۳۷	۶۲۰	۶۴۵	

قیمتها بر حسب دلار

اتیل بنزن ۰/۴۵/Kg		بخار فشار پایین	۱۳/۵/MT
بنزن ۰/۱۴/Kg		محصول تراکم	۰/۲۴/MT
تولوئن ۱۵/Kg		آب سرد	۰/۲۷/MT
استیرن ۱/Kg		سوخت	۱۸/MMKCAL
قیر ۰/Kg (یادداشت ۱)		برق	۰/۰۶/KW-HR
گازخروجی(*) ۱۸/MMKCAL		هزینه ثابت	۲۲/MTSM
کاتالیزور ۱۲/۲/Kg			
NSI INH ۳/۸/Kg			
TBC INH ۱۵/Kg	کاتالیزور	[G-۶۴J]:۱	[G-۸۴C]:۱
بخار پرفشار۱۶/MT		(۱)	(۲)
بخارفشارمتوسط ۱۳/۵/MT		F_1 را برای کمک فشار دهید، [ESC] = ادامه	

یادداشت ۱: وقتی به عنوان سوخت در ابرگرمکن مصرف شود، آن را خالی بگذارید.

* مقصود از SM ،مونومر استیرن می‌باشد.

شکل ۵ - نمونه ورودی بهینه ساز

مشخصات اجزای محصول

محصول	اجزای سازنده برحسب درصد وزنی در محصول					
	بنزن	تولوئن	نفتیل آمین	اتیل بنزن استیرن	AMS	آب
استیرن				۰/۰۵۰۰	۰/۰۳۰۰	
قیر				۵/۵۰۰		
بنزن		۰/۱۰۰۰				
تولوئن		۰/۱۰۰۰		۱/۵۵۰۰	۰/۰۰۰	
EB تازه		۰/۰۰۲۰	۰/۰۳۰۰	۰/۰۶۰۰		
EB بازگشتی		۰/۰۲۰۰	۱/۵۵۰۰	۰/۵۷۰۰		
گاز خروجی	۰/۰۳۶۰	۰/۰۰۰	۰/۰۰۰	۰/۰۰۱۵	۰/۰۰۰۹	۰/۱۷۰۰

شکل ۶ - ورودی مشخصات محصول

باشد تا استیرن با خلوص بالا (بیش از ۹۹/۹٪) به دست آید. چنانچه قبلا بحث شد ،به دلیل محدودیتهای تعادلی خوراک هرگز تبدیل کامل نمی‌شود. بنابراین ،ترکیب مواد بازگشتی با کارکرد راکتور تغییر می‌کند. از این رو ،مدل باید علاوه بر نظارت بر ظرفیت ،خلوص مواد بازگشتی رانیز محاسبه کند. الگوریتمهای استاندارد زیادی وجود دارند تا این برجها را با دقت بالا شبیه سازی کنند. ولی، حتی با این الگوریتمهای پیچیده نیز باید بازدهی سینیها و مقادیر "K" (ثابت تعادل مایع و بخار) را تغییر داد تا با عملیات برج واقعی جور شود. برخی از این روشها نظارت بر رابطه‌های هیدرولیکی ندارد. چون موارد مورد نیاز فعلی تنها برآورد مصرف انرژی، حدود ظرفیت و ترکیب محصول می‌باشند، از مدلهای ساده شده برای صرفه‌جویی در وقت می‌توان استفاده کرد. یکی از روشهای پرطرفدار برای این منظور ،تقریب اسمیت - برینکلی (Smith-Brinkley) است که در شبیه سازیهای کنونی نیز به کار می رود [۷ و ۸].

با استفاده از این روش زمان کامپیوتری با ضریب ۳۰ در مقایسه با برخی روشهای دقیق کاهش می یابد. برای اینکه این روش دقیقتر و معتبرتر شود ،پارامترهای روش اسمیت - برینکلی از شبیه سازی دقیق برج موجود به دست می‌آیند.

نتایج زیر پس از تلفیق نتیجه بخش پارامترها به دست آمده اند:

توزیع محصول

مصرف انرژی خالص (سوخت ،برق ،بخار و آب خنک کننده)

محدودیتهای ظرفیت

وقتی این کمیتها همراه با قیمت مشخص خوراک ،محصولات و تاسیسات آب ،برق و بخار موجود باشند ،سودمندترین حالت را به وسیله یک بهینه ساز می توان یافت.

بهینه ساز SM GAIN / خروجی شبیه ساز

شبیه ساز (۱) / بهینه ساز (۲ یا ۳) ۲	شروع	پایین	بالا	بهینه	سوداضافی بر
خوراک هیدروکربن (تازه ،برگشتی)، T/HR	۳۵	۳۳	۴۳	۳۸/۴۸۲	حسب MM دلار در سال
بخارکلی /روغن،وزنی /وزنی	۱/۶۵	۱/۳	۲	۱/۸۱۳	
خروجی راکتور ۲، P,KCA	۰/۵۳	۰/۷۰/۳۵		۰/۵۳۶	۸/۲۰۷
ورودی راکتور ۱، T, °C	۶۳۵	۶۲۰	۶۴۵	۶۲۲/۸۴	
ورودی راکتور ۲، T, °C	۶۳۷	۶۲۰	۶۴۵	۶۴۴/۶۴	
MT-SM,VCOP/ دلار	۵۴۸/۷۷			۵۴۸/۴۷	

قیمتها بر حسب دلار

اتیل بنزن	۰/۴۵/Kg	بخارکم فشار	۱۳/۵
بنزن	۰/۱۴/Kg	محصول تراکم	۰/۲۴
تولوئن	۰/۱۵/Kg	آب سرد	۰/۲۷
استیرن	۱/Kg	سوخت	۱۸
قیر	۰/Kg	هزینه ثابت	۰/۰۶

گاز خروجی

کاتالیزور ۱۲/۲/Kg

NSI INH ۳/۸/Kg

TBC INH ۱۵/Kg [G- ۸۴ C]:۱، کاتالیزور [G- ۶۴ J]

بخار پرفشار ۱۶

بخار با فشار متوسط ۱۳/۵

شکل ۷ - خروجی بهینه ساز

بهینه ساز

در سالهای اخیر الگوریتمهای بهینه ساز زیادی در دسترس قرار گرفته‌اند [۹و ۱۰]. آنها به عنوان روشهای گرادیانی و مستقیم دسته بندی می‌شوند. آزمونهای اولیه نشان داد که وقتی محدودیتهایی وجود داشته باشد، روشهای گرادیانی کارکرد رضایتبخشی ندارند و از این رو آنها در اینجا بررسی نمی شوند. از روشهای مستقیم ،روش مجموعه باکس (Box) مورد استفاده وسیع قرار گرفته است. این روش شبیه به روش الگویابی با کناره‌های غیریکنواخت است. برای دستیابی به همگرایی سریعتر، الگوریتم به ترتیب زیر اصلاح شد.

معمولا وقتی از محدودیت وابسته‌ای تخلف شود ،همه متغیرهای مستقل به طور اختیاری از مقادیر جاری به سوی مرکز مجموعه تغییر می‌کنند.در الگوریتم اصلاح شده ،هر محدودیت متغیر وابسته‌ای به صورت تابعی ازمتغیرهای وابسته قبلا ارتباط یافته است.بنابراین ،وقتی از (محدودیت) مشخصی تخلف می‌شود ،به جای تغییر همه متغیرهای مستقل، تنها متغیرهای مستقل انتخابی که از بقیه حساسترند تغییر می‌یابند. روشن است که این یک روش عمومی نیست ،ولی می‌توان آن را برای نوعی مسئله ویژه به کار برد. با این اصلاح ،تعداد ارزیابیهای تابع نسبت به روش اصلاح نشده ، ۱۰ تا ۵۰٪ کاهش می‌یابد.با توجه به مستقیم بودن روش با مجموعه اولیه‌ای که به طور تصادفی تولید شده است، اغلب بهینه سراسری بیشتر از بهینه محلی یافت می‌شود.بهینه بدون محدودیت برابر یا برتر از بهینه با محدودیت است ،ولی برای بیشتر مسائل عملی ،به بهینه با محدودیت در مرزها (حدمحدودیتها) می‌توان رسید ،از این رو یک تحلیل حساسیت (sensitivity analysis) ،حساسیت بهینه را فراهم می‌آورد [۹]. همچنین این امکان را می‌دهد که نتایج بهینه به کامپیوتر فرایند با اطمینان بیشتری تخلیه شود.وقتی بهینه حساستر است ،انجام دادن وکنترل بهینه مشکل خواهد بود.تابع هدف به طور نمونه ماکسیمم سود است ،سایر تابعهای هدف مانند ظرفیت ماکسیمم و هزینه متغیر تولید ، VCOP (variable cost of production) ،مینیمم نیز به کار می روند.

نتایج و بحث

با آوردن مثال، یک شبیه‌سازی وبهینه‌سازی واقعی واحد استیرن بر مبنای فرایند لوماس (Lummus) و مونسانتو (Monsanto) در شکلهای ۵ تا ۸ نشان داده شده است که صفحه‌های ورودی و خروجی برنامه را نمایش می‌دهد.مدل کامل در فرترن ۷۷ برنامه‌نویسی و در کامپیوتر شخصی (مدل IBM PS/۲۶۰ با کمک پردازنده ریاضی) آزمایش شد.مطالعه موردی انفرادی کمتر از ۳۰ ثانیه طول می‌کشد و یک بهینه‌سازی نمونه در حدود ۳۰ دقیقه در این کامپیوتر زمان می برد.حجم مکنده کمپرسور گاز خروجی محدودیتی است که اغلب نقض می شودودرمرحله بعد ظرفیت ابر گرمکنهای بخار قرار دارد.بنابر این ،کارکرد ضعیف کمپرسور یا متالورژی درجه پایین با دمایی که در ابر گرم‌کننده بخار وجود دارد، کاهش سوددهی را به دنبال خواهد داشت.اگر چه بهینه واقعی را شرایط مختلف تعیین می‌کند ،تجربه نشان می‌دهد که با قیمت گذاری جاری، شدت تولید* بالای محصول و دمای بالا ترجیح داده می‌شود.این شرایط به طور نمونه عمر کاتالیزور را کاهش می‌دهد.ولی ،افزایش موثر تولید و تفاوت قیمت بالا بین مونومر استیرن واتیل بنزن هزینه بالای تعویض کاتالیزور را جبران می‌کند.

* شدت تولید (Q): جرم محصول در واحد زمان در واحد حجم واحد عملیاتی (m).

مقادیر محاسبه شده و تعیین شده برای محدودیتها

محدودیت	تعیین شده	محاسبه شده	
		شروع	بهینه
دمای ابرگرمکن اصلی، °C	۸۹۰/۰	۸۴۲/۲	۸۸۰/۸
دمای ابرگرمکن °C ،EB/SM	۶۲۵/۰	۵۶۴/۴	۴۹۸/۱
فشار مکنده KG/CM۲	۰/۲۸	۰/۴۱	۰/۳۷
حجم مکنده M۰۰۳/HR	۲۵۱۰۰	۱۶۹۵۴/۸۵	۲۴۶۲۶/۲۸
وظیفه ابرگرمکن اصلی، MMKCAL/HR	۲۴/۵۰	۱۸/۷۹	۲۴/۳۲
وظیفه ابرگرمکن EB/SM، MMKCal/HR	۱۲/۰۰	۹/۲۰	۸/۱۲
پمپ رفلاکس جداکننده M۳/HR ،EB/SM	۱۷۶/۰۰	۱۰۳/۲۱	۱۱۳/۸۷
پمپ رفلاکس بازیابی M۳/HR ،EB	۹/۰۰	۸/۲۶	۸/۸۲
پمپ رفلاکس برج M۳/HR ،SM	۴۵/۰۰	۵/۱۷	۳/۹۶
پمپ رفلاکس برج M۳/HR ،B/T	۴۵/۰۰	۰/۰	۰/۰
سطح بازجوش آور جداکننده M۲ ،EB/SM	۴۲۴/۰۰	۱۷۷/۵۸	۲۸۳/۳۹
سطح بازجوش آور بازیابی M۲ ،EB	۶۱/۰۰	۴۲/۸۰	۴۵/۹۶
سطح بازجوش آور برج M۲ ،SM	۳۱۳/۷۰	۱۳۱/۸۸	۱۴۲/۶۶
سطح بازجوش آور M۲ ،B/T	۰/۰۰	۰/۰۰	۰/۰۰
طغیان جداکننده EB/SM ،%	۹۵/۰۰	۶۴/۷۲	۷۱/۲۸
طغیان بازیابی EB ،%	۹۵/۰۰	۸۸/۵۲	۹۴/۳۰
طغیان برج SM ،%	۹۵/۰۰	۷۸/۵۳	۸۱/۷۰
طغیان برج B/T ،%	۰/۰۰	۰/۰۰	۰/۰۰
طغیان عریان کننده محصول تراکم، %	۹۵/۰۰	۳۰/۸۹	۳۷/۳۲
سطح تبخیرکننده خوراک، M۲	۲۳۰/۲۰	۱۶۶/۶۰	۱۸۳/۱۷
جریان بخار توربین KG/HR	۲۰۰۰۰/۰۰	۱۲۰۹۶/۹۱	۱۷۲۰۳/۶۷
جریان هوای متراکم کننده اصلی T/HR	۶۳۵۰/۰۰	۳۱۸۰/۲۲	۲۶۰۴/۵۹

شکل ۸- خروجی محدودیتهای تعیین شده و محاسبه شده

نتیجه گیری

یک مدل ریاضی با جزئیات دقیق برای شبیه‌سازی راکتورهای استیرن توسعه یافته است.سینتیک مربوط از داده‌های تجاری و پیلوت به دست آمده است. معادلات نیمه تجربی و روشهای میان بر برای مدلسازی واحدهای بازیابی و سایر تجهیزات موجود در واحد مورد استفاده قرار گرفته است.چون همه محدودیتهای واحد در شبیه سازی منظور شده‌اند، بهره‌های پیش‌بینی شده قابل دسترس هستند.با کمک یک بهینه‌ساز، بهترین (پرسودترین) شرایط عملیاتی را می‌توان یافت.به دلیل محدودیتهای واقعی ،واحدهای بحرانی رامی‌توان تشخیص داد و رفع مشکلات برای اجرای عملیات با استفاده موثر از انرژی یا افزایش ظرفیت ساده است.سینتیک بسیاری از کاتالیزورهای تجاری را می‌توان درون برنامه ساخت.بنابر این ،نتیجه مقایسه کارکرد انواع کاتالیزورها را می‌توان برای یک واحد ویژه بدون تغییر کاتالیزور پیش‌بینی کرد.

بهینه سازی تمام واحد شرایط بهینه‌ای را برای شرکت تولیدی جهت تغییر قیمت خوراک و محصول و هزینه‌های تاسیسات در عرض چند دقیقه فراهم می‌آورد.نرم‌افزار SM GAIN در برابر داده‌های واحد به دست آمده از واحدهای طراحی شده مونسانتو و لوماس آزمایش شده است.چون این یک مدل عمومی است ،آن را می‌توان برای هر واحد استیرنی که در آن از راکتورهای هیدروژن زدایی با بستر شعاعی استفاده می‌شود ،به کار برد.

نامگذاری

A= سطح انتقال گرما	P_t= فشارکل
a= فعالیت کاتالیزور	X = تبدیل
C_j= غلظت گونه jام	r_i = سرعت واکنش iام
C_p = ظرفیت گرمایی	S_{ij} = ضریب استوکیومتری
d_p = قطر ذره	T = دما °C یا K
D = نسبت رقت، مول بخاربر مول خوراک EB	t = روزهای در جریان
	U = ضریب انتقال گرمای کل
g = شتاب ثقل	U_s = سرعت سطحی
G = شارجرمی	P_b = چگالی توده بستر
ΔH = گرمای واکنش	P_g = چگالی گاز
h = آنتالپی	P_t = فشار کل (kg/cm^2 = مطلق)
K_p= ثابت تعادل	S/HC = نسبت بخاربه هیدروکربن
M = سرعت جریان جرمی	BARA = فشار برحسب Bar مطلق

مراجع

1 Williams, D.L., "*Styrene Catalysts: Past, Present and Future*", paper presented at the Spring National AIChE meeting, New Orleans, La., March 6-10, 1988.

2 Stull, D.R., Westrum Jr., E.F. and Sinke, G.C., *The Chemical Thermodynamics of Organic Compounds*, Wiley, N.Y., 1969.

3 Sundaram, K.M. and Froment, G.F., Chem. Eng. Sci., **32**, 601,1977.

4 Froment, G.F., "*Deactivation by Coking*", Int. Congr. on Catalysis, London, 1976.

5 Dumez, F.J. and Froment, G.F., *Ind.Eng.Chem.Proc. Des.Devpt.*, **15**, 291, 1976.

6 Kern, D.Q., *Process Heat Transfer*, McGraw-Hill, N.Y., 1950.

7 Smith, B.D. and Brinkley, W.K., *AIChE J.*, **6**, 446, 1960.

8 Perry, R.H. and Chilton, C.H., *Chemical Engineers' Handbook*, 5th ed., McGraw- Hill, N.Y., 1973.

9 Edgar, T.F. and Himmelblau, D.M., *Optimization of Chemical Processes*, McGraw-Hill, N.Y., 1988.

10 Beveridge, G.S.G and Schechter, R.S., *Optimization: Theory and Practice*, McGraw-Hill, N.Y., 1970.