مرجع کامل شبیه‌سازی فرآیندهای پایا

با

ASPEN HYSYS

همراه با مثال‌های متعدد عملی شبیه‌سازی‌شده

نگارش:
مهندس غلامرضا باغمیشه
مهندس رضا درستی
مهندس معصومه مرادزاده

واکنش‌های شیمیایی

در این فصل می‌خوانید:

۱- شناخت انواع واکنش‌های موجود در ASPEN HYSYS و تئوری هرکدام

۲- نحوه‌ی تعریف انواع واکنش‌های شیمیایی

۳- شناخت انواع راکتورها و دستگاه‌هایی که در آن واکنش انجام می‌شود

۱- بخش اول: واکنش‌های شیمیایی

بیشتر فرآیندهای شیمیایی دارای واکنش می‌باشند به همین دلیل شناخت امکانات و توانایی‌های ASPEN HYSYS در این مورد دید مناسبی در شبیه‌سازی این نوع واحدها دارد. معمولاً فرآیندهایی که دارای واکنش شیمیایی هستند دارای سینتیک واکنش معینی می‌باشند که در قالب‌های مختلف ارائه می‌شوند. در این فصل نوع سینتیک‌هایی که می‌توان در ASPEN HYSYS تعریف کرد گفته شده است امّا واکنش‌هایی هم هستند که دارای سینتیک نیستند. بنابراین در مورد شبیه‌سازی‌هایی که این گونه هستند باید چاره‌اندیشی نمود.

در نرم‌افزار ASPEN HYSYS پنج دسته واکنش وجود دارند که شامل موارد زیر می‌باشند:

۱- Conversion

۲- Equilibrium

۳- Heterogeneous Catalyst

۴- Kinetic

۵- Simple Rates

در زیر تفاوت‌های هر پنج واکنش بالا توضیح داده خواهد شد. علاوه بر نوع واکنش‌هایی که در این‌جا آورده شده است، باید بدانید در هر راکتور حق استفاده از چه نوع واکنشی را دارید. مثلاً در یک راکتور از نوع Conversion فقط می‌توانید از واکنش‌های نوع Conversion استفاده نمایید و یا زمانی که از یک راکتور Plug استفاده می‌شود تنها واکنش‌های نوع Kinetic، Heterogeneous Catalyst و یا Simple قابل استفاده می‌باشد و در صورت استفاده از سایر واکنش‌ها پیغام خطا داده می‌شود. در جدول ۱ مقایسه‌ای بین این واکنش‌ها انجام شده است. در جدول ۱ کلیات نوع واکنش‌ها آورده شده است امّا

جزئیات در مورد هرکدام بر اساس مثالی توضیح داده خواهد شد. از سوی دیگر برای همه‌ی انواع واکنش‌های بالا، همواره یک متد ثابتی وجود دارد که تعریف یک واکنش را از همان ابتدای ایجاد تا نصب به PFD شامل می‌شود.

جدول ۱

نوع واکنش	اطلاعات مورد نیاز
نوع Conversion	۱- باید استوکیومتری تمامی واکنش‌ها به آن داده شود. ۲- درصد تبدیل به صورت دستی برای کلیه‌ی واکنش بر مبنای ماده‌ی پایه تعیین شود.
نوع Equilibrium	۱- باید استوکیومتری تمامی واکنش‌ها به آن داده شود. ۲- ثابت تعادل واکنش به صورت $Ln(K_{eq})$ به روش‌های مختلف (بعداً توضیح داده می‌شود) تعیین می‌شود.
نوع Heterogeneous Catalyst	۱- باید استوکیومتری تمامی واکنش‌ها به آن داده شود. ۲- نیاز به وارد کردن کلیه ترم‌های سینتیکی از قبیل انرژی اکتیواسیون، فاکتور فرکانس، توان مواد و ترم جذب واکنش، می‌باشد که بعداً فرمت این واکنش توضیح داده خواهد شد.
نوع Kinetic	۱- باید استوکیومتری تمامی واکنش‌ها به آن داده شود. ۲- می‌توان واکنش رفت و برگشتی را هم‌زمان در نظر گرفت. ۳- نیاز به وارد کردن کلیه ترم‌های سینتیکی از قبیل انرژی اکتیواسیون، فاکتور
نوع Simple	همانند نوع Kinetic می‌باشد با این تفاوت که برای واکنش برگشت به جای پارامترهای مستقیم سینتیکی باید ثابت تعادل تعیین گردد.

در زیر مراحل تعریف واکنش به صورت کلی آورده شده است که تنها مرحله‌ی اول آن باهم متفاوت است:

۱- اضافه کردن واکنش‌ها
۲- دسته‌بندی واکنش‌ها در یک گروه به عنوان Reaction Set
۳- نصب به Fluid Package

مرحله‌ی اول طی ادامه فصل برای هر پنج نوع به صورت اختصاصی توضیح داده می‌شود. امّا دسته‌بندی واکنش چیست؟

فرض کنید فرآیند مورد شبیه‌سازی دارای دو نوع راکتور می‌باشد. مثلاً فرآیند تولید متانول شامل راکتور گاز سنتز برای تولید گاز سنتز (H_2+CO) و راکتور متانول است که در آن گاز سنتز طی واکنش

کاتالیستی به متانول تبدیل می‌شود. واکنش‌های گاز سنتز شامل تبدیل گاز (متان + اتان + بوتان+ ...) و یا نفتا (شامل هیدروکربن‌های مختلف) به گاز سنتز می‌باشد که معمولاً دارای طیف وسیعی از واکنش‌هاست. واکنش‌های متانول خود شامل دو واکنش مستقل است. هرکدام از این واکنش‌ها (تک تک واکنش‌هایی که منجر به تولید گاز سنتز می‌شود و واکنش‌هایی که تولید متانول را در بر دارد) در مرحله‌ی اول تعریف می‌شوند. سپس در ادامه باید طوری دسته‌بندی شوند تا معلوم گردد چه واکنش‌هایی به صورت هم‌زمان در یک راکتور خاص اتفاق می‌افتد.

مرحله‌ی سوم شناساندن این دسته واکنش‌ها به Fluid Package می‌باشد.

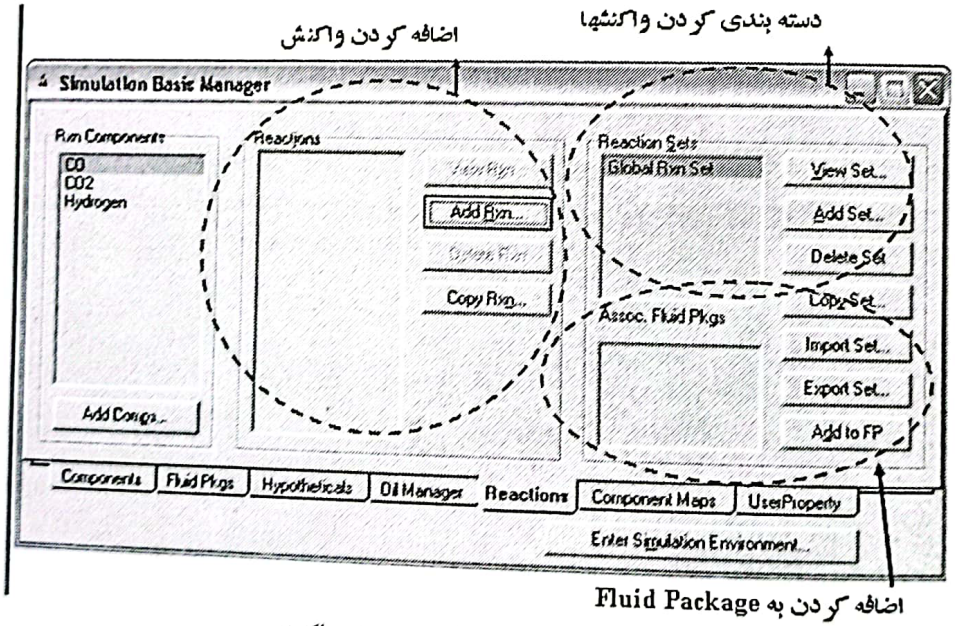
مراحل سه‌گانه‌ی گفته‌شده در نرم‌افزار ASPEN HYSYS در شکل ۱ آورده شده است. برای مشاهده‌ی این قسمت مراحل زیر را انجام دهید:

۱- برنامه اجرایی ASPEN HYSYS را اجرا نمایید.

۲- فایل جدیدی را با زدن کلید New Case در منوی File / New ایجاد نمایید.

۳- در پنجره‌ی Simulation Base Manager (SBM) به زیرصفحه‌ی Components رفته و با زدن کلید Add مواد CO، CO_2 و H_2 را طی پنجره‌ی Component List View انتخاب نمایید.

۴- در پنجره‌ی SBM به زیرصفحه‌ی Reactions بروید (شکل ۱).



شکل ۱. مراحل سه‌گانه تعریف واکنش

۱-۱- واکنش نوع Kinetic

فرض کنید واکنش دو طرفه‌ی زیر انجام می‌گیرد:

$$a A + b B + \ldots \longleftrightarrow rR + s S + \ldots$$

سینتیک واکنش به صورت کلی (Power Low) مطابق روابط زیر قابل بیان است:

$$r_A = k.\ f(\text{Basis}) - k'.\ f'(\text{Basis})$$

که در آن ضریب k و k' ثابت واکنش‌های رفت و برگشت است که به صورت زیر تعریف می‌گردند:

$$k = A\,T^{B} \exp(-E/RT),\quad k' = A'\,T^{B'} \exp(-E'/RT)$$

و f و f' توابعی از غلظت‌های مواد حاضر است. این توابع حاصل‌ضرب غلظت مواد (با توان مشخص)حاضر در واکنش می‌باشند و هم‌چنین داریم:

k, k' = forward and reverse reaction rate constant,
A, A' = forward and reaction Frequency Factor,
E, E' = forward and reverse Activation Energy,
B, B' = forward and reverse extended reaction constant.

توجه داشته باشید که اگر واکنش یک‌طرفه باشد لزومی به مشخص کردن ضرایب واکنش برگشت وجود ندارد. در زیر برای این نوع واکنش، مثال ۱ مطرح شده است.

مثال ۱:

طبق واکنش یک طرفه‌ی زیر اکسید پروپیلن با آب منجر به تولید گلیکول پروپیلن می‌گردد:

Propylene Oxide (C_3H_6O) + Water (H_2O) --->Propylene Glycol ($C_3H_8O_2$)

که در آن سرعت واکنش به صورت زیر است.

$$-r_{\text{Propylene Glycol}} = 1.7e13 \exp(-75362\ (\text{kJ/kgmol})/RT)\ C_{\text{Propylene Oxide}}$$

که در آن C غلظت بر واحد مول ($lb\ mol/ft^3$) و سرعت واکنش به صورت $lb\ mol/ft^3/hr$ است.

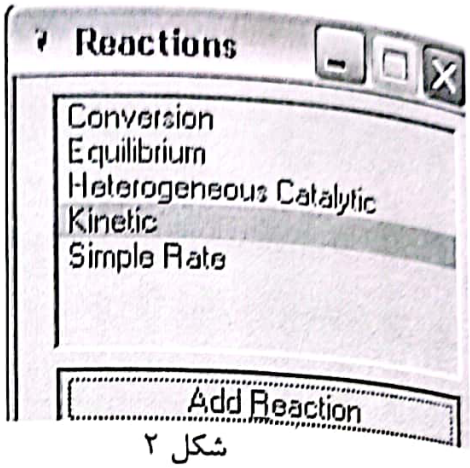
۱-۱-۱- مواد گفته‌شده را به فهرست مواد خود اضافه کنید. ممکن است در پیدا کردن این مواد دچار مشکل شوید؛ پیشنهاد می‌شود از گزینه‌ی View Filter استفاده گردد.

۱-۱-۲- مدل ترمودینامیکی UNIFAC را انتخاب نمایید.

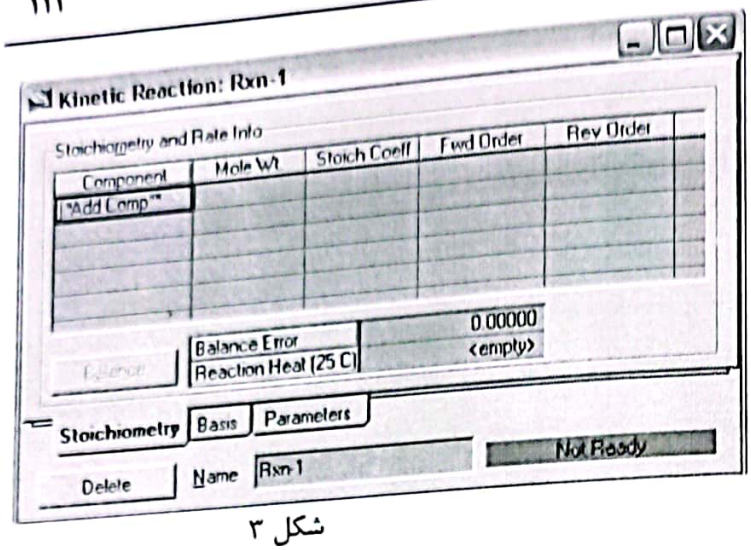
۱-۱-۳- به زیرصفحه‌ی Reactions بروید و در فیلد Reactions کلید Add Rxn را بزنید (شکل ۱).

۱-۱-۴- در پنجره‌ی ظاهرشده‌ی Reactions (شکل ۲)، گزینه‌ی Kinetic را انتخاب کرده کلید Add Reaction را بزنید. این پنجره امکان شروع تعریف انواع پنج‌گانه‌ی واکنش را فراهم می‌سازد.

۱-۱-۵- پنجره‌ی Kinetic Reaction: Rxn 1 ظاهر خواهد شد (در این پنجره Rxn 1 اسم پیش‌فرض ASPEN HYSYS برای واکنش ایجادشده می‌باشد). در زیرصفحه‌ی Stoichiometry در ستون Component تمامی موادی را که در واکنش وجود دارند، انتخاب کنید. فهرست Mole Wt. توسط خود نرم‌افزار برای بالانس کردن جرم دو طرف واکنش اضافه خواهد شد.



شکل ۲

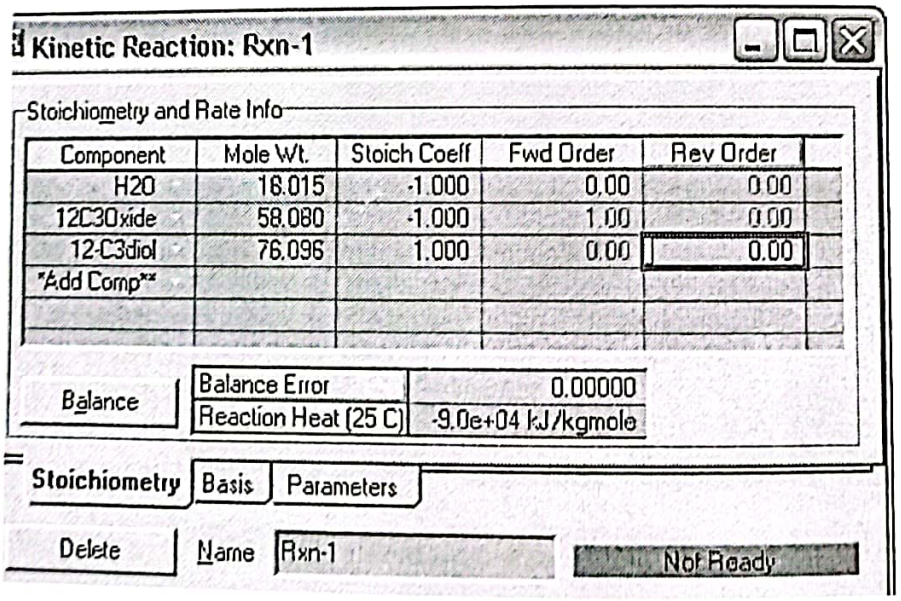


شکل ۳

از آن‌جا که واکنش یک‌طرفه است ستون‌های Fwd Order و Rev Order را طبق شکل ۴ تکمیل نمایید. دقت کنید در ستون Stoich Coeff باید ضرایب استوکیومتری وارد شود که برای مواد اولیه به صورت عدد منفی و برای محصولات به صورت عدد مثبت انتخاب می‌گردد.

گریز ۱:

به خاطر داشته باشید که این مرحله برای هر پنج نوع واکنش ثابت است و دقت کنید که گزینه‌ی Balance Error حتماً صفر گردد، چرا که این عدد نشان‌دهنده‌ی موازنه‌ی جرم دو طرف واکنش می‌باشد و تا زمانی که مواد و یا ضرایب استوکیومتری درست تنظیم نشده باشند خطای این قسمت از بین نخواهد رفت.

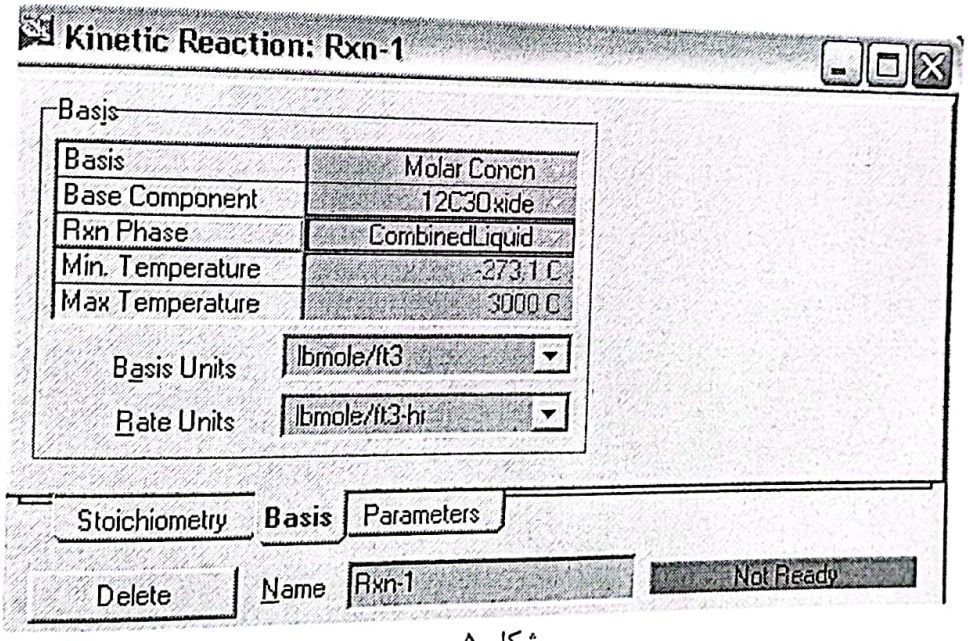


شکل ۴

گریز ۲: تکمیل صفحه‌ی Basis

موارد زیر در این صفحه باید معین گردد:

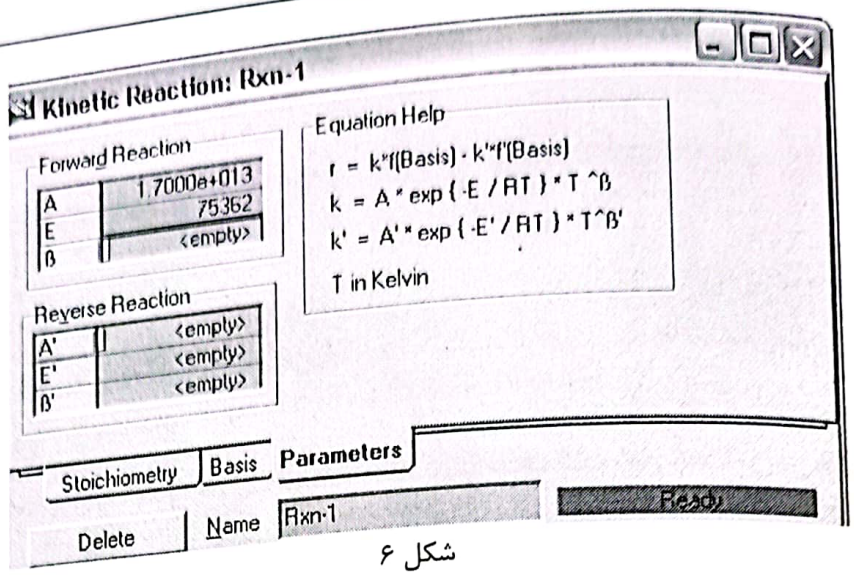
- نوع غلظت مورد استفاده در عبارت واکنش، شامل موارد Activity، Partial Pressure، Mole Concn، Mass Concn، Mole Fraction، Mass Fraction و Fugacity.
- ماده‌ی پایه (ماده‌ی واکنش‌دهنده که میزان پیشرفت واکنش بر مبنای آن بیان می‌گردد).
- فاز واکنش، شامل Overall (واکنش در کلیه‌ی فازها انجام می‌شود)، Liquid Phase (فقط در فاز مایع سبک واکنش انجام می‌شود)، Vapor Phase (فقط در فاز بخار واکنش انجام می‌شود)، Aqueous Phase (واکنش در فاز مایع سنگین انجام می‌شود)، Combined Liquid (واکنش در فاز Liquid-Liquid وجود دارد).
- حداکثر و حداقل بازه دمایی که واکنش می‌تواند در آن انجام گردد، در صورت تخطی از این محدوده هشدار داده خواهد شد.
- واحدهای غلظت و سرعت



شکل ۵

۱-۱-۶- زیرصفحه را مطابق شکل ۵ تکمیل کنید.

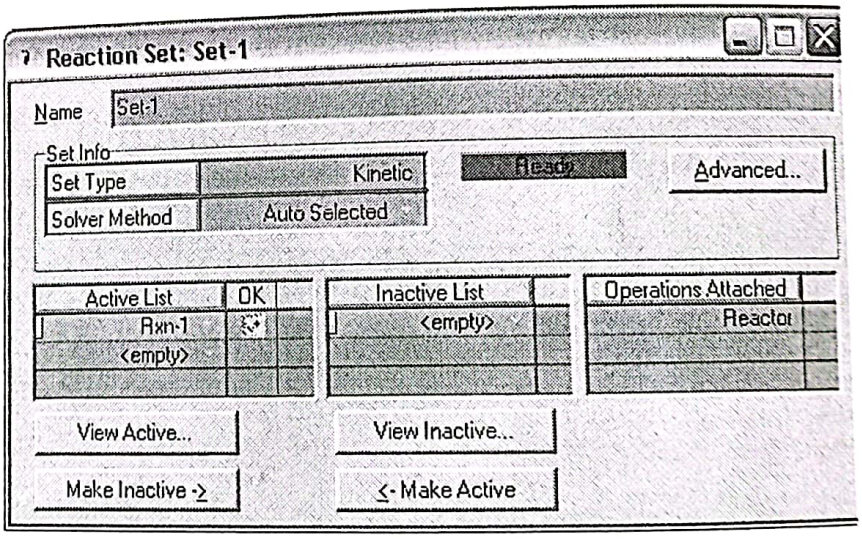
۱-۱-۷- بر طبق فرمتی که برای این نوع واکنش گفته شد، زیرصفحه‌ی Parameters را مطابق شکل ۶ تکمیل نمایید. وارد نکردن مقدار برای واکنش برگشتی به منزله‌ی نبود این واکنش می‌باشد.



شکل ۶

۱-۱-۸- تا به حال مرحله‌ی ۱ از سه مرحله‌ی اصلی برای تعریف واکنش انجام شده است. به زیرصفحه‌ی Reactions از Base Manager برگردید. در فیلد Reactions Set کلید Add Set را بزنید.

۱-۱-۹- پنجره‌ی Reactions Set: Set 1 ظاهر خواهد شد (شکل ۷). در این پنجره می‌توان مجموعه‌ای از واکنش‌های همرده را به صورت یک بسته (مثلاً به نام Set 1) در آورد. در این پنجره به فهرست Active List بروید و در آن Rxn 1 که در مرحله‌ی اول ایجادشده را به فهرست مربوط اضافه کنید.

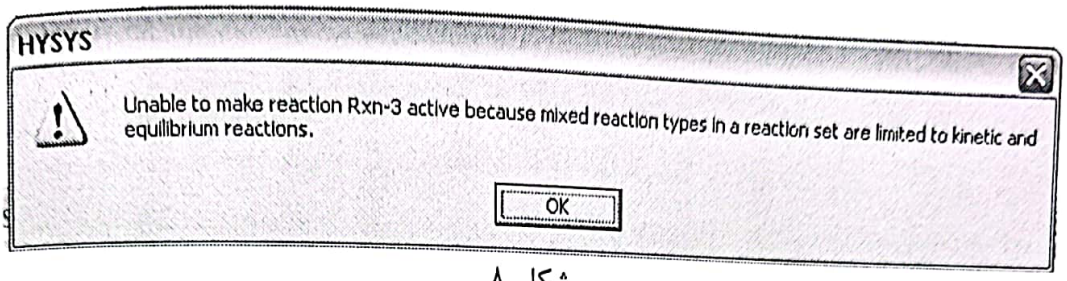


شکل ۷

گریز ۳:

۱- همرده بودن واکنش به این معنی است که مثلاً واکنش سینتیکی و یا از این دست را نمی‌توان با واکنش Conversion دسته‌بندی کرد ولی با واکنش‌های Equilibrium می‌توان دسته‌بندی نمود. مثلاً پنجره‌ی

شکل ۸ در این مواقع ظاهر خواهد شد. از آن‌جا که در این مطالعه تنها واکنش Rxn 1 وجود دارد، دسته (Set 1) تنها شامل یک واکنش خواهد بود.



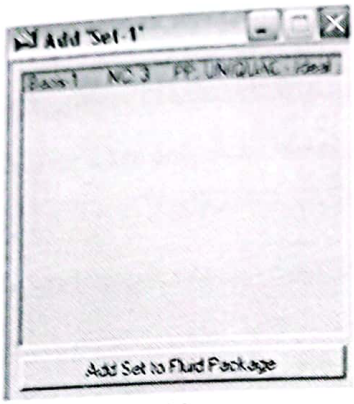
شکل ۸

۲- در صورتی که مایل باشید به صورت موقتی واکنشی را حذف کنید بهتر است بر روی واکنش کلیک کرده با کلید Make Inactive آن را به فهرست Inactive List اضافه کنید.

۳- برای حل معادلات واکنش، نرم‌افزار ASPEN HYSYS از روش‌های مختلفی استفاده می‌کند. گزینه‌ی (Solver Method) روش حلی که توسط ASPEN HYSYS برای حل واکنش استفاده می‌شود را نمایش می‌دهد (شکل ۷). البته این گزینه زمانی فعال می‌شود که واکنش از نوع سینتیکی باشد. عموماً قرار دادن این خانه در حالت Default بهتر است در هر حال گزینه‌های آن به شرح زیر هستند.

- گزینه‌ی Auto Selected: ابتدا روش نیوتن و در صورت عدم موفقیت، روش تکرار معادله‌ی سرعت و در نهایت روش انتگرال سرعت استفاده می‌گردد. در اکثر حالات، بهترین انتخاب می‌باشد.
- گزینه‌ی Newton's Method: یک روش سریع حل می‌باشد که با استفاده از مشتق تابع سرعت و حدس اولیه و در نهایت تنظیم نتیجه برای حدس دقیق‌تر، صورت می‌گیرد.
- گزینه‌ی Rate Iterated: نوعی روش نیوتن بوده و فرض می‌کند که عناصر قاطع قطر ماتریس ژاکوبین برابر صفر می‌باشند. این روش در مواقعی که برهم کنش اندکی بین واکنش‌ها وجود داشته باشد استفاده می‌گردد.
- Rate Integrated: این روش از معادله‌ی سرعت انتگرال می‌گیرد. این روش پایدار (ولی کند) می‌باشد.

۱-۱-۱۰- تا به این‌جا مرحله‌ی دوم از مراحل سه‌گانه تعریف واکنش را آموخته‌اید. مرحله‌ی سوم اضافه کردن این دسته واکنش به Fluid Package می‌باشد. برای انجام این مرحله کلید Add to FP را بزنید. در این صورت Fluid Packageهای موجود در پنجره‌ی مربوط (شکل ۹) فهرست خواهند شد (در این شبیه‌سازی تنها یک Fluid Package ظاهر خواهد شد). بعد انتخاب Fluid Package مورد نظر، کلید Add Set to Fluid Package را بزنید.



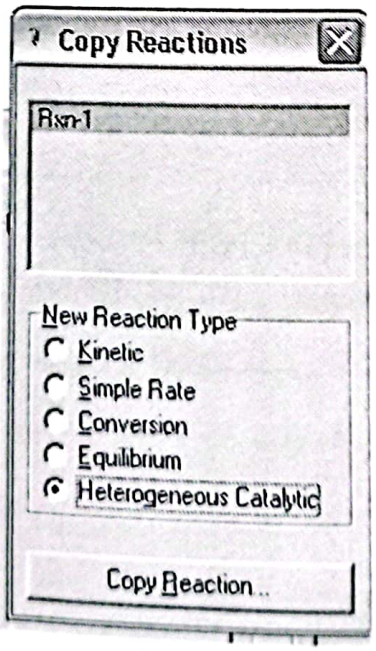
شکل ۹

همان‌طور که قبلاً ذکر شد، مراحل نهایی (مرحله‌ی دوم و سوم) در تعریف واکنش برای همه‌ی انواع واکنش‌ها یکی است و تنها مرحله‌ی اول است که بستگی به نوع واکنش دارد.

۱-۱-۱۱- شبیه‌سازی را در این مقطع ذخیره نمایید تا در بخش آتی این فصل از آن استفاده کنید (با نام CSTR_ Kinetic .hsc ذخیره نمایید).

گریز ۴:

- کلیدهای Delete Rxn و Delete Set برای حذف واکنش و دسته واکنش‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد.
- فرض کنید می‌خواهید واکنشی جدیدی اضافه کنید که شبیه واکنشی است که قبلاً در فهرست Reactions دارید. با کلید Copy Rxn می‌توانید این کار را انجام دهید. با زدن این کلید پنجره‌ی شکل ۱۰ ظاهر خواهد شد و از کاربر نوع واکنش و نام واکنشی که باید از روی آن کپی‌برداری شود درخواست می‌شود. هم‌چنین کلید Copy Set نیز خاصیت مشابهی دارد.



شکل ۱۰

- فرض کنید می‌خواهید از واکنشی که قبلاً در یک فایل شبیه‌سازی وجود دارد استفاده کنید. برای این که واکنش مورد نظر را در شبیه‌سازی خود بیاورید، کافی است در شبیه‌سازی مبدأ دسته واکنش را انتخاب کرده کلید Export Set را بزنید. پنجره‌ی مخصوص Save ظاهر خواهد شد و اسم واکنش خواسته می‌شود. با دادن اسمی برای واکنش آن را با پسوند rst. ذخیره نمایید. در شبیه‌سازی مقصد (شبیه‌سازی جاری) کلید Import را بزنید. در این صورت پنجره‌ی Open ظاهر خواهد شد با دادن مسیر و اسم واکنش آن را باز کنید. دسته واکنش مورد نظر بی‌فاصله در فیلد Reaction Set اضافه خواهد شد البته تنها موادی به فهرست اضافه می‌شوند که قبلاً در آن وجود نداشته باشند.
- هنگام اضافه کردن واکنش در مرحله‌ی اول و یا اضافه کردن دسته واکنش در مرحله‌ی دوم، نرم‌افزار به صورت پیش‌فرضی اسمی را برای واکنش و یا دسته واکنش انتخاب می‌کند که قابل تغییر دادن می‌باشد.
- در بخش Reaction Sets دسته پیش‌فرضی به نام Global Rxn Set وجود دارد که شامل تمامی واکنش‌های موجود در فهرست فیلد Reactions می‌باشد. ممکن است تمامی واکنش‌ها از یک دسته نباشند (مثلاً برخی Kineticی و برخی دیگر Equilibrium و یا Conversionی باشند). بنابراین برخی در فهرست Active و برخی دیگر در فهرست Inactive قرار داده خواهند شد.
- هر واکنش اضافه‌شده در مرحله‌ی اول می‌تواند در همه‌ی دسته واکنش‌ها حضور داشته باشد.

۱-۲- واکنش نوع Simple:

همان‌طور که قبلاً در جدول ۱ هم به آن اشاره شد واکنش Simple بسیار شبیه به واکنش Kinetic می‌باشد. تنها تفاوت آن، این است که در واکنش Simple برخلاف واکنش Kinetic به جای وارد کردن ثابت واکنش برگشتی لازم است ثابت تعادل وارد شود.

برای واکنش رفت ثابت واکنش باید به صورت زیر وارد گردد:

$$k = A.\ \exp(-E/RT)\ T^{B}$$

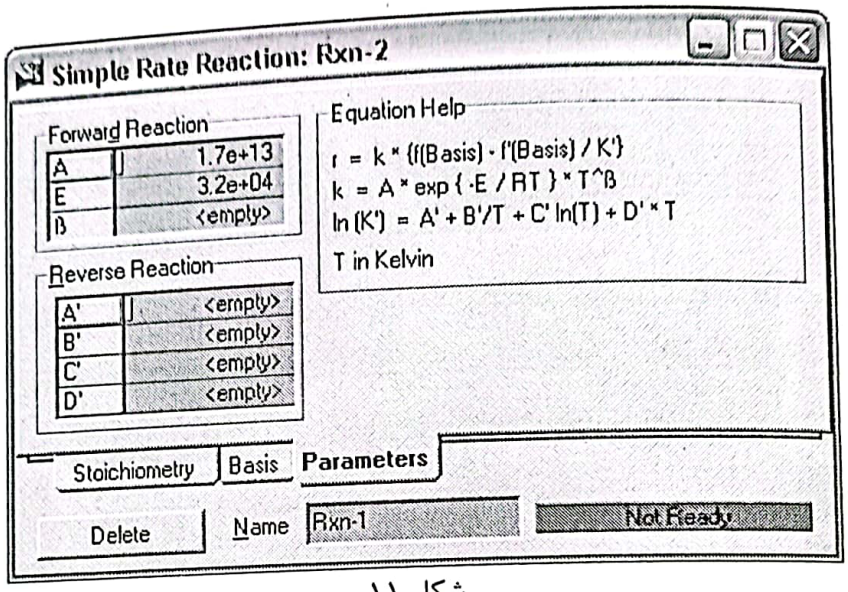
ثابت تعادل باید به صورت معادله‌ای که تابعی از دما است، وارد گردد. ضرایب این معادله به صورت A'، B'، C' و D' می‌باشد.

$$Ln(K') = A' + B'/T + C'\ Ln(T) + D'\ T$$

تمام مراحل گفته‌شده برای واکنش Kinetic برای واکنش Simple نیز تکرار می‌شود و تنها فرق آن این است که به جای مرحله‌ی ۷ باید مرحله‌ی زیر انجام شود.

مرحله‌ی هفتم

پارامترهای لازم برای ثابت واکنش و ثابت تعادل را مطابق شکل ۱۱ تکمیل نمایید (مثال مورد بررسی، فاقد واکنش برگشت است).



شکل ۱۱

۱-۳- واکنش نوع Heterogeneous Catalyst

این نوع واکنش‌ها اغلب در راکتورهای Plug Flow مورد استفاده قرار می‌گیرد. امّا می‌توان از آن‌ها برای راکتورهای CSTR هم استفاده کرد. دو نوع از راکتورهای Plug Flow در صنعت رایج است که عبارت‌اند از: راکتورهای آدیاباتیک و ایزوترمال. در راکتورهای ایزوترمال در بیشتر مواقع، کاتالیست داخل لوله‌های راکتور ریخته شده و سیال خنک‌کننده (گرم‌کننده) در بیرون لوله‌ها جریان دارد و گرما همانند یک مبدل Shell & Tube در این مجموعه مبادله می‌شود. در راکتورهای آدیاباتیک معمولاً کاتالیست به صورت Packing در کل راکتور ریخته می‌شود که در این حالت ممکن است از راکتورهای یک و یا چند بستری استفاده گردد. زمانی که راکتور از نوع چند بستری باشد عمل سرمایش (گرمایش) بین بسترها انجام خواهد شد.

واکنش‌های Heterogeneous Catalyst معمولاً دارای سینتیکی مشابه با سینتیک واکنش‌های کاتالیستی (بستر ثابت و یا سیال) هستند و از آن‌جا که سینتیک این نوع واکنش‌ها پیچیده است نمی‌توان معادلات ساده مانند Power Low برای حل آن‌ها به کار برد (دو مورد بالا). این واکنش‌ها معمولاً به صورت رابطه‌ی زیر دارای سه ترم سینتیک، پتانسیل و جذب می‌باشند. دلیل وجود این ترم‌ها، وجود مکانیسم جذب و واکنش در روی کاتالیست می‌باشد.

$$-r = \frac{(kinetic\ term)(potential\ term)}{(absorption\ term)}$$

معمولاً بسته به میزان اهمیت و نقش هریک از این مکانیسم‌ها، از یکی از سه رابطه‌ی زیر که در جدول ۲ آورده شده است برای توصیف واکنش استفاده می‌گردد.

جدول ۲

Model	Equation
Langmuir - Hinshelwood Model	$r=\frac{k_s K_A K_B C_A C_B}{(1+k_A C_A+K_B C_B+K_P C_P)^2}$
Eley – Rideal Model	$r=\frac{k_s K_B C_A C_B}{1+K_B C_B+K_P C_P}$
Mars –van Krevelen Model	$r=\frac{kC_A}{1+(a/b)(k/k^*)C_A C_B^{-n}}$

نرم‌افزار ASPEN HYSYS یک معادله‌ی واکنش کلی پیشنهاد می‌کند که در آن مدل‌های گفته شده در بالا لحاظ شده است. این مدل به صورت زیر می‌باشد.

$$r=\frac{k_f \prod_{i=1}^{\text{Reactant}} C_i^{\alpha_i}-k_r \prod_{j=1}^{\text{Product s}} C_j^{\beta_j}}{\left[1+\sum_{k=1}^{M}\left(K_k \prod_{g=1}^{M} C_g^{\gamma_{kg}}\right)\right]^n}$$

که در آن ثابت‌های واکنش هم‌چنان تابعیت آرنیوسی دارند و قابل تعریف می‌باشند. برای وارد کردن واکنش Heterogeneous Catalyst مثال صنعتی از سنتز دی‌اتیل اتر آورده شده است.

مثال ۲:

سنتز دی‌اتیل اتر از اتانول روش غیر مستقیم تولید این ماده نامیده می‌شود. در روش مستقیم از گاز سنتز به عنوان ماده‌ی اولیه استفاده می‌گردد. راکتور از نوع آدیاباتیک است و واکنش‌های زیر در آن انجام می‌گیرد. دیده می‌شود که علاوه بر تولید DEE محصولات جانبی نیز تولید می‌گردند. برای انجام شبیه‌سازی مراحل زیر را انجام دهید.

واکنش‌ها:

$$C_2H_5OH \xrightarrow{k_3} C_2H_4 + H_2O \qquad \text{(A)}$$

ethanol *ethylene*

$$2C_2H_5OH \xrightarrow{k_4} (C_2H_5)_2O + H_2O \qquad \text{(B)}$$

ethanol *DEE*

$$(C_2H_5)_2O \xrightarrow{k_5} C_2H_5OH + C_2H_4 \qquad \text{(C)}$$

DEE *ethanol* *ethylene*

$$(C_2H_5)_2O \xrightarrow{k_6} 2C_2H_4 + H_2O \qquad \text{(D)}$$

DEE *ethylene*

سینتیک:

$$r_1 = \frac{54\ e^{(-1770[kPa.m^3/kmol]/RT)} P_{EtOH}}{1+1.2185\times10^{-6} e^{(+41060/RT)} P_{EtOH} + 5.295\times10^{-6} e^{(+33010/RT)} P_{DEE} + 3.573\times10^{-5} e^{(+26200/RT)} P_{H_2O}}$$

$$r_2 = \frac{58.1\ e^{(-23090[kPa/m^3/kmol]/RT)} P_{EtOH}^2}{1+1.2185\times10^{-6} e^{(-41060/RT)} P_{EtOH} + 5.295\times10^{-6} e^{(+33010/RT)} P_{DEE} + 3.573\times10^{-5} e^{(+26200/RT)} P_{H_2O}}$$

$$r_3 = \frac{1.7876\times10^{5} e^{(-72210[kPa.m^3/kmol]/RT)} P_{DEE}}{1+1.2185\times^{-6} e^{(+41060/RT)} P_{EtOH} + 5.295\times10^{-6} e^{(+33010/RT)} P_{DEE} + 3.573\times10^{-5} e^{(+26200/RT)} P_{H_2O}}$$

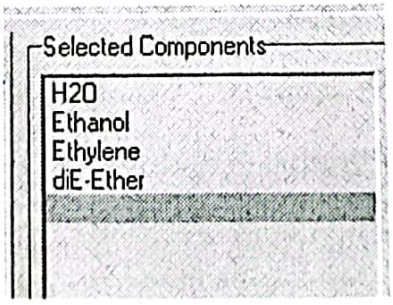
$$r_4 = \frac{31.44 e^{(-3176.3[kPa.m^3/kmol]/RT)} P_{DEE}}{1+1.2185\times^{-6} e^{(+41060/RT)} P_{EtOH} + 5.295\times10^{-6} e^{(+33010/RT)} P_{DEE} + 3.573\times10^{-5} e^{(+26200/RT)} P_{H_2O}}$$

۱-۳-۱- فایل جدیدی باز کنید.

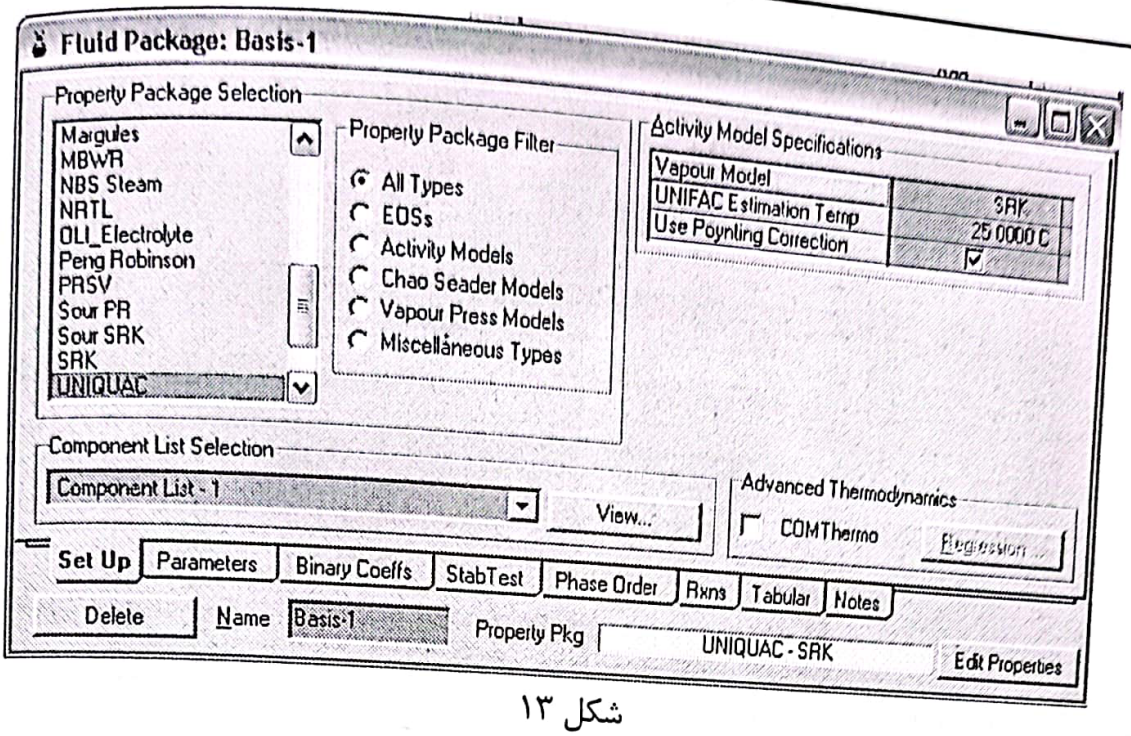
۱-۳-۲- در پنجره‌ی Simulation Base Manager (SBM) به زیرصفحه‌ی Components رفته و مواد موجود را طبق شکل ۱۲ انتخاب نمایید.

۱-۳-۳- به زیرصفحه‌ی Fluid Pkgs رفته و در آن مدل UNIQUAC را انتخاب کنید. در این صفحه برای مدل گاز نیز SRK را از فیلد Activity Model Specification انتخاب نمایید (شکل ۱۳). پنجره‌ی Fluid Package را بسته به پنجره‌ی SBM برگردید.

توصیه می‌شود برای هم‌سان شدن واحد متغیرها، رژیم واحدی SI انتخاب شود. برای این کار به منوی Tools رفته و گزینه‌ی Preferences را انتخاب نمایید. در پنجره‌ی Preferences به زیرصفحه‌ی Variables رفته و در فیلد Available Unit Sets گزینه‌ی SI را انتخاب کنید.

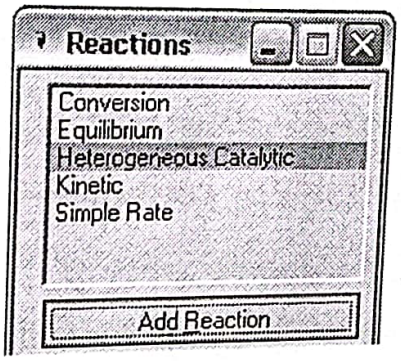


شکل ۱۲



شکل ۱۳

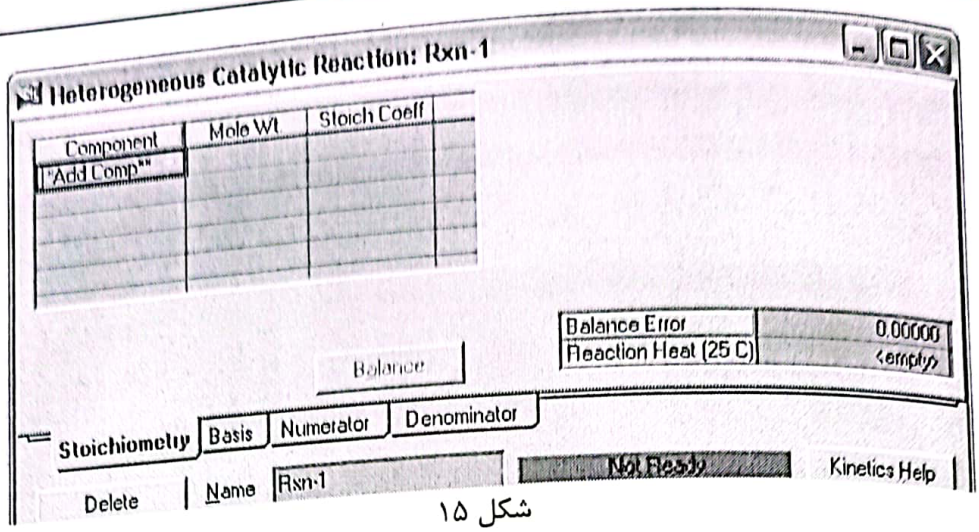
۱-۳-۴- به زیرصفحه‌ی Reactions از پنجره‌ی SBM بروید. در فیلد Reactions کلید Add Rxn را زده و در پنجره‌ی Reactions گزینه‌ی Heterogeneous Catalyst را انتخاب نموده کلید Add Reaction را بزنید (شکل ۱۴).



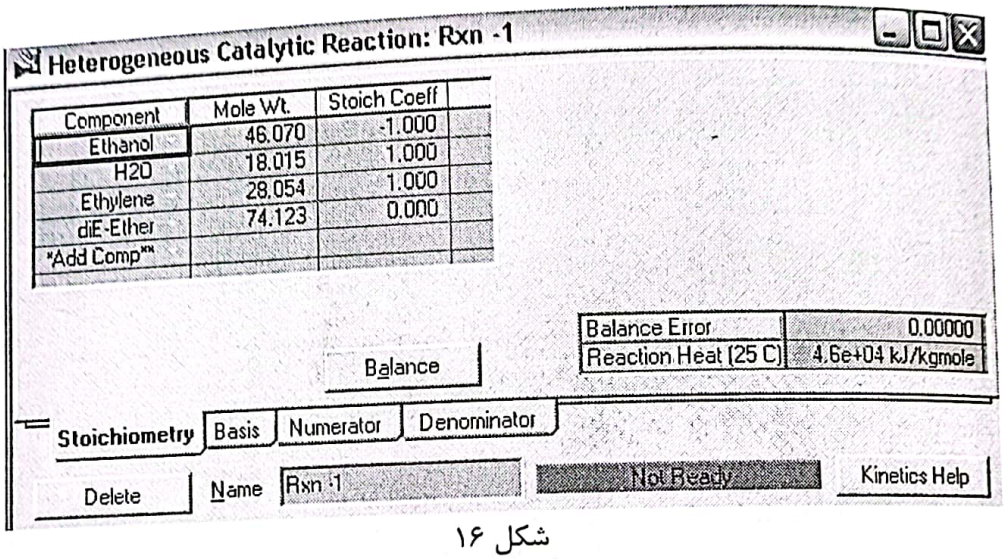
شکل ۱۴

۱-۳-۵- پنجره‌ی Heterogeneous Catalyst Reaction: Rxn-1 ظاهر خواهد شد که دارای ۴ زیرصفحه می‌باشد (شکل ۱۵). زیرصفحه‌ی اول، صفحه‌ی Stoichiometry می‌باشد که مشابه دو واکنش Simple و Kinetic می‌باشد.

۱-۳-۶- واکنش (A) را مطابق شکل ۱۶ در زیرصفحه‌ی Stoichiometry وارد نمایید. دلیل انتخاب ماده‌ی دی‌اتیل اتر در این مرحله وجود فشار جزئی این ماده در معادله‌ی واکنش می‌باشد.

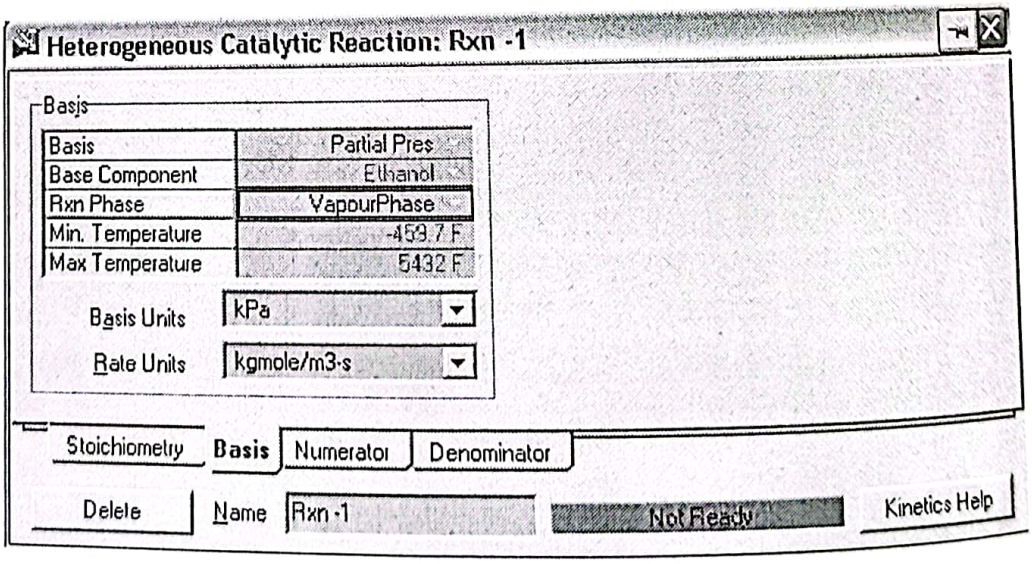


شکل ۱۵



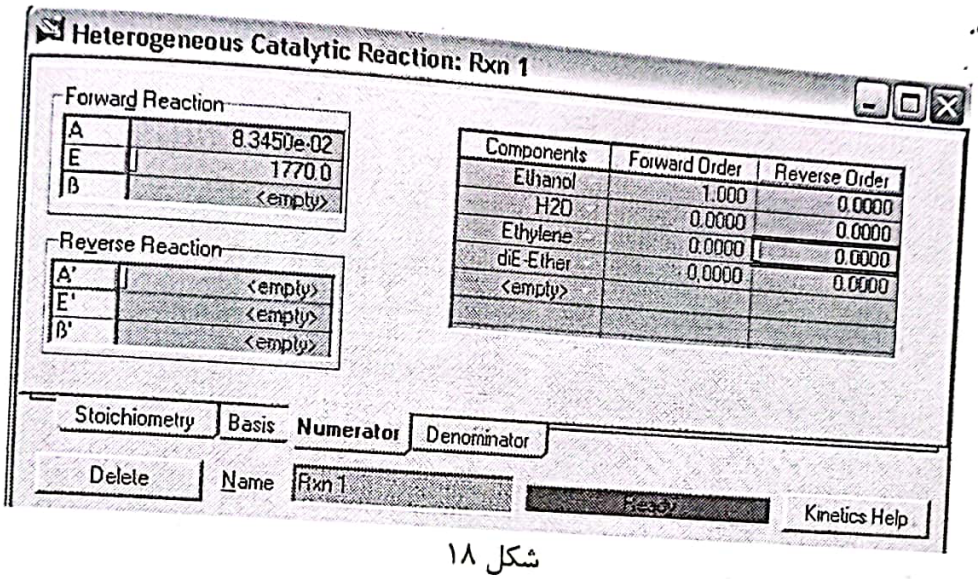
شکل ۱۶

۱-۲-۷- توضیحاتی که در واکنش Kinetic راجع به زیرصفحه‌ی Basis داده شد، برای این نوع واکنش نیز مشابه هست این صفحه را مطابق شکل ۱۷ تکمیل نمایید (واکنش در فاز گاز انجام می‌شود وسرعت واکنش بر اساس فشار جزئی تعریف می‌شود).



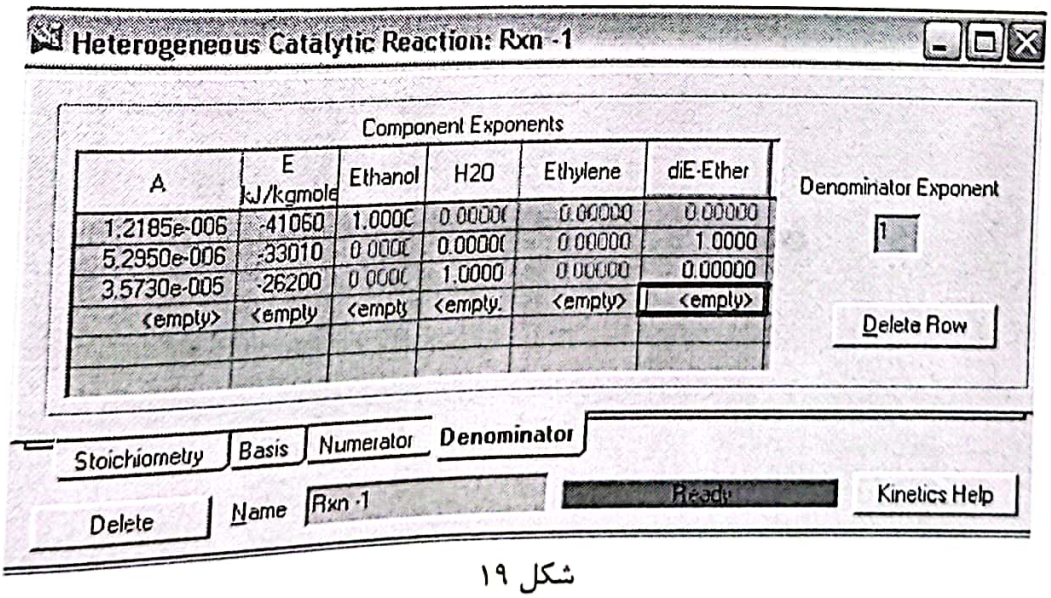
شکل ۱۷

۱-۳-۸- صفحه‌ی Numerator (شکل ۱۸) در واقع صورت کسر در معادله‌ی واکنش اول می‌باشد. همان‌طور که در این معادله مشاهده می‌شود فقط واکنش رفت موجود است به همین دلیل Reverse Reaction وارد نشده است، هم‌چنین در کلیه‌ی ردیف‌های ستون Reverse Order عدد صفر وارد شده است.



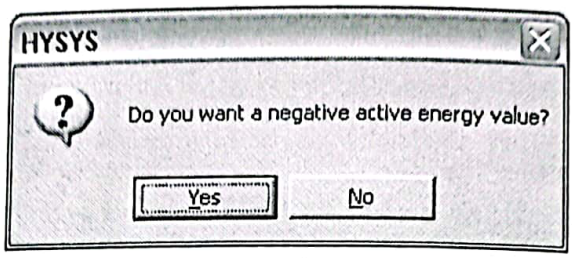
شکل ۱۸

۱-۳-۹- مخرج معادلات واکنش دارای سه ترم می‌باشد که این سه ترم دارای ثابت آرنیوسی و ترم تابعیت غلظتی هستند. مطابق شکل ۱۹ داده‌های موجود که شامل Frequency Factor، Activation Energy و Potential term است و به ترتیب در ستون‌های A، E و مواد مختلف داده شده است، را همانند این شکل تکمیل نمایید. ماتریسی از مواد بر اساس تعداد جملات مخرج وجود دارد که مقدار آن، توان هرکدام از مواد است که در جملات مختلف حضور دارند. در گزینه‌ی Denominator Exponent مطابق معادله‌ی اول سینتیکی عدد ۴ را قرار دهید.



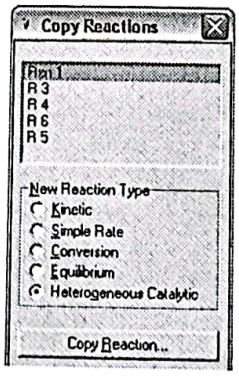
شکل ۱۹

نکته: توجه نمایید در صورتی که در صفحه‌ی Stoichiometry دی‌اتیل اتر انتخاب نمی‌شد این ماده در ماتریس گفته‌شده حضور نداشت.نکته‌ی دیگر این که موقع وارد کردن Activation Energy پیغامی مبنی بر منفی بودن Active Energy ظاهر خواهد شد که با زدن کلید Yes آن را بپذیرید (شکل ۲۰).



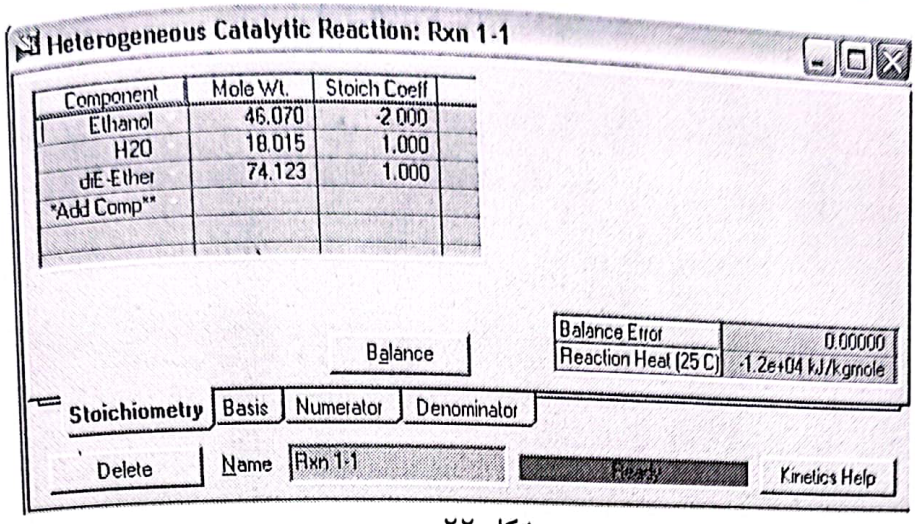
شکل ۲۰

۱-۳-۱۰- تا به حال یکی از چهار واکنش موجود تعریف شده است. از آن‌جا که مخرج واکنش‌ها مشابه هم هستند بهتر است برای ایجاد واکنش‌های بعدی از واکنش اول کمک گرفته شود. برای این کار در فیلد Reactions از زیرصفحه‌ی Reactions کلید Copy Rxn را بزنید. پنجره‌ی Copy Reaction ظاهر خواهد شد، در این پنجره واکنش اول و نوع واکنش Heterogeneous Catalyst را انتخاب کرده و سپس کلید Copy Reactions را بزنید (شکل ۲۱).

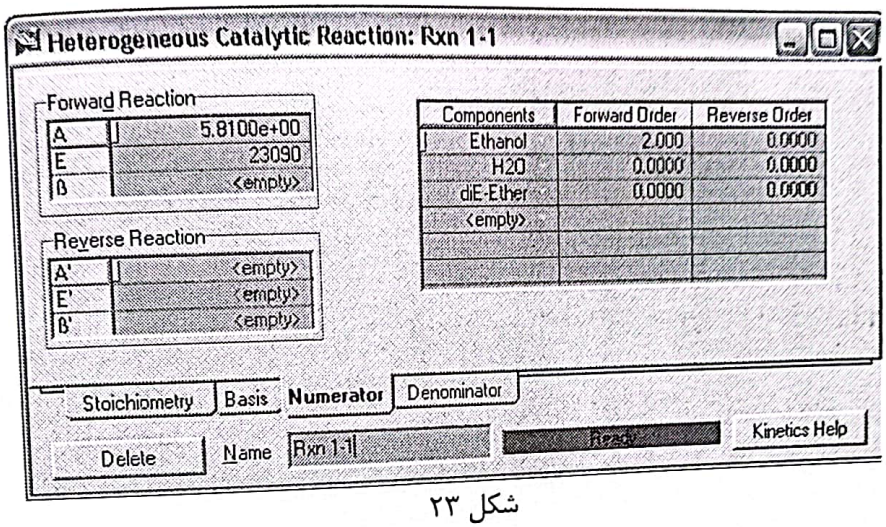


شکل ۲۱

۱-۳-۱۱- در این صورت کپی پنجره‌ی واکنش اول با نام جدیدی ظاهر خواهد شد که در آن باید مطابق شکل‌های ۲۲ و ۲۳ زیر صفحات Stoichiometry و Numerator مطابق سینتیک واکنش دوم اصلاح گردد. صفحه‌ی Basis در این مرحله مشابه واکنش قبلی است (در صفحه‌ی Stoichiometry مکان مواد را تغییر ندهید در غیر این صورت صفحه‌ی Denominator را دوباره باید کمی اصلاح کنید).



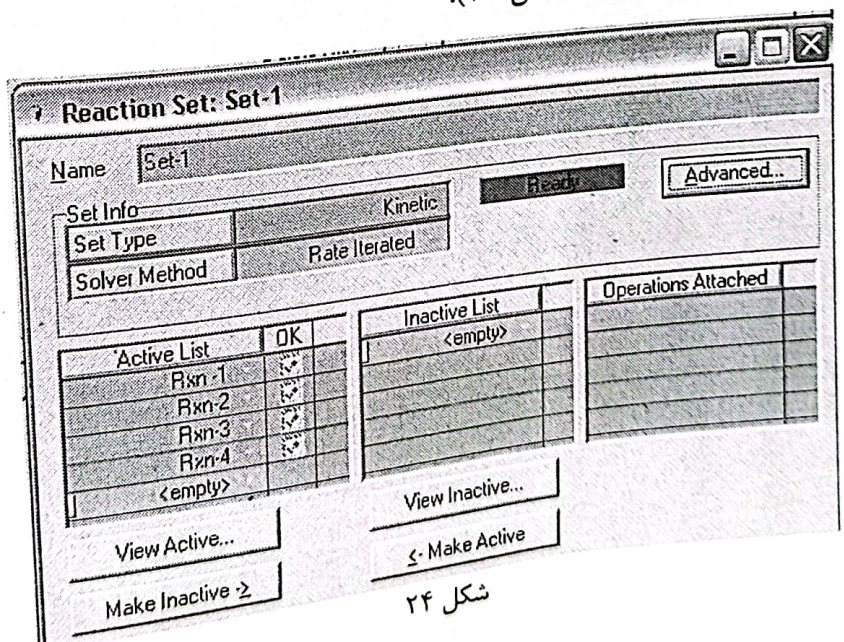
شکل ۲۲



شکل ۲۳

۱-۳-۱۲- مرحله‌ی ۱۱ را برای دو واکنش باقی‌مانده نیز اعمال کنید.

۱-۳-۱۳- پس از تعریف همه‌ی واکنش‌های موجود، مرحله‌ی تعریف دسته واکنش را با تعریف یک Set در فیلد Reaction Sets (کلید Add Set را زده و در پنجره‌ی Reaction Set: Set1 وارد شوید) و انتخاب هر چهار واکنش تکمیل نمایید (شکل ۲۴).



شکل ۲۴

۱-۳-۱۴- شبیه‌سازی را تا این مقطع ذخیره نمایید تا در بخش‌های دیگر این فصل از آن استفاده کنید (این فایل را با نام Hetro_PFR.hsc ذخیره نمایید).

۱-۴- واکنش نوع Equilibrium

برخی از واکنش‌های شیمیایی هستند که نیاز به سینتیک ندارند و سرعت واکنش در آن‌ها به قدری زیاد است که سریع به تعادل می‌رسند. در نرم‌افزار ASPEN HYSYS برای چنین واکنش‌هایی قابلیت‌های زیادی وجود دارد. ثابت تعادل واکنش‌ها از راه‌های مختلفی قابل حصول است که نرم‌افزار ASPEN HYSYS برای آن موارد کاملی را در نظر گرفته است. در هر حال برای همه‌ی موارد، استوکیومتری واکنش مشخص است.

رابطه‌ی زیر در حالت تعادل برای همه‌ی واکنش تعادلی برقرار می‌باشد.

$$K = \prod_{j=1}^{N_c} \left[\left([BSASE]_{E_j} \right)^{v_j} \right]$$

که در آن:

K = Equilibrium Constant, $[BASE]_{Ej}$ = Basis for component j at equilibrium
v_j = Stoichiometry coefficient for the jth component
N_c = Number of components

مقدار ثابت تعادل می‌تواند به چهار قسم زیر وجود داشته و قابل استحصال باشد:

- به صورت عدد ثابت و مستقل از دما
- به صورت تابعی از دما با پارامترهای مشخص

$$Ln(K_{eq}) = a + b, \qquad a = A + \frac{B}{T} + C.Ln(T) + D.T,\ b = E.T^2 + F.T_3 + G.T^4 + H.T^5$$

- به صورت جدولی از ثابت تعادل برحسب دما
- یافتن ثابت تعادل از روی انرژی آزاد گیبس

$$Ln(K_{eq}) = -\frac{\Delta G^\circ}{RT}$$

مثال ۳:

سنتز متانول در یک راکتور بستر ثابت مد نظر می‌باشد. فرض بر این است که طول راکتور به قدر کافی دراز است و می‌توان واکنش کلی را تعادلی فرض کرد. گاز ورودی حاوی گاز سنتز، دی‌اکسید کربن، اتیلن، متانول (به خاطر جریان برگشتی در سنتز متانول) و آب می‌باشد.

همه‌ی واکنش‌های موجود به صورت زیر در راکتور انجام می‌شوند.

$$C_2H_4 + H_2O \leftrightarrow C_2H_5OH \qquad (E)$$

$$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2 \qquad (F)$$

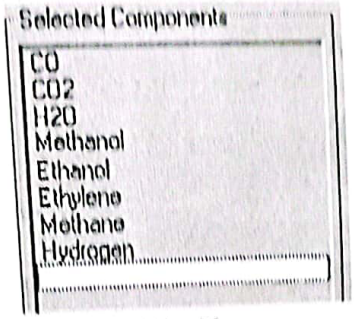
$$CO + 2H_2 \leftrightarrow CH_3OH \qquad (G)$$

$$CO_2 + 3H_2 \leftrightarrow CH_3OH + H_2O \qquad (H)$$

برای تعریف واکنش از نوع Equilibrium مراحل زیر را انجام دهید.

۱-۴-۱- فایل جدیدی باز کنید.

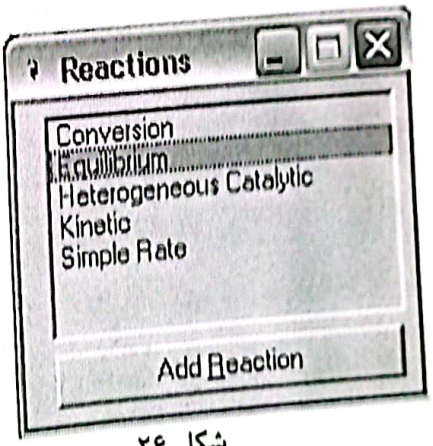
۱-۴-۲- در پنجره‌ی Simulation Base Manager (SBM) به زیرصفحه‌ی Components رفته و مواد را مطابق شکل ۲۵ انتخاب نمایید.



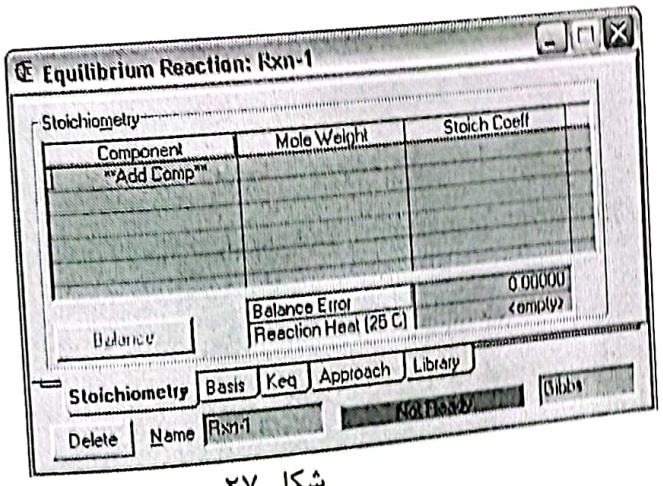
شکل ۲۵

۱-۴-۳- در زیرصفحه‌ی Fluid Pkgs مدل ترمودینامیکی PRSV را انتخاب نمایید.

۱-۴-۴- به زیرصفحه‌ی Reactions رفته کلید Add Rxn را بزنید. در پنجره‌ی Reactions (شکل ۲۶) گزینه‌ی Equilibrium را انتخاب نموده و کلید Add Reaction را بزنید. در این صورت پنجره‌ی Equilibrium Reaction: Rxn-1 ظاهر خواهد شد.



شکل ۲۶



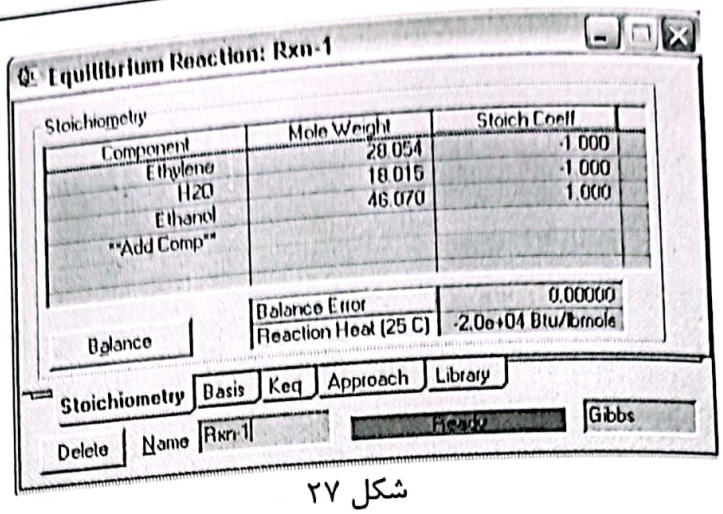
شکل ۲۷

۱-۴-۵- برای وارد کردن واکنش (E) مطابق شکل ۲۷ مواد را در فهرست Components انتخاب کرده و ضریب استوکیومتری آن‌ها را وارد نمایید (برای مواد واکنش‌گر عدد منفی و برای محصولات مثبت می‌باشد).

این پنجره دارای ۵ زیرصفحه می‌باشد که صفحه‌ی Stoichiometry قبلاً توضیح داده شده است.

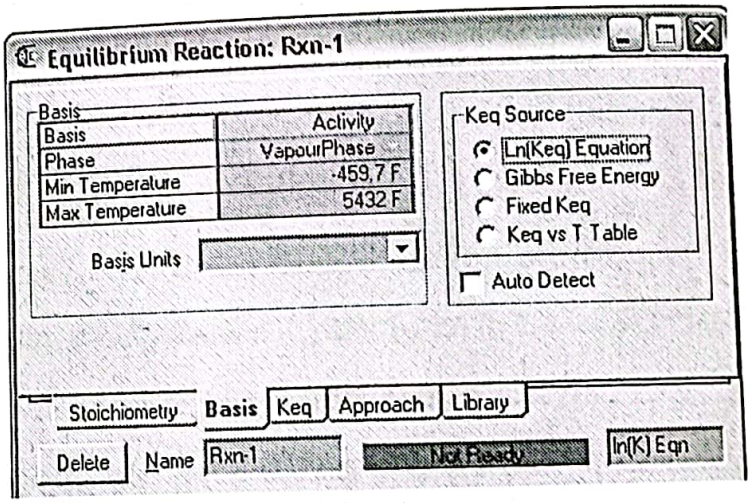
نکته:

برای این که واحد متغیرهای شبیه‌سازیتان با داده‌های این بخش همسان باشد، واحد SI را انتخاب نمایید.



شکل ۲۷

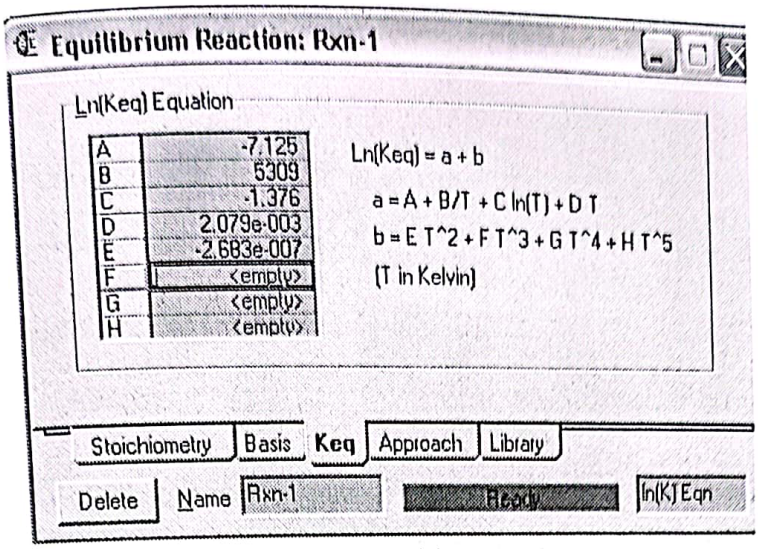
۱-۴-۶- به زیرصفحه‌ی Basis بروید و در آن فاز گاز را به عنوان فاز واکنش انتخاب نمایید. در این مرحله باید تصمیم بگیرید که نرم‌افزار ASPEN HYSYS ثابت تعادل واکنش را از چه روشی (۴ مرحله‌ی گفته شده در بالا) محاسبه کند. هرگاه هیچ داده‌ای در این مورد ندارید گزینه‌ی Gibbs Free Energy را انتخاب کنید (به صورت پیش‌فرض از طرف نرم‌افزار انتخاب شده بود). برای این مثال گزینه‌ی Ln (Keq) Equation را انتخاب کنید (شکل ۲۸).



شکل ۲۸

۱-۴-۷- به زیرصفحه‌ی Keq بروید. در این زیرصفحه پارامترهای معادله‌ی مذکور باید وارد گردد. مطابق رابطه‌ی زیر این پارامترها را تکمیل نمایید (شکل ۲۹).

$$Ln(K_{eq}) = \frac{5,308.7}{T} - 1.376Ln(T) + 2.0785\times10^{-3}T - 0.2683\times10^{-6}T^2 - 7.125$$



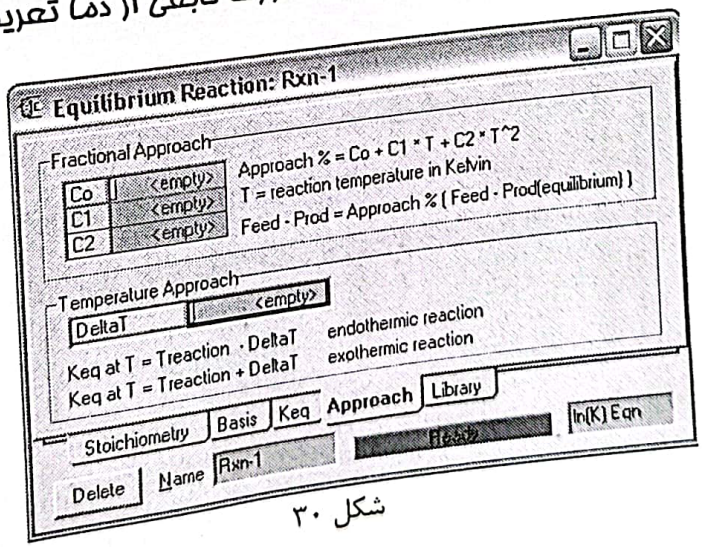
شکل ۲۹

گریز ۵:

تا مرحله‌ی ۷ تعریف واکنش تعادلی تکمیل شده است امّا گاهی واکنش تعادلی به تعادل کامل نمی‌رسد. مثلاً در یک واکنش تعادلی ممکن است تنها به ۹۰ درصد تبدیل تعادلی بتوان رسید. برای لحاظ کردن این مورد در محاسبات، از زیرصفحه‌ی Approach استفاده می‌شود. دو روش برای بیان این موضوع در نرم‌افزار در نظر گرفته شده است:

- Temperature Approach
- Fractional Approach

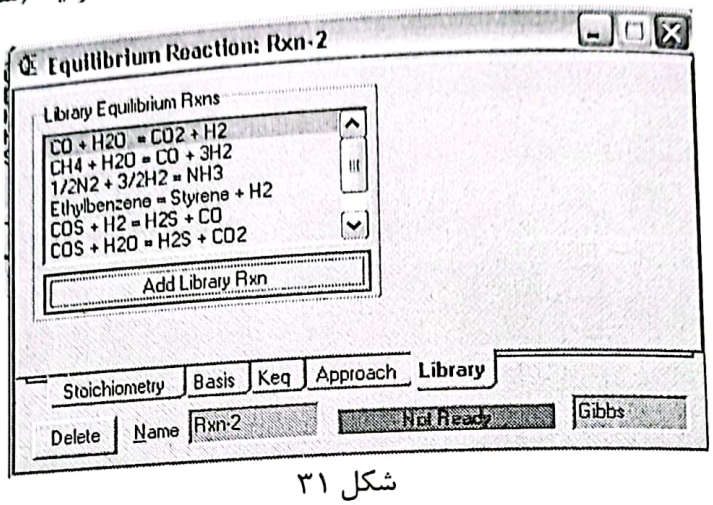
امکان استفاده از هردو روش وجود دارد. در حالت Temperature Approach ثابت تعادل واکنش در دمایی کمتر و یا بیشتر از دمای واکنش محاسبه می‌گردد (بسته به گرماده و یا گرماگیر بودن واکنش). ولی در Fractional Approach به صورت مستقیم به نرم‌افزار گفته می‌شود درصد تبدیل نهایی چه درصدی از درصد تبدیل تعادلی خواهد بود. هم‌چنین این درصد را می‌توان به صورت تابعی از دما تعریف نمود (شکل ۳۰).



شکل ۳۰

یکی از صفحات دیگری که در پنجره‌ی واکنش تعادلی وجود دارد، صفحه‌ی Library است. در این صفحه فهرستی از واکنش‌های تعادلی معمول تعبیه شده است. ثابت‌های تعادل این واکنش‌ها برحسب دما در جدولی داده شده است.

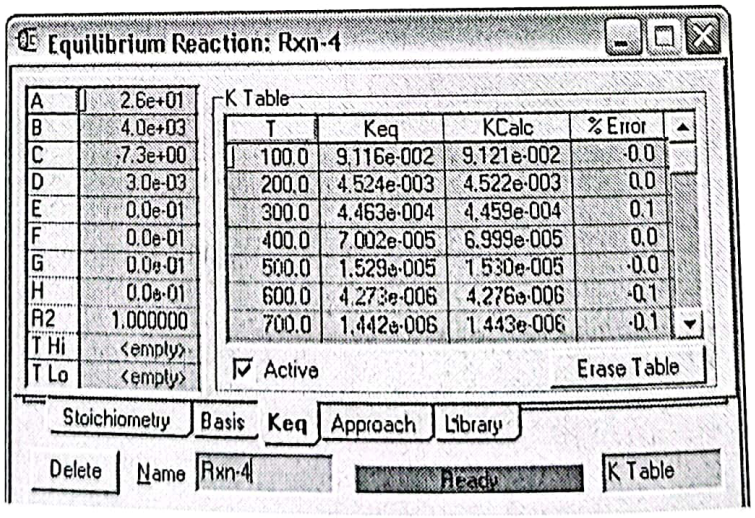
۱-۴-۸- اگر در زیرصفحه‌ی Library نگاه کنید خواهید دید که سه واکنش دیگر در آن‌جا وجود دارند. در زیرصفحه‌ی Reactions از پنجره‌ی SBM کلید Add Rxn را بزنید و دوباره گزینه‌ی Equilibrium را در پنجره‌ی ظاهرشده انتخاب کرده و کلید Add Reaction را بزنید. به زیرصفحه‌ی Library رفته و واکنش دوم را پیدا کرده و کلید Add Library Rxn را بزنید (شکل ۳۱).



شکل ۳۱

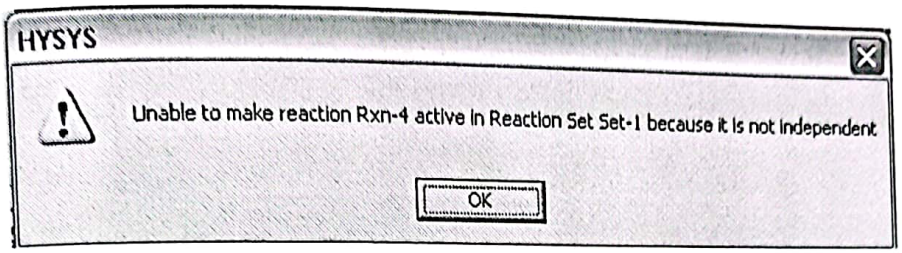
۱-۴-۹- همانند مرحله‌ی ۸ دو واکنش دیگر را پیدا کرده و به فهرست واکنش‌های خود اضافه نمایید (برای اضافه کردن دوباره مراحل باید تکرار گردد).

۱-۴-۱۰- هرگاه به زیرصفحه‌ی Keq واکنش‌هایی که از این طریق انتخاب کرده‌اید بروید، همانند شکل ۳۲ جدولی از ثابت تعادل برحسب دما مشاهده خواهید کرد که در ستون چپ معادله‌ی برازش شده از طریق نرم‌افزار دیده می‌شود. در صورتی که این داده‌ها را تغییر دهید نرم‌افزار بلافاصله ضرایب معادله را تطبیق خواهد داد.



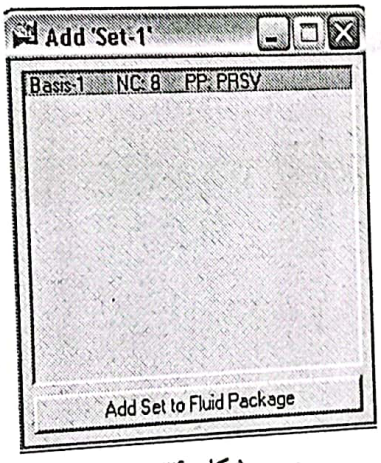
شکل ۳۲

۱-۴-۱۱- به زیرصفحه‌ی Reactions از پنجره‌ی SBM برگردید و در آن کلید Add Set را بزنید. در پنجره‌ی Reaction Set: Set 1 در فهرست Active واکنش‌های ایجادشده در مراحل قبل را انتخاب کنید. در صورتی که بخواهید هر چهار واکنش را اضافه کنید، پیغام غیر مستقل بودن واکنش‌ها را دریافت خواهید کرد (شکل ۳۳). نرم‌افزار تنها واکنش‌هایی را قبول خواهد کرد که مستقل از بقیه‌ی واکنش‌ها باشد. در واکنش‌های تبدیلی چنین اجازه‌ای داده می‌شود.



شکل ۳۳

۱-۴-۱۲- پس از تعریف Set واکنش کلید Add to FP را بزنید (شکل ۳۴).



شکل ۳۴

۱-۴-۱۳- برنامه‌ی خود را برای شبیه‌سازی‌های آتی این فصل برای بخش دوم با نام Equilibrium_Reactor.hsc ذخیره نمایید.

۱-۵- واکنش نوع Conversion

ساده‌ترین مدل واکنشی را که می‌توان در نظر گرفت واکنش تبدیلی است در این صورت نه از سینتیک واکنش داده‌ای وجود دارد و نه از درجه‌ی تعادلی بودن آن. البته در برخی موارد، درصد تبدیل مشخص است مثلاً واکنش‌های احتراق را در نظر بگیرید که فرض تبدیل صد درصد، فرض معقولی برای آن‌ها به شمار می‌رود.

مثال ۴:

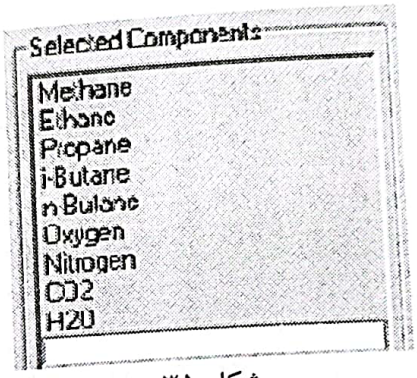
در زیر واکنش احتراق هیدروکربن‌ها برای آشنایی با واکنش‌های تبدیلی آورده شده است. واکنش‌های زیر را برای انجام این شبیه‌سازی در نظر بگیرید.

$$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O \quad (I)$$
$$C_2H_6 + 3.5O_2 \rightarrow 2CO_2 + 3H_2O \quad (J)$$
$$C_3H_8 + 5O_2 \rightarrow 3CO_2 + 4H_2O \quad (L)$$
$$C_4H_{10} + 6.5O_2 \rightarrow 4CO_2 + 5H_2O \quad (M)$$

برای انجام شبیه‌سازی مراحل زیر را انجام دهید.

۱-۵-۱- فایل جدیدی را باز کنید.

۱-۵-۲- در پنجره‌ی Simulation Base Manager (SBM) به زیرصفحه‌ی Components رفته و مواد را مطابق شکل ۳۵ انتخاب نمایید.

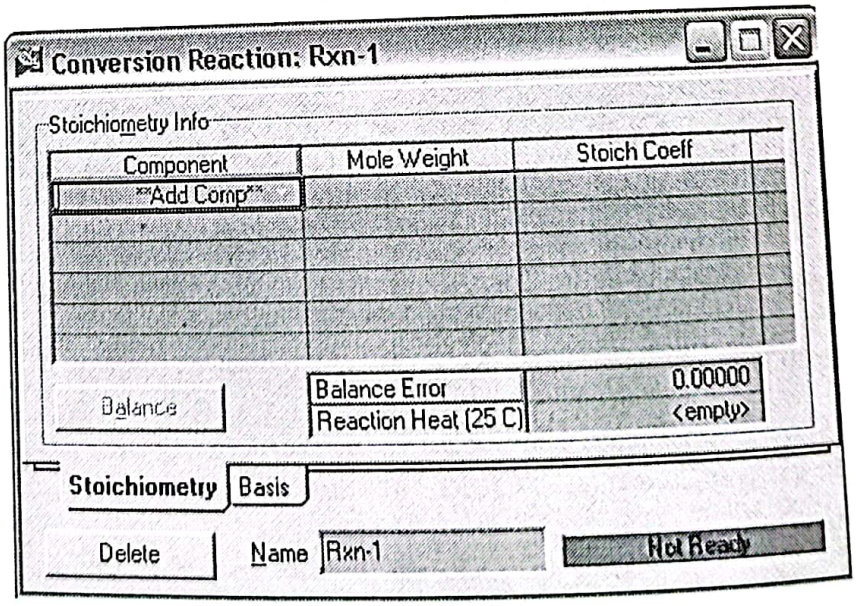


شکل ۳۵

۱-۵-۳- به زیرصفحه‌ی Fluid Pkgs رفته و در آن مدل Peng Robinson را انتخاب نمایید.

۱-۵-۴- به زیرصفحه‌ی Reactions از پنجره‌ی SBM بروید و در آن کلید Add Rxn را بزنید.

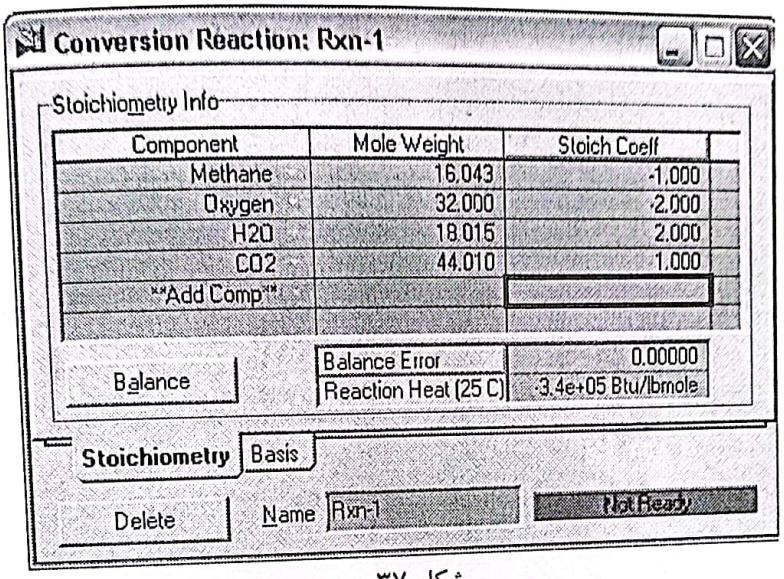
۱-۵-۵- در پنجره‌ی Reactions گزینه‌ی Conversion را بزنید. در این صورت پنجره‌ی Conversion Reaction: Rxn-1 ظاهر خواهد شد (شکل ۳۶).



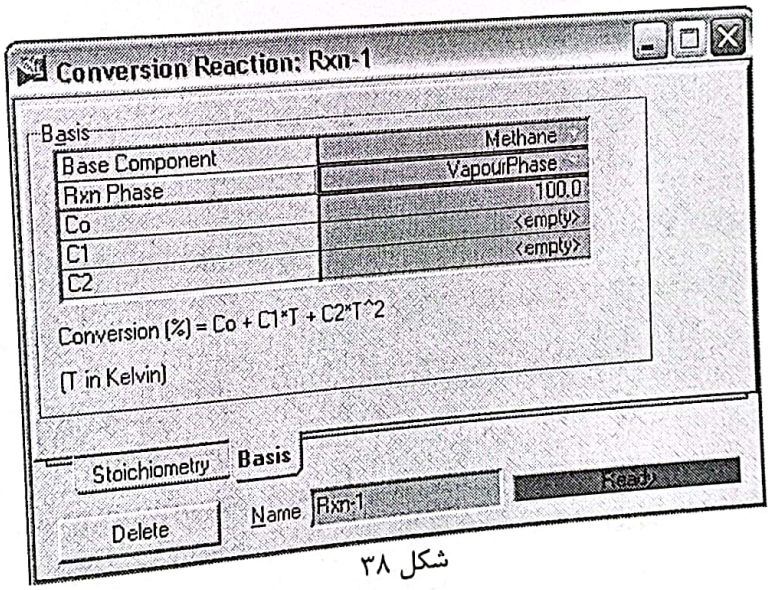
شکل ۳۶

۱-۵-۶- مطابق شکل ۳۷ استوکیومتری واکنش اول را وارد کنید.

۱-۵-۷- به زیرصفحه‌ی Basis بروید. در این زیرصفحه ماده‌ی Base Component باید معین شود (درصد تبدیل بر مبنای آن سنجیده می‌شود). این درصد را می‌توان هم به صورت عدد ثابت و یا تابعی از دما وارد کرد (شکل ۳۸). فاز واکنش نیز باید تعیین گردد.



شکل ۳۷



شکل ۳۸

۱-۵-۸- کلیه واکنش‌های موجود را طبق مراحل ۶ و ۷ تکرار نمایید (برای بوتان دو ایزومر وجود دارد برای هردو این کار را انجام دهید).

۱-۵-۹- در زیرصفحه‌ی Reactions در پنجره‌ی SBM کلید Add Set را زده و کلیه واکنش‌های موجود (۵ واکنش) را در فهرست Active قرار دهید (شکل ۳۹).

۱-۵-۱۰- دسته واکنش ایجادشده را به Fluid Package نصب کنید. کلید Add to FP را بزنید.

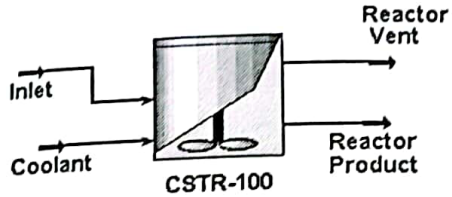
۱-۵-۱۱- برنامه را در این مرحله برای شبیه‌سازی‌های آتی این فصل در بخش دوم، با نام Conversion_Reactor.hsc ذخیره نمایید.

مثال ۵:

۲-۱-۱- شبیه‌سازی که در مثال ۱ انجام داده‌اید (فایل CSTR_ Kinetic .hsc) را باز کنید. در مثال ۱ تعریف واکنش سنتز پروپیلن گلیکول به صورت یک واکنش Kinetic انجام شده است.

۲-۱-۲- با زدن کلید Enter to Simulation Environment به صفحه‌ی فلوشیت بروید.

۲-۱-۳- راکتور CSTR را به PFD اضافه نمایید و مطابق شکل ۴۲ جریان‌های مواد و انرژی را ایجاد نمایید.



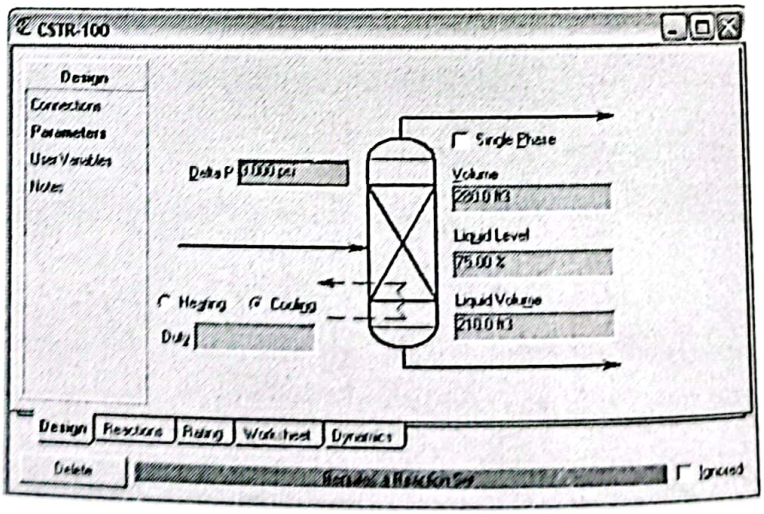
شکل ۴۲

۲-۱-۴- مشخصات جریان Inlet را مطابق جدول ۳ وارد نمایید.

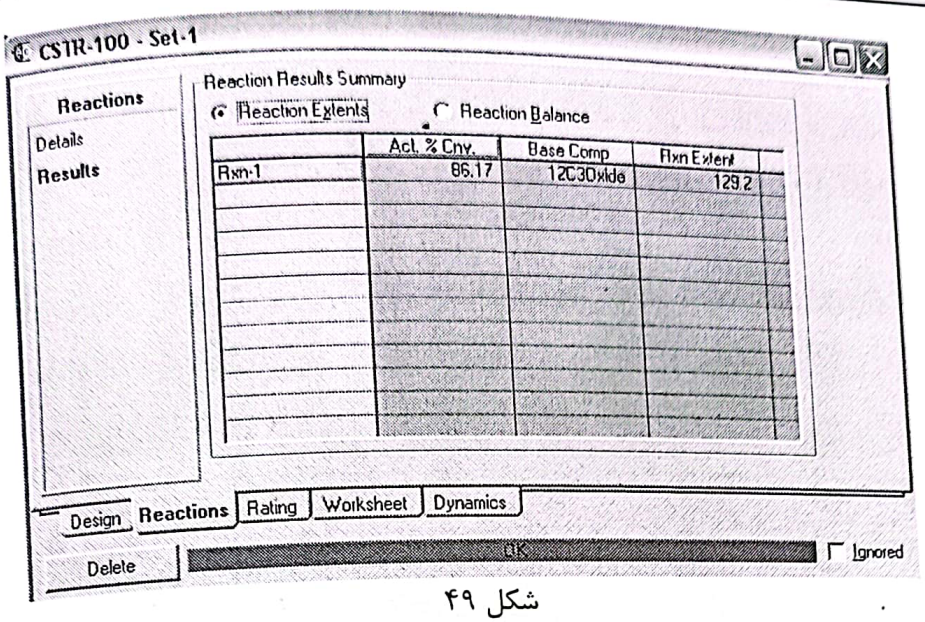
جدول ۳

Inlet		
Temperature	75.00	F
Pressure	5.000	psig
Molar Flow	760.6	lbmole/hr
Comp Mole Frac (12C3Oxide)	0.197213	
Comp Mole Frac (12-C3diol)	+0.000000	
Comp Mole Frac (H2O)	0.802787	

۲-۱-۵- به پنجره‌ی مشخصات راکتور بروید. این پنجره دارای پنج زیرصفحه‌ی اصلی می‌باشد (Design، Reactions، Rating، Worksheet و Dynamic). به زیرصفحه‌ی Design / Parameter رفته و افت فشار راکتور و حجم راکتور را مطابق شکل ۴۳ وارد کنید. توجه کنید که ارتفاع مایع در راکتور ۷۵ درصد در نظر گرفته شده است و نوع انتقال حرارت نیز به صورت Cooling می‌باشد.



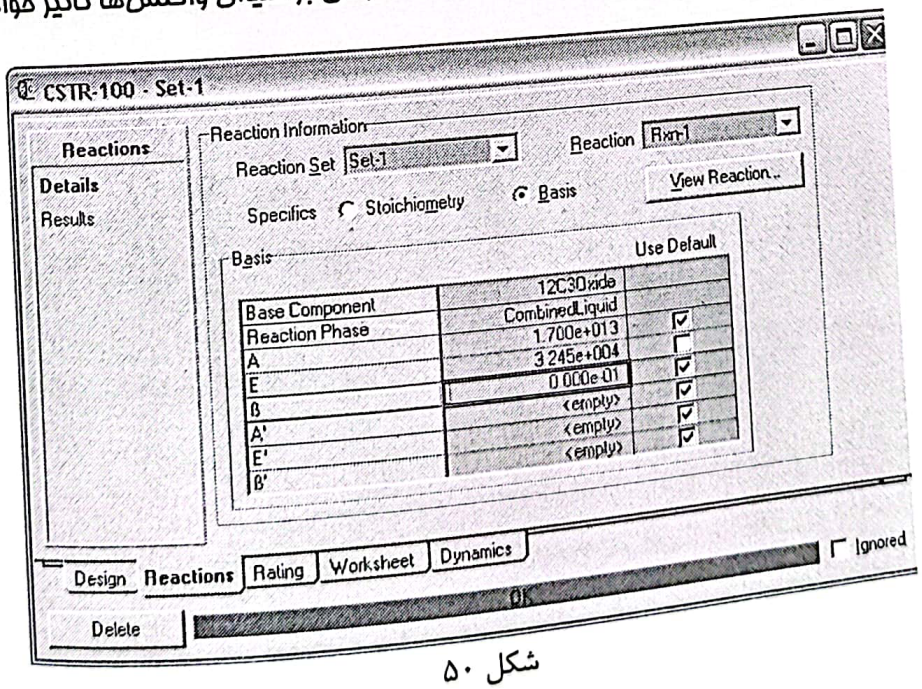
شکل ۴۳



شکل ۴۹

گریز ۶:

با استفاده از کلید View Reaction در صفحه‌ی Reactions / Details می‌توانید به پارامترهای واکنش دست‌رسی داشته باشید. در صورتی که در زیرصفحه‌ی Reactions / Details گزینه‌ی Radio box مربوط به Basis را انتخاب کنید (شکل ۵۰) می‌توانید پارامترهای واکنش را در یک دسته واکنش تغییر دهید. این تغییر تأثیری بر روی واکنش در راکتورهای دیگر که همین واکنش در آن‌ها انجام می‌شود نخواهد گذاشت و تنها بر روی راکتور CSTR فعلی تأثیر می‌گذارد. در صورتی که مایل باشید از اصل نسخه واکنش استفاده کنید گزینه‌ی جلوی هرکدام از پارامتر را ضرب‌در بزنید. ولی در صورتی که برای تغییر پارامتری از واکنش، از کلید View Reaction استفاده کنید تغییرات در واکنش به صورت عمومی بر کلیه‌ی واکنش‌ها تأثیر خواهد گذاشت.



شکل ۵۰

۲-۲- راکتور لوله‌ای (PFR)

راکتورهای جریان لوله‌ای عموماً از دسته‌ای لوله‌های موازی تشکیل شده‌اند که مواد واکنش‌دهنده داخل لوله‌ها و سیال گرم‌کننده یا سردکننده در اطراف لوله‌ها جریان دارند. در راکتورهای آدیاباتیک، معمولاً فضای بین لوله‌ها توسط مواد عایق پر می‌شود.

مواد واکنش‌دهنده ضمن جریان در لوله‌ها، با یک‌دیگر واکنش داده و بنابراین یک پروفایل تغییرات غلظت (و به تبع آن سرعت واکنش) در طول لوله‌ها به وجود می‌آید. نرم‌افزار ASPEN HYSYS برای حل مسائل مربوط به راکتورهای لوله‌ای، هرکدام از لوله‌ها را به تعداد زیادی المان‌های کوچک‌تر تقسیم می‌کند و با فرض ثابت بودن غلظت در طول این المان کوچک، با استفاده از محاسبات دما، فشار و غلظت برای المان مزبور، محاسبات سرعت و درصد تبدیل را انجام می‌دهد. برای هرکدام از این المان‌های دیفرانسیلی (که با زیروند j نشان داده می‌شوند) داریم:

$$F_{j0} - F_j + \int_V r_j \, dV = \frac{dN_j}{dt}$$

و از آن‌جا که غلظت (و بنابراین سرعت واکنش) در هرکدام از حجم‌های دیفرانسیلی ثابت بوده و ترم پس از مساوی در حالت Steady-State برابر صفر می‌باشد، بنابراین داریم:

$$F_j = F_{j0} + r_j V$$

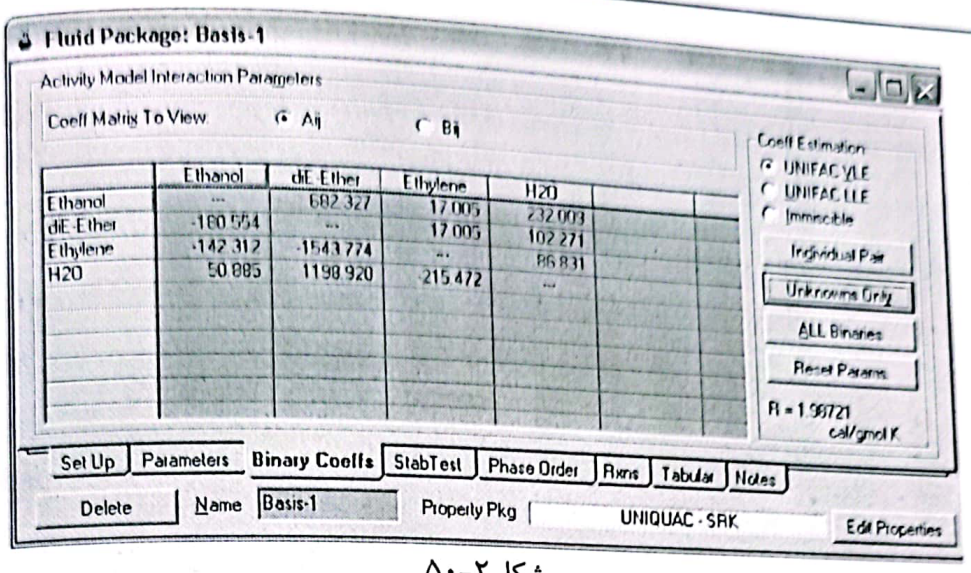
مثال ۵:

در بخش شبیه‌سازی راکتور، سنتز دی‌اتیل اتر از اتانول در یک راکتور ایزوترمال و یک راکتور آدیاباتیک مورد بررسی قرار گرفته است. در مثال ۲ سینتیک این واکنش که به فرم Heterogeneous Catalyst بود ارائه شد. همان‌طور که دیدید علاوه بر محصول اصلی محصول جانبی اتیلن و هم‌چنین آب نیز تولید می‌گردد.

برای انجام شبیه‌سازی مراحل زیر را انجام دهید.

۲-۲-۱- فایل Hetro_PFR.hsc که در مثال ۲ ذخیره کرده بودید باز کنید.

۲-۲-۲- پیش از این که وارد PFD شوید، به پنجره‌ی Fluid Package رفته و در صفحه‌ی Binary Coeffs با انتخاب گزینه‌ی UINFAC VLE از فیلد Coeff Estimation کلید Unknown only را بزنید تا ضرایب تداخل مواد از روی مدل UINFAC تخمین زده شود (شکل ۲-۵۰).



شکل ۲-۵۰

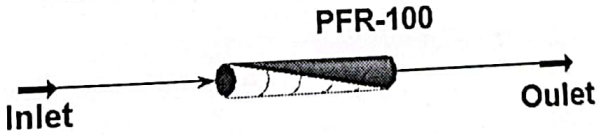
۲-۲-۳- به صفحه‌ی SBM برگردید و در آن کلید Enter to Simulation Environment را بزنید و وارد PFD شوید.

۲-۲-۴- جریان Inlet را مطابق جدول ۴ در PFD ایجاد کنید.

۲-۲-۵- راکتور PFR را در فلوشیت قرار داده و مطابق شکل ۵۱ جریان Outlet را به آن متصل نمایید.

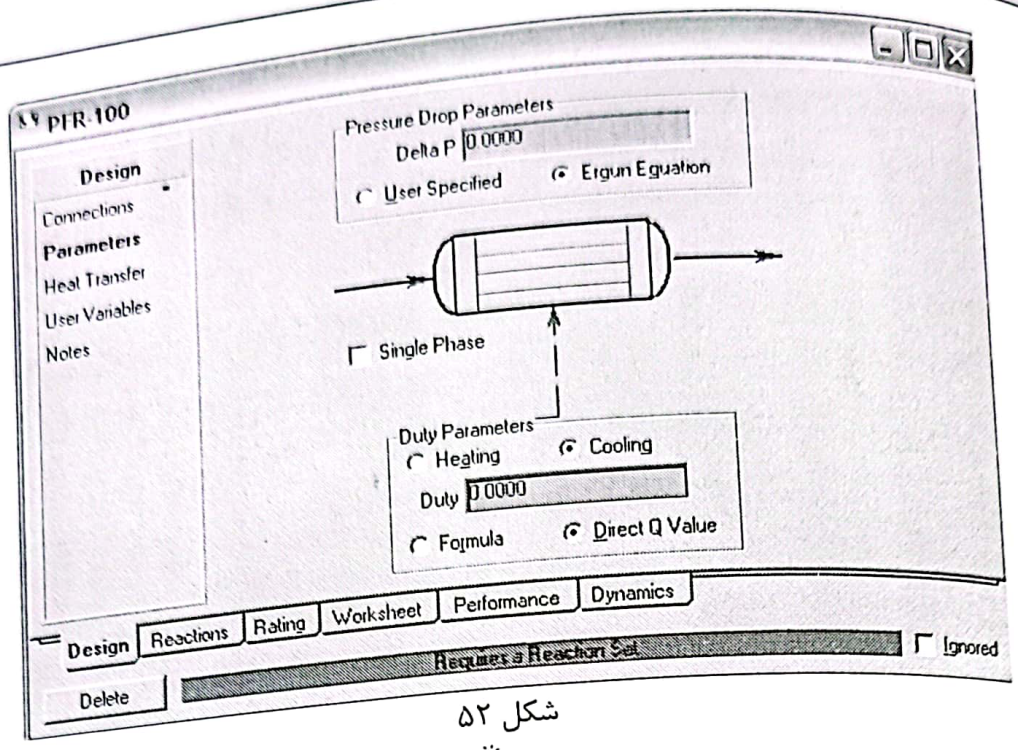
جدول ۴

Inlet		
Temperature	176.7	C
Pressure	2000	kPa
Molar Flow	600.0	kgmole/h
Comp Mole Frac (Ethanol)	0.908309	
Comp Mole Frac (diE-Ether)	0.009118	
Comp Mole Frac (Ethylene)	0.036699	
Comp Mole Frac (H2O)	0.045875	



شکل ۵۱

۲-۲-۶- به پنجره‌ی راکتور رفته و در آن به زیرصفحه‌ی Design / Parameters بروید (شکل ۵۲). برای محاسبه افت فشار گزینه‌ی Ergun Equation را انتخاب نمایید. در فیلد Duty Parameters لازم به وارد کردن پارامتر نیست (راکتور به صورت آدیاباتیک شبیه‌سازی می‌شود).



شکل ۵۲

گریز ۷:

در زیرصفحه‌ی Design / Parameters دو مورد از مشخصات راکتور تعیین می‌شود. اولی تعیین افت فشار و یا معادله‌ی مورد نیاز برای این کار و دومی نوع انتقال حرارت می‌باشند. برای افت فشار نیز دو گزینه در نظر گرفته شده است، وارد کردن میزان افت فشار به صورت مستقیم (User Specified) و یا با استفاده از معادله‌ی Ergun. معادله‌ی Ergun برای بسترهای پرشده و کاتالیستی مورد استفاده قرار می‌گیرد و به صورت زیر می‌باشد.

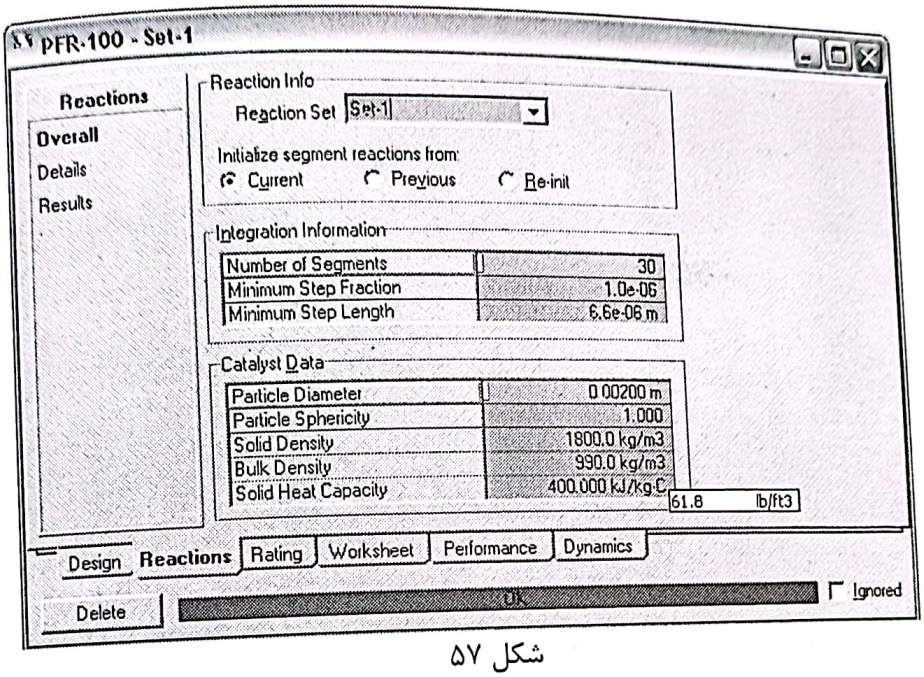
$$\frac{\Delta P g_c \varphi_s D_p \varepsilon^3}{L \rho \overline{V}^2 (1-\varepsilon)} = \frac{150(1-\varepsilon)}{\varphi_s D_p \overline{V} \rho / \mu} + 1.75$$

که در آن Δp افت فشار کلی در طول راکتور، g_c ثابت نیوتن، L طول راکتور، φs ضریب کرویت، D_p قطر دانه‌های کاتالیست، ρ چگالی سیال، ε تخلخل و μ لزجت سیال می‌باشند. امّا توجه نمایید در صورتی که راکتور کاتالیستی نباشد (در زیر صفحات بعد این گزینه تعیین خواهد شد) افت فشار در طول راکتور صفر گرفته خواهد شد.

برای انتقال حرارت دو گزینه‌ی گرمایش و سرمایش وجود دارد که هردو می‌توانند به صورت حرارت دادن مستقیم باشد و یا از طریق فرمول باشد. در صورتی که نوع انتقال حرارت به صورت Direct Q Value انتخاب گردد میزان انتقال حرارت باید در بخش Duty وارد شود. در صورتی که گزینه‌ی Formula انتخاب شود باید به صفحه‌ی Design / Heat Transfer بروید (شکل‌های ۵۳ و ۵۴).

مطابق شکل ۵۶ ابعاد راکتور را وارد نمایید (راکتور به صورت بستر Packed و به صورت راکتور آدیاباتیک می‌باشد). کسر خالی بستر 0.45 در نظر گرفته شده است. در صورتی که کسر خالی بستر کوچک‌تر از ۱ گردد، فیلد Catalyst Data در زیرصفحه‌ی Reaction / Overall فعال خواهد شد.

۲-۲-۸- دوباره به زیرصفحه‌ی Reaction / Overall بروید و در فیلد Catalyst Data مشخصات کاتالیست را مطابق شکل ۵۷ وارد نمایید. با وارد کردن این اطلاعات شبیه‌سازی راکتور با توجه به فعال بودن Solver بلافاصله شروع خواهد شد. در صورتی که شبیه‌سازی انجام نشود به دنبال رفع مشکل برآیید.



شکل ۵۷

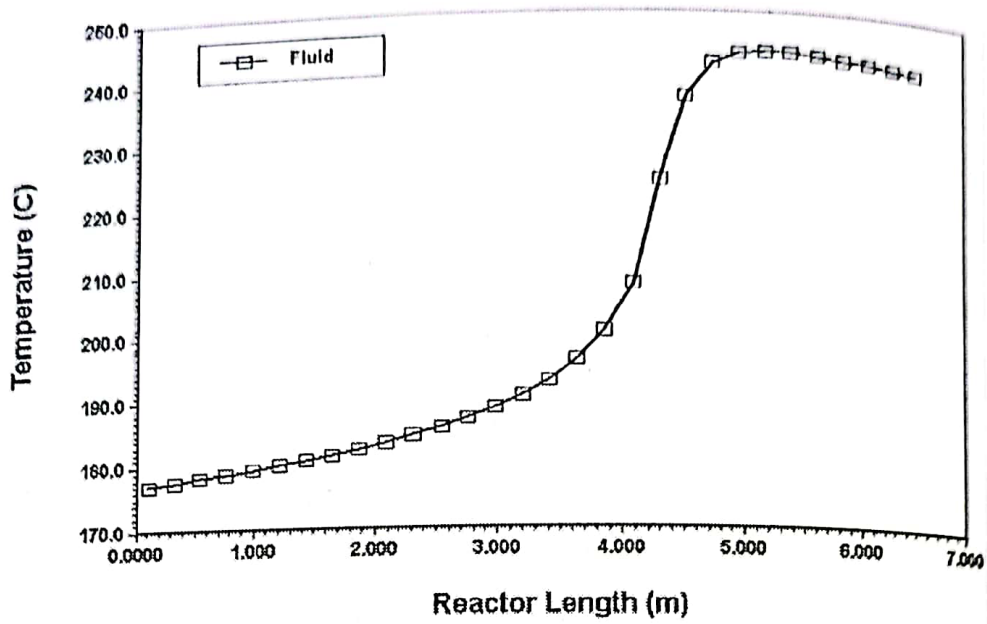
۲-۲-۹- نتایج شبیه‌سازی به صور مختلف قابل دست‌رسی است. نتایج خروجی راکتور را می‌توانید در Worksheet بیابید (شکل ۵۸).

Name	Inlet	Outlet
Vapour	1.0000	1.0000
Temperature [C]	176.7	241.9
Pressure [kPa]	2000	1998
Molar Flow [kgmole/h]	600.0	622.8
Mass Flow [kg/h]	2.663e+004	2.663e+004
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	34.22	36.63
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2.163e+005	-2.084e+005
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	129.3	231.6
Heat Flow [kJ/h]	-1.298e+008	-1.298e+008

	Inlet	Outlet
Ethanol	0.908309	0.012731
diE-Ether	0.009118	0.421595
Ethylene	0.036699	0.072016
H2O	0.045875	0.493657

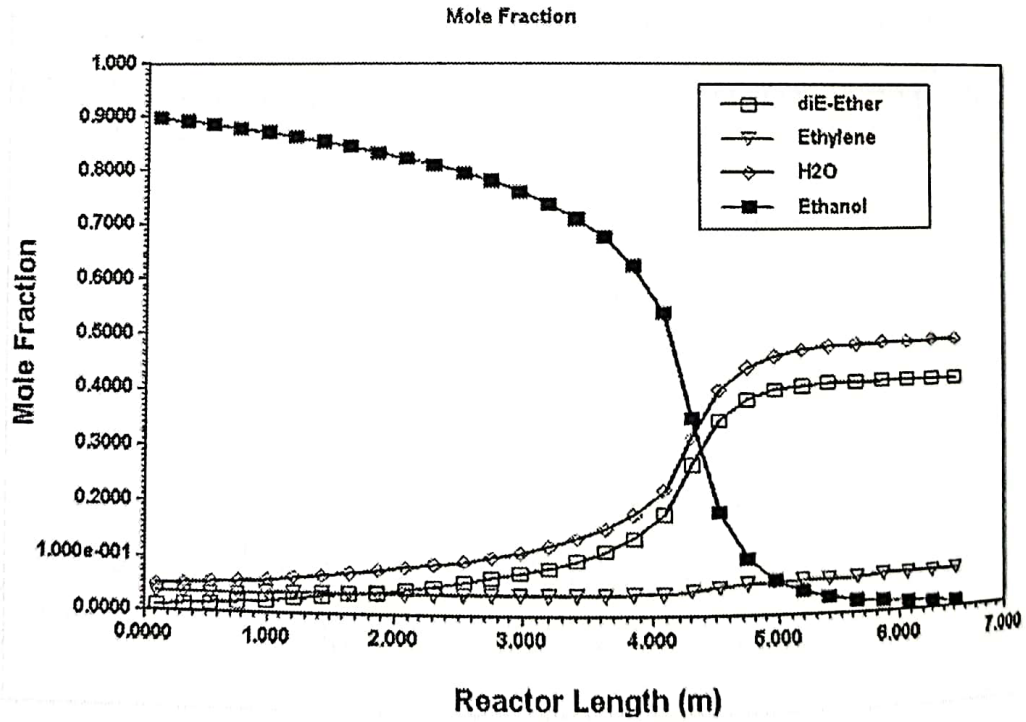
شکل ۵۸

۲-۲-۹- علاوه بر نتایج خروجی در راکتور PFR پروفایل‌های دما، فشار، غلظت، فلو، خواص ترموفیزیکی، سرعت‌های واکنش و مانند آن را می‌توانید بررسی نمایید. برای این منظور به زیرصفحه‌ی Performance / Conditions بروید و کلید Plot را بزنید و در آن گزینه‌ی Temperature را برای مانیتور کردن انتخاب نمایید(شکل ۵۹).



شکل ۵۹

۲-۲-۱۰- برای مشاهده‌ی پروفایل‌های مواد در طول راکتور به صفحه‌ی Performance / Composition بروید. ابتدا کلید Plot را بزنید و در صفحه‌ی مربوط گزینه‌ی Mole Fraction را انتخاب نمایید. در فیلد Select Component مواد لازم برای مانیتور شدن را انتخاب نمایید (شکل ۶۰).



شکل ۶۰

۲-۲-۱۱- شبیه‌سازی خود را ذخیره نمایید.

گریز ۸:

در شبیه‌سازی راکتور PFR در صورت نیاز به نکات زیر توجه کنید.

۱- دقت کنید که تنها واکنش‌های «سینتیک» و واکنش‌های «تعادلی برگشت‌پذیر» برای راکتور PFR قابل انتخاب می‌باشند.

۲- همان‌طور که گفته شد نرم‌افزار برای محاسبات مربوط به راکتور لوله‌ای، آن را به تعداد زیادی قطعات کوچک‌تر تقسیم می‌کند. در قسمت Initialize Segment Reaction From، شما برای محاسبات مربوط به این قطعات تعیین می‌کنید که:

- **Current**: محاسبات از نزدیک‌ترین حل قطعه‌ی فعلی شروع شود.
- **Previous**: محاسبات از نزدیک‌ترین حل قطعه‌ی قبلی آغاز شود.
- **Re-init**: محاسبات دوباره از اول انجام گیرد.

حالت پیش‌فرض ASPEN HYSYS حالت Current می‌باشد. این مورد در صفحه‌ی Reaction / Overall موجود است.

۳- در قسمت Integration Information جزئیات اطلاعات مربوط به انتگرال‌گیری را وارد می‌نمایید (صفحه Reaction Overall):

- در خانه‌ی Number of Segments، تعداد قطعاتی که لوله باید به آن‌ها تقسیم شود را معین می‌کنید. توجه داشته باشید که حداقل طول هر قطعه Minimum Step Length از ضرب Minimum Step Fraction در طول کلی لوله به دست می‌آید.
- نرم‌افزار ASPEN HYSYS برای محاسبات راکتور، ابتدا محاسبات را بر روی طول کامل قطعه لوله انجام می‌دهد. اگر حل، قابل دست‌رسی نباشد طول فعلی نصف شده و محاسبات برای هردو قسمت، دوباره انجام می‌گیرد. در صورت عدم کسب جواب، دوباره طول فعلی نصف می‌شود و این کار تا حصول جواب درست برای کلیه‌ی قطعات ادامه می‌یابد.
- سپس محاسبات برای طول باقی‌مانده به همین ترتیب انجام می‌گیرد.
- اگر نصف کردن طول لوله‌ها تا جایی ادامه یابد که طول قطعه، از حداقل طول هر قطعه (Minimum Step Length) که در این‌جا تعیین شده است کمتر شود، محاسبات متوقف می‌گردد.

۴- اگر شما در صفحه‌ی Rating / Sizing و در فیلد Tube Packing ضریب تخلخل ۱ را وارد کرده باشید، در صفحه‌ی Reaction / Overall این پیغام را نمایش می‌دهد که «با توجه به انتخاب ضریب تخلخل ۱، کاتالیستی تعیین نشده است». در غیر این صورت، جدول «اطلاعات کاتالیست» (Catalyst Data) ظاهر می‌شود که شما می‌باید در آن، اطلاعات زیر را وارد کنید (شکل ۶۱):

- قطر ذرات کاتالیست (Particle Diameter)

Catalyst Data

Particle Diameter	0.00200 m
Particle Sphericity	1.000
Solid Density	1800.0 kg/m3
Bulk Density	990.0 kg/m3
Solid Heat Capacity	400.000 kJ/kg-C

شکل ۶۱

- ضریب کرویت ذرات (Particle Sphericity) از تقسیم «سطح کره‌ای که هم حجم ذره باشد». بر «سطح ذره» به دست می‌آید و در فرمول Ergun که برای محاسبه‌ی افت فشار جریان، مین عبور از بستر کاتالیستی است استفاده می‌شود. بدیهی است که ضریب کرویت ذرات کروی کامل، ۱ می‌باشد.
- **دانسیته‌ی جامد (Solid Density)**: دانسیته‌ی جزء جامد ذرات می‌باشد که از تقسیم جرم ذره بر حجم کلی آن به دست می‌آید.
- **دانسیته‌ی توده (Bulk Density)**: دانسیته‌ی توده ذره می‌باشد که همواره کمتر از دانسیته‌ی جامد بوده و از فرمول زیر به دست می‌آید:
- $\rho_b = \rho_s(1-\varepsilon_{ma})$
- که در آن ρs دانسیته‌ی جامد و εma ضریب تخلخل است.
- ظرفیت گرمایی جامد (Solid Heat Capacity): برای حالت دینامیک به کار برده می‌شود.

۵- شمای صفحه‌ی انتقال حرارت بسته به انتخاب شما در قسمت SS Duty Calculation Option، حالات Formula یا Direct Q Value می‌باشد (شکل‌های ۵۳ و ۵۴).

گزینه‌ی Formula

به این وسیله نرم‌افزار ASPEN HYSYS با استفاده از معادلات زیر و روش‌های دقیق محاسباتی، توان حرارتی مربوط به هرکدام از المان‌های دیفرانسیلی را جداگانه و با استفاده از ضریب انتقال حرارت نقطه‌ای برای داخل و خارج هرکدام از لوله‌های راکتور محاسبه می‌کند (شکل ۶۲).

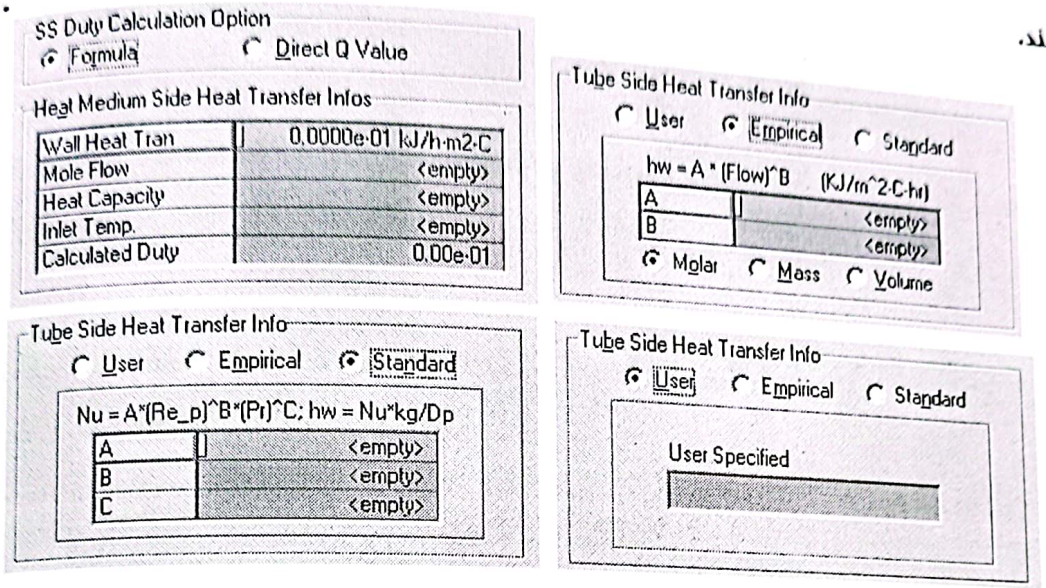
$$Q_{j=} = U_j A\left(T_{Bulk_J} - T_{Out_J}\right)$$

که در آن Q_j انتقال حرارت المان دیفرانسیلی j، U_j ضریب انتقال حرارت کلی برای المان دیفرانسیلی، A سطح لوله راکتور، T_{bulkj} گرمای توده‌ی جریان سیال داخل لوله و T_{outj} دمای سیال اطراف لوله PFR می‌باشد.

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_{Out}} + \frac{1}{h_j} + \frac{X_W}{K_m}$$

که در آن U ضریب انتقال حرارت کلی، h_{out} ضریب انتقال حرارت نقطه‌ای در خارج لوله (برای سیال اطراف لوله‌ها) و h_j ضریب انتقال حرارت نقطه‌ای داخل لوله (برای سیال داخل لوله‌ها) و X_w / K_m ترم مقاومت هدایت برای دیواره لوله (که در محاسبه نادیده گرفته می‌شود) می‌باشند. در هر المان دیفرانسیلی، گرما به صورت شعاعی بین سیال اطراف لوله‌ها و سیال داخل لوله‌های راکتور، تبادل می‌گردد. دو گروه اطلاعاتی که در

صفحه‌ی Heat Transfer وارد می‌گردند، برنامه را در محاسبه‌ی توان حرارتی بین سیال داخل و خارج لوله‌ها یاری می‌کنند.



شکل ۶۲

- در قسمت اول (Heat Medium Side Heat Transfer Infos)، شما اطلاعاتی را که برای محاسبه‌ی گرمای منتقل شده به قسمت خارجی هرکدام از المان‌های دیفرانسیلی مورد نیاز است، مشاهده می‌کنید.
  - Wall heat Transfer Coefficient (hout): مقداری برای ضریب انتقال حرارت نقطه‌ای است.

از آن‌جا که UA (و در این مورد خاص U) ضریب انتقال حرارت نقطه‌ای بوده و ثابت می‌باشد، بنابراین اعمال تغییرات روی طول، قطر و تعداد لوله‌ها (در صفحه‌ی پارامترها) که موجب تغییر A می‌شود، روی مقدار h_{out} نیز تأثیر خواهد داشت.

  - **Mole Flow (m)**: دبی جرمی سیال مورد استفاده در جریان اطراف لوله‌ها
  - **Heat Capacity (Cp)**: ظرفیت گرمایی سیال مورد استفاده در جریان اطراف لوله‌ها
  - **Inlet Temperature (T)**: دمای سیال مورد استفاده در جریان اطراف لوله‌ها، هنگام ورود به PFR.
  - **Calculated Duty (Qj)**: توان گرمایی هر المان دیفرانسیلی

فرمولی که برای محاسبه‌ی دمای سیال اطراف لوله‌ها (مربوط به هر المان دیفرانسیلی) استفاده می‌شود، عبارت است از:

$$Q_J = m\rho C_P\left(T_J - T_{J+1}\right)$$

  - در قسمت دوم (Tube Side Heat Transfer Infos) شما روشی که می‌باید برای محاسبه‌ی ضریب انتقال حرارت نقطه‌ای داخل لوله (hin) به کار برده شود را با انتخاب دکمه‌ی تک‌حالتی مناسب و تعیین پارامترهای مربوط مشخص می‌کنید:
  - **User**: مقدار ضریب انتقال حرارت را خودتان مستقیماً در خانه‌ی Specified Input وارد می‌کنید.

- **Empirical**: در این روش hj از یک معادله‌ی تجربی به فرم زیر که مقدار ضریب انتقال حرارت را به شدت جریان (Flow) سیال داخل لوله مربوط می‌کند، محاسبه می‌گردد.

$$h_j = A \times Flow^B$$

شما می‌توانید مبنای شدت جریان سیال را از بین شدت جریان مولی، جرمی یا حجمی انتخاب کنید.

- **Standard**: ضرایب مربوط به فرمول محاسبه‌ی عدد نوسلت (Nu) را تعیین می‌نمایید. این عدد سپس برای محاسبه‌ی ضریب انتقال حرارت نقطه‌ای استفاده می‌گردد.

$$N_{Nu} = A \times N_{\mathrm{Re},P}^{B} \times N_{\mathrm{Pr}}^{C}, \qquad h_J = \frac{N_{Nu} \cdot K_g}{D_P}$$

مقادیر پیش‌فرض ASPEN HYSYS برای A و B و C به شرح زیر هستند.

A = 1.6 و B = 0.51 و C = 0.33

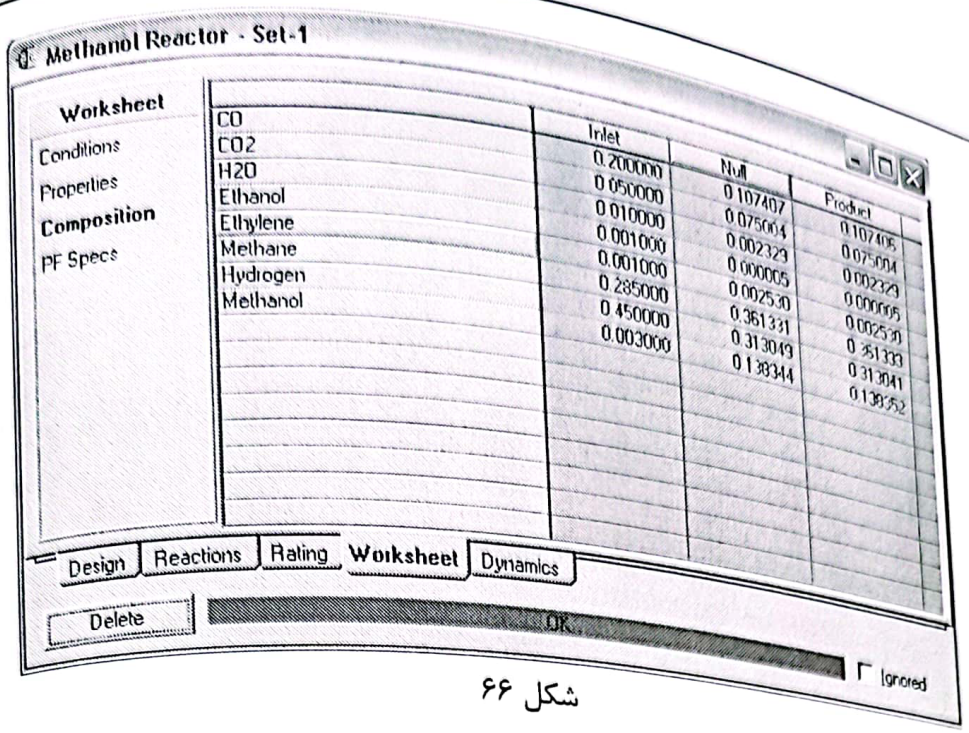
۲-۳- راکتور تعادلی (Equilibrium Reactor)

راکتور تبدیل، راکتوری است که در آن واکنش تبدیل صورت می‌گیرد، شما فقط می‌توانید مجموعه واکنش‌هایی را که تنها شامل واکنش‌های تبدیل باشند به این راکتور متصل کنید. هر واکنش تا جایی ادامه پیدا می‌کند که میزان تبدیلی که شما معین نموده‌اید حاصل شود یا ماده‌ی محدودکننده تمام شود.

در این بخش با شبیه‌سازی راکتور سنتز متانول و برخی از واکنش‌های جانبی، راکتور Equilibrium مورد بررسی قرار گرفته شده است. برای انجام این شبیه‌سازی مراحل زیر را انجام دهید.

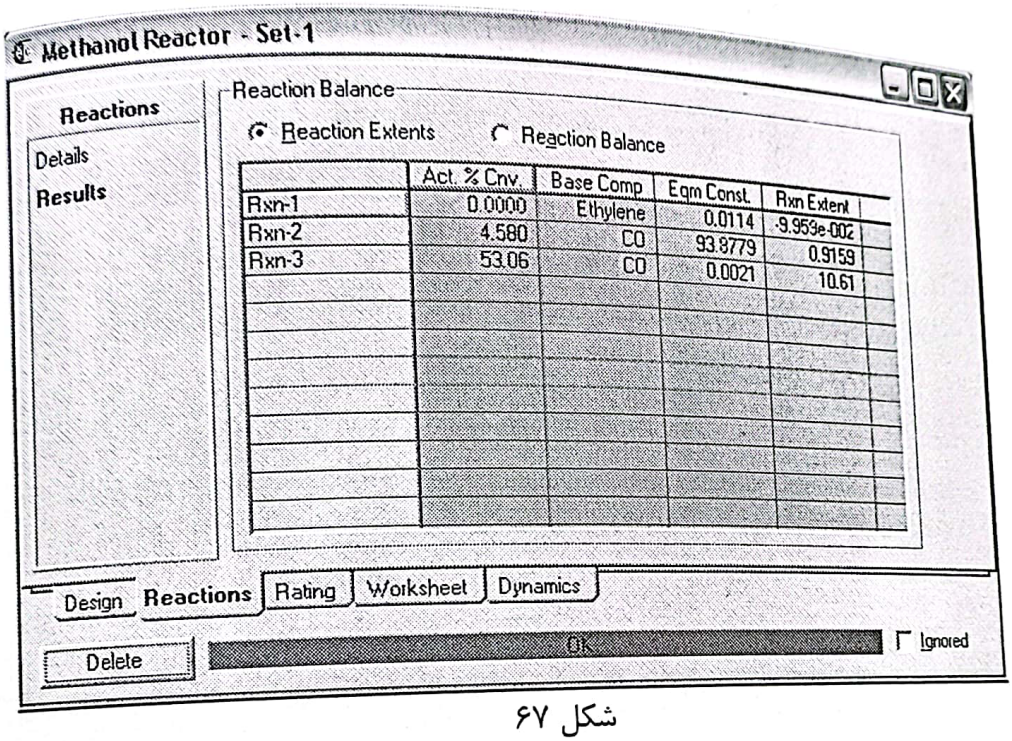
۲-۳-۱- فایل مثال ۳ را که در بخش اول با نام Equilibrium–Reactor.hsc ذخیره کرده‌اید باز کنید.

۲-۳-۲- با زدن کلید Enter to Simulation Environment در پنجره‌ی SBM به محیط PFD وارد شوید.



	Inlet	Null	Product
CO	0.200000	0.107407	0.107405
CO2	0.050000	0.075004	0.075004
H2O	0.010000	0.002329	0.002329
Ethanol	0.001000	0.000005	0.000005
Ethylene	0.001000	0.002530	0.002530
Methane	0.285000	0.361331	0.361333
Hydrogen	0.450000	0.313049	0.313041
Methanol	0.003000	0.138344	0.138352

شکل ۶۶



	Act. % Cnv.	Base Comp	Eqm Const.	Rxn Extent
Rxn-1	0.0000	Ethylene	0.0114	-9.959e-002
Rxn-2	4.580	CO	93.9779	0.9159
Rxn-3	53.06	CO	0.0021	10.61

شکل ۶۷

۲-۳-۹- شبیه‌سازی را دوباره ذخیره نمایید.

۲-۴- راکتور تبدیل (Conversion Reactor)

راکتور تبدیل، راکتوری است که در آن واکنش تبدیل صورت می‌گیرد، شما فقط می‌توانید مجموعه واکنش‌هایی را که تنها شامل واکنش‌های تبدیل باشند به این راکتور متصل کنید. هر واکنش تا جایی ادامه پیدا می‌کند که میزان تبدیلی که شما معین نموده‌اید حاصل شود یا ماده‌ی محدودکننده تمام شود.

در این بخش مثال ۴ را که در آن واکنش احتراق اتفاق می‌افتد بررسی شده است. برای انجام شبیه‌سازی با یک راکتور تبدیلی مراحل زیر را انجام دهید:

۲-۴-۱- فایل مثال ۳ را که در بخش اول با نام Conversion_Reactor.hsc ذخیره کرده‌اید باز کنید.

۲-۴-۲- با زدن کلید Enter to Simulation Environment در پنجره‌ی SBM به محیط PFD وارد شوید.

۲-۴-۳- جریان‌های Fuel و Air مطابق جداول ۶ و ۷ ایجاد نمایید.

جدول ۶

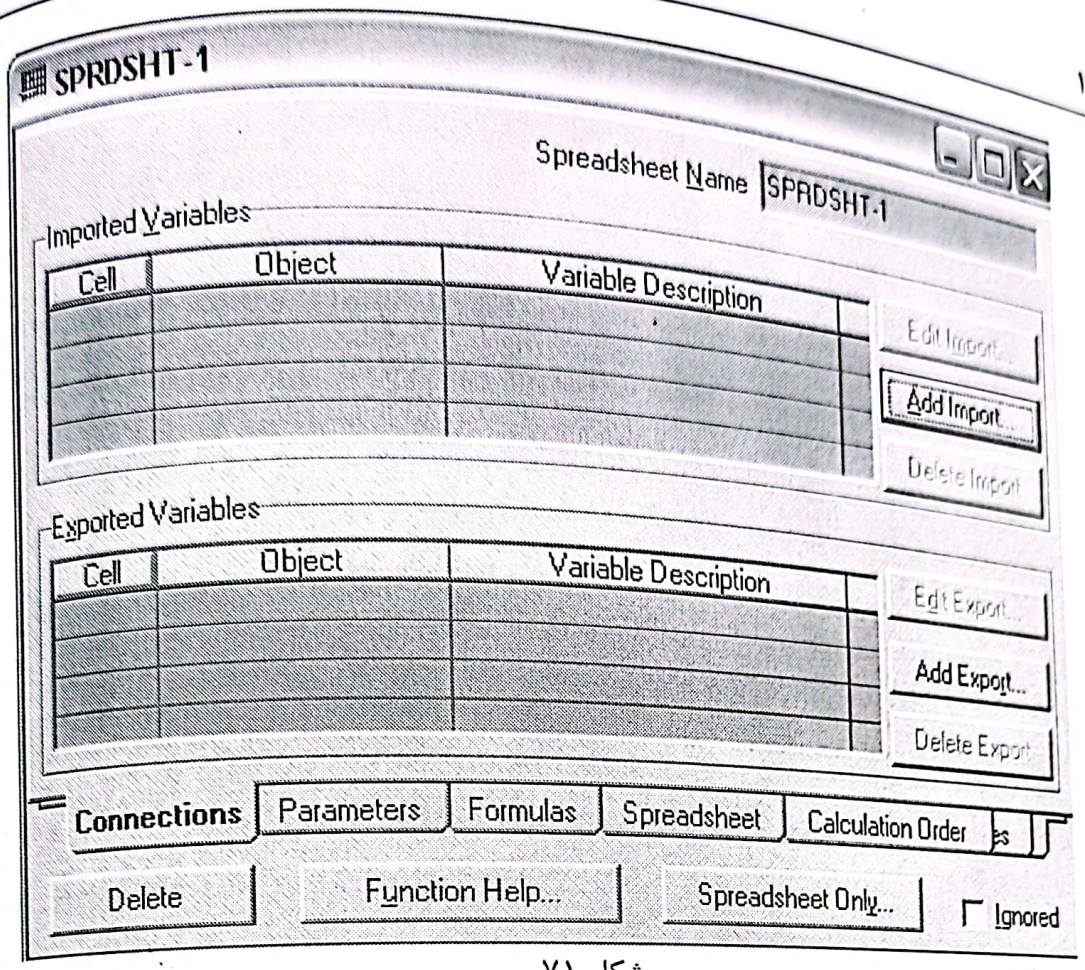
Material Streams			
		Fuel	Air
Vapour Fraction		1.0000	1.0000
Temperature	C	25.00	25.00
Pressure	kPa	150.0	150.0
Molar Flow	kgmole/h	1933	1386
Mass Flow	kg/h	3.600e+004	4.000e+004
Liquid Volume Flow	m3/h	109.9	46.24
Heat Flow	kJ/h	-1.508e+008	-1.678e+004

جدول ۷

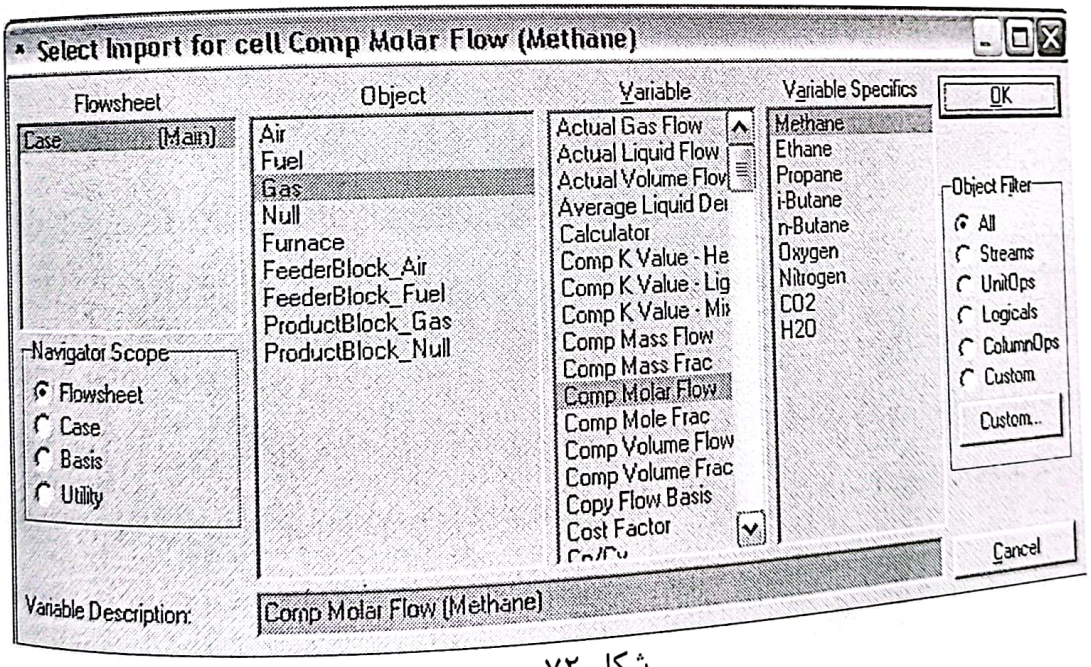
Compositions		
	Fuel	Air
Comp Mole Frac (Methane)	0.918367	+0.000000
Comp Mole Frac (Ethane)	0.020408	+0.000000
Comp Mole Frac (Propane)	0.020408	+0.000000
Comp Mole Frac (i-Butane)	0.020408	+0.000000
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.020408	+0.000000
Comp Mole Frac (Oxygen)	+0.000000	0.210000
Comp Mole Frac (Nitrogen)	+0.000000	0.790000
Comp Mole Frac (CO2)	+0.000000	+0.000000
Comp Mole Frac (H2O)	+0.000000	+0.000000

۲-۴-۴- مطابق شکل ۶۸ راکتور Conversion را در PFD گذاشته و جریان‌های مربوط را تعریف نمایید.

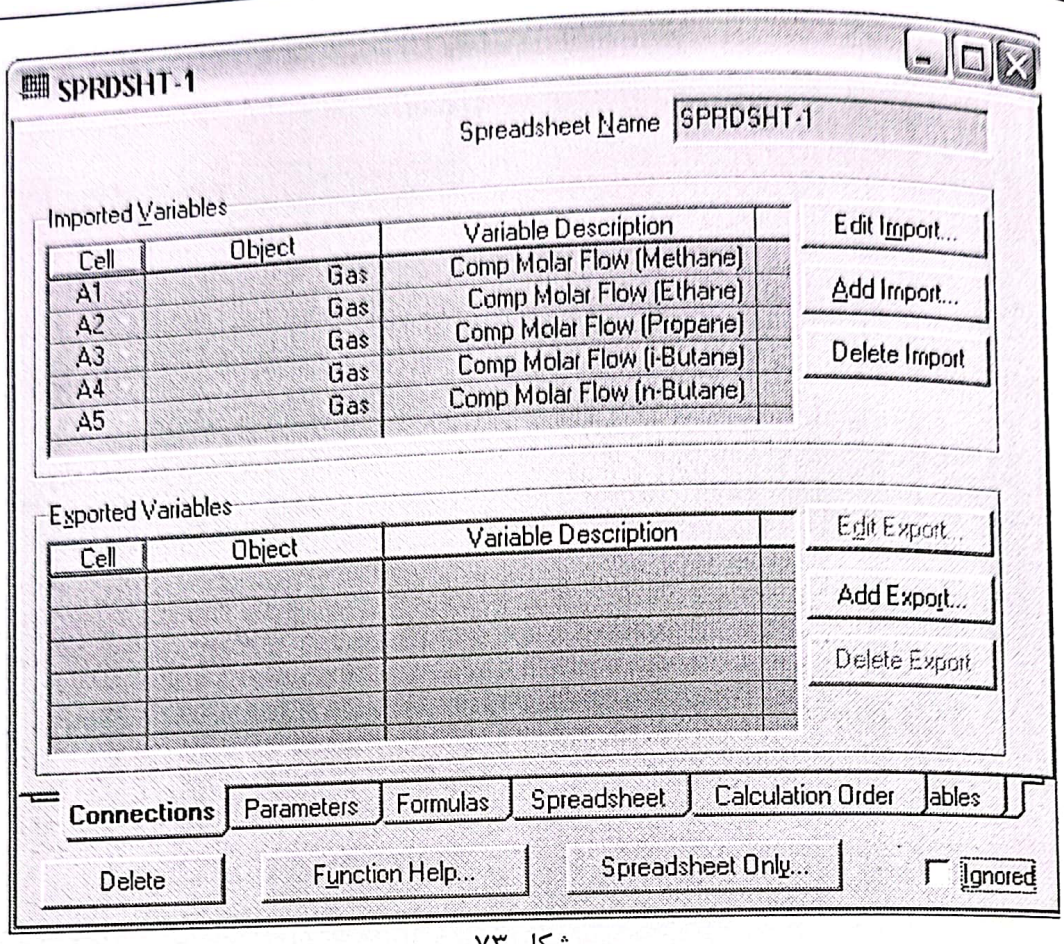
۲-۴-۵- به زیرصفحه‌ی Reaction / Details بروید و در آن دسته واکنش مربوط را انتخاب کنید (فقط یک انتخاب وجود دارد). از آن‌جا که همانند راکتور تعادلی نیازی به وارد کردن اندازه‌ی راکتور در شبیه‌سازی Steady – State نیست بنابراین برنامه با توجه به فعال بودن Solver شبیه‌سازی را انجام خواهد داد.


SPRDSHT-1
Spreadsheet Name
SPRDSHT-1
Imported Variables
Cell
Object
Variable Description
Edit Import...
Add Import...
Delete Import
Exported Variables
Cell
Object
Variable Description
Edit Export...
Add Export...
Delete Export
Connections
Parameters
Formulas
Spreadsheet
Calculation Order
Delete
Function Help...
Spreadsheet Only...
Ignored

شکل ۷۱

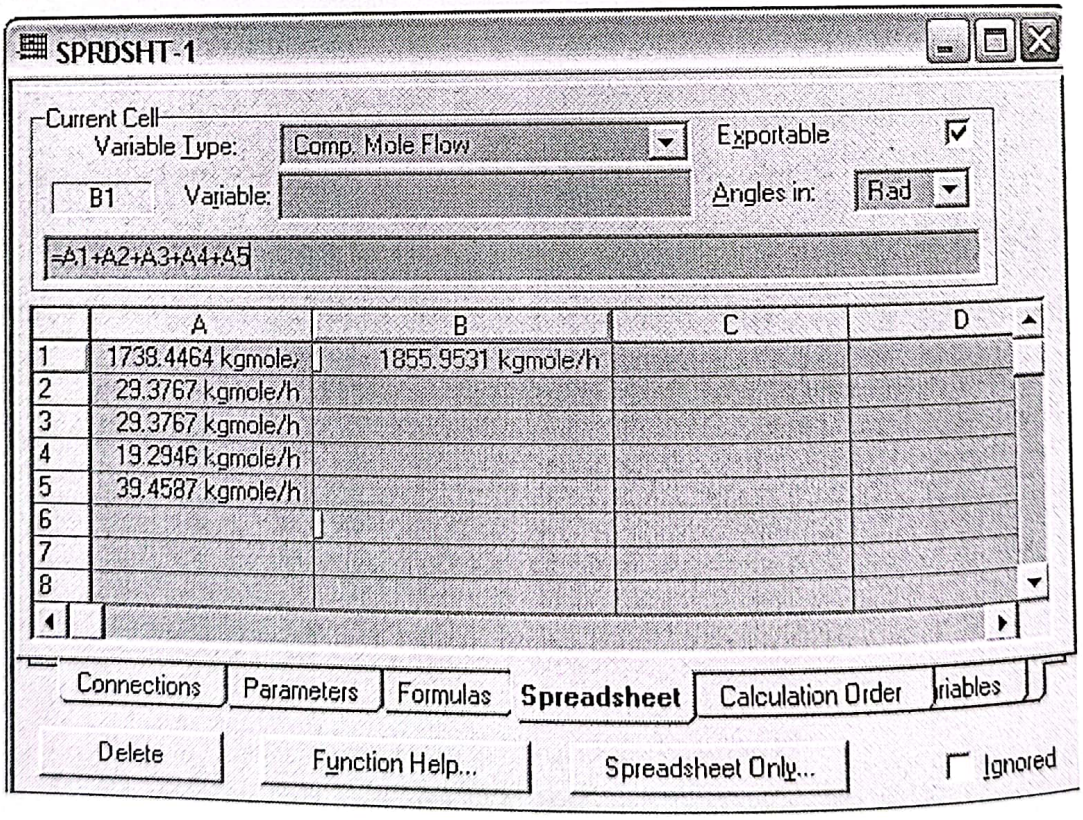

Select Import for cell Comp Molar Flow (Methane)
Flowsheet
Case (Main)
Navigator Scope
Flowsheet
Case
Basis
Utility
Object
Air
Fuel
Gas
Null
Furnace
FeederBlock_Air
FeederBlock_Fuel
ProductBlock_Gas
ProductBlock_Null
Variable
Actual Gas Flow
Actual Liquid Flow
Actual Volume Flow
Average Liquid Den
Calculator
Comp K Value - He
Comp K Value - Lig
Comp K Value - Mix
Comp Mass Flow
Comp Mass Frac
Comp Molar Flow
Comp Mole Frac
Comp Volume Flow
Comp Volume Frac
Copy Flow Basis
Cost Factor
Variable Specifics
Methane
Ethane
Propane
i-Butane
n-Butane
Oxygen
Nitrogen
CO2
H2O
OK
Object Filter
All
Streams
UnitOps
Logicals
ColumnOps
Custom
Custom...
Cancel
Variable Description:
Comp Molar Flow (Methane)

شکل ۷۲



شکل ۷۳

۲-۴-۱۱- به زیرصفحه‌ی Spreadsheet از پنجره‌ی Spreadsheet بروید و در آن خانه‌ی B1 را به صورت حاصل جمع A1 تا A5 تعریف نمایید (شکل ۷۴).

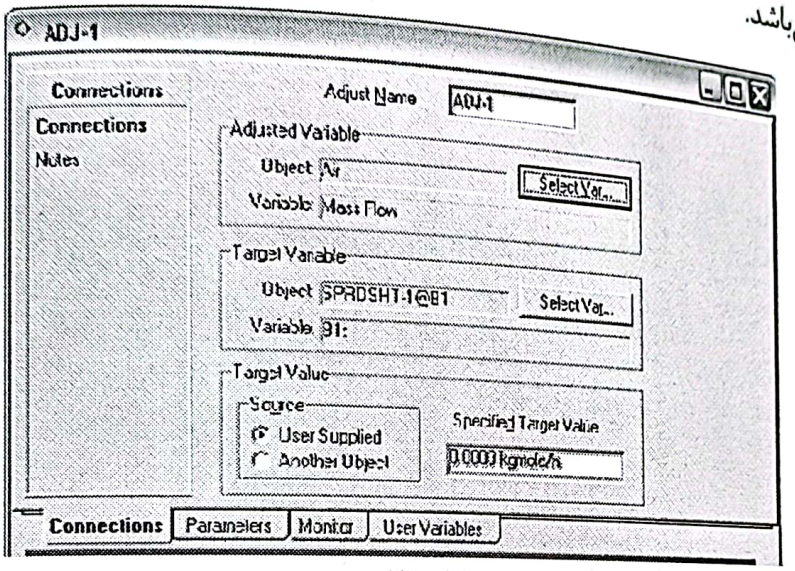


شکل ۷۴

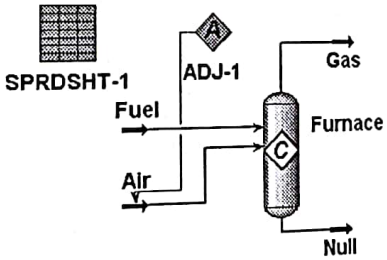
۲-۴-۱۲- به PFD برگردید و در آن یک لاجیک Adjust اضافه نمایید.

۲-۴-۱۳- به پنجره‌ی Adjust رفته، صفحه‌ی Connections را مطابق شکل ۷۵ تکمیل کنید. در این صورت PFD به صورت شکل ۷۶ در خواهد آمد.

پارامتری که باید تغییر کند میزان دبی جرمی هوا و متغیر هدف، میزان گازهای سوختی است که از کوره خارج می‌گردد و باید به صفر برسد. میزان هوای محاسبه‌شده در این بخش میزان اکسیژن استوکیومتری می‌باشد.



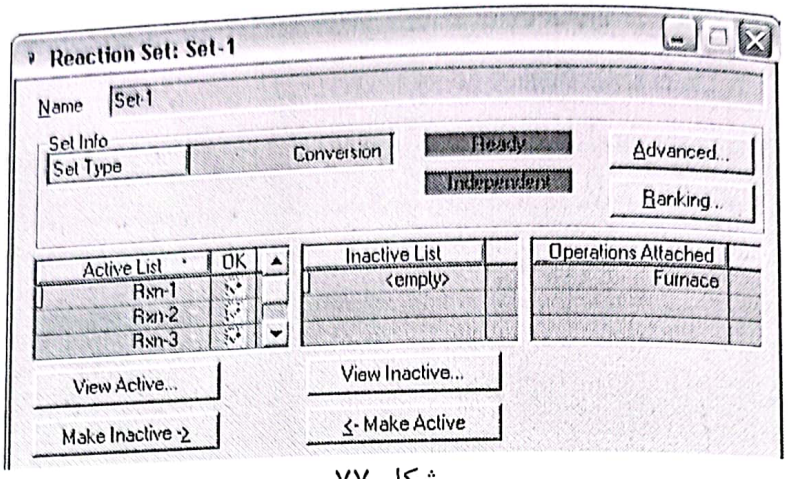
شکل ۷۵



شکل ۷۶

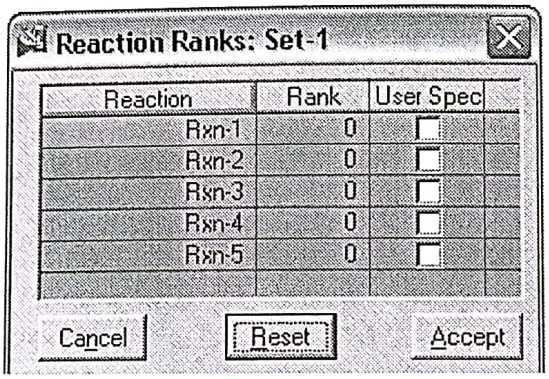
گزینه ۱:

وقتی واکنش‌های تبدیلی مطرح می‌شوند تقدم و تأخر در انجام واکنش‌ها مطرح می‌گردد. گزینه‌ای در پنجره‌ی Set به نام Ranking وجود دارد که برای همین موضوع و برای تعیین ترتیب انجام واکنش‌ها در نظر گرفته شده است.



شکل ۷۷

با فشردن این دکمه پنجره‌ی Reaction Ranks باز می‌گردد که می‌توانید ترتیب واکنش‌ها را در آن معین کنید (شکل ۷۷).

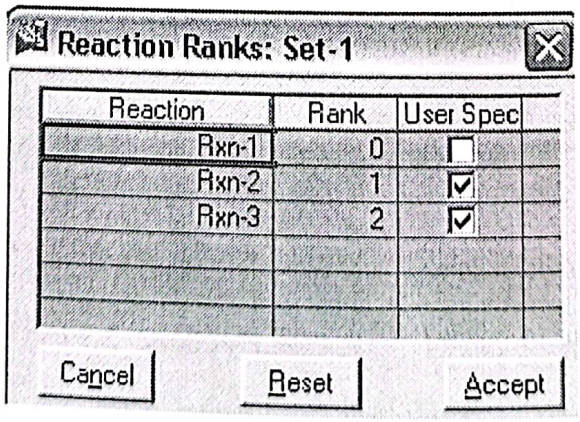


شکل ۷۸

این موضوع هنگامی اهمیت دارد که مجموعه‌ای از واکنش‌های پشت سرهم یا موازی در یک راکتور صورت می‌پذیرد. برای مثال واکنش‌های زیر را در نظر بگیرید.

$$Rxn-1: A \rightarrow B \quad Rxn-2: B \rightarrow C \quad Rxn-3: C \rightarrow D$$

در این حالت می‌باید ترتیب واکنش‌ها به صورت زیر باشد. توجه کنید که واکنش‌های با درجه‌ی (Rank) پایین‌تر، اول انجام می‌شوند.



شکل ۷۹

یا مثلاً در مورد واکنش‌های زیر

$$Rxn-4: A+B \rightarrow C \qquad Rxn-5: B+D \rightarrow E$$

باید توجه داشته باشید که اگر واکنش ۴ اول صورت گیرد، درصد تبدیل واکنش ۵ تنها بر مقداری از ماده‌ی B که پس از تکمیل واکنش ۴ باقی مانده است اعمال می‌گردد. اگر تنظیم ترتیب واکنش‌ها توسط شما صورت نگیرد، ASPEN HYSYS با توجه به محصولات و مواد اولیه‌ی واکنش‌ها، در صورت لزوم عمل مرتب‌سازی را انجام می‌دهد.

برای مثال در مورد واکنش‌های زیر:

$$CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2 \qquad (1)$$
$$CH_4 + 2H_2O \rightarrow CO_2 + 4H_2 \qquad (2)$$
$$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O \qquad (3)$$

با توجه به این که محصول واکنش ۳ یعنی H_2O در دو واکنش دیگر به عنوان ماده‌ی اولیه شرکت کرده است و تا H_2O موجود نباشد واکنش ۲ و ۱ صورت نمی‌گیرد، بنابراین ASPEN HYSYS به صورت خودکار به واکنش ۳ درجه‌ی 0 و به دو واکنش دیگر متحداً درجه‌ی 1 می‌دهد. تنها توضیح باقی‌مانده در مورد پنجره‌ی Reaction Rank این است که در صورت فشردن دکمه‌ی Reset، مقادیر Rank به مقادیر پیش‌فرض اولیه تغییر می‌یابد. همچنین با فشردن دکمه‌ی Zero کلیه درجات Rank صفر می‌گردند.

در نهایت این که در صورت تعیین مقدار Rank یک واکنش در ستون User Spec در مربع مربوط علامت ضرب قرار می‌گیرد؛ به این معنی که درجه‌ی ترتیب این واکنش، توسط کاربر تعیین شده است.

۲-۵- راکتور گیبس (Gibbs Reactor):

راکتور گیبس (Gibbs Reactor) راکتوری است که جریان خروجی را به شکلی محاسبه می‌کند که به تعادل شیمیایی و فیزیکی رسیده باشد؛ بنابراین ضرورتاً نیازی به استوکیومتری واکنش ندارد چون خروجی به شکلی محاسبه می‌شود که در نهایت، حداقل انرژی آزاد گیبس را دارا باشد.

قابلیت تطبیق‌پذیری راکتور گیبس به آن اجازه می‌دهد که به سه صورت به کار برده شود:

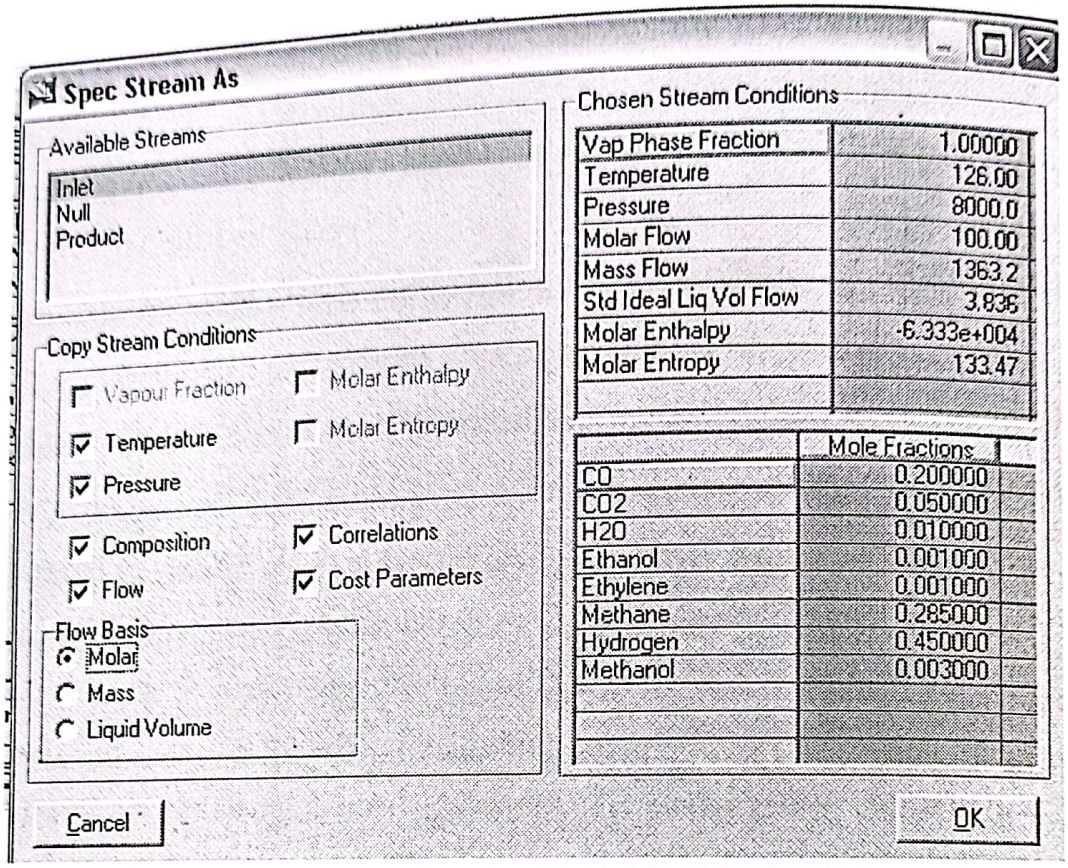
- همانند یک جدا کننده (Separator)؛
- همانند یک راکتور که بدون انجام واکنش، انرژی آزاد گیبس را به حداقل کاهش می‌دهد؛
- و یا همانند راکتور تعادلی با قبول یک واکنش تعادلی.

برای کار کردن با این راکتور از مثال شبیه‌سازی‌شده در بخش ۲-۳ استفاده خواهد شد. مراحل زیر را انجام دهید.

۲-۵-۱- فایل ذخیره‌شده در بخش ۲-۳ را با نام Equilibrium–Reactor.hsc باز کنید.

۲-۵-۲- جریان 'Inlet' را در PFD قرار دهید و مشخصات آن را از جریان Inlet کپی نمایید. برای کپی کردن در پنجره‌ی جریان 'Inlet' کلید Define from Other Stream را بزنید. طی پنجره‌ی Spec Stream As

مطابق شکل ۷۹ با انتخاب جریان Inlet در فیلد Available Streams و قبول گزینه‌های پیش‌فرض، کلید OK را بزنید.



شکل ۸۰

۲-۵-۳- مطابق شکل ۸۰ راکتور Gibbs را از Palette انتخاب کرده و در PFD قرار دهید و سپس جریان‌های مربوط را به آن وصل نمایید. دمای جریان خروجی 'Product را همانند جریان Product، ۲۴۵ درجه‌ی سانتی‌گراد وارد کنید.

در این صورت شبیه‌سازی شروع شده و هم‌گرا می‌شود. دلیل این امر آن است که اطلاعات پیش‌فرض برای شبیه‌سازی کامل است.

۲-۵-۴- به زیرصفحه‌ی Design / Parameter رفته و در آن نوع انتقال حرارت را Cooling انتخاب نمایید.

۲-۵-۵-به زیرصفحه‌ی Reactions / Overall بروید. به صورت پیش‌فرض، گزینه‌ی Gibbs Reaction Only انتخاب شده است. زمانی از این گزینه استفاده می‌شود که هیچ‌گونه اطلاعاتی از استوکیومتری واکنش‌ها وجود نداشته باشد.

گزینه ۱:

سه گزینه در این بخش (Reaction / Overall) وجود دارد:

۱- Gibbs Reaction Only

خروجی به شکلی محاسبه می‌شود که ضمن رسیدن به تعادل فیزیکی و شیمیایی، انرژی آزاد گیبس آن حداقل باشد، بنابراین نیازی به اتصال واکنش نیست.

۲- Specify Equilibrium Reactions

انتخاب این گزینه باعث می‌شود که قسمت Reaction Parameters ظاهر گردد. هنگامی که یک واکنش را جهت اتصال به راکتور انتخاب می‌کنید؛ خروجی راکتور گیبس با توجه به استوکیومتری واکنش معرفی‌شده محاسبه می‌شود. کاستن از انرژی آزاد گیبس تا حالت حداقل، با استفاده از میزان پیشرفت واکنش صورت می‌گیرد.

۳- NO Reactions (= Separator)

راکتور مانند یک جداکننده (که تنها تعادل فازی را در خروجی ایجاد می‌کند) فرض می‌شود.

۲-۵-۳- می‌توانید نتایج هردو راکتور را در این بخش مقایسه کنید. برای مقایسه، جدول جریان Product و Product' را با هم مقایسه نمایید (جدول ۸). هم‌چنین میزان جریان‌های انرژی را با هم مقایسه کنید.

جدول ۸

Product		
Temperature	245.0	C
Pressure	8000	kPa
Molar Flow	78.87	kgmole/h
Comp Molar Flow (CO)	8.4716	kgmole/h
Comp Molar Flow (CO2)	5.9159	kgmole/h
Comp Molar Flow (H2O)	0.1837	kgmole/h
Comp Molar Flow (Ethanol)	0.0004	kgmole/h
Comp Molar Flow (Ethylene)	0.1996	kgmole/h
Comp Molar Flow (Methane)	28.5000	kgmole/h
Comp Molar Flow (Hydrogen)	24.6910	kgmole/h
Comp Molar Flow (Methanol)	10.9124	kgmole/h

Product'		
Temperature	245.0	C
Pressure	8000	kPa
Molar Flow	67.79	kgmole/h
Comp Molar Flow (CO)	0.0006	kgmole/h
Comp Molar Flow (CO2)	8.9449	kgmole/h
Comp Molar Flow (H2O)	13.5097	kgmole/h
Comp Molar Flow (Ethanol)	0.0000	kgmole/h
Comp Molar Flow (Ethylene)	0.0000	kgmole/h
Comp Molar Flow (Methane)	45.2546	kgmole/h
Comp Molar Flow (Hydrogen)	0.0812	kgmole/h
Comp Molar Flow (Methanol)	0.0000	kgmole/h

۲-۵-۴- به زیرصفحه‌ی Reactions / Overall بروید و در آن گزینه‌ی Specify Equilibrium Reactions را انتخاب نمایید. در فیلد Equilibrium Reaction Sets برای فهرست Reaction Sets دسته واکنش Set-1 را انتخاب نمایید. در این صورت شبیه‌سازی دوباره اجرا خواهد شد.

گریز ۱۲:

زیرصفحه‌ی Reaction Details

در این زیرصفحه شما می‌توانید در مورد هرکدام از ترکیبات، شدت جریان ورودی و خروجی (Total Feed / Total Prod) را نمایش دهید. علاوه بر آن می‌توانید در ستون Inerts مشخص کنید که ترکیب مزبور به عنوان ترکیب بی‌اثر در نظر گرفته شود یا خیر. ترکیب بی‌اثر در محاسبات مربوط به انرژی آزاد گیبس در نظر گرفته نمی‌شود.

در صورت انتخاب یک ماده به عنوان ماده‌ی بی‌اثر، می‌باید برای آن در ستون Frsc Spec مقداری بین ۰ تا ۱ که ترکیب درصد آن را در جریان ورودی مشخص می‌کند وارد کنید. هم‌چنین مقدار Fixed Spec که میزان شدت جریان (ثابت) آن را نشان می‌دهد، می‌باید با شدت جریان ترکیب مزبور در خوراک و محصول مساوی باشد تا عدم دخالت آن را در واکنش نشان دهد.

امکان دارد شما بخواهید که میزان تولید هرکدام از ترکیبات را (به عنوان یک پارامتر مشخص در محاسبه‌ی ترکیب تعادلی در خروجی) تعیین کنید. در این صورت، شدت جریان ترکیب مزبور در محصول (با استفاده از مقادیر Fixed Spec و Frac Spec که شما تعیین می‌کنید)، به شکل زیر محاسبه می‌شود:

Total Prod = Frac Spec. Total Feed + Fixed Spec

راکتور گیبس تلاش می‌کند تا در محاسبه‌ی ترکیب تعادلی خروجی به این مقدار برسد. در صورتی که امکان رسیدن به این مقدار وجود نداشته باشد، پیغام خطای مناسب اعلام می‌گردد.

گزینه‌ی جدول اتمی (Atom Matrix)

در جدول این صفحه شما می‌توانید فرمول شیمیایی هرکدام از ترکیبات که فرمول آن برای نرم‌افزار ناشناخته است را وارد کنید.

این قابلیت عمدتاً در موقع کار با ترکیبات پیچیده مفید می‌باشد. اطلاعات مربوط به سایر ترکیباتی که توسط نرم‌افزار شناخته شده‌اند در این جدول توسط خود نرم‌افزار تکمیل می‌گردد. شما می‌توانید در صورتی که اطلاعات اتمی هرکدام از ترکیبات غلط باشد، خودتان آن را اصلاح کنید. اطلاعات واردشده در این صفحه برای محاسبات مربوط به تخمین انرژی آزاد گیبس لازم می‌باشند.