

تقدیم به تمامی دانشجویانمان گذشته، حال و آینده

و با تشکر و قدردانی ویژه از زحمات بی شائبه و دلسوزانه استاد فرزانه

پروفسور منصور طاهری انارکی

که همیشه در قلب ها خواهد ماند.

مقدمه مؤلفان

سپاس بیکران پروردگار جهانیان را که به ما قدرت تعلیم و تعلم عطا نمود و درود بی پایان به تمامی شهدای راه حقیقت. خداوند را شاکریم که به ما توفیق نگارش و چاپ این کتاب را پس از ۶ سال تحقیق و تدریس عطا نمود. این کتاب برای علاقه مندان به تقطیر چند جزئی به دلیل عدم وجود منبع علمی فارسی در این زمینه به رشته تحریر درآمده است و قابل استفاده برای دانشجویان لیسانس، فوق لیسانس و دکترا می باشد. این کتاب شامل چهار بخش است. در بخش اول که شامل سه فصل بوده، تعادل که از اصول اولیه جداسازی و تقطیر است و همچنین جداکننده‌های دوفازی و سه‌فازی مورد بررسی قرار گرفته است زیرا قبل از اینکه برج تقطیر بوجود بیاید از جداکننده‌های دوفازی و سه‌فازی استفاده می‌شد اما امروزه از این تجهیزات در کنار برج‌های تقطیر و در مواردی که ضرایب فراریت مواد تفاوت زیادی با هم داشته باشند مورد استفاده قرار می‌گیرند.

در فصل‌های بعد جداسازی مخلوط‌های چند جزئی توسط برج تقطیر مورد بررسی قرار گرفته است. با توجه به دقت لازم جهت محاسبات، روش‌های حل مسائل تقطیر چند جزئی به دو دسته تقسیم می‌شوند.

۱- روش‌های میان‌بر

۲- روش‌های دقیق

با استفاده از روش‌های میان‌بر، با تخمین خوبی حداقل جریان برگشتی به برج، تعداد مراحل تعادلی و توزیع محصولات بین بالا و پایین برج را می‌توان بدست آورد. اما این طراحی برای بدست آوردن قیمت اولیه تجهیزات مفید است و جهت طراحی و ساخت دستگاه‌ها حتماً باید از روش‌های دقیق استفاده نمود. بخش دوم این کتاب شامل هشت فصل می باشد و روش‌های میان‌بر بررسی شده است. روش‌های میان‌بر توسط محققان زیادی مورد بررسی قرار گرفته که هر روش در یک فصل مورد بررسی قرار گرفته است. این فصل‌ها طوری طراحی شده‌اند که ارتباطی با یکدیگر ندارند تا اساتید محترم بنا بر صلاحدید بتوانند فصل-هایی را برای تدریس انتخاب نمایند. در آخرین فصل این بخش، بهینه‌سازی برج‌های تقطیر مورد بررسی قرار گرفته است.

در بخش سوم که شامل پنج فصل می‌باشد روش‌های دقیق مورد بررسی قرار گرفته‌اند. از آنجا که برای حل دقیق برج‌های تقطیر باید تعداد متغییرهای لازم برای حل مشخص شود، ابتدا درجه آزادی سیستم‌ها بررسی شده و سپس روش‌های حل دقیق برای برج‌های معمولی، برج‌های متصل به هم، برج تقطیر آزنوتروپی و برج تقطیر استخراجی مورد بررسی قرار گرفته است.

برای جداسازی مواد به صورت تقریباً خالص و همچنین برای جداسازی برش‌های مختلف از نفت خام لازم است که مجموعه‌ای از برج‌ها در کنار یکدیگر قرار داشته باشند. نحوه قرار گرفتن این برج‌ها در کنار یکدیگر و تجهیزات بکار رفته بین برج‌ها، می‌تواند تاثیر بسیار زیادی در هزینه‌ها داشته باشد. برای این منظور در بخش چهارم نحوه آرایش برج‌ها و بهینه‌سازی فرآیندها به صورت مختصر توضیح داده شده و نحوه آرایش برج‌ها

توسط مفاهیم اولیه تقطیر طراحی می گردند و در انتها از مفهوم بازده ترمودینامیکی جهت بهینه سازی فرآیندها استفاده شده است.

در اینجا بر خود لازم می دانیم از دوست ارجمندمان جناب آقای دکتر محمد حسن وکیلی که با مرور و ویرایش کتاب و دست نوشته ها دیدگاه ها و نظرات با ارزشی ارائه نموده اند سپاسگزاری گردد. از مهندس علی قاسمی، مهندس امیر حسین احسانی و مهندس محمد عظیمی کیا که در مراحل مختلف این اثر کمک نموده اند تشکر و قدردانی می گردد. همچنین از تمامی مسئولان و کارکنان انتشارات یزدا بالاخص جناب مهندس محمد حسین دهقان به دلیل کمکهای بی دریغشان تشکر و قدردانی به عمل می آید.

امیدواریم اساتید و دانشجویان عزیز با راهنمایی های ارزنده خود ما را در جهت بهبود کیفی این کتاب یاری نموده تا در چاپ های بعدی با کیفیتی بهتر تقدیم حضورتان گردد.

سامان موسویان - داود عشوری

m_c_distillation@yahoo.com

فهرست مطالب

۱	بخش اول : جداکننده ها (Separators)
۲	فصل اول : تعادل مایع بخار در سیستم چند جزئی
۲	مقدمه
۲	تعادل مایع- بخار
۹	منابع
۱۱	فصل دوم : تبخیر ناگهانی در سیستم های چند جزئی
۱۱	مقدمه
۱۱	فرآیند تبخیر ناگهانی
۱۶	حل همزمان سیستم های چند جزئی
۲۱	منابع
۲۲	مسائل
۲۶	فصل سوم : سیستم های چند فازی
۲۶	مقدمه
۲۶	سیستم چند فازی
۲۷	روش تخمینی برای سیستم مایع - بخار- جامد
۲۹	روش تخمینی سیستم مایع- مایع - بخار
۳۲	روش دقیق برای حل سیستم های بخار- مایع- مایع
۳۶	منابع
۳۶	مسائل
۳۸	بخش دوم : روشهای میانبر (Short Cut Method)
۳۹	فصل چهارم : روش فنسکی- آندروود- گیلیلاند
۳۹	مقدمه
۴۱	انتخاب کلید برای حل مسائل چند جزئی
۴۶	تخمین بازیابی اجزاء غیر کلیدی
۴۶	فشار برج و انتخاب کندانسور
۴۸	حداقل تعداد مراحل تعادلی
۵۳	توزیع اجزاء غیر کلیدی
۵۳	توزیع اجزاء غیر کلیدی در جریان برگشتی کامل (روش فنسکی و روش وین)
۵۶	توزیع اجزاء غیر کلیدی (روش هنگستیک- گدس)
۵۸	توزیع اجزاء غیر کلیدی (روش یاوس و همکاران)
۶۶	مینیمم جریان برگشتی به برج
۷۸	توزیع اجزاء غیر کلیدی در جریان برگشتی واقعی
۸۰	محاسبه حداقل جریان برگشتی به برج (R_{Min}) بدون در نظر گرفتن توزیع اجزاء
۸۰	روش آندروود (سیستم های اجزاء مجاور)
۸۵	روش آندروود (سیستم های اجزاء میانی)
۸۹	محاسبه حداقل جریان برگشتی (روش کلبرن)
۹۵	روش آندروود برای ضریب فراریت متغییر (سیستم های اجزاء مجاور)
۹۵	رابطه تجربی شیبیل- مونتروس

۹۸	روش چائو و یاوس
۱۰۴	تعداد مراحل تعادلی در نسبت های جریان برگشتی واقعی
۱۰۴	روش گیلیلاند
۱۱۳	روش براون و مارتین
۱۱۶	روش ادولج
۱۱۶	تعداد مراحل واقعی
۱۱۷	محل سینی خوراک
۱۲۰	موازنه انرژی حول برج
۱۲۲	منابع
۱۲۳	مسائل
۱۲۹	فصل پنجم : روش ادمیستر
۱۲۹	مقدمه
۱۲۹	روش ادمیستر
۱۳۳	برجهای جذب
۱۴۳	برج دفع
۱۵۰	استخراج مایع- مایع
۱۵۵	حل سیستم های غیر همسو پیچیده با روش ادمیستر
۱۶۲	تقطیر
۱۶۹	منابع
۱۶۹	مسائل
۱۷۴	فصل ششم : روش تخمینی سینی به سینی
۱۷۴	مقدمه
۱۷۴	روش محاسبه سینی به سینی
۱۷۴	محاسبات بخش پالایش
۱۷۵	محاسبات بخش دفع
۱۷۹	شرایط حرارتی خوراک
۱۷۹	حداقل جریان برگشتی
۱۸۲	محاسبات سینی به سینی
۱۸۶	راندمان سینی
۱۸۷	منابع
۱۸۸	فصل هفتم : روش اسمیت
۱۸۸	مقدمه
۱۸۸	روش اسمیت
۱۹۰	بدست آوردن رابطه روش میانبر اسمیت - برینکلی
۱۹۲	فرآیندهای ساده
۱۹۴	تقطیر
۲۰۲	منابع
۲۰۳	مسائل
۲۰۵	فصل هشتم : روش لویس- ماتسون
۲۰۵	مقدمه

۲۰۵	روش لويس - ماتسون
۲۰۷	انتخاب اجزاء کلیدی
۲۰۷	روش حل
۲۱۲	محل بهینه سینی خوراک
۲۱۳	محاسبات سینی به سینی مربوط به بالای برج
۲۱۴	محاسبات سینی به سینی مربوط به پایین برج
۲۲۱	منابع
۲۲۲	مسائل
۲۲۳	فصل نهم : روش ترسیمی هنگستیک
۲۲۳	مقدمه
۲۲۳	روش ترسیمی هنگستیک
۲۲۳	معادلات اساسی
۲۲۴	الگوی دبی اجزاء در طول برج
۲۲۶	دبی محدود
۲۲۹	منحنی تعادل
۲۳۱	حداقل جریان برگشتی به برج
۲۳۲	خط خوراک
۲۳۳	منابع
۲۳۴	فصل دهم : روش تیلی - گدس
۲۳۴	مقدمه
۲۳۴	محاسبات سینی به سینی
۲۳۸	انتخاب حدس جدید برای دما، دبی مایع و دبی بخار
۲۴۰	شرط همگرایی
۲۴۹	منابع
۲۵۰	فصل یازدهم : بهینه سازی نسبت جریان برگشتی و تعداد سینی ها
۲۵۰	مقدمه
۲۵۰	روش وینکل و تاد
۲۵۲	فرمولاسیون
۲۶۳	منابع
۲۶۳	مسائل
۲۶۵	بخش سوم : روش های دقیق (Exact Solution)
۲۶۶	فصل دوازدهم : درجه آزادی برای سیستم های جداسازی
۲۶۶	مقدمه
۲۶۶	مشخص کردن متغیرهای طراحی
۲۶۷	متغیرهای جریان
۲۶۸	مرحله تعادلی آدیباتیک
۲۶۹	یک مرحله تعادلی با انتقال حرارت شامل خوراک و جریان جانبی
۲۷۱	کندانسور و جوش آور
۲۷۳	مخلوط کننده ، تقسیم کننده جریان و جداکننده
۲۷۸	ترکیب اجزاء سیستم با استفاده از الگوریتم شمارش

۲۸۰	روش هانسون برای بدست آوردن درجه آزادی
۲۸۱	درجه آزادی برای یک واحد پیچیده
۲۸۹	مشخص کردن متغیرهای طراحی
۲۹۲	منابع
۲۹۳	مسائل
۳۰۲	فصل سیزدهم : روش MESH
۳۰۲	مقدمه
۳۰۲	مدل یک مرحله تعادلی تئوری
۳۰۷	استراتژی کلی برای حل ریاضی معادلات MESH
۳۰۸	روش حل معادلات
۳۰۸	الگوریتم ماتریس سه قطری
۳۱۰	روش BP برای تقطیر
۳۲۷	روش SR برای برج جذب و برج دفع
۳۲۹	اعمال روش نیوتن رافسون
۳۳۶	روش مجموع جریان های همدم (ISR) برای استخراج مایع-مایع
۳۴۲	روش اصلاح همزمان
۳۴۳	روش نیوتن رافسون
۳۵۷	منابع
۳۵۸	مسائل
۳۷۰	فصل چهاردهم : روش همگرایی θ
۳۷۰	مقدمه
۳۷۰	بسط و کاربرد روش همگرایی θ برای برجهای تقطیر معمولی
۳۷۱	معادلات لازم برای توصیف برج تقطیر معمولی
۳۷۵	فرمولاسیون و کاربرد روش همگرایی θ ، روش ثابت تعادل (k_b) و روش غلظت ثابت
۳۷۵	موازنه جرم و روابط تعادلی
۳۸۰	فرمولاسیون روش همگرایی θ
۳۸۱	بدست آوردن دما با استفاده از روش ثابت تعادل (k_b)
۳۸۲	بدست آوردن دبی کل فازهای خروجی از هر سینی
۳۸۳	روش محاسبات برای یک محلول ایده آل
۳۹۰	حل موازنه جرم و معادلات تعادل با استفاده از روش نستینگ
۳۹۸	فاکتورهای همگرایی روش θ ، روش ثابت تعادل (k_b) و غلظت ثابت
۴۰۵	مقایسه روش همگرایی θ و روش حل مستقیم
۴۰۵	اثر فشار بر محاسبات
۴۰۶	اصلاح روابط برای وجود مواد بی اثر
۴۰۷	انواع دیگر مسائل
۴۰۷	منابع
۴۰۸	مسائل
۴۱۱	فصل پانزدهم : کاربرد روش همگرایی θ برای برج های پیچیده
۴۱۱	مقدمه
۴۱۱	برج تقطیر پیچیده

۴۱۳	موازنه جرم برای اجزاء
۴۱۵	فرمولاسیون روش همگرایی θ
۴۱۶	محاسبه جزء مولی روی هر سینی
۴۱۶	محاسبه دمای تصحیح شده با استفاده از روش ثابت تعادل (k_b)
۴۱۷	محاسبه دبی های خروجی از هر سینی
۴۱۷	نشان دادن حل گرافیکی توابع g
۴۲۲	مشخصه های همگرایی روش θ برای برج های پیچیده
۴۲۶	سیستم هایی شامل چند برج تقطیر با تبادل جریان
۴۲۷	فرمولاسیون روش \ominus برای یک سیستم با دو برج تقطیر
۴۲۸	روش انجام محاسبات
۴۲۹	مشخصه های همگرایی روش \oplus
۴۴۱	منابع
۴۴۱	مسائل
۴۴۴	فصل شانزدهم: روش همگرایی θ برای برج های تقطیر آزنوتروپی و استخراجی
۴۴۴	مقدمه
۴۴۴	بررسی مشخصه های تقطیر آزنوتروپی و استخراجی
۴۴۵	رفتار حلال
۴۴۵	جداسازی ترکیبات اکسیژن دار با استفاده از تقطیر آزنوتروپی و استخراجی
۴۴۸	جداسازی استن و متانول
۴۴۸	جداسازی متیل اتیل کتون از ترکیبات اکسیژن دار
۴۴۹	جداسازی اتانول و آب
۴۵۰	حلال برای جداسازی هیدروکربن ها
۴۵۱	جداسازی بوتادین از مخلوط هیدروکربن ها
۴۵۱	نمونه های دیگر از تقطیر آزنوتروپی
۴۵۱	جداسازی آزنوتروپ ها با استفاده از تقطیر
۴۵۱	جداسازی محلول آزنوتروپ دمای مینیمم همگن
۴۵۴	جداسازی محلول آزنوتروپ دمای ماکزیمم همگن
۴۵۶	جداسازی محلول های آزنوتروپ غیر همگن
۴۵۷	جداسازی محلول های غیر ایده آل در برج های مرتبط
۴۵۸	فرمولاسیون روش \oplus برای سیستم برج های آزنوتروپی و استخراجی
۴۶۵	منابع
۴۶۷	بخش چهارم: انتخاب آرایش بهینه
۴۶۸	فصل هفدهم: آرایش برج ها در جداسازی چندجزئی
۴۶۸	مقدمه
۴۶۸	فاکتورهای ابتدایی انتخاب آرایش
۴۷۰	تعداد آرایش ها برای یک خوارک مشخص
۴۷۶	روش های دیگر جداسازی
۴۸۲	روش اکتشافی و تکاملی برای رسیدن به آرایش مطلوب
۴۸۸	استفاده از الگوریتم آرایش ها
۴۹۱	منابع

۴۹۲	مسائل
۵۰۲	فصل هجدهم : جلوگیری از اتلاف انرژی و بازده ترمودینامیکی
۵۰۲	مقدمه
۵۰۲	حداقل کار لازم جهت جداسازی
۵۰۴	مخلوط گازهای ایده آل
۵۰۵	مخلوط مایعات در فشار کم
۵۰۸	کار خالص مصرف شده و راندمان ترمودینامیکی
۵۱۳	کاهش انرژی لازم در تقطیر
۵۱۴	تقطیر در چند مرحله
۵۱۸	استفاده از پمپ گرمایی برای تقطیر در دمای پایین
۵۲۶	تقطیر همراه با تبخیر و میعان ثانویه
۵۲۸	ادغام مبدل های حرارتی
۵۲۹	منابع
۵۳۰	مسائل
۵۴۰	ضمائم
۵۴۱	ضمیمه A : ثابت ها و ضرایب
۵۶۰	ضمیمه B
۵۶۶	ضمیمه C
۵۶۷	ضمیمه D
۵۶۸	ضمیمه E

بخش اول

جداکننده‌ها (Separators)

فصل اول

تبادل مایع بخار در سیستم چند جزئی

مقدمه

قبل از اینکه بخواهیم یک مسئله تقطیر چندجزئی را بررسی کنیم لازم است بدانیم تبادل مایع-بخار از چه معادله‌ای پیروی می‌کند. برای این منظور معادلات مختلفی در کتابهای ترمودینامیک و مقالات مختلف ارائه شده است در این فصل معادلاتی که کاربرد بیشتری دارند و همچنین استفاده از آنها ساده می‌باشد مورد بحث قرار گرفته است. این معادلات پایه و اساس محاسبات تبادل در فصل‌های بعد خواهد بود.

تبادل مایع-بخار

تبادل مایع بخار در سیستم‌های چند جزئی معمولاً بر حسب مقادیر ثابت تبادل (k_i) بیان می‌شود که رابطه آن به صورت زیر است.

$$y_i = k_i x_i \quad 1-1$$

به طور کلی مقادیر ثابت تبادل تابع دما و فشار محفظه تبخیر ناگهانی^۱ و همچنین غلظت همه اجزاء در فاز مایع می‌باشد.

$$k_i = k_i(T_{drum}, P_{drum}, all x_i) \quad 2-1$$

مقادیر غیر ایده‌آل ثابت تبادل توسط اسمیت^۲ [۱۸] و والاس^۳ [۲۲] مورد بررسی قرار گرفته است البته برای بسیاری از سیستم‌ها مقادیر ثابت تبادل با تقریب خوبی تابعی از دما و فشار است.

$$k = k(T, P)$$

1- Flash Tank
2- Smith
3 - Walas

برای هیدروکربن‌های سبک ، تخمین مقادیر ثابت تعادل از طریق نمودارهای ارائه شده توسط دیپریستر^۱ امکان‌پذیر است. این نمودارها در شکل‌های ۱-۱ تا ۴-۱ برای محدوده‌های مختلف دما و فشار ارائه شده است. همچنین داده‌های این نمودار توسط معادله مک ویلیام^۲ [۱۰] نیز قابل محاسبه می‌باشد.

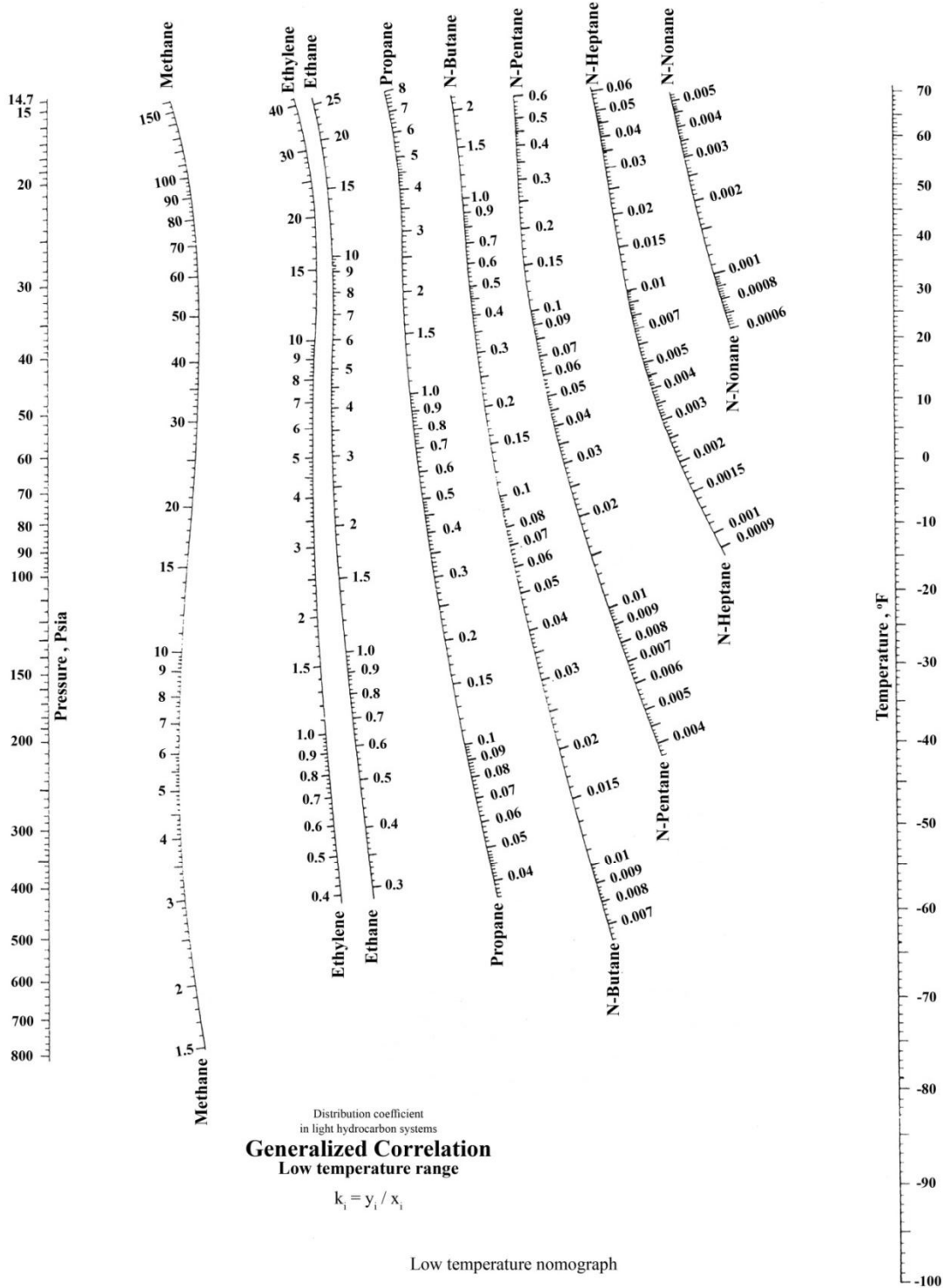
$$\ln(k) = a_{T1}/T^2 + a_{T2}/T + a_{T3} + a_{P1} \ln(P) + a_{P2}/P^2 + a_{P3}/P \quad ۳-۱$$

جدول ۱-۱ : ثابت‌های معادله مک ویلیام

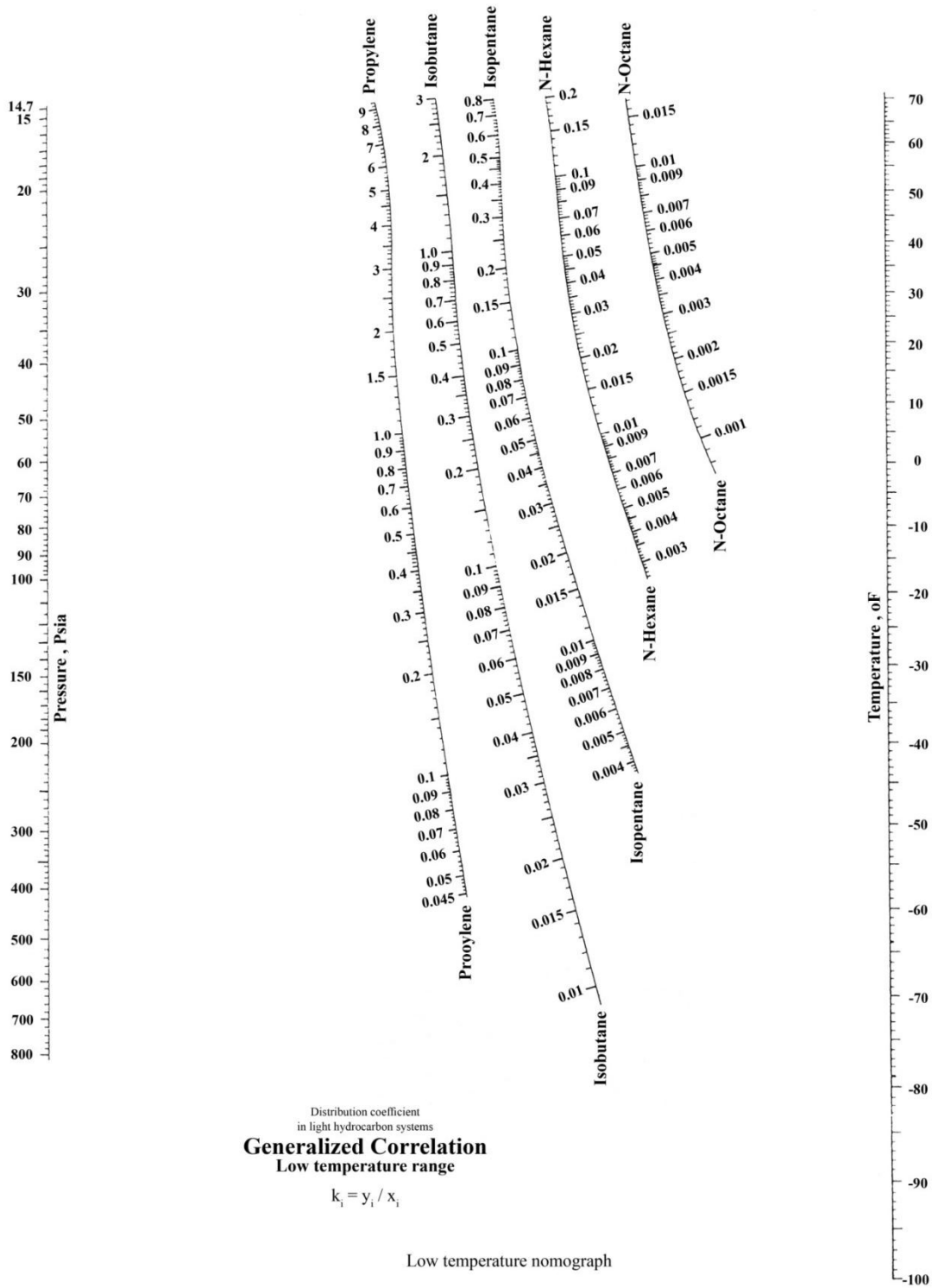
Component	a_{T1}	a_{T2}	a_{T3}	a_{P1}	a_{P2}	a_{P3}	Mean Error
Methane	-292.860	0	8.2445	-0.8951	59.8465	0	1.66
Ethylene	-600076.875	0	7.90595	-0.84677	42.94594	0	2.65
Ethane	-687248.25	0	7.90694	-0.88600	49.02654	0	1.95
Propylene	-923484.6875	0	7.71725	-0.87871	47.67624	0	1.9
Propane	-970688.5625	0	7.15059	-0.76984	0	6.90224	2.35
Isobutane	-1166846	0	7.72668	-0.92213	0	0	2.52
n-Butane	-1280557	0	7.94986	-0.96455	0	0	3.61
Isopentane	-1481583	0	7.58071	-0.93159	0	0	4.56
n-Pentane	-1524891	0	7.33129	-0.89143	0	0	4.3
n-Hexane	-1778901	0	6.96783	-0.84634	0	0	4.9
n-Heptane	-2013803	0	6.52914	-0.79543	0	0	6.34
n-Octane	0	-7646.81641	12.48457	-0.73152	0	0	7.58
n-Nonane	-2551040	0	5.69313	-0.67818	0	0	9.40
n-Decane	0	-9760.45703	13.80354	-0.71470	0	0	5.69

در این رابطه دما بر حسب رانکین و فشار بر حسب *Psi* می‌باشد. ثابت‌های این معادله در جدول ۱-۱ ارائه شده است و در ستون آخر این جدول نیز درصد انحراف این معادله و داده‌های دیپریستر نیز ارائه گردیده است. این معادله برای محدوده دمایی $(365.7 R) \text{ } ^\circ C -70$ تا $(851.7 R) \text{ } ^\circ C 200$ و محدوده فشاری $(14.69 Psi) \text{ } kpa 101.3$ تا $(870.5 Psi) \text{ } kpa 6000$ کاربرد دارد و مزیت آن بر داده‌های دیپریستر این است که می‌توان از این معادله در برنامه‌های کامپیوتری استفاده نمود.

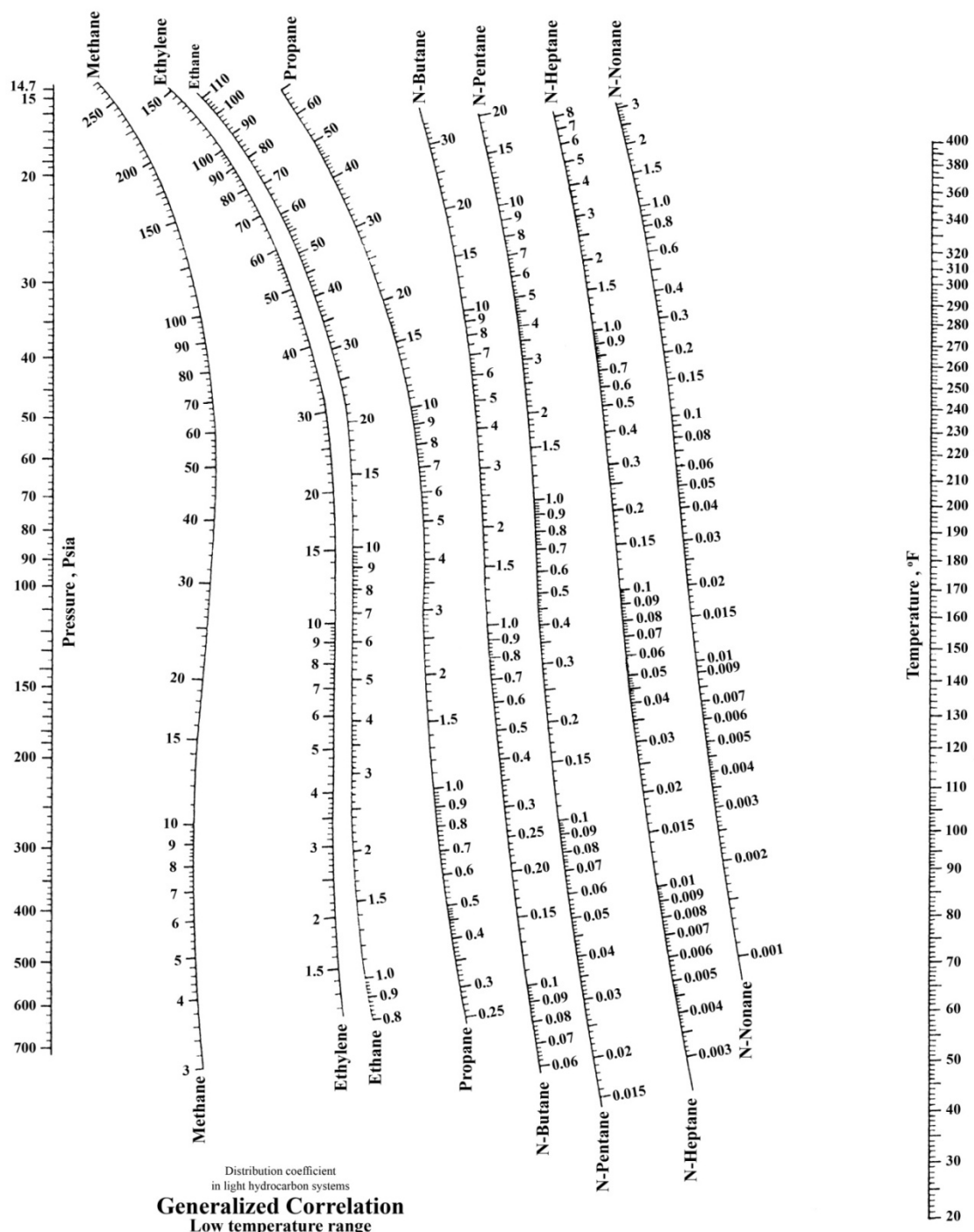
1- Depriester
2 - Mc Williams



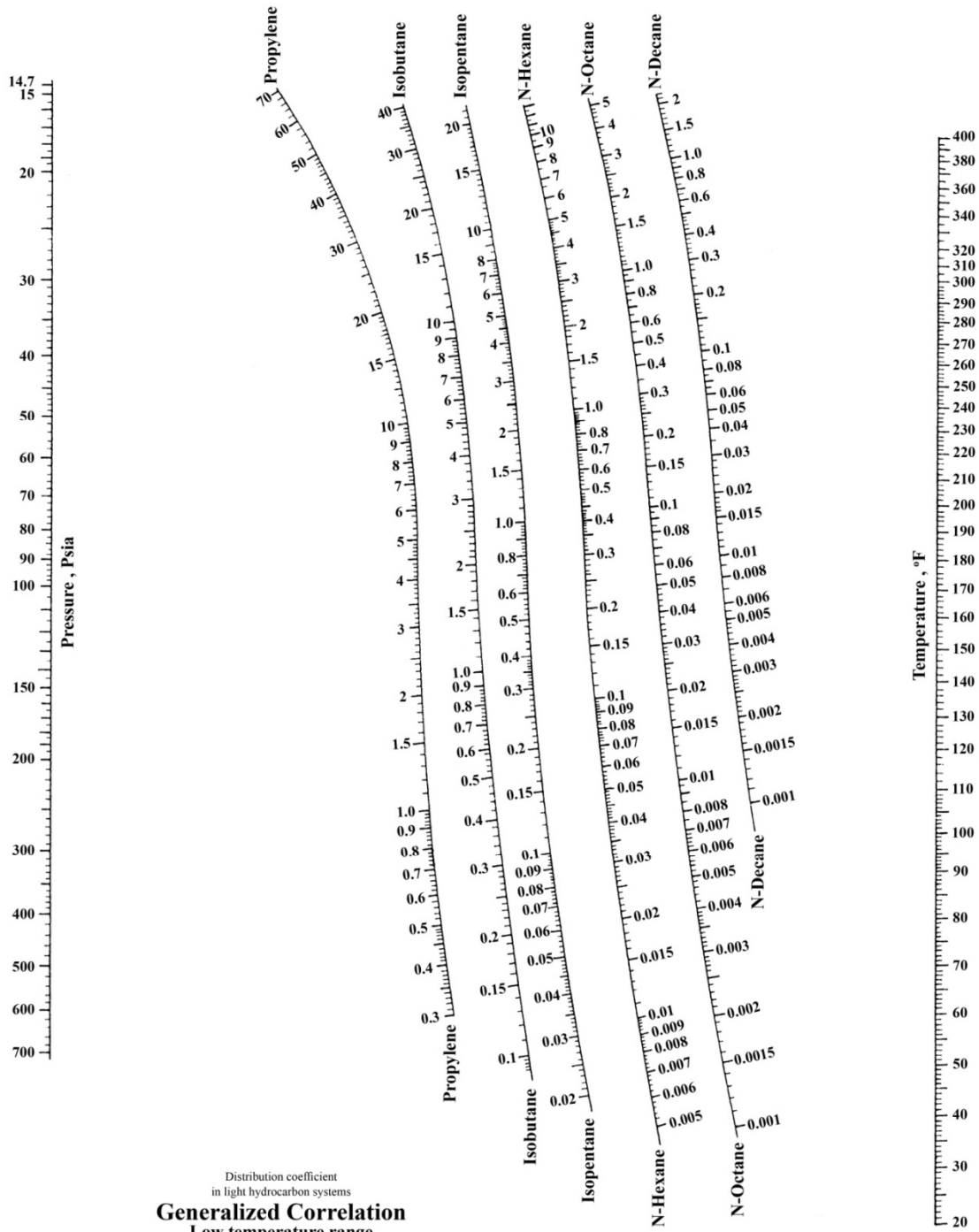
شکل ۱-۱: نمودار دیپریستر برای دماهای پایین



شکل ۱-۲: نمودار دیپریستر برای دماهای پایین



شکل ۱-۳: نمودار دیپریستر برای دماهای بالا



شکل ۱-۴ : نمودار دیپریستر برای دماهای بالا

اگر فقط یک ماده وجود داشته باشد غلظت در فاز مایع و بخار مساوی یک است ($x=1, y=1$) با استفاده از این مقادیر ، ثابت تعادل یک خواهد شد ($k = \frac{y}{x} = 1.0$) که از این نکته می توان دمای جوش مواد خالص را بدست آورد. به طور مثال اگر بخواهیم دمای جوش ایزوبوتان را در فشار $P = 150 \text{ kpa}$ بدست آوریم روی نمودار دمای جوش یک خط مستقیم از $P = 150 \text{ kpa}$ به $k = 1$ رسم کرده و امتداد می دهیم تا نمودار دما را قطع کند. دمای بدست آمده در این شرایط $T = -1.5 \text{ } ^\circ\text{C}$ خواهد بود. اگر از معادله ۱-۳ نیز استفاده کنیم دمای بدست آمده $T = -1.6 \text{ } ^\circ\text{C}$ یا $T = 488.68 \text{ R}$ خواهد بود.

مقادیر ثابت تعادل را با استفاده از قانون راولت^۱ نیز می توان بدست آورد. برای این منظور قانون راولت را برای محلول های غیر ایده آل می نویسیم.

$$y_A P = P_A^{sat} x_i \gamma_i$$

حال معادله اخیر را به صورت زیر مرتب می کنیم.

$$\frac{y_i}{x_i} = \frac{P_A^{sat} \gamma_i}{P_{total}} \quad 4-1$$

با مقایسه ۱-۱ و ۴-۱ خواهیم داشت.

$$k_A = \gamma_A P_A^{sat} / P_{total} \quad 5-1$$

مقادیر فشار بخار مواد مختلف (P_i^{sat}) را می توان از جداول فشار بخار موجود در هندبوک پری^۲ و یا سایر هندبوک ها^۳ بدست آورد. فشار بخار را از معادله آنتوان نیز می توان بدست آورد.

$$\ln(P_i^{sat}) = A - \frac{B}{(T + C)} \quad 6-1$$

ضرایب A ، B و C برای هر جزء مقادیر ثابتی بوده که می توان آنها را از جداول مربوط به آن استخراج کرد. ضرایب اکتیویته (γ_i) نیز تابعی از دما ، فشار و غلظت می باشند که توسط روابط مارگولس^۴ ، ون لار^۵ ، ویلسون^۶ ، NRTL و UNIQUAC قابل محاسبه می باشند. بسیاری از نرم افزارهای شبیه سازی برای محاسبه ثابت تعادل، از روابط ۱-۵ و ۱-۶ استفاده می کنند ضمناً برای هر محلول استفاده از روابط مناسب اکتیویته الزامی است که روابط بسنده برای محلول های مختلف در جدول ۱-۲ ذکر شده است.

-
- 1- Rault's law
 - 2- Perry and Green 1997
 - 3 - E.g,Boubik et al.1984
 - 4 - Margules
 - 5 - Vanlar
 - 6 - Wilson

جدول ۱-۲: راهنمای انتخاب روش مناسب برای محاسبه ثابت تعادل

Chemical Systems		
Low Mw Alcohol and Hydrocarbons		Wilson
Higher Mw Alcohol and Hydrocarbons		NRTL
Hydrogen Bonding Systems		Margules
Liquid-Liquid Equilibrium		NRTL / UNIQUAC
Water as second Liquid Phase		NRTL
Component in Homologous Family		UNIQUAC
Low Pressure System with Associating Vapor Phase		Hayden- O'Connell
Light Hydrocarbon And Oil System		
Natural Gas Systems w/sweet and sour gas		SRK / PR
Cryogenic Systems		SRK / PR
Refinery Mixture with P<5000 Psia		SRK / PR
Hydrotreaters and Reformer		Grayson- Stread
Simple Paraffinic Systems		SRK / PR
Heavy Component System		BK10
Aromatic (near critical region) + H ₂		SRK / PR
Based on Polarity and Ideality		
nonpolar- nonpolar	Ideal & non- ideal	any activity coefficient model
nonpolar- weakly polar	Ideal	any activity coefficient model
nonpolar- weakly polar	non- ideal	UNIQUAC
nonpolar- strongly polar	Ideal	UNIQUAC
nonpolar- strongly polar	non- ideal	Wilson
weakly polar - weakly polar	Ideal	NRTL
weakly polar - weakly polar	non- ideal	UNIQUAC
weakly polar - strongly polar	Ideal	NRTL
weakly polar - strongly polar	non- ideal	UNIQUAC
strongly polar - strongly polar	Ideal	UNIQUAC
strongly polar - strongly polar	non- ideal	No Recommendation
Aqueous - strongly polar		UNIQUAC

Key : **NRTL** = non random two liquid model : **SRK** = Soave-Redlich-Kwong model :
BK10 = Braun K10 for Petroleum

PR = Peng - Robinson

منابع

- 1- Barnicki, S. D., "How Good are Your Data?" *Chem. Engr. Progress*, 98 (6),58 (June 2002).

- 2- Blackwell, W. W., *Chemical Process Design on a Programmable Calculator*, McGraw-Hill, New York, 1984, Chapter 3.
- 3- Boublik, T., V. Fried. and E. Hala. *Vapour Pressures of Pure Substances*, Elsevier, Amsterdam, 1984.
- 4- Carlson, E. C., "Don't Gamble with Physical Properties for Simulators." *Chem. Engr. Progress*, 92 (10), 35 (Oct. 1996).
- 5- Chein, H. H. y., "Formulations for Three-Phase Flash Calculations." *ALChE Journal*, 40 (6), 957 (1994).
- 6- Dadyburjor, D. B., "SI Units for Distribution Coefficients." *Chem. Engr. Progress*, 74 (4), 85 (April 1978).
- 7- Fredenslund, A., J. Gmehling and P. Rasmussen, *Vapor-Liquid Equilibria Using UNIFAC : A Group-Contribution Method*, Elsevier, Amsterdam, 1977.
- 8- Lazzaroni, M. J., D. Bush, C. A. Eckert, T. C. Frank, S. Gupta and J. D. Oslen, "Revision of MOSCED Parameters and Extension to Solid Solubility Calculations," *Ind. Eng. Chem. Research*, 44, 4075 (2005).
- 9- Maxwell, J. B., *Data Book on Hydrocarbons*, Van Nostrand, Princeton, N.J, 1950.
- 10- McWilliams, M. L., "An Equation to Relate K-factors to Pressure and Temperature," *Chem. Engineering*, 80(25), 138 (Oct. 29. 1973).
- 11- Marsh, k. N., "The Measurement of Thermodynamic Excess Functions of Binary Liquid Mixtures," *Chemical Thermodynamics*, Vol.2 , The Chemical Society, London, 1978, PP.1-45.
- 12- Nelson, A. R., J. H. Olson, and S. I. Sandler, "Sensitivity of Distillation Process Design and Operation to VLE Data, ",*Ind. Eng. Chem. Process ,Des. Develop.*, 22, 547 (1983).
- 13- Poling, B. E., J. M. Prausnitz and J. P. O'Connell, *The Properties of Gases and Liquids*, 5th Ed., McGraw-Hill, New York, 2001.
- 14- Prausnitz, J. M., T. F. Anderson, E. A. Grens, C. A. Eckert, R. Hsieh and J. P. O'Connell, *Computer Calculations for Multicomponent Vapor-Liquid and Liquid-Liquid Equilibria*, Prentice-Hall, Upper Saddle River, N.J, 1980.
- 15- Prausnitz., J. M., R. N. Lichtenthaler and E. G. de Azevedo, *Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria*, 3rd ed., Prentice-Hall. Upper Saddle River, N.J, 1999.
- 16- Sandler, S. I., *Chemical and Engineering Thermodynamics*, 4th ed., Wiley, New York, 2006.
- 17- Seider, W. D., J. D. Seader and D. R. Lewin, *Process Design Principles*, Wiley , New York, 1999.
- 18- Smith, B. D., *Design of Equilibrium Stage Processes*, McGraw-Hill, New York, 1963.
- 19- Smith, J. M., H. C. Van Ness and M. M. Abbott, *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics*, 7th ed., McGraw-Hill, New York, 2005.
- 20- Tester, J. W. and M. Modell, *Thermodynamics and Its Applications* , 3rd ed., Prentice Hall PTR, Upper Saddle River, NJ 1997.
- 21- Van Ness, H. C. and M. M. Abbott, *Classical Thermodynamics of Non-Electrolyte Solutions With Applications to Phase Equilibria*, McGraw-Hill, New York, 1982.
- 22- Walas, S. M., *Phase Equilibria in Chemical Engineering*, Butterworth, Boston, 1985.
- 23- Yaws, C. L., P. K. Narasimhan and C. Gabbula, *Yaw's Handbook of Antoine Coefficients for vapor Pressure (Electronic Edition)*. Knovel. 2005.

فصل دوم

تبخیر ناگهانی در سیستم‌های چند جزئی

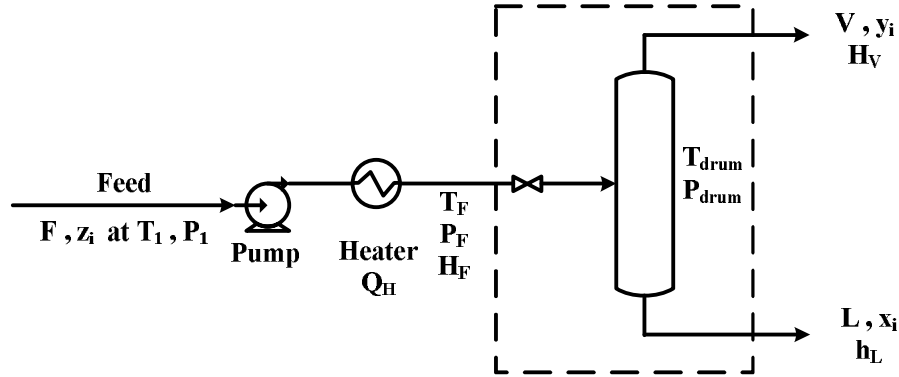
مقدمه

تبخیر ناگهانی ساده‌ترین روش برای جداسازی یک مخلوط چندجزئی به شمار می‌آید. این روش زمانی مورد استفاده قرار می‌گیرد که اختلاف ضریب فراریت میان اجزاء زیاد باشد در غیر این صورت میزان جداسازی راضی‌کننده نخواهد بود مگر اینکه از چند سیستم تبخیر ناگهانی به صورت سری استفاده شود. از طرفی در یک آرایش سری، وقتی تعداد سیستم‌های تبخیر ناگهانی افزایش می‌یابد هزینه سرمایه‌گذاری اولیه بسیار زیاد شده و همچنین کنترل کردن عملیات نیز دشوار خواهد شد.

فرآیند تبخیر ناگهانی^۱

تجهیزات لازم برای فرآیند تبخیر ناگهانی در شکل ۱-۲ نشان داده شده است. در این فرآیند ابتدا سیال فشرده شده و سپس گرم می‌شود و از یک شیر فشارشکن عبور می‌کند و وارد محفظه تبخیر ناگهانی می‌شود. تحت این شرایط قسمتی از مایع تبخیر شده و به سمت بالای محفظه هدایت می‌شود و باقی‌مانده مایع به سمت پایین محفظه سرازیر می‌شود. بالای محفظه قسمتی به عنوان قطره‌گیر^۲ تعبیه شده است که باعث گرفتن قطرات مایع از فاز بخار می‌شود. در محفظه تبخیر ناگهانی به علت تماس کامل مایع و بخار، شرایط محفظه نزدیک به تعادل می‌باشد. در شکل ۱-۲ یک سیستم تبخیر ناگهانی عمودی نشان داده شده است البته استفاده از سیستم‌های افقی نیز معمول می‌باشد.

1 - Flash Vaporization Process
2- Demister



شکل ۱-۲: شمایی از یک سیستم تبخیر ناگهانی

موازنه جرم برای هر جزء حول سیستم شکل ۱-۲ به صورت زیر است.

$$F z_i = L x_i + V y_i \quad 1-2$$

موازنه کلی نیز به صورت زیر است.

$$F = L + V \quad 2-2$$

همانطور که در بحث ثابت تعادل ذکر شد ثابت تعادل به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$y_i = k_i x_i, \quad k_i = k_i(T_{drum}, P_{drum})$$

و از آن برای حذف y_i در معادله ۱-۲ استفاده می‌کنیم.

$$F z_i = L x_i + V k_i x_i \quad i = 1, \dots, c$$

c نشان دهنده تعداد کل اجزاء می‌باشد. سپس مقدار L را توسط معادله ۲-۲ محاسبه کرده و در رابطه اخیر جایگزین می‌کنیم.

$$F z_i = (F - V) x_i + V k_i x_i \quad i = 1, \dots, c$$

حال طرفین معادله اخیر را بر F تقسیم کرده و معادله را بر حسب x_i مرتب می‌کنیم.

$$x_i = \frac{z_i}{1 + (k_i - 1) \frac{V}{F}} \quad i = 1, \dots, c \quad 3-2$$

از طرفی چون $y_i = k_i x_i$ است برای y_i خواهیم داشت:

$$y_i = \frac{k_i z_i}{1 + (k_i - 1) \frac{V}{F}} \quad i = 1, \dots, c \quad 4-2$$

چون مجموع کسرهای مولی اجزاء در فاز مایع مساوی یک ($\sum x_i = 1$) و همچنین مجموع کسرهای مولی فاز بخار نیز مساوی یک ($\sum y_i = 1$) است. معادلات ۳-۲ و ۴-۲ به صورت زیر درمی‌آیند.

$$\sum_{i=1}^c \frac{z_i}{1 + (k_i - 1) \frac{V}{F}} = 1.0 \quad 5-2$$

$$\sum_{i=1}^c \frac{k_i z_i}{1 + (k_i - 1) \frac{V}{F}} = 1.0 \quad ۶-۲$$

اگر طرفین دو معادله اخیر را از هم کم کنیم معادله زیر حاصل می‌شود.

$$\sum_{i=1}^c \frac{k_i z_i}{1 + (k_i - 1) \frac{V}{F}} - \sum_{i=1}^c \frac{z_i}{1 + (k_i - 1) \frac{V}{F}} = 0$$

در این معادله معمولاً $\frac{V}{F}$ مجهول است که به صورت تابع زیر نوشته می‌شود.

$$f\left(\frac{V}{F}\right) = \sum_{i=1}^c \frac{(k_i - 1) z_i}{1 + (k_i - 1) \frac{V}{F}} = 0 \quad ۷-۲$$

این معادله به معادله راجفورد-رایس^۱ معروف است.

برای بدست آوردن $\frac{V}{F}$ از هر کدام از معادلات ۲-۵، ۲-۶ و ۲-۷ می‌توان استفاده کرد اما معادله ۲-۷ از نظر ریاضی پایدارتر است و زودتر همگرا می‌شود. چون این معادله غیر خطی است باید از طریق سعی و خطا حل شود. این معادله را از روش نیوتن-رافسون^۲ می‌توان حل کرد.

$$\left(\frac{V}{F}\right)_{n+1} = \left(\frac{V}{F}\right)_n - \frac{f\left(\left(\frac{V}{F}\right)_n\right)}{f'\left(\left(\frac{V}{F}\right)_n\right)} \quad ۸-۲$$

وقتی که $n=1$ است $\left(\frac{V}{F}\right)_1$ حدس اولیه است و بقیه $\left(\frac{V}{F}\right)_n$ ها توسط رابطه بالا بدست می‌آید. f_n توسط رابطه ۲-۷ و با قرار دادن $\left(\frac{V}{F}\right)_n$ بدست می‌آید و f'_n از رابطه زیر بدست می‌آید.

$$f'\left(\left(\frac{V}{F}\right)\right) = \frac{df}{d\left(\frac{V}{F}\right)} = -\sum_{i=1}^c \frac{(k_i - 1)^2 z_i}{\left[1 + (k_i - 1) \frac{V}{F}\right]^2} \quad ۹-۲$$

هرگاه $\left(\frac{V}{F}\right)$ حدس زده شده و $\left(\frac{V}{F}\right)$ مرحله بعد با هم تقریباً برابر شود معادله همگرا شده است و $\left(\frac{V}{F}\right)$ بدست آمده است. پس از بدست آوردن این نسبت می‌توان x_i و y_i را توسط معادله‌های ۲-۳ و ۲-۴ محاسبه نمود.

1 - Rachford Rice
2 - Newton - Raphson

البته مقدار خطایی برای آن در نظر گرفته می‌شود که معمولاً این مقدار خطا $\varepsilon_R = 0.005$ است یعنی اگر $\left(\frac{V}{F}\right)$ حدس زده شده و $\left(\frac{V}{F}\right)$ بدست آمده برای دو مرحله متوالی، اختلافی کمتر از 0.005 داشته باشند محاسبات خاتمه می‌یابد.

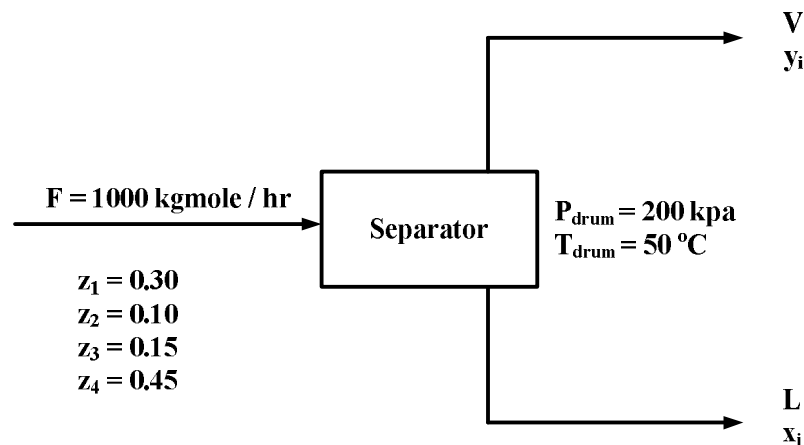
$$\left| \left(\frac{V}{F}\right)_{n+1} - \left(\frac{V}{F}\right)_n \right| < \varepsilon_R$$

بعد از اینکه $\left(\frac{V}{F}\right)$ ، x_i و y_i بدست آمد می‌توان آنتالپی مایع و بخار خروجی از محفظه تبخیر ناگهانی را بدست آورد.

$$H_V = \sum_{i=1}^c y_i H_{Vi}(T_{drum}, P_{drum}) \quad , \quad h_L = \sum_{i=1}^c x_i h_{Li}(T_{drum}, P_{drum})$$

مثال ۱-۲: یک محفظه تبخیر ناگهانی در $50^\circ C$ فشار 200 kpa کار می‌کند. خوراکی شامل 30% مولی پروپان، 10% مولی نرمال بوتان، 15% مولی نرمال پنتان و 45% مولی نرمال هگزان با شدت $1000 \frac{\text{kgmole}}{\text{hr}}$ وارد این جداکننده می‌شود. میزان محصولات این جداکننده و غلظت این جریان‌ها را محاسبه نمایید.

حل: ابتدا داده‌های مسئله را روی شکل نشان می‌دهیم.



باید ابتدا $\left(\frac{V}{F}\right)$ را از رابطه راجفورد- رایس بدست می‌آوریم برای این منظور ابتدا مقادیر ثابت تعادل را در دمای $T_{drum} = 50^\circ C$ و $P_{drum} = 200 \text{ kpa}$ توسط نمودار دیپریستر بدست می‌آوریم.

Component	k_i
C ₃	$k_1 = 7.0$
n-C ₄	$k_2 = 2.4$
n-C ₅	$k_3 = 0.8$
n-C ₆	$k_4 = 0.3$

حال باید $\left(\frac{V}{F}\right)$ را با استفاده از روابط ۸-۲ و ۹-۲ بدست می‌آوریم که برای این منظور حدس اولیه را $\left(\frac{V}{F}\right)_1 = 0.1$ در نظر می‌گیریم

حدس اولیه $\left(\frac{V}{F}\right)_1 = 0.1$ را در معادله Rachford Rice قرار می‌دهیم.

$$f(0.1) = \frac{(7.0-1)(0.3)}{1+(7.0-1)(0.1)} + \frac{(2.4-1)(0.1)}{1+(2.4-1)(0.1)} + \frac{(0.8-1)(0.15)}{1+(0.8-1)(0.1)} + \frac{(0.3-1)(0.45)}{1+(0.3-1)(0.1)} = 1.125 + 0.1228 + (-0.0306) + (-0.3387) = 0.8785$$

باید $\left(\frac{V}{F}\right)$ طوری انتخاب شود که تابع f مساوی صفر شود چون مقدار آن مثبت شده است باید افزایش یابد برای تصحیح این نسبت از رابطه ۸-۲ و ۹-۲ استفاده می‌کنیم.

$$f'(0.1) = - \left[\frac{(k_1-1)^2 z_1}{\left[1+(k_1-1)\frac{V}{F}\right]^2} + \frac{(k_2-1)^2 z_2}{\left[1+(k_2-1)\frac{V}{F}\right]^2} + \frac{(k_3-1)^2 z_3}{\left[1+(k_3-1)\frac{V}{F}\right]^2} + \frac{(k_4-1)^2 z_4}{\left[1+(k_4-1)\frac{V}{F}\right]^2} \right]$$

$$= - \left[\frac{10.8}{\left[1+(6.0)\frac{V}{F}\right]^2} + \frac{0.196}{\left[1+(1.4)\frac{V}{F}\right]^2} + \frac{0.006}{\left[1+(-0.2)\frac{V}{F}\right]^2} + \frac{0.2205}{\left[1+(-0.7)\frac{V}{F}\right]^2} \right] = -4.631$$

برای تصحیح از معادله ۸-۲ استفاده می‌کنیم. در مرحله اول $n=1$ است.

$$\left(\frac{V}{F}\right)_2 = \left(\frac{V}{F}\right)_1 - \frac{f\left(\left(\frac{V}{F}\right)_1\right)}{f'\left(\left(\frac{V}{F}\right)_1\right)} \Rightarrow \left(\frac{V}{F}\right)_2 = 0.1 - \frac{0.8785}{-4.631} = 0.29$$

همین مراحل را دوباره باید تکرار کنیم.

$$f\left(\left(\frac{V}{F}\right)_2\right) = f(0.29) = 0.329 \quad , \quad f'\left(\left(\frac{V}{F}\right)_2\right) = f'(0.29) = -1.891$$

$$\left(\frac{V}{F}\right)_3 = \left(\frac{V}{F}\right)_2 - \frac{f\left(\left(\frac{V}{F}\right)_2\right)}{f'\left(\left(\frac{V}{F}\right)_2\right)} \Rightarrow \left(\frac{V}{F}\right)_3 = 0.29 - \frac{0.329}{-1.891} = 0.46$$

با تکرار همین مراحل $\left(\frac{V}{F}\right)_4 = 0.51$ و $\left(\frac{V}{F}\right)_5 = 0.51$ بدست می‌آید. هرچقدر این مراحل را تکرار کنیم

تغییر چندانی نخواهد کرد. پس از این مرحله باید x_i و y_i را با استفاده از روابط ۲-۳ و ۲-۴ بدست آوریم.

$$x_1 = \frac{z_1}{1 + (k_1 - 1) \frac{V}{F}} = \frac{0.3}{1 + (7.0 - 1)(0.51)} = 0.0739 \quad , \quad y_1 = k_1 x_1 = (7.0)(0.0739) = 0.5172$$

$$x_2 = 0.0583 \quad y_2 = 0.1400$$

$$x_3 = 0.1670 \quad y_3 = 0.1336$$

$$x_4 = 0.6998 \quad y_4 = 0.2099$$

اگر $\sum x_i$ و $\sum y_i$ را بدست آوریم نتیجه به صورت زیر خواهد بود.

$$\sum_{i=1}^4 x_i = 0.999 \quad , \quad \sum_{i=1}^4 y_i = 1.0007$$

این دو مقدار به میزان بسیار جزئی از مقدار یک انحراف دارند علت این است که ما $\left(\frac{V}{F}\right)$ را تا دو رقم اعشار

بدست آورده‌ایم در صورتی که جواب دقیق $\left(\frac{V}{F}\right)$ را بدست آوریم این دو مقدار مساوی یک خواهد شد.

حل همزمان سیستم‌های چند جزئی

معمولاً مقدار خوراک (F)، غلظت خوراک (z_i)، دمای خوراک (T_F) و فشار محفظه تبخیر ناگهانی (P_{drum}) مشخص است. وقتی خوراک وارد محفظه تبخیر ناگهانی می‌شود با افت فشار روبرو می‌شود و قسمتی از خوراک تبخیر می‌شود. انرژی لازم برای تبخیر از فاز مایع گرفته شده و باعث سرد شدن مایع داخل محفظه تبخیر ناگهانی می‌شود. پس دمای محفظه تبخیر ناگهانی (T_{drum}) مشخص نیست در نتیجه مسئله شامل دو مجهول $\left(T_{drum}, \frac{V}{F}\right)$ خواهد بود که حل آن با روش سعی و خطا امکان‌پذیر است. روش حل در شکل ۲-۲ نشان داده شده است.

در این روش ابتدا دمای محفظه تبخیر ناگهانی (T_{drum}) حدس زده می‌شود سپس مراحل برای محاسبه $\left(\frac{V}{F}\right)$ پیگیری می‌شود پس از اینکه $\left(\frac{V}{F}\right)$ محاسبه شد باید موازنه انرژی نیز بررسی شود در صورتی که موازنه انرژی برقرار نباشد دمای حدس زده شده باید تصحیح شود. برای این منظور ابتدا موازنه انرژی را برای شکل ۱-۲ می‌نویسیم.

$$F h_F + Q_{flash} = V H_V + L h_L$$

چون آنتالپی مایع (h_L) و آنتالپی بخار (H_V) تابعی از دمای محفظه تبخیر ناگهانی (T_{drum}) است موازنه انرژی را به صورت زیر مرتب می‌کنیم.

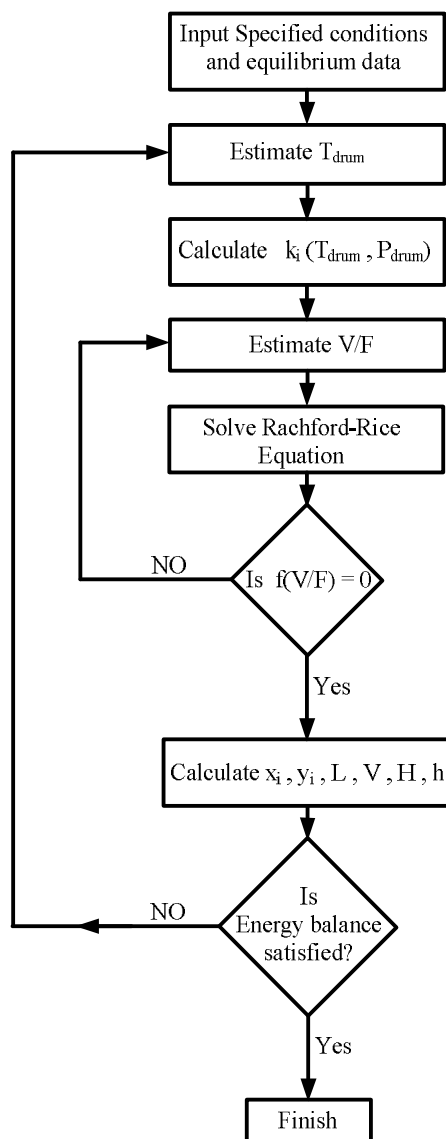
$$E(T_{drum}) = V H_V + L h_L - F h_F - Q_{flash} \quad ۱۰-۲$$

معادله اخیر را می‌توان با استفاده از روش نیوتن رافسون حل کرد و دما را در هر مرحله تصحیح نمود. تصحیح دما به صورت زیر خواهد بود.

$$(T_{drum})_{n+1} = (T_{drum})_n - \frac{E((T_{drum})_n)}{E'((T_{drum})_n)} \quad ۱۱-۲$$

وقتی $n=1$ است $(T_{drum})_1$ حدس اولیه است و حدس‌های بعدی $[(T_{drum})_2, (T_{drum})_3, \dots]$ توسط رابطه اخیر بدست می‌آیند. تابع E توسط رابطه ۱۰-۲ و با قرار دادن T_{drum} هر مرحله بدست می‌آید. E' مشتق تابع E نسبت به T_{drum} است و از رابطه زیر بدست می‌آید.

$$E' = \frac{dE}{dT_{drum}} = V \frac{dH_V}{dT_{drum}} + L \frac{dh_L}{dT_{drum}} = V C_{P_V} + L C_{P_L}$$



شکل ۲-۲: فلوجارت حل همزمان T_{drum} , $\frac{V}{F}$

هرگاه T_{drum} حدس زده شده و T_{drum} بدست آمده با هم برابر شوند معادله همگرا شده و T_{drum} بدست آمده است. البته مقدار خطایی برای آن در نظر گرفته می شود که معمولاً این مقدار خطا $\varepsilon = 0.01^\circ C$ است یعنی اگر T_{drum} حدس زده شده و T_{drum} بدست آمده برای دو مرحله متوالی کمتر از $0.01^\circ C$ داشته باشد محاسبات خاتمه می یابد.

$$|\Delta T_{drum}| < \varepsilon \quad , \quad |(T_{drum})_{n+1} - (T_{drum})_n| < \varepsilon$$

البته برای محاسبات دستی مقدار خطای $\varepsilon = 0.2^\circ C$ در نظر گرفته می شود.

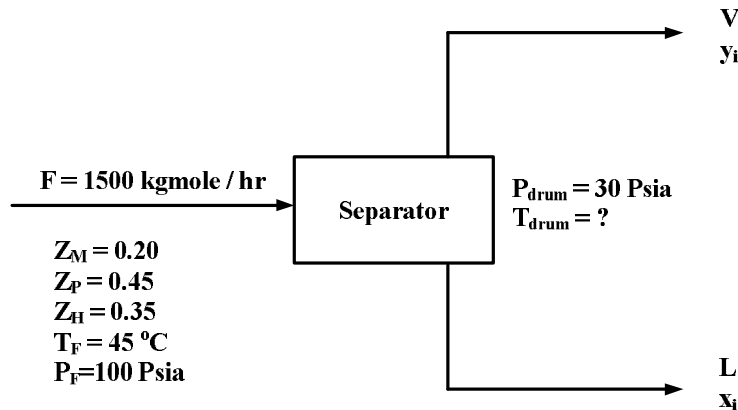
در محاسبات کامپیوتری برای اطمینان از همگرایی معادله ۲-۱۱ یک ضریب میرایی به این معادله افزوده می شود که رابطه به صورت زیر در خواهد آمد.

$$(T_{drum})_{n+1} = (T_{drum})_n - d \times \frac{E((T_{drum})_n)}{E'((T_{drum})_n)}$$

ضریب میرایی معمولاً $d = 0.5$ در نظر گرفته می‌شود در صورتی که $d = 1$ در نظر گرفته شود در حقیقت از همان روش نیوتن-رافسون استفاده شده است. مقدار d در محدوده $0 < d \leq 1$ است. هر چقدر مقدار d به صفر نزدیک شود اطمینان از همگرایی مسئله بیشتر شده اما سرعت رسیدن به جواب کاهش می‌یابد. دمای محفظه تبخیر ناگهانی (T_{drum}) معمولاً بین دمای نقطه شبنم^۱ و دمای نقطه حباب^۲ خوراک واقع می‌شود.

مثال ۲-۲: خوراک مایعی شامل ۲۰٪ مولی متان، ۴۵٪ مولی نرمال پنتان و ۳۵٪ مولی نرمال هگزان و با شدت $1500 \frac{\text{kgmole}}{\text{hr}}$ و دمای $T_F = 45^\circ\text{C}$ و فشار 100 psia وارد محفظه تبخیر ناگهانی می‌شود. محفظه تبخیر ناگهانی در فشار $P_{drum} = 30 \text{ psia}$ و به صورت آدیاباتیک کار می‌کند. مقدار V ، L ، x_i ، y_i و $\frac{V}{F}$ را محاسبه نمایید.

حل: ابتدا داده‌های فرآیند و مجهولات را روی شکل مشخص می‌کنیم.



خطای محاسبات را برای دما مساوی $\varepsilon = 0.2^\circ\text{C}$ و برای $\frac{V}{F}$ مساوی $\varepsilon_R = 0.005$ در نظر می‌گیریم. ابتدا باید دما را حدس بزنیم چون دمای خوراک 45°C است پس دمای محفظه تبخیر ناگهانی پایین‌تر از این مقدار خواهد بود پس دمای محفظه را $T_{drum} = 15^\circ\text{C}$ حدس می‌زنیم و محاسبات را برای بدست آوردن $\frac{V}{F}$ انجام می‌دهیم این کار را با استفاده از معادله ۲-۸ انجام می‌دهیم. برای این منظور باید $\frac{V}{F}$ را حدس بزنیم. حدس اول $\frac{V}{F} = 0.25$ اختیار می‌شود. بقیه نتایج به صورت زیر خواهد بود.

-
- 1 - Dew Point Temperature
 - 2 - Bubble Point Temperature

$$\frac{V}{F} = 0.25, 0.2485, 0.2470, 0.2457, 0.2445, 0.2434, 0.2424, 0.2414, 0.2405, \\ 0.2397, 0.2390, 0.2383, 0.2377, 0.2371, 0.2366, 0.2361$$

پس $\frac{V}{F} = 0.2361$ بدست می‌آید. حال می‌توانیم با استفاده از معادلات ۲-۳ و ۲-۴ مقادیر کسر مولی فاز مایع و بخار را بدست آوریم.

$$x_m = 0.0124, \quad x_p = 0.5459, \quad x_H = 0.4470 \\ y_m = 0.8072, \quad y_p = 0.1398, \quad y_H = 0.0362$$

سپس باید دمای حدس زده شده را تصحیح کنیم که این کار توسط معادله ۲-۱۱ امکان‌پذیر است و دمای تصحیح شده $(T_{drum})_2 = 27.9^\circ C$ خواهد بود. بقیه مراحل شبیه به مرحله اول است که در جدول ۲-۲ ارائه شده است.

جدول ۲-۱: خواص لازم برای متان، نرمال پنتان و نرمال هگزان

Component	λ kcal/grmole	Normal boiling point, °C	$(C_p)_{Liquid}$ cal/(grmole °C)
1. Methane	1.955	-161.48	11.0
2. n-Pentane	6.160	36.08	39.66
3. n-Hexane	6.896	68.75	45.58

Vapor heat capacities in cal/(grmole °C), T in °C

$$(C_{p_v})_1 = 8.20 + 0.01307 T + 8.75 \times 10^{-7} T^2 - 2.63 \times 10^{-9} T^3$$

$$(C_{p_v})_2 = 27.45 + 0.08148 T - 4.538 \times 10^{-5} T^2 - 10.1 \times 10^{-9} T^3$$

$$(C_{p_v})_3 = 32.85 + 0.09763 T - 5.716 \times 10^{-5} T^2 - 13.78 \times 10^{-9} T^3$$

Source : Himmelblau[8]

جدول ۲-۲ : نتیجه تکرار مراحل

Iteration No.	Initial T_{drum}	Trials to find V/F	V/F	Calculated T_{drum}
1	15.00	16	0.2361	27.903
2	27.903	13	0.2677	21.385
3	21.385	14	0.2496	25.149
4	25.149	7	0.2567	32.277
5	32.277	3	0.2551	24.128
6	24.128	2	0.2551	23.786
7	23.786	2	0.2550	23.930
8	23.930	2	0.2550	23.875
9	23.875	2	0.2549	23.900
10	23.900	2	0.2549	23.892

در نهایت کسر مولی فاز مایع و بخار و همچنین مقادیر مایع و بخار به صورت زیر بدست می‌آیند.

$$x_m = 0.0108 \quad , \quad x_p = 0.5381 \quad , \quad x_H = 0.4513$$

$$y_m = 0.7531 \quad , \quad y_p = 0.1925 \quad , \quad y_H = 0.0539$$

$$L = 1117.7 \frac{\text{kgmole}}{\text{hr}} \quad , \quad V = 382.3 \frac{\text{kgmole}}{\text{hr}}$$

منابع

- 1- Evans, F. L., Jr., *Equipment Design Handbook for Refineries and Chemical Plants*, Vol. 2, 2nd ed., Gulf Publishing Co., Houston, TX, 1980.
- 2- King, C. J., *Separation Processes*, 2nd ed., McGraw-Hill, New York, 1981.
- 3- Perry, R. H., C. H. Chilton and S. D. Kirkpatrick (Eds), *Chemical Engineer's Handbook*, 4th ed., McGraw-Hill, New York, 1981.
- 4- Perry, R. H. and D. Green (Eds.). *Perry's Chemical Engineer's Handbook*, 7th ed., McGraw-Hill, New York, 1997.
- 5- Schad, R. C., "Make the Most of Process Simulation," *Chem. Engr. Progress*, 94 (1), 21 (Jan. 1998).
- 6- Wankat, P. C., *Equilibrium-Staged Separations*, Prentice-Hall, Upper Saddle River, NJ, 1988.
- 7- Woinsky, S. G., "Help Cut Pollution With Vapor/Liquid and Liquid/Liquid Separators." *Chem. Engr. Progress*, 90 (10), 55 (Oct. 1994).
- 8- Himmelblau, D. M., *Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering*, 3rd ed, Prentice-Hall, Upper Saddle River, N.J. 1974.

مسائل

۱- 100 kgmole/day خوراکی شامل 10% مولی اتان ، 35% مولی نرمال پنتان و 55% مولی نرمال هپتان وارد یک محفظه تبخیر ناگهانی می شود. جداکننده در 100 kpa و 120°C کار می کند مقادیر x_i ، y_i و V/F را بدست آورید. (مقادیر k را می توان از نمودار دیپریستر بدست آورد)

۲- 1 kgmole/min خوراکی شامل 45% نرمال بوتان ، 35% نرمال پنتان و 20% نرمال هگزان وارد یک محفظه تبخیر ناگهانی در شرایط 200 kpa و 50°C می شود. غلظت مایع و بخار خروجی و نسبت V/F را بدست آورید.

۳- خوراکی شامل 30% مولی متان و 70% مولی پروپان وارد یک محفظه تبخیر ناگهانی در شرایط 2500 kpa و 0°C می شود. غلظت مایع و بخار خروجی و نسبت V/F را بدست آورید.

۴- 2000 kgmole/hr خوراکی شامل 5% مولی متان ، 10% مولی پروپان و بقیه شامل نرمال هگزان وارد یک محفظه تبخیر ناگهانی در شرایط 2 atm و 25°C می شود دبی و غلظت مایع و بخار خروجی از جداکننده را بدست آورید.

۵- 1000 kgmole/hr خوراکی شامل 30% وزنی اتانول و 70% وزنی آب با دمای 200°C وارد یک محفظه تبخیر ناگهانی با فشار 1 kg/cm^2 می شود. دبی و غلظت محصولات خروجی و دمای محفظه تبخیر ناگهانی (T_{drum}) را بدست آورید.

$$(C_{P_L})_{EtOH} = 37.96 \text{ kcal/kgmole } ^\circ \text{C} \quad \text{at } 100^\circ \text{C}$$

$$(C_{P_L})_W = 18.0 \text{ kcal/kgmole } ^\circ \text{C}$$

$$(C_{P_V})_{EtOH} = 14.66 + 3.758 \times 10^{-2} T - 2.091 \times 10^{-5} T^2 + 4.74 \times 10^{-9} T^5$$

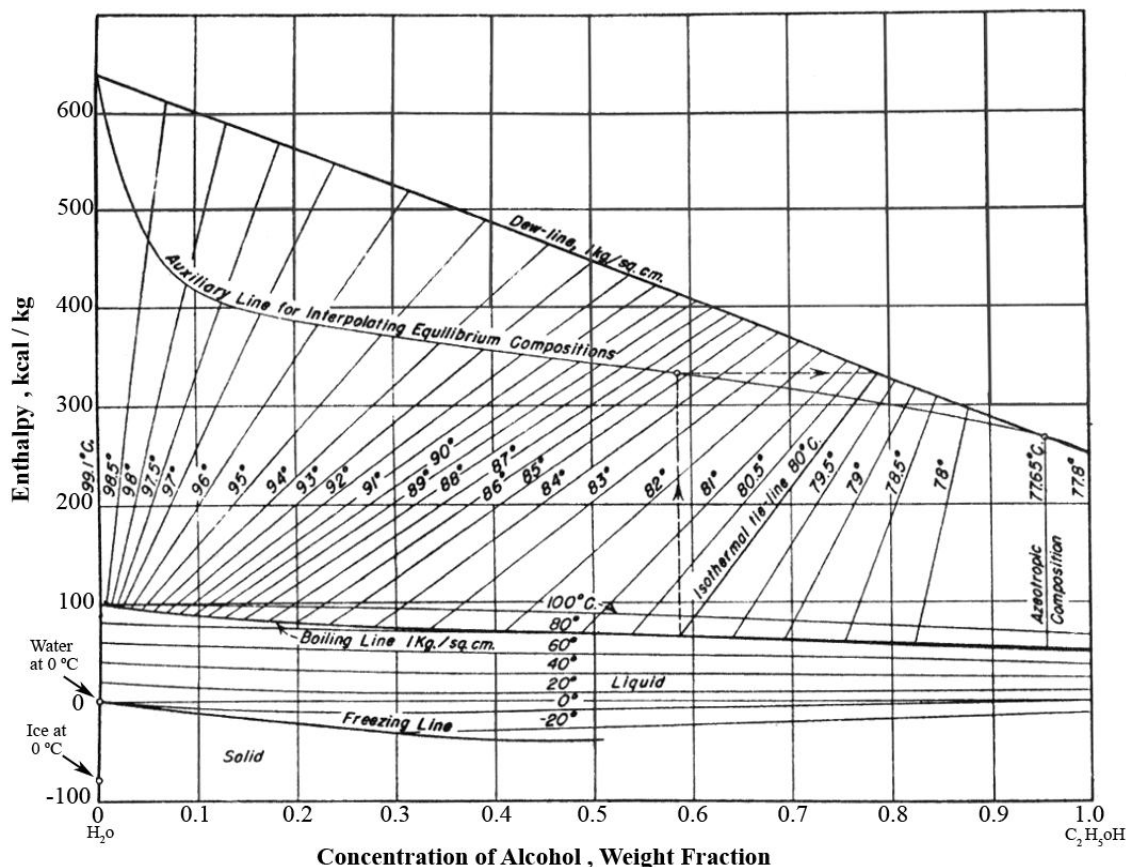
$$(C_{P_V})_W = 7.88 + 0.32 \times 10^{-2} T - 0.04833 \times 10^{-5} T^2$$

Both C_{P_V} and C_{P_L} value are in $\text{kcal/kgmole } ^\circ \text{C}$, with T in $^\circ \text{C}$

$$\rho_{EtOH} = 0.789 \text{ gr/mlit} , \rho_W = 1.0 \text{ gr/mlit} , (M_W)_{EtOH} = 46.07 , (M_W)_W = 18.016$$

$$\lambda_{EtOH} = 9.22 \text{ kcal/gmole at } 351.7 \text{ K} , \lambda_W = 9.7171 \text{ kcal/gmole at } 353.16 \text{ K}$$

منحنی آنتالپی - غلظت اتانول و آب در فشار 1 kg/cm^2 به صورت زیر می باشد.



شکل ۳-۱: منحنی آنتالپی-غلظت اتانول و آب در فشار 1 kg/cm^2 (Bosnjakovic, Technische Thermodynamic T.Steinkopff. Leipzig, 1935)

۶- 10000 kgmole/hr خوراکی شامل 0.65 مولی نرمال هگزان و 0.35 مولی نرمال اکتان وارد یک محفظه تبخیر ناگهانی در فشار 1 atm می شود در صورتی که $V/F = 0.4$ باشد. دمای محفظه تبخیر ناگهانی (T_{drum}) و همچنین غلظت مایع و بخار خروجی از جداکننده را بدست آورید.

۷- 100 kgmole/hr خوراکی شامل 0.30 مولی نرمال بوتان و 0.70 مولی نرمال هگزان وارد یک محفظه تبخیر ناگهانی می شود مقدار $V/F = 0.4$ است و جداکننده در دمای 100°C کار می کند مقادیر k را می توان با استفاده از قانون راتولت بدست آورد. ضرایب معادله آنتوان به صورت زیر می باشد.

$$\log_{10}(P^{sat}) = A - \frac{B}{(T + C)}$$

$$n\text{-butane: } A = 6.809, \quad B = 935.86, \quad C = 238.73$$

$$n\text{-hexane: } A = 6.876, \quad B = 1171.17, \quad C = 224.41$$

P^{sat} نشان دهنده فشار بخار است که بر حسب mmHg می باشد و دما بر حسب درجه سانتیگراد است. مقادیر غلظت محصولات خروجی و فشار محفظه تبخیر ناگهانی (P_{drum}) را بدست آورید.

۸- 50 kgmole/hr خوراکی شامل اتان ، ایزوبوتان و نرمال بوتان وارد یک محفظه تبخیر ناگهانی می‌شود نسبت ایزوبوتان به نرمال بوتان ثابت و مساوی $0/8$ نگه داشته می‌شود. غلظت اجزاء می‌توانند در خوراک تغییر کنند محفظه تبخیر ناگهانی در شرایط 100 kpa و 20°C کار می‌کند در صورتی که $V/F = 0.4$ باشد غلظت خوراک ورودی را بدست آورید. (مقادیر k را می‌توان از نمودار دیپریستر یا معادله ۲-۳۰ بدست آورد)

۹- 150 kgmole/hr خوراکی شامل 50% مولی متان ، 10% مولی نرمال بوتان ، 15% مولی نرمال پنتان و 25% مولی نرمال هگزان وارد یک محفظه تبخیر ناگهانی در شرایط 250 kpa و 10°C می‌شود دبی و غلظت مایع و بخار خروجی از جداکننده و همچنین مقدار V/F را بدست آورید.

۱۰- 10 kgmole/hr خوراکی شامل 10% مولی پروپان ، 30% مولی نرمال بوتان و 60% مولی نرمال هگزان وارد یک محفظه تبخیر ناگهانی در فشار 200 kpa می‌شود لازم است غلظت نرمال هگزان در مایع خروجی 85% مولی باشد مقدار V/F و دمای محفظه تبخیر ناگهانی (T_{drum}) را با دقت 0.5°C بدست آورید.

۱۱- 1000 kgmole/hr خوراکی شامل 40% مولی ایزوبوتان ، 25% مولی نرمال پنتان و 35% مولی نرمال هگزان وارد یک محفظه تبخیر ناگهانی در فشار 300 kpa می‌شود می‌خواهیم 90% از نرمال هگزان در فاز مایع خروجی از جداکننده ظاهر شود مقادیر V/F ، x_i ، y_i و T_{drum} را بدست آورید.

۱۲- خوراکی شامل 40% مولی اتیلن ، 20% مولی پروپیلن ، 30% مولی نرمال بوتان و 10% مولی نرمال هگزان وارد یک محفظه تبخیر ناگهانی در شرایط 1000 kpa و 50°C می‌شود مقدار V/F و همچنین غلظت مایع و بخار خروجی از جداکننده را بدست آورید.

۱۳- 100000 kgmole/hr خوراکی شامل 55% مولی اتان و 45% مولی نرمال پنتان وارد یک محفظه تبخیر ناگهانی در شرایط 700 kpa و 30°C می‌شود. مقدار V/F و همچنین دبی و غلظت محصولات خروجی از جداکننده را بدست آورید.

فاز گاز ایده‌آل در نظر گرفته می‌شود مقادیر k را نیز می‌توان از نمودار دیپریستر بدست آورد همچنین $h_{total}/D = 4$ در نظر گرفته می‌شود.

$$(M_W)_{Ethane} = 30.07 \quad , \quad (M_W)_{Pentane} = 72.15$$

$$\text{Liquid densities : } \rho_E = 0.54 \text{ g/ml (estimated)} \quad , \quad \rho_P = 0.63 \text{ g/ml}$$

۱۴- 100 kgmole/hr خوراکی شامل 50% وزنی نرمال پروپانول و 50% وزنی ایزوپروپانول وارد یک محفظه تبخیر ناگهانی در شرایط 101.3 kpa و 90°C می‌شود مقادیر k را می‌توان با استفاده از قانون راولت بدست آورد. ضرایب معادله آنتوان به صورت زیر می‌باشد.

$$\log_{10}(P^{sat}) = A - \frac{B}{(T + C)}$$

$$n - \text{propanol} : A = 7.84767 \quad , \quad B = 1499.2 \quad , \quad C = 204.64$$

$$\text{isopropanol} : A = 8.11778 \quad , \quad B = 1580.9 \quad , \quad C = 219.61$$

P^{sat} نشان دهنده فشار بخار است که بر حسب $mmHg$ می باشد و دما بر حسب درجه سانتیگراد است. غلظت جریان های خروجی از جداکننده را بدست آورید.

۱۵- 1000 kgmole/hr خوراکی شامل ۴۰٪ مولی متان ، ۵٪ مولی اتیلن ، ۳۵٪ مولی اتان و ۲۰٪ مولی نرمال هگزان وارد یک محفظه تبخیر ناگهانی با شرایط 2500 kpa و 0°C می شود مقادیر V/F ، x_i و y_i را بدست آورید.

فصل سوم

سیستم‌های چند فازی

مقدمه

در فصل قبل مواردی که در جداکننده^۱ تشکیل دوفاز می‌دادند مورد بررسی قرار گرفت. در این فصل مواردی که منجر به تشکیل سه یا چند فاز می‌شود مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

سیستم چند فازی

در شکل ۳-۱ شمایی از یک سیستم آزمایشگاهی که توسط هیلدبرانت^۲ [۱] مورد بررسی قرار گرفته نشان داده شده است. در این سیستم هفت فاز در دمایی نزدیک به دمای محیط در حال تعادل هستند. فاز بالایی فاز هوا می‌باشد شش فاز دیگر به ترتیب دانسیته‌هایشان روی یکدیگر قرار گرفته‌اند که این فازها شامل فاز مایع هگزان (عمدتاً شامل هگزان است)، فاز آنیلین، فاز مایع آب، فاز مایع فسفریک، فاز مایع گالیم و فاز مایع جیوه می‌باشند. همه اجزاء در همه فازها وجود دارند اما غلظت هر جزء در فازهای مختلف متفاوت است. برای مثال فاز آنیلین شامل ۱۰٪ نرمال هگزان، ۲۰٪ آب و کمتر از ۱٪ هوا، فسفریک، گالیم و جیوه می‌باشد. در این سیستم فازها دو به دو با هم در حال تعادل هستند. مثلاً فاز هگزان به طور مستقیم در تماس با فاز آب نیست و مقدار کمی از آب (حدوداً ۰/۰۶٪) در فاز هگزان موجود است. تعادل بین فازها بر حسب فوگاسیته اجزاء به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$f_i^{(1)} = f_i^{(2)} = f_i^{(3)} = f_i^{(4)} = f_i^{(5)} = f_i^{(6)} = f_i^{(7)}$$

در بسیاری از حالت‌های عملی شامل کریستالیزورهای تبخیری و پیش تبخیر کننده‌ها سه فاز جامد مایع و گاز وجود دارد همچنین در تقطیر مخلوط‌هایی که شامل هیدروکربن و آب هستند، سه فاز مایع-مایع و گاز بوجود

1- Separator
2- Hildebrant

می‌آید هر دو حالت ذکر شده در ادامه مورد بررسی قرار می‌گیرند. جنس دستگاه جداساز باید طوری در نظر گرفته شود که اثری روی مواد درون نداشته باشد و همچنین مواد درون اثری روی جنس دستگاه نداشته باشند و قطعاً در تعادل نیز شرکت نمی‌کنند.

اگرچه مبنای محاسبات سیستم‌های چند فازي مانند سیستم‌های دو فازي بر موازنه جرم ، انرژی و برابری فوگاسیته‌ها است اما با فرضیاتی ساده کننده می‌توان مسئله را بسیار ساده کرد. محاسبات دقیق را می‌توان با استفاده از معادلاتی که ارائه خواهد شد با الگوریتم مناسب حل نمود.

Air
n-hexane-rich Liquid
Aniline-rich Liquid
Water-rich Liquid
Phosphorous Liquid
Gallium Liquid
Mercury Liquid

شکل ۳-۲ : شمایی از یک سیستم چندفازی

روش تخمینی برای سیستم مایع - بخار - جامد

کریستالیزور تبخیری یک نمونه ساده از سیستم‌های چندفازی است که در آن سه فاز جامد ، مایع و بخار با هم در حال تعادل می‌باشند. در کریستال کننده تبخیری ماده معدنی (B) به صورت کریستال از محلول آن با آب جدا می‌شود این دو فاز در حضور فاز بخار هستند در این حالت فرض می‌شود که ماده B دارای فشار بخار نیست و آب در فاز جامد ظاهر نمی‌شود پس در فاز بخار فقط آب ظاهر می‌شود و در فاز جامد فقط ماده B ظاهر خواهد شد. پس حلالیت B در فاز مایع به فاز بخار بستگی ندارد و فشار سیستم در دماهای داده شده با استفاده از قانون راولت تخمین زده می‌شود.

$$P = P_{H_2O}^{sat} x_{H_2O} \quad 1-3$$

که x_{H_2O} با استفاده از حلالیت ماده B در آب بدست می‌آید.

مثال ۳-۱ : 5000 lb_m از محلول آبی شامل ۲۰٪ وزنی $MgSO_4$ وارد یک کریستال کننده تبخیری در فشار زیر اتمسفر می‌شود. دمای این سیستم $160^\circ F$ است و کریستال در این حالت $MgSO_4 \cdot H_2O$ می‌باشد حلالیت $MgSO_4$ در آب ۳۶٪ وزنی است و ۷۵٪ از آب ورودی تبخیر می‌شود مطلوبست الف : میزان آب تبخیر شده

ب : میزان کریستال $MgSO_4.H_2O$

ج : فشار کریسال کننده

حل : الف : میزان آب و $MgSO_4$ موجود در خوراک به صورت زیر است.

$$lb_m \text{ of } MgSO_4 = 0.2(5000) = 1000$$

$$lb_m \text{ of Water} = 5000 - 1000 = 4000$$

از آنجا که ۷۵٪ از آب ورودی تبخیر می شود آب تبخیر شده به صورت زیر می باشد.

$$Evaporated \text{ Water} = 0.75(4000) = 3000 lb_m$$

ب : اگر مقدار $MgSO_4$ موجود در محلول W باشد مقدار $MgSO_4$ موجود در کریستال $1000 - W$ خواهد بود. با توجه به اینکه جرم ملکولی آب برابر ۱۸ و جرم ملکولی $MgSO_4$ برابر ۱۲۰/۴ است میزان آب موجود در کریستال به صورت زیر خواهد بود.

$$(1000 - W)(18/120.4) = 0.15(1000 - W)$$

آب موجود در محلول نیز به صورت زیر است.

$$Water \text{ remaining in solution} = 4000 - 3000 - 0.15(1000 - W) = 850 + 0.15W$$

پس میزان آب و $MgSO_4$ موجود در محلول به صورت زیر خواهد بود.

$$Total \text{ amount of solution} = 850 + 0.15W + W = 850 + 1.15W$$

با استفاده از میزان حلالیت $MgSO_4$ خواهیم داشت.

$$0.36 = \frac{W}{850 + 1.15W}$$

با حل معادله اخیر $W = 522$ خواهد بود پس میزان $MgSO_4$ موجود در محلول $522 lb_m$ است و میزان $MgSO_4$ موجود در کریستال به صورت زیر است.

$$MgSO_4 \text{ crystallized} = 1000 - 522 = 478 lb_m$$

میزان آب موجود در کریستال به صورت زیر خواهد بود.

$$Water \text{ of crystallized} = 0.15(1000 - W) = 0.15(1000 - 522) = 72 lb_m$$

پس میزان کریستال ($MgSO_4.H_2O$) به صورت زیر است.

$$crystals = 478 + 72 = 550 lb_m$$

ج : با استفاده از رابطه ۱-۳ می توان فشار کریستال کننده را بدست آورد. در دمای $160^\circ F$ فشار بخار آب $4.74 Psia$ است. با استفاده از جرم آب باقی مانده در محلول می توان مولهای آب باقی مانده در محلول را بدست آورد.

$$\frac{(850 + 0.15W)}{18} = 51.6 lbmole$$

همچنین مولهای $MgSO_4$ باقی مانده در محلول به صورت زیر است.

$$\frac{522}{120.4} = 4.3 \text{ lbmole}$$

کسر مولی آب در محلول به صورت زیر خواهد بود.

$$x_{H_2O} = \frac{51.6}{51.6 + 4.3} = 0.923$$

با استفاده از قانون راولت فشار کریستال کننده به صورت زیر خواهد بود.

$$P = P_{H_2O}^{sat} x_{H_2O} = 4.74 \times 0.923 = 4.38 \text{ Psia}$$

روش تخمینی سیستم مایع-مایع - بخار

سیستم‌های آب و هیدروکربن مثالی از سیستم مایع-مایع-بخار می‌باشد در این سیستم یک فاز بخار با دو فاز مایع در حال تعادل می‌باشد. فاز مایع اول غنی از هیدروکربن (*HC-rich*) و فاز مایع دوم غنی از آب (*Water-rich*) است. معمولاً غلظت آب در فاز غنی از هیدروکربن و غلظت هیدروکربن در فاز غنی از آب کمتر از ۱/۰٪ مولی و معمولاً قابل صرف‌نظر می‌باشد.

Vapor
HC-Rich
Water - Rich

شکل ۳-۳: شمایی از یک سیستم آب و هیدروکربن

وقتی فاز هیدروکربن از قانون راولت پیروی می‌کند فشار سیستم توسط قانون راولت به صورت زیر بدست می‌آید.

$$P = P_{H_2O}^{sat} + \sum_{HCs} P_i^{sat} x_i^{(1)} \quad ۲-۳$$

و زمانی که فاز بخار ایده‌آل و فاز مایع غیر ایده‌آل باشد برای محاسبه فشار از رابطه زیر استفاده می‌شود.

$$P = P_{H_2O}^{sat} + P \sum_{HCs} k_i x_i^{(1)} \quad ۳-۳$$

در صورتی که معادله اخیر را برای محاسبه فشار (P) مرتب کنیم رابطه زیر حاصل می‌شود.

$$P = \frac{P_{H_2O}^{sat}}{1 - \sum_{HCs} k_i x_i^{(1)}} \quad ۴-۳$$

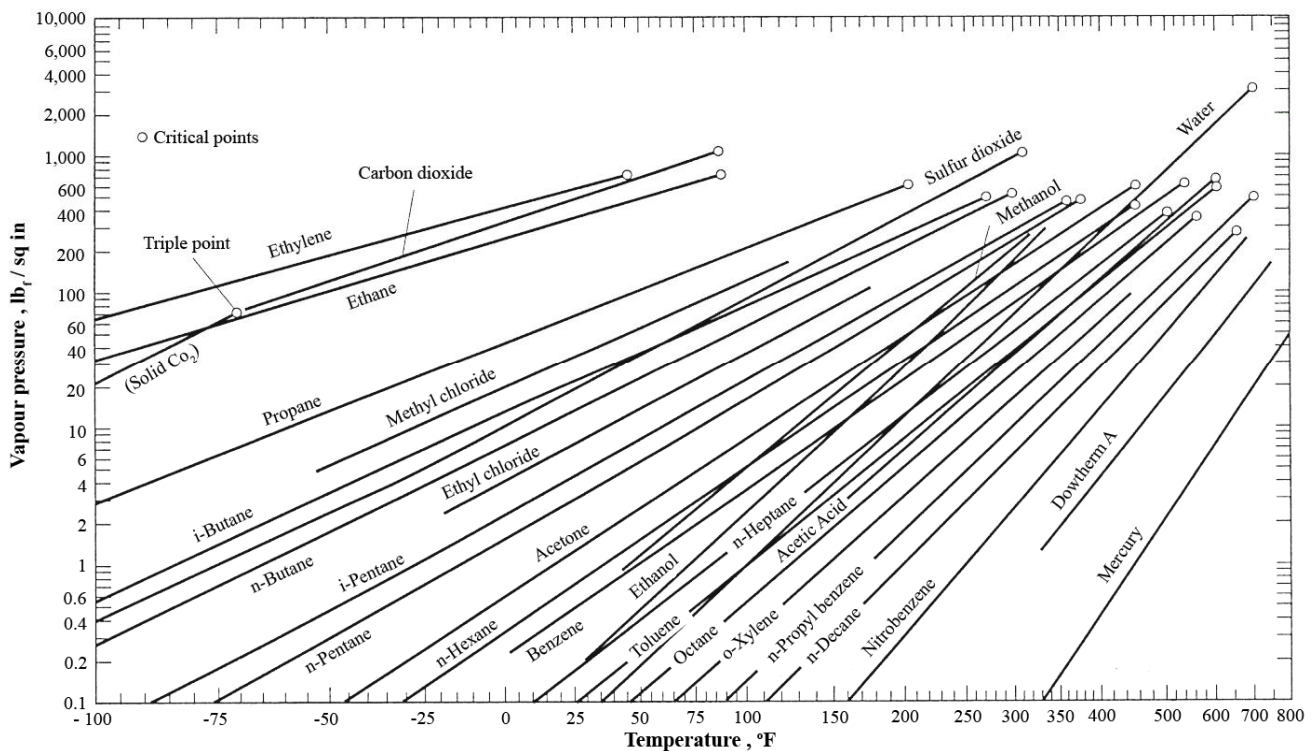
از معادلات ۲-۳ و ۴-۳ می توان به طور مستقیم برای محاسبه فشار سیستم (در صورتی که دما داده شده باشد) ، محاسبه غلظت و محاسبه دما (در صورتی که فشار کل داده شده باشد) استفاده نمود.

مثال ۲-۳ : 100 kgmole مخلوطی شامل ۰.۷۵ مولی آب و ۰.۲۵ مولی نرمال اکتان تحت شرایط تعادلی و در فشار ثابت $P = 133.3 \text{ kpa}$ از 136°C تا 25°C خنک می شود.

الف : شرایط اولیه فازها به چه صورت است؟

ب : دما ، مقدار فازها و غلظت فازها را محاسبه نمایید.

فرض کنید فاز آب و فاز نرمال اکتان نامحلول باشند فشار بخار نرمال اکتان با استفاده از شکل ۴-۳ بدست می آید.



شکل ۴-۳ : فشار بخار برخی از هیدروکربنها بر حسب دما

حل : الف : شرایط ترمودینامیکی اولیه $T = 136^\circ \text{C} = 276.8^\circ \text{F}$ و $P = 133.3 \text{ kpa} = 19.34 \text{ Psia}$ می باشد. فشار بخار اجزاء در دمای 276.8°F به صورت زیر است.

$$P_{H_2O}^{sat} = 46.7 \text{ Psia} \quad P_{nC_8}^{sat} = 19.5 \text{ Psia}$$

از آنجا که فشار کل از هر دو فشار بخار کمتر است پس خوراک به صورت بخار می باشد و فشار جزئی اجزاء به صورت زیر خواهد بود.

$$p_{H_2O} = P y_{H_2O} = 0.75 (19.34) = 14.5 \text{ Psia}$$

$$P_{nC_8} = P y_{nC_8} = 0.25 (19.34) = 4.8 \text{ Psia}$$

ب: وقتی که دما کاهش می‌یابد اولین تغییر فاز زمانی رخ می‌دهد که فشار بخار آب برابر با $P_{nC_8}^{sat} = P_{nC_8} = 4.8 \text{ Psia}$ یا فشار بخار نرمال اکتان $P_{H_2O}^{sat} = P_{H_2O} = 14.5 \text{ Psia}$ شود به ترتیب در دماهای $211^\circ F$ برای آب و $194^\circ F$ برای نرمال اکتان بدست می‌آید. بنابراین اولین قطره فاز مایع در دمای $211^\circ F$ بوجود می‌آید این دما، نقطه شبنم ابتدایی مخلوط است هر چه دما کمتر شود مولهای بیشتری از آب میعان می‌شود بدین ترتیب فشار جزئی آب کاهش یافته و فشار جزئی نرمال اکتان افزایش می‌یابد. پس نرمال اکتان در دمایی بالاتر از $194^\circ F$ (و پایین‌تر از $211^\circ F$) میعان می‌شود که این دما به عنوان نقطه شبنم ثانویه در نظر گرفته می‌شود. برای اینکه محاسبات راحت‌تر شود محاسبات نقطه حباب را برای مخلوط انجام می‌دهیم با اعمال رابطه ۲-۳ خواهیم داشت.

$$P = 19.34 \text{ Psi} = P_{H_2O}^{sat} + P_{nC_8}^{sat}$$

دمای نقطه حباب برای رابطه اخیر به صورت سعی و خطا بدست می‌آید که نتیجه حدس‌های مختلف به صورت زیر می‌باشد.

$T, ^\circ F$	$P_{H_2O}^{sat}, \text{ Psia}$	$P_{nC_8}^{sat}, \text{ Psia}$	$P, \text{ Psia}$
194	10.17	4.8	14.97
202	12.01	5.6	17.61
206	13.03	6.1	19.13
207	13.30	6.2	19.50

با میان‌یابی خطی دمای $T = 206.7^\circ F$ برای $P = 133.3 \text{ kpa} = 19.34 \text{ Psia}$ بدست می‌آید وقتی که دما از این مقدار کمتر شود فاز بخار ناپدید می‌شود و فقط دو فاز مایع نامحلول وجود خواهد داشت. در این حالت چون در فاز هیدروکربنی فقط یک ماده وجود دارد نقطه حباب و نقطه شبنم ثانویه در یک دما رخ خواهد داد پس در دمای $206.7^\circ F$ محلول به جوش می‌آید و در دمای ثابت یکی از فازها تبخیر می‌شود پس از تبخیر شدن فاز اول دما افزایش یافته و فاز دوم تبخیر خواهد شد. در نقطه شبنم ثانویه ($T = 206.7^\circ F$) فشار جزئی آب $P_{H_2O} = 13.2 \text{ Psia}$ و فشار جزئی نرمال اکتان $P_{nC_8} = 6.14 \text{ Psia}$ می‌باشد که با توجه به این مقادیر می‌توان جزء مولی هر دو ماده را در فاز بخار بدست آورد.

$$y_{H_2O} = \frac{P_{H_2O}}{P} = \frac{13.2}{19.34} = 0.683 \quad y_{nC_8} = \frac{P_{nC_8}}{P} = \frac{6.14}{19.34} = 0.317$$

در این حالت دو فاز وجود دارد که فاز بخار حاوی آب و نرمال اکتان است و فاز مایع فقط حاوی آب می‌باشد. با نوشتن یک موازنه برای نرمال اکتان روی سیستم خواهیم داشت.

$$V y_{nC_8} = F x_{nC_8} \Rightarrow V \times 0.317 = 100 \times 0.25 \Rightarrow V = 78.9 \text{ kgmole}$$

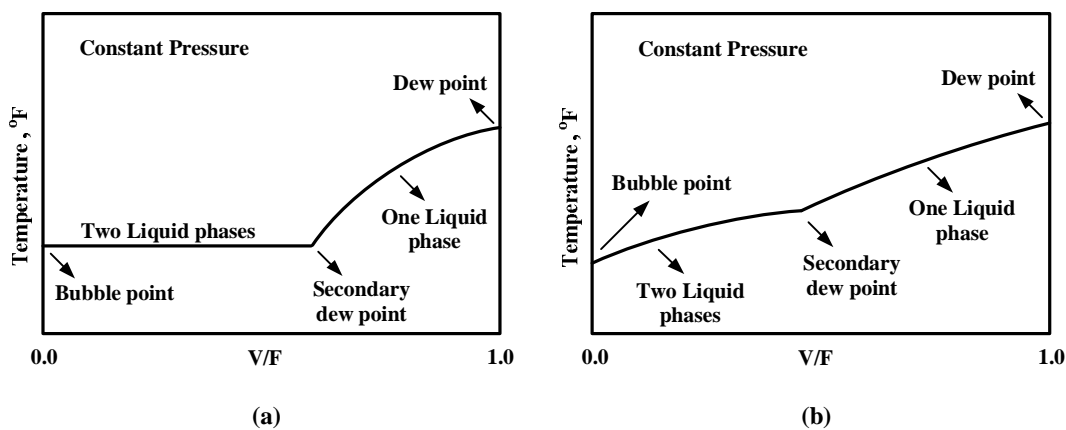
که نتایج این محاسبات در جدول زیر خلاصه شده است.

Component	Vapor		H ₂ O-Rich Liquid
	kgmol	y _i	kgmol
H ₂ O	53.9	0.683	21.1
nC ₈	25.0	0.317	0.0
	78.9	1.000	21.1

نمودار تغییرات دما بر حسب مقدار V/F در قسمت A شکل ۳-۵ نشان داده شده است. در صورتی که بیش از یک هیدروکربن در سیستم وجود داشته باشد نمودار دما بر حسب مقدار V/F به صورت قسمت B شکل ۳-۵ خواهد شد که در این حالت دمای نقطه حباب و دمای نقطه شبنم ثانویه با هم برابر نخواهد شد. با استفاده از قسمت A شکل ۳-۵ با توجه به اینکه دمای مخلوط در حالت نهایی ($T = 25^\circ\text{C}$) کمتر از دمای حباب ($T = 206.7^\circ\text{F} = 97.06^\circ\text{C}$) است پس سیستم شامل فاز مایع نرمال اکتان و فاز مایع آب خواهد بود.

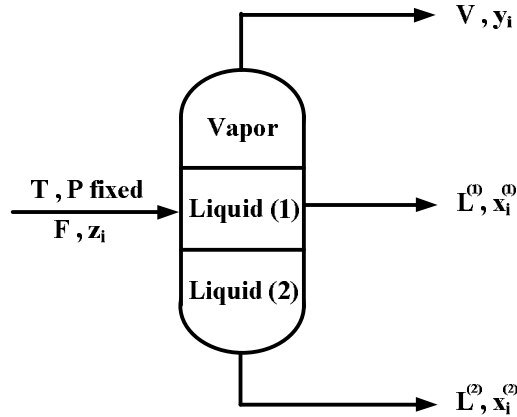
روش دقیق برای حل سیستم‌های بخار-مایع-مایع

روش دقیق حل سیستم‌های بخار-مایع-مایع در دما و فشار ثابت تحت عنوان تبخیر ناگهانی دما ثابت سه-فازی^۱ مورد بررسی قرار می‌گیرد. این محاسبات که شبیه به محاسبات تبخیر ناگهانی سیستم‌های دوفازی است ابتدا توسط هنلی و روسن^۲ مورد بررسی قرار گرفت. این سیستم به صورت شماتیک در شکل ۳-۵ نشان داده شده است.



- 1 - Three phase isothermal flash
- 2 - Henley and Rosen

شکل ۳-۵: نمونه‌ای از نمودار تبخیر ناگهانی سیستم‌هایی شامل مایعات امتزاج‌ناپذیر در فشار ثابت (a) یک ماده هیدروکربنی در سیستم وجود دارد. (b) بیش از یک ماده هیدروکربنی در سیستم موجود است.



شکل ۳-۶: وضعیت سه فاز در سیستم تبخیر ناگهانی دما ثابت سه‌فازی

موازنه جرم و رابطه تعادلی برای هر جزء به صورت زیر می‌باشد.

$$F z_i = V y_i + L^{(1)} x_i^{(1)} + L^{(2)} x_i^{(2)} \quad ۵-۳$$

$$k_i^{(1)} = y_i / x_i^{(1)} \quad ۶-۳$$

$$k_i^{(2)} = y_i / x_i^{(2)} \quad ۷-۳$$

که رابطه زیر می‌تواند به عنوان یک جایگزین برای معادله ۶-۳ یا ۷-۳ در نظر گرفته شود.

$$k_{D_i} = x_i^{(1)} / x_i^{(2)} \quad ۸-۳$$

برای حل این مسئله متغیرهای جدیدی توسط راجفورد و رایس^۱ ارائه شده است.

$$\Psi = \frac{V}{F} \quad \xi = \frac{L^{(1)}}{L^{(1)} + L^{(2)}} \quad 0 \leq \Psi \leq 1 \quad , \quad 0 \leq \xi \leq 1$$

با ترکیب کردن معادلات ۵-۳، ۶-۳ و ۷-۳ با معادلات زیر می‌توان y_i ، $x_i^{(1)}$ و $x_i^{(2)}$ را حذف کرد.

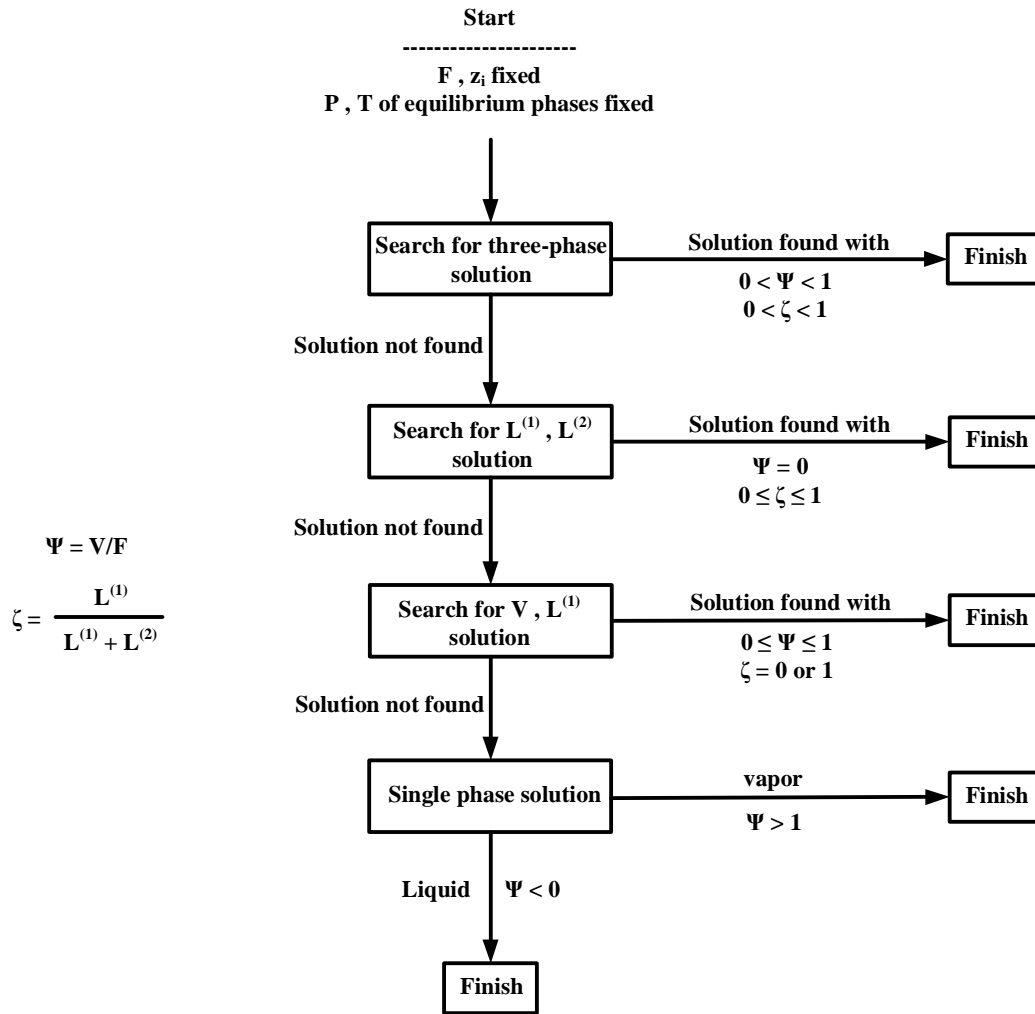
$$\sum x_i^{(1)} - \sum y_i = 0 \quad ۹-۳$$

$$\sum x_i^{(1)} - \sum x_i^{(2)} = 0 \quad ۱۰-۳$$

که با حذف y_i ، $x_i^{(1)}$ و $x_i^{(2)}$ معادلات ۹-۳ و ۱۰-۳ به صورت زیر خواهند شد.

$$\sum_i \frac{z_i (1 - k_i^{(1)})}{\xi (1 - \Psi) + (1 - \Psi) (1 - \xi) k_i^{(1)} / k_i^{(2)} + \Psi k_i^{(1)}} = 0 \quad ۱۱-۳$$

$$\sum_i \frac{z_i (1 - k_i^{(1)} / k_i^{(2)})}{\xi (1 - \Psi) + (1 - \Psi) (1 - \xi) k_i^{(1)} / k_i^{(2)} + \Psi k_i^{(1)}} = 0 \quad ۱۲-۳$$



شکل ۳-۷: الگوریتم شمارش تعداد فازهای بوجود آمده در سیستم تبخیر ناگهانی دما ثابت چند فازی

معادلات ۳-۱۱ و ۳-۱۲ توسط روش‌های مناسبی همچون نیوتن رافسون حل می‌شوند تا مقادیر ξ و Ψ بدست آیند سپس مقدار و غلظت فازها به صورت زیر بدست می‌آیند.

$$V = \Psi F \quad 13-3$$

$$L^{(1)} = \xi (F - V) \quad 14-3$$

$$L^{(2)} = F - V - L^{(1)} \quad 15-3$$

$$y_i = \frac{z_i}{\xi(1-\Psi)/k_i^{(1)} + (1-\Psi)(1-\xi)/k_i^{(2)} + \Psi} \quad 16-3$$

$$x_i^{(1)} = \frac{z_i}{\xi(1-\Psi) + (1-\Psi)(1-\xi)(k_i^{(1)}/k_i^{(2)}) + \Psi k_i^{(1)}} \quad 17-3$$

$$x_i^{(2)} = \frac{z_i}{\xi(1-\Psi)(k_i^{(2)}/k_i^{(1)}) + (1-\Psi)(1-\xi) + \Psi k_i^{(2)}} \quad 18-3$$

محاسبات سیستم‌های تبخیر ناگهانی دما ثابت سه‌فازی بسیار مشکل و خسته کننده است زیرا مقادیر k تابع بسیار قوی از غلظت‌های دو فاز مایع خواهد بود به علاوه معلوم نیست که هر سه فاز وجود داشته باشند که بخواهیم محاسبات را برای سه فاز انجام دهیم. با استفاده از الگوریتم شکل ۳-۷ می‌توان مشخص کرد که چه تعداد فاز در سیستم بوجود می‌آید سپس محاسبات را انجام می‌دهیم.

مثال ۳-۳: برای جداسازی استایرن از تولوئن و متانول از یک سیستم تبخیر ناگهانی استفاده می‌شود. گاز ورودی به محفظه تبخیر ناگهانی به صورت زیر می‌باشد.

Component	kgmol / hr
Hydrogen	350
Methanol	107
Water	491
Toluene	107
Ethylbenzene	141
Styrene	350

محفظه تبخیر ناگهانی در فشار 300 kpa و دمای 38°C کار می‌کند. دبی و غلظت فازها را بدست آورید. حل: به دلیل وجود آب، هیدروکربن و گاز سبک انتظار می‌رود که در محفظه تبخیر ناگهانی سه فاز ایجاد شود که متانول در میان همه فازها توزیع می‌شود. برای حل این مسئله از قسمت تبخیر ناگهانی سه‌فازی نرم‌افزار ChemCAD استفاده شده است در این شبیه‌سازی قانون هنری^۱ برای هیدروژن و معادله UNIFAC برای بدست آوردن ضرایب اکتیویته مواد استفاده شده است که نتایج زیر بدست آمده است.

Component	Kmol / hr		
	V	L ⁽¹⁾	L ⁽²⁾
Hydrogen	349.96	0.02	0.02
Methanol	9.54	14.28	83.18
Water	7.25	8.12	475.63
Toluene	1.50	105.44	0.06
Ethylbenzene	0.76	140.44	0.04
Styrene	1.22	348.64	0.14
Totals	370.23	616.70	559.07

همانطور که انتظار می‌رفت مقدار کمی از هیدروژن در دو فاز مایع حل می‌شود. در فاز غنی از آب نیز مقدار کمی هیدروکربن حل می‌شود در صورتی که میزان متانول زیاد است همچنین در فاز آلی بیشتر هیدروکربن‌ها

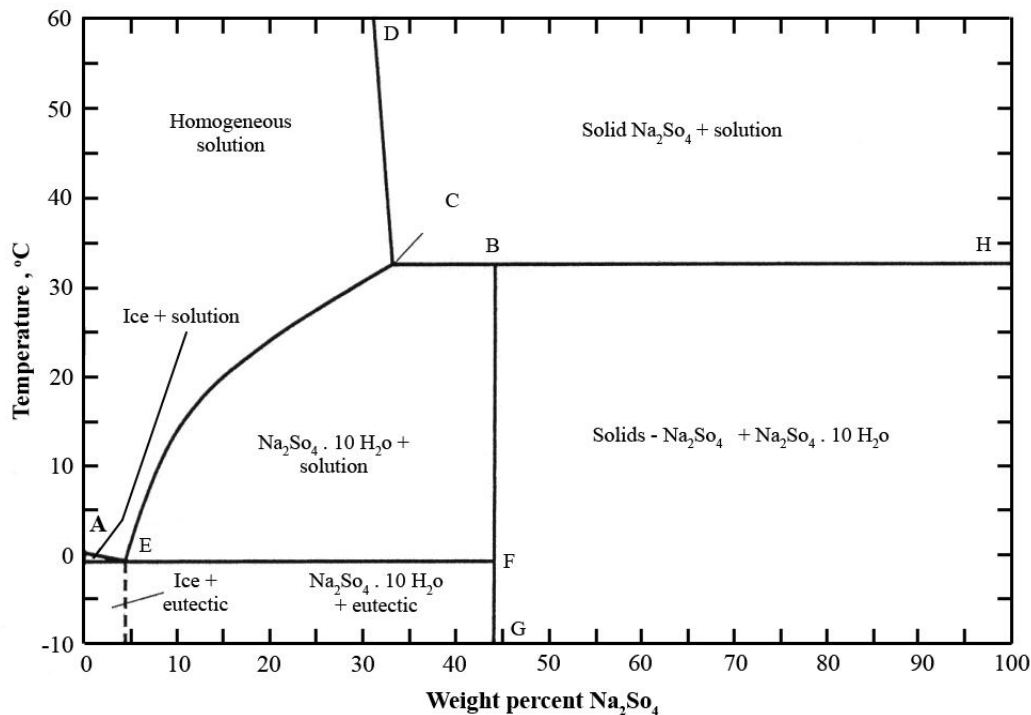
وجود دارند و مقدار کمی آب و متانول در آن یافت می‌شوند. محاسبات در فشار 300 kpa نشان داد که فاز آلی در دمای 143°C شروع به میعان می‌کند و محلول دارای نقطه شبنم ثانویه با دمای 106°C می‌باشد.

منابع

- 1- HILDEBRAND, J.H., *Principles of Chemistry*, 4th ed., Macmillan, New York (1940).
- 2- HENLEY, E.J., E.M. ROSEN, *Material and Energy Balance Computation*, John Wiley and Sons, New York, pp. 351-353 (1969).
- 3- CONWAY, J.B., and J.J. NORTON, *Ind. Eng. Chem.*, 43, 1433- 1435 (1951).

مسائل

- ۱- مثال ۳-۱ را برای حالتی که 90% از آب تبخیر شود تکرار نمایید.
- ۲- 5000 kg/hr از خوراکی آبی شامل 20% وزنی Na_2SO_4 وارد یک کریستالیزور تبخیری با دمای 60°C می‌شود. داده‌های تعادلی در زیر ارائه شده است در صورتی که 80% از Na_2SO_4 کریستال شود مطلوبست الف : مقدار آبی که باید در ساعت تبخیر شود.
ب : میزان فشار کریستالیزور



شکل ۳-۸ : حلالیت سولفات سدیم در آب

- ۳- مقدار نقطه شبنم اولیه ، نقطه شبنم ثانویه و نقطه حباب را برای مخلوط‌های زیر در 50°C بدست آورید. فرض کنید دو فاز به طور متقابل در یکدیگر نامحلول هستند.

الف : ۵۰٪ مولی آب و ۵۰٪ مولی بنزن

ب : ۵۰٪ مولی تلوئن و ۵۰٪ مولی آب

ج : ۴۰٪ مولی بنزن ، ۴۰٪ مولی تلوئن و ۲۰٪ مولی آب

۴- مسئله ۳ را برای محاسبه دمای نقطه شبنم اولیه ، نقطه شبنم ثانویه و نقطه حباب در فشار 2 atm حل نمایید.

۵- خوراک مایعی شامل ۳۰٪ مولی تلوئن ، ۴۰٪ مولی اتیل بنزن و ۳۰٪ مولی آب وارد یک محفظه تبخیر ناگهانی با فشار 0.5 atm می‌شود. فرض کنید مخلوط تلوئن و اتیل بنزن از قانون راولت پیروی می‌کنند و فازهای هیدروکربنی و آبی کاملاً نامحلول هستند. دما و غلظت فاز بخار را در نقطه حباب بدست آورید.

۶- آب (W) و نرمال بوتانول (B) در فشار 101 kpa یک سیستم سه فازی را بوجود می‌آورند. خوراک محفظه تبخیر ناگهانی شامل ۶۰٪ مولی آب و ۴۰٪ مولی نرمال بوتانول می‌باشد در صورتی که ضرایب اکتیویته را از رابطه UNIFAC محاسبه کنیم مطلوبست:

الف : دمای نقطه شبنم و غلظت اولین قطره میعان شونده

ب : دمای نقطه حباب و غلظت اولین حباب ایجاد شده

ج : غلظت و دبی فازها در صورتی که ۵۰٪ از خوراک تبخیر شود.

۷- مثال ۳-۳ را برای دمای 25°C تکرار نمایید. آیا تغییرات زیادی مشاهده می‌شود؟

بخش دوم

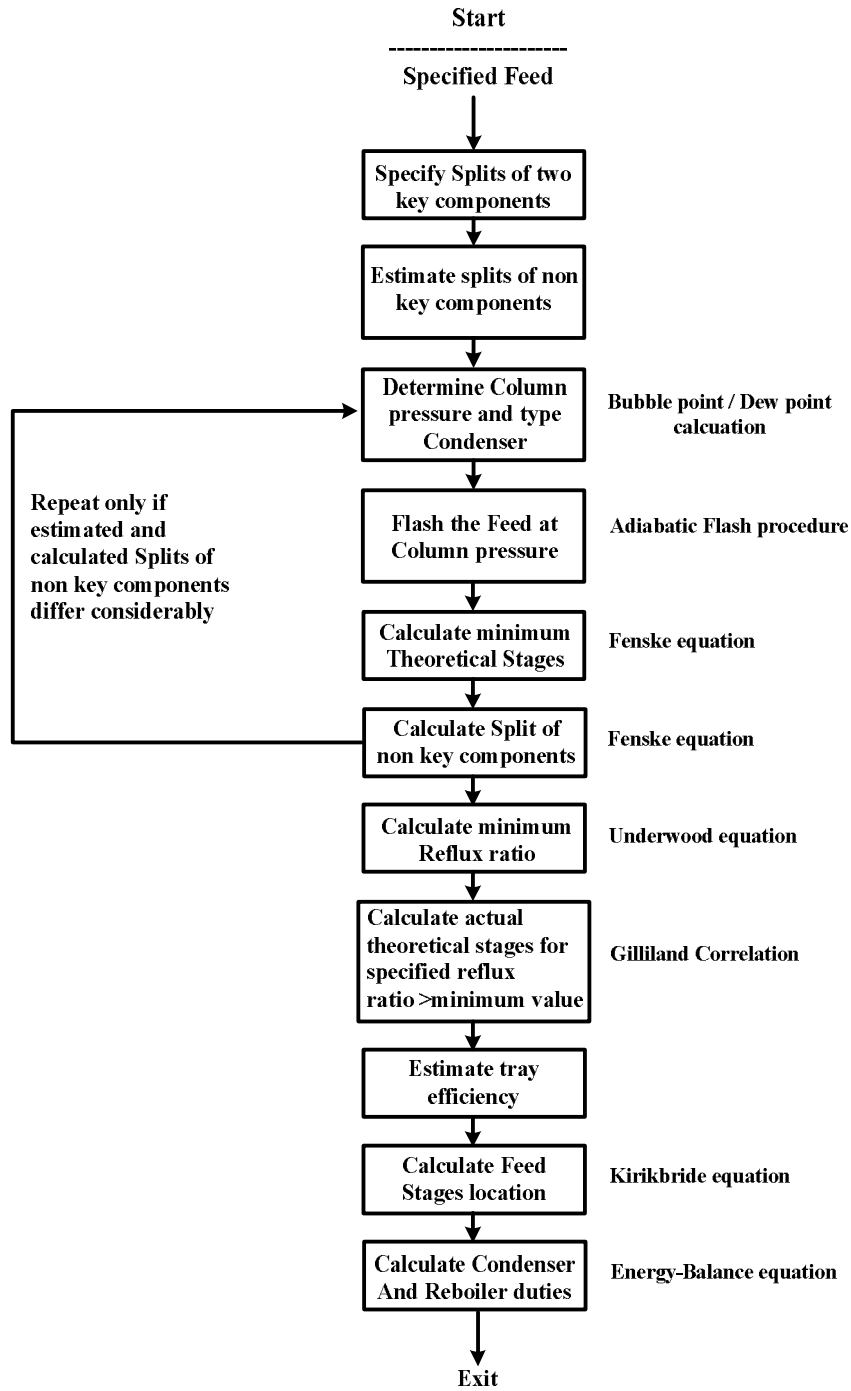
روش‌های میان‌بر (Short Cut Method)

فصل چهارم روش فنسکی - آندروود - گیلیلاند^۱

مقدمه

بررسی تقطیر سیستم‌های دو جزئی در حقیقت یک پیش‌زمینه برای بررسی سیستم‌های چند جزئی است. سیستم‌های چندجزئی بسیار پیچیده‌تر از سیستم‌های دو جزئی هستند و این موضوع به دلیل تاثیر خواص اجزاء بر یکدیگر می‌باشد وجود این تاثیرات، خود را به صورت بوجود آمدن نقطه آزنوتروپ، ضریب اکتیویته و انحراف از معادله راولت نشان می‌دهد. و گاهی اوقات با اضافه کردن یک ماده به مخلوط آزنوتروپ دو جزئی، می‌توان نقطه آزنوتروپ را از بین برد بدین ترتیب مخلوط دوجزئی به چند جزئی تبدیل خواهد شد. اگرچه روش‌های دقیق برای حل مسائل چندجزئی با استفاده از کامپیوتر میسر می‌باشد اما استفاده از روش‌ها تقریبی برای حل مسائل چندجزئی برای اهدافی شامل طراحی اولیه، بررسی شرایط بهینه و طراحی یک آرایش بهینه برای جداسازی مورد استفاده قرار می‌گیرد.

الگوریتم حل مسائل تقطیر چندجزئی که توسط فنسکی - آندروود - گیلیلاند ارائه شده در شکل ۴-۱ نشان داده شده است. در صورتی که خواص فیزیکی مستقل از غلظت باشند این روش را می‌توان بدون استفاده از کامپیوتر و به صورت دستی مورد استفاده قرار داد.



شکل ۴-۱: الگوریتم حل مسائل چندجزئی با استفاده از روش فنسکی- آندروود- گیلیلاند

انتخاب کلید^۱ برای حل مسائل چند جزئی

برای حل مسائل چندجزئی انتخاب دو جزء کلیدی ضروری است که انتخاب این دو جزء ، علاوه بر دمای جوش اجزاء به آرایش فرآیند جداسازی بستگی دارد ضمناً توزیع دو جزء انتخاب شده بین محصول بالا و پایین برج باید مشخص باشد. این اجزاء به عنوان اجزاء کلیدی^۲ شناخته می‌شوند. توزیع بقیه اجزاء^۳ بین بالا و پایین برج به طور قطعی مشکل است اما با استفاده از الگوریتم سعی و خطا که در شکل ۴-۱ ارائه شده با دو یا سه تکرار می‌توان توزیع تخمینی بقیه اجزاء بین بالا و پایین برج را بدست آورد.

تقسیم اجزاء به کلیدهای مسئله به صورت زیر می‌باشد.

۱- جزء کلیدی سبک^۴ : جزء سبکی (دارای دمای جوش پایین‌تر) که باید جداسازی روی آن انجام شود.

۲- جزء کلیدی سنگین^۵ : جزء سنگینی (دارای دمای جوش بالاتر) که باید جداسازی روی آن انجام شود.

۳- اجزاء مجاور^۶ : اجزاء دیگر که ممکن است سنگین‌تر از جزء کلیدی سنگین و یا سبک‌تر از جزء کلیدی سبک باشند.

۴- جزء میانی^۷ : جزئی که بین جزء سبک و جزء سنگین قرار گرفته است.

مثال ۴-۱ : قرار است بین متان و اتان جداسازی انجام شود مخلوط گازی به صورت زیر است.

Relative volatility		
Component	$\alpha_{1/h}$ at 7 °F and 550 Psia	Designation
Hydrogen	16.25	Adjacent key
Methane	5.14	Light key
Ethylene	1.39	Split key
Ethane	1.0	Heavy key
Propylene	0.32	Adjacent key
Propane	0.26	Adjacent key

حل: جزء کلیدی سبک و کلیدی سنگین به این بستگی دارد که بخواهیم بین کدام اجزاء جداسازی انجام دهیم و هر کدام از این دو جزء که دمای جوش کمتری داشته باشد (ضریب فراریت بیشتری داشته باشد)، جزء کلیدی سبک است و جزء دیگر به عنوان جزء کلیدی سنگین در نظر گرفته می‌شود. در مثال اخیر متان

-
- 1- Key Component
 - 2- Key Component
 - 3- Non Key Component
 - 4- Light Key
 - 5- Heavy Key
 - 6- Adjacent Key
 - 7- Split Key

جزء کلیدی سبک، اتان جزء کلیدی سنگین و اتیلن که دمای جوش آن (ضریب فراریت آن) بین جزء سبک و جزء سنگین است، جزء میانی بوده و بقیه اجزاء به عنوان اجزاء مجاور شناخته می‌شوند. در شکل ۴-۲ خروجی از راکتور واحد الکیلاسیون^۱ نشان داده شده است. اجزاء به ترتیب ضریب فراریت‌شان مرتب شده‌اند. اجزاء ابتدایی دارای ضریب فراریت بیشتری هستند و به ترتیب ضریب فراریت بقیه اجزاء کاهش می‌یابد. خروجی از راکتور وارد یک فرآیند جداسازی می‌شود. در این فرآیند جداسازی از یک آرایش شامل جداکننده بوتان^۲ و یک جداکننده ایزوبوتان^۳ استفاده شده است. خروجی از این آرایش شامل سه محصول با مشخصات نشان داده شده در شکل ۴-۲ می‌باشد. جهت انتخاب دو جزء کلیدی برای حل مسئله سه حالت مطابق جدول ۴-۱ در نظر گرفته می‌شود. شرح حالت‌های مختلف به صورت زیر می‌باشد.

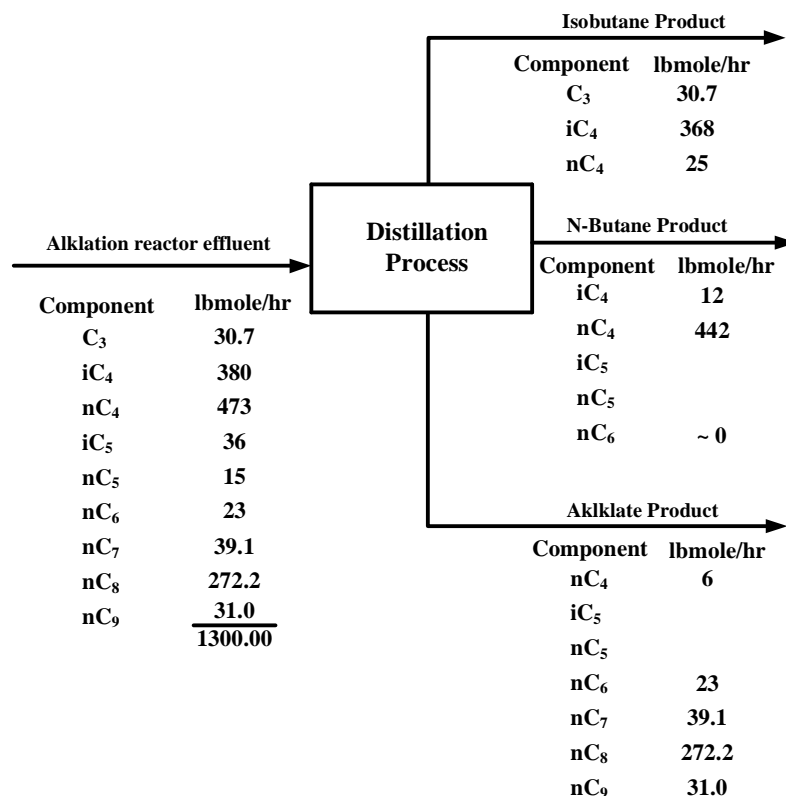
جدول ۴-۱: انتخاب اجزاء کلیدی و توزیع اجزاء کلیدی و غیر کلیدی بین محصول بالا و پایین برج

Component	Feed lbmole/hr	Case 1 : Deisobutanizer Column First (nC ₄ is hk) , lbmole/hr		Case 2 : Debutanizer Column First (iC ₅ is hk) , lbmole/hr		Case 3 : Debutanizer Column First (nC ₆ is hk) , lbmole/hr	
		Distillate	Bottom	Distillate	Bottom	Distillate	Bottom
C ₃	30.7	(30.7)	(0)	(30.7)	(0)	(30.7)	(0)
iC ₄	380	^b 368	^a 12	(380)	(0)	(380)	(0)
nC ₄	473	^a 25	^b 448	^b 467	^a 6	^b 467	^a 6
iC ₅	36	(0)	(36)	^a 13	^b 23	(13)	(23)
nC ₅	15	(0)	(15)	(1)	(14)	(1)	(14)
nC ₆	23	(0)	(23)	(0)	(23)	^a 0.01	^b 22.99
nC ₇	39.1	(0)	(39.1)	(0)	(39.1)	(0)	(39.1)
nC ₈	272.2	(0)	(272.2)	(0)	(272.2)	(0)	(272.2)
nC ₉	31.0	(0)	(31.0)	(0)	(31.0)	(0)	(31.0)
	1300	423.7	876.3	891.7	408.3	891.71	408.29

^a Specification

^b By material balance
(Preliminary estimate)

- 1 - Alkylation Plant
- 2 - Debutanizer
- 3 - Deisobutanizer



شکل ۴-۲: جداسازی جریان خروجی از راکتور الکیلاسیون

حالت اول^۱: در این حالت برج جداکننده ایزوبوتان به عنوان برج اول آرایش در نظر گرفته می‌شود از آنجا که مطابق شکل ۴-۲، میزان نرمال بوتان (nC_4) در محصول ایزوبوتان و همچنین میزان ایزوبوتان در محصول بوتان خروجی معلوم است می‌توان ایزوبوتان و نرمال بوتان را به عنوان اجزاء کلیدی مسئله در نظر گرفت و چون ضریب فراریت ایزوبوتان بیشتر است به عنوان جزء کلیدی سبک در نظر گرفته می‌شود بدین ترتیب چون نرمال بوتان دارای ضریب فراریت کمتری نسبت به ایزوبوتان است به عنوان جزء کلیدی سنگین در نظر گرفته می‌شود و چون ضریب فراریت پروپان (C_3) خیلی بیشتر از جزء کلیدی سبک (ایزوبوتان) است فرض می‌کنیم فقط در بالای برج ظاهر شده و به دلیل اینکه ضریب فراریت اجزاء سنگین تر از جزء کلیدی سنگین (نرمال بوتان) خیلی کمتر از ضریب فراریت نرمال بوتان هستند فرض می‌کنیم کاملاً پایین برج ظاهر می‌شوند.

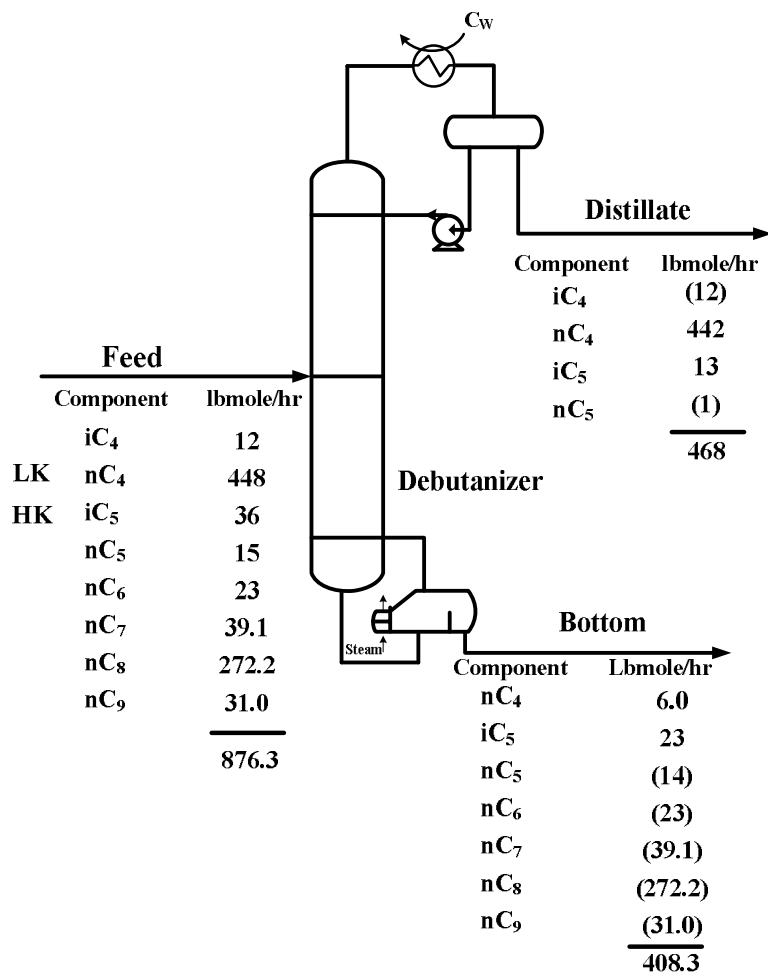
حالت دوم^۲: در این حالت برج جداکننده بوتان به عنوان برج اول آرایش در نظر گرفته می‌شود. با توجه به ترتیب اجزاء از نظر فراریت، مشخص است که نرمال بوتان باید به عنوان جزء کلیدی سبک در نظر گرفته شود. با توجه به اطلاعات سه جریان خروجی از فرآیند جداسازی شکل ۴-۲، توزیع هیچکدام از اجزاء

1 - Case 1
2 - Case 2

سنگین تر از نرمال بوتان داده نشده است پس می توان هر کدام از اجزاء iC_5 ، nC_5 یا nC_6 را به عنوان جزء کلیدی سنگین در نظر گرفت. ساده ترین روش این است که iC_5 به عنوان جزء کلیدی سنگین در نظر گرفته شود. چون iC_5 و nC_4 از نظر فراریت ، اجزاء مجاور هستند. انتخاب این دو جزء ، حل مسئله را در مراحل بعدی آسانتر می نماید.

برای مثال فرض می کنیم $13lbmole/hr$ از iC_5 موجود در خوراک در بالای برج ظاهر شود. از آنجا که ضریب فراریت nC_5 به iC_5 نزدیک است مقداری از nC_5 بالای برج ظاهر خواهد شد که قابل صرف نظر کردن نیست تخمین اجزاء غیر کلیدی در جدول ۴-۱ ارائه شده است اگرچه ممکن است iC_4 در محصول پایین برج نیز ظاهر شود اما در تخمین اولیه فرض می شود که کاملاً بالای برج ظاهر خواهد شد.

حالت سوم^۱ : در این حالت برج جداکننده بوتان به عنوان برج اول آرایش در نظر گرفته می شود پس نرمال بوتان به عنوان ماده کلیدی سبک در نظر گرفته می شود. از آنجا که قرار است در محصول نرمال بوتان خروجی میزان هگزان خیلی کم باشد این جزء (هگزان) به عنوان جزء کلیدی سنگین در نظر گرفته می شود و فرض می شود مقدار ناچیزی از هگزان ($0.01lbmole/hr$) بالای برج ظاهر شود و توزیع اجزاء غیرکلیدی بدین صورت است که فرض می شود همه اجزاء سبکتر از جزء کلیدی سبک (nC_4) ، بالای برج ظاهر می شوند و همه اجزاء سنگین تر از جزء کلیدی سنگین (nC_6) ، پایین برج ظاهر می شوند و اجزائی که بین اجزاء کلیدی سبک و سنگین قرار گرفته اند بین بالا و پایین برج توزیع می شوند. البته حل این حالت نسبت به حالت دوم مشکل تر است.



شکل ۳-۴: توزیع اجزاء بین محصول بالا و پایین برج برای جداکننده بوتان

در عمل برج جداکننده ایزوبوتان به عنوان برج اول آرایش در نظر گرفته می‌شود. در حالت اول محصول پایین برج اول (برج جداکننده ایزوبوتان) به عنوان خوراک وارد برج جداکننده بوتان می‌شود و برای سهولت محاسبات بهتر است که iC_5 به عنوان جزء کلیدی سنگین در نظر گرفته شود. توزیع اجزاء کلیدی و همچنین توزیع اولیه بقیه اجزاء در شکل ۳-۴ نشان داده شده است. نرمال بوتان (nC_4) و اکتان (nC_8) تقریباً ۸۲٪ از خوراک برج جداکننده بوتان را تشکیل می‌دهند و از نظر ضریب فراریت نیز با هم اختلاف زیادی دارند که باعث می‌شود دمای بالای و پایین برج اختلاف نسبتاً زیادی با هم داشته باشند. اجزاء سبکتر از جزء کلیدی سبک به مقدار خیلی ناچیزی در محصول پایین برج ظاهر می‌شوند اما از مقدار اجزاء سنگین‌تر از جزء کلیدی سنگین در بالای برج نمی‌توان صرف نظر کرد.

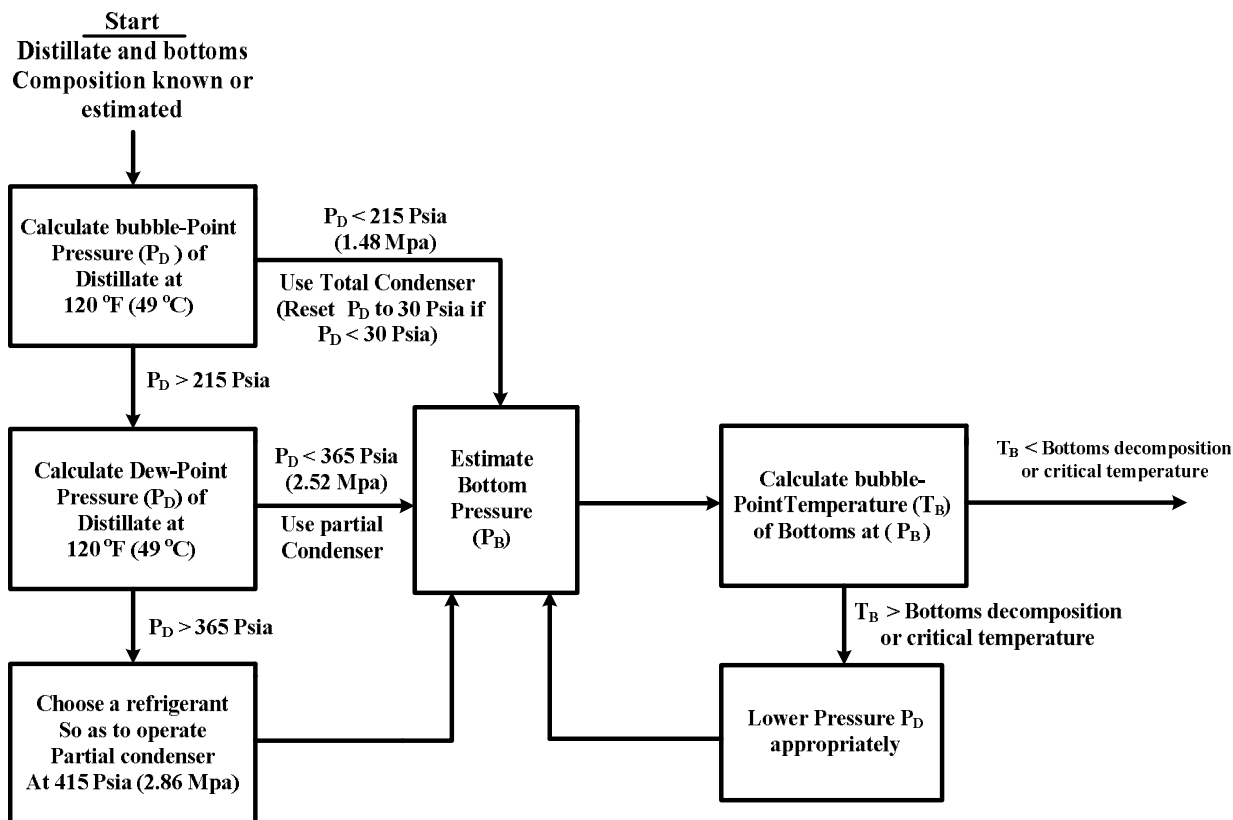
تخمین بازیابی اجزاء غیر کلیدی

برای یک سیستم چند جزئی، تقریباً همه اجزاء سبکتر از جزء کلیدی سبک (اجزایی که نقطه جوش آنها از نقطه جوش جزء سبک کمتر باشد) در بالای برج ظاهر می‌شوند و تقریباً همه اجزاء سنگین‌تر از جزء کلیدی سنگین (اجزایی که نقطه جوش آنها از نقطه جوش جزء سنگین بیشتر باشد) در پایین برج ظاهر خواهند شد. برای سیستم‌هایی که شامل جزء میانی نیز باشند جزء میانی بین پایین و بالای برج توزیع می‌شود. جزء کلیدی سبک و کلیدی سنگین نیز بین بالا و پایین برج توزیع می‌شوند که نحوه توزیع شدن آنها به خواص این مواد بستگی دارد. برای اینکه فشار برج را محاسبه کنیم لازم است همه اجزاء به صورت تخمینی بین بالا و پایین برج توزیع شوند. برای این منظور فرض می‌کنیم اجزاء سبک‌تر از جزء سبک کاملاً در بالای برج و اجزاء سنگین‌تر از جزء سنگین کاملاً پایین برج ظاهر شوند و اجزاء میانی را به طور تخمینی بین بالا و پایین برج توزیع می‌نماییم.

فشار برج و انتخاب کندانسور

جهت طراحی مقدماتی باید فشار برج و نوع کندانسور مطابق آنچه در شکل ۴-۴ نشان داده شده مشخص شود. در این الگوریتم فشار مخزن جریان برگشتی از صفر تا $415 \text{ Psi} (2.86 \text{ Mpa})$ در دمای $120^\circ \text{F} (49^\circ \text{C})$ در نظر گرفته شده است. دمای $120^\circ \text{F} (49^\circ \text{C})$ برای این منظور در نظر گرفته شده تا بتوان از آب به عنوان ماده خنک کننده کندانسور استفاده کرد. دما و فشار ذکر شده به فاکتورهای اقتصادی بستگی دارند. افت فشار کندانسور و همچنین افت فشار برج، 5 Psi در نظر گرفته می‌شود. وقتی تعداد سینی‌های برج معلوم است افت فشار هر سینی 0.1 Psi/Tray برای برج اتمسفریک و یا برج‌هایی با فشار بیشتر در نظر گرفته می‌شود همچنین در صورتی که تعداد سینی‌های برج معلوم باشد افت فشار 0.05 Psi/Tray در نظر گرفته می‌شود. افت فشار کندانسور در برج خلاء $5 - 2 \text{ Psi}$ در نظر گرفته می‌شود. دمای پایین برج نیز باید بررسی شود این دما نباید در حدود دمای بحرانی اجزاء باشد و همچنین باید ساختار اجزاء حفظ شود و باعث شکسته شدن آنها نشود.

خوراک نیز باید در شرایط ورودی به برج به صورت آدیباتیک تبخیر ناگهانی شود. مثلاً اگر خوراک در میانه برج وارد شود باید در فشار $P_D + 7.5$ (فشار مخزن جریان برگشتی است و $7/5$ شامل افت فشار کندانسور و نیمی از برج می‌باشد) به صورت آدیباتیک تبخیر ناگهانی شود.



شکل ۴-۴ : الگوریتم جهت بدست آوردن فشار برج و نوع کندانسور

مثال ۴-۲ : برای برج جداکننده بوتان که در شکل ۴-۳ نشان داده شده، فشار برج و نوع کندانسور را بدست آورید.

حل : ابتدا باید محاسبات نقطه حباب را با استفاده از غلظت محصول بالای برج که در شکل ۴-۳ نشان داده شده در دمای $120^{\circ}F$ ($49^{\circ}C$) انجام دهیم. با انجام این محاسبات فشار مخزن جریان برگشتی 71.68 Psi بدست می‌آید پس با توجه به اینکه این فشار کوچکتر از 215 Psi است کندانسور کلی انتخاب می‌شود چون افت فشار کندانسور 5 Psi در نظر گرفته می‌شود فشار بالای برج $(71.68 + 5) = 76.68\text{ Psi}$ خواهد بود و با توجه به اینکه افت فشار برج 5 Psi در نظر گرفته می‌شود فشار پایین برج $(76.68 + 5) = 81.68\text{ Psi}$ خواهد بود. فشار برج توسط بچلر^۱ در سرتاسر برج 80 Psi در نظر گرفته شد و با توجه به این فشار دمای بالای برج $131^{\circ}F$ و دمای پایین برج $346.4^{\circ}F$ بدست آمده است که دمای پایین برج خیلی کمتر از دماهای بحرانی اجزاء است و باعث تجزیه اجزاء هم نمی‌شود.

فشار خوراک برج جداکننده بوتان در حدود 100 Psi می‌باشد که باید در شرایط برج (فشار 80 Psi) به صورت آدیاباتیک تبخیر ناگهانی شود که این کار توسط بچلر به صورت زیر انجام شده است.

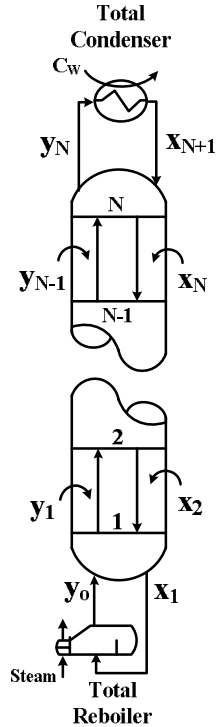
Component	lbmole/hr	
	Vapor Feed	Liquid Feed
iC ₄	3.3	8.7
nC ₄	101.5	346.5
iC ₅	4.6	31.4
nC ₅	1.6	13.4
nC ₆	1.3	21.7
nC ₇	1.2	37.9
nC ₈	3.2	269.0
nC ₉	0.2	30.8
	116.9	759.4

دمای خوراک (82.2 °C) 180 °F بدست می‌آید و میزان q به صورت زیر می‌باشد.

$$q = \frac{\text{Fraction of liquid in feed}}{\text{total feed}} = \frac{759.4}{876.3} = 0.8666$$

حداقل تعداد مراحل تعادلی

برای جداسازی بین دو جزء کلیدی از مخلوط چندجزئی، می‌توان معادله برای محاسبه حداقل تعداد مراحل تعادلی بدست آورد. حداقل تعداد مراحل تعادلی در حالت جریان برگشتی کامل امکان‌پذیر است. حالت جریان برگشتی کامل در عمل قابل حصول است برای این منظور ابتدا جریان خوراک را به برج برقرار می‌کنیم تا همه سینی‌های برج پر شوند سپس جریان خوراک را قطع می‌کنیم در این حالت هیچگونه محصولی از بالای برج خارج نمی‌شود و همه بخار ایجاد شده روی سینی N ام توسط کندانسور میعان شده و به همان سینی برگشت داده می‌شود. به همین ترتیب در پایین برج نیز محصولی نخواهیم داشت و همه مایع خروجی از سینی زیرین، توسط جوش‌آور^۱ به بخار تبدیل می‌شود و به سینی زیرین برمی‌گردد. این حالت در شکل ۴-۵ نشان داده شده است.



شکل ۴-۵ : شمایی از یک برج تقطیر در حالت جریان برگشتی کامل (Total Reflux)

در حالت پایا^۱ با فرض اینکه هیچگونه حرارتی از برج تلف نشود میزان حرارت داده شده به جوش آور دقیقاً برابر با حرارت گرفته شده از کندانسور می‌باشد. همچنین با استفاده از موازنه جرم ، میزان جریانی که بین دو سینی متوالی تبادل می‌شود و همچنین غلظت آنها با هم برابر هستند. برای مثال $V_{N-1} = L_N$ و $y_{i,N-1} = x_{i,N}$ می‌باشد. البته میزان جریان مایع و بخار از یک سینی به سینی دیگر تغییر می‌کند. بدست آوردن یک معادله جهت محاسبه حداقل تعداد مراحل تعادلی با استفاده از مقادیر k^2 و استفاده از برابری غلظت جریان‌های تبادل شده بین سینی‌ها قابل حصول است. برای جزء i روی سینی اول در شکل ۴-۵ رابطه تعادلی زیر را می‌توان نوشت.

$$y_{i,1} = k_{i,1} x_{i,1} \quad 1-4$$

با توجه به موازنه جرم ، غلظت جریان‌های تبادل شده بین سینی اول و دوم با هم برابر هستند.

$$y_{i,1} = x_{i,2} \quad 2-4$$

با ترکیب دو معادله اخیر خواهیم داشت.

$$x_{i,2} = k_{i,1} x_{i,1} \quad 3-4$$

برای جزء i روی سینی دوم نیز می‌توان رابطه تعادل را به صورت زیر نوشت.

$$y_{i,2} = k_{i,2} x_{i,2} \quad 4-4$$

1- Steady State
2- k Value

با ترکیب معادله ۳-۴ و ۴-۴ خواهیم داشت.

$$y_{i,2} = k_{i,2} k_{i,1} x_{i,1} \quad ۵-۴$$

رابطه ۵-۴ را می‌توان به صورت زیر برای سینی N ام بسط داد.

$$y_{i,N} = k_{i,N} k_{i,N-1} \dots k_{i,2} k_{i,1} x_{i,1} \quad ۶-۴$$

یک رابطه مشابه نیز برای جزء j به صورت زیر خواهیم داشت.

$$y_{j,N} = k_{j,N} k_{j,N-1} \dots k_{j,2} k_{j,1} x_{j,1} \quad ۷-۴$$

با تقسیم کردن معادله ۶-۴ بر معادله ۷-۴ رابطه زیر بدست می‌آید.

$$\frac{y_{i,N}}{y_{j,N}} = \alpha_N \alpha_{N-1} \dots \alpha_2 \alpha_1 \left(\frac{x_{i,1}}{x_{j,1}} \right) \quad ۸-۴$$

یا

$$\left(\frac{x_{i,N+1}}{x_{i,1}} \right) \left(\frac{x_{j,1}}{x_{j,N+1}} \right) = \prod_{k=1}^{N_{Min}} \alpha_k \quad ۹-۴$$

که $\alpha_k = \frac{k_{i,k}}{k_{j,k}}$ ضریب فراریت بین اجزاء i و j می‌باشد. رابطه ۹-۴ غلظت دو جزء i و j را در جریان

بالا و پایین برج در یک برج با N مرحله تعادلی در حالت جریان برگشتی کامل بر حسب ضریب فراریتشان نشان می‌دهد. البته دمای هر مرحله باید مشخص باشد تا بتوان ضریب فراریت را برای آن بدست آورد اما با ثابت در نظر گرفتن ضریب فراریت می‌توان معادله ۹-۴ را برای بدست آوردن حداقل تعداد مراحل تعادلی به صورت زیر مرتب کرد.

$$\left(\frac{x_{i,N+1}}{x_{i,1}} \right) \left(\frac{x_{j,1}}{x_{j,N+1}} \right) = \alpha^{N_{Min}} \quad ۱۰-۴$$

یا

$$N_{Min} = \frac{\log \left[\left(\frac{x_{i,N+1}}{x_{i,1}} \right) \left(\frac{x_{j,1}}{x_{j,N+1}} \right) \right]}{\log \alpha_{i,j}} \quad ۱۱-۴$$

معادله ۱۱-۴ که کاربرد زیادی دارد به معادله فنسکی^۱ معروف است که جزء i به عنوان جزء کلیدی سبک و جزء j به عنوان جزء کلیدی سنگین شناخته می‌شود. حداقل تعداد مراحل تعادلی علاوه بر اجزاء کلیدی، توسط اجزاء غیر کلیدی نیز تحت تاثیر قرار می‌گیرد زیرا اجزاء غیر کلیدی روی ضریب فراریت تاثیر گذار خواهند بود.

با استفاده از معادله ۴-۱۱ می‌توان حداقل تعداد مراحل تعادلی را بدست آورد. اما معمول است که دبی اجزاء کلیدی را به جای غلظت اجزاء در معادله ۴-۱۱ بکار بریم. دبی اجزاء کلیدی در محصول بالای برج با d_i و d_j دبی این اجزاء در پایین برج با b_i و b_j نشان داده می‌شوند. که با این جایگزاری، معادله ۴-۱۱ به صورت زیر خواهد شد.

$$N_{Min} = \frac{\log \left[\left(\frac{d_i}{b_i} \right) \left(\frac{b_j}{d_j} \right) \right]}{\log \alpha_m} \quad \text{or} \quad 12-4$$

$$N_{Min} = \frac{\log \left[\left(\frac{d_i}{d_j} \right) \left(\frac{b_j}{b_i} \right) \right]}{\log \alpha_m}$$

که ضریب فراریت توسط رابطه زیر تخمین زده می‌شود.

$$\alpha_m = \left[(\alpha_{i,j})_N (\alpha_{i,j})_1 \right]^{\frac{1}{2}} \quad 13-4$$

پس حداقل تعداد مراحل تعادلی به درجه جداسازی اجزاء کلیدی و ضریب فراریت آنها وابسته است و همچنین مستقل از غلظت و حالت خوراک است. در عمل برج‌های تقطیر تا حداقل ۱۵۰ مرحله تعادلی نیز ساخته شده‌اند.

وقتی ضریب فراریت در طول برج متغیر باشد و یا تعداد حداقل مراحل تعادلی زیاد باشد استفاده از رابطه فنسکی دارای دقت زیادی نخواهد بود و این رابطه تعداد حداقل مراحل تعادلی را بیشتر از مقدار واقعی آن بدست می‌آورد. تحت این شرایط سعی می‌شود از معادله وین^۱ استفاده شود. در این معادله فرض بر این است که ضریب k اجزاء کلیدی بر حسب یکدیگر به صورت تابع زیر باشد.

$$k_i = \xi_{i,j} k_j^{\phi_{i,j}} \quad 14-4$$

ضریب ϕ و ξ ، ضرایب تجربی هستند که برای فشار برج و دماهای مختلف بدست آورده می‌شوند. برای بدست آوردن حداقل تعداد مراحل تعادلی در این حالت معادله ۴-۶ را بر معادله ۴-۷ که به توان ϕ رسانده شده تقسیم می‌کنیم و با ترکیب کردن آن با معادله ۴-۱۴ معادله زیر حاصل می‌شود.

$$N_{min} = \frac{\log \left[\left(\frac{x_{i,N+1}}{x_{i,1}} \right) \left(\frac{x_{j,1}}{x_{j,N+1}} \right)^{\phi_{i,j}} \right]}{\log \xi_{i,j}} \quad 15-4$$

در صورتی که معادله ۴-۱۴ صادق نباشد استفاده از معادله ۴-۱۵ خطای زیادی خواهد داشت.

مثال ۳-۴: برای برج جداکننده بوتان که در شکل ۳-۴ نشان داده شده، حداقل تعداد مراحل تعادلی را با استفاده از روش‌های زیر بدست آورید.

الف: با استفاده از روش فنسکی

ب: با استفاده از روش وین

فرض کنید فشار سرتاسر برج در 80 Psi ثابت باشد. مقادیر k نیز توسط بچلر ارائه شده که در شکل ۴-۶ نشان داده شده است.

حل: نرمال بوتان و ایزوپنتان، اجزاء کلیدی مسئله هستند. غلظت محصولات بالا و پایین برج با استفاده از اطلاعات شکل ۳-۴ به صورت زیر می‌باشد.

Component		$x_{N+1} = x_D$	$x_1 = x_B$
	iC ₄	0.0256	0 ≈
lk	nC ₄	0.9445	0.0147
hk	iC ₅	0.0278	0.0563
	nC ₅	0.0021	0.0343
	nC ₆	0 ≈	0.0563
	nC ₇	0 ≈	0.0958
	nC ₈	0 ≈	0.6667
	nC ₉	0 ≈	0.0759
		1.0000	1.0000

الف: با استفاده از شکل ۴-۶، ضریب فراریت بالای برج (در دمای $131^\circ F$) به صورت زیر خواهد بود.

$$(\alpha_{nC_4, iC_5})_N = \frac{1.03}{0.495} = 2.08$$

ضریب فراریت برای پایین برج (در دمای $346.4^\circ F$) نیز با استفاده از شکل ۴-۶ بدست می‌آید.

$$(\alpha_{nC_4, iC_5})_1 = \frac{5.20}{3.60} = 1.44$$

با استفاده از رابطه ۴-۱۳ می‌توان ضریب فراریت متوسط را بدست آورد.

$$\alpha_m = [(2.08)(1.44)]^{\frac{1}{2}} = 1.73$$

از آنجا که $d_i/d_j = x_{Di}/x_{Dj}$ و $b_i/b_j = x_{Bi}/x_{Bj}$ است با استفاده از رابطه ۴-۱۲ می‌توان حداقل تعداد مراحل تعادلی را بدست آورد.

$$N_{Min} = \frac{\log \left[\left(\frac{0.9445}{0.0278} \right) \left(\frac{0.0563}{0.0147} \right) \right]}{\log 1.73} = 8.88 \text{ Stages}$$

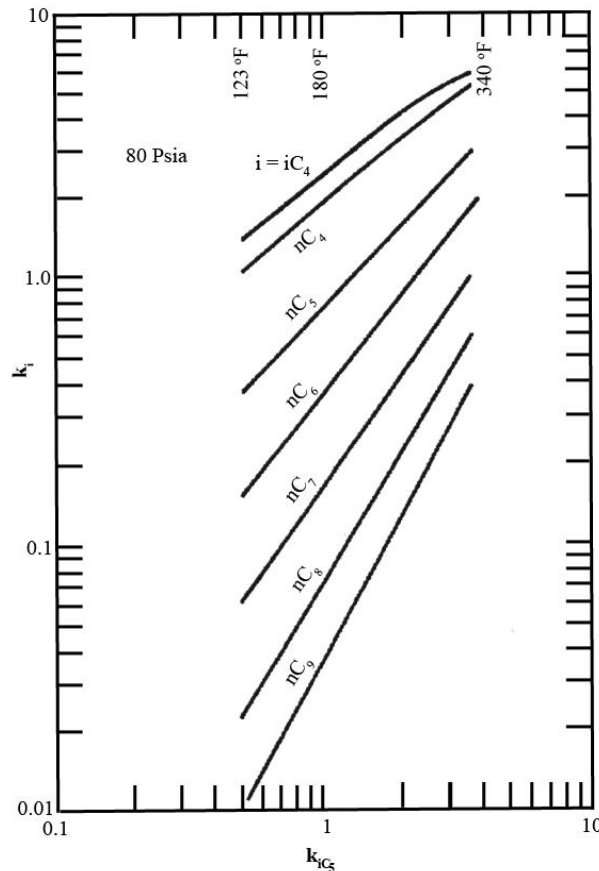
ب: با استفاده از شکل ۴-۶ می‌توان k_{nC_4} را بر حسب k_{iC_5} بدست آورد.

$$k_{nC_4} = 1.862 k_{iC_5}^{0.843}$$

پس $\xi = 1.862$ و $\phi = 0.843$ خواهد بود که با استفاده از رابطه ۴-۱۵ می‌توان تعداد حداقل مراحل تعادلی را بدست آورد.

$$N_{Min} = \frac{\log \left[\left(\frac{0.9445}{0.0147} \right) \left(\frac{0.0563}{0.0278} \right)^{0.843} \right]}{\log 1.862} = 7.65 \text{ Stages}$$

در این مسئله جواب بدست آمده از روش وین یک مرحله تعادلی کمتر از جواب بدست آمده توسط فنسکی می‌باشد.



شکل ۴-۶: مقادیر k برای هیدروکربن‌ها در فشار 80 Psi

توزیع اجزاء غیر کلیدی

توزیع اجزاء غیر کلیدی در جریان برگشتی کامل (روش فنسکی و روش وین)

معادلات فنسکی و وین به دو جزء کلیدی محدود نمی‌شوند و می‌توان از آنها برای توزیع بقیه اجزاء نیز استفاده کرد. ابتدا با استفاده از اجزاء کلیدی باید N_{Min} را بدست آوریم سپس توسط معادلات اخیر بقیه اجزاء را بین بالا و پایین برج توزیع کنیم. توزیع بدست آمده یک تخمین اولیه است. برای بدست آوردن توزیع

اجزاء در حالی که تعداد سینی‌ها بیش از N_{Min} باشد. وقتی از معادله وین استفاده می‌کنیم توزیع اجزاء غیرکلیدی مشکل‌تر است.

از این پس اجزاء غیر کلیدی با اندیس i و جزء کلیدی سنگین با اندیس r نشان داده می‌شوند. با استفاده از خواص لگاریتم می‌توان معادله ۴-۱۲ را به صورت زیر بازنویسی کرد.

$$\left(\frac{d_i}{b_i}\right) = \left(\frac{d_r}{b_r}\right) (\alpha_{i,r})_m^{N_{Min}} \quad ۱۶-۴$$

از آنجا که $f_i = d_i + b_i$ است معادله اخیر را می‌توان به صورت زیر نوشت.

$$b_i = \frac{f_i}{1 + \left(\frac{d_r}{b_r}\right) (\alpha_{i,r})_m^{N_{Min}}} \quad ۱۷-۴$$

یا

$$d_i = \frac{f_i \left(\frac{d_r}{b_r}\right) (\alpha_{i,r})_m^{N_{Min}}}{1 + \left(\frac{d_r}{b_r}\right) (\alpha_{i,r})_m^{N_{Min}}} \quad ۱۸-۴$$

معادلات ۴-۱۷ و ۴-۱۸ توزیع اجزاء غیرکلیدی را در حالت جریان برگشتی کامل را با استفاده از معادله فنسکی نشان می‌دهد.

برای معادله وین نیز می‌توان چنین کاری انجام داد که نتایج آن به صورت زیر است.

$$b_i = \frac{f_i}{1 + \frac{\xi_{i,r}^{N_{Min}}}{\left(\frac{b_r}{d_r}\right)^{\varphi_{i,r}} \left(\frac{B}{D}\right)^{1-\varphi_{i,r}}} \quad ۱۹-۴$$

و

$$d_i = \frac{f_i}{1 + \frac{\xi_{i,r}^{N_{Min}}}{\left(\frac{b_r}{d_r}\right)^{\varphi_{i,r}} \left(\frac{B}{D}\right)^{1-\varphi_{i,r}}} \quad ۲۰-۴$$

که در معادلات اخیر B و D به صورت زیر می‌باشند.

$$B = \sum_i b_i \quad ۲۱-۴$$

و

$$D = \sum_i d_i \quad ۲۲-۴$$

برای استفاده از معادلات ۴-۱۹ و ۴-۲۰ باید مقادیر B و D را حدس بزنیم سپس صحت مقادیر حدس زده شده توسط روابط ۴-۲۱ و ۴-۲۲ بررسی می‌شوند. برای دقت بیشتر بهتر است که توزیع اجزاء را برای پایین برج بدست آوریم سپس توزیع اجزاء برای بالای برج را با استفاده از موازنه جرم محاسبه کنیم. مثال ۴-۴: برای مثال ۴-۳ توزیع اجزاء غیر کلیدی بین بالا و پایین برج را با استفاده از معادله فنسکی بدست آورید.

حل: ضریب فراریت اجزاء بر حسب جزء کلیدی سنگین (ایزو پنتان) در دمای بالای برج و دمای پایین برج و همچنین ضریب فراریت متوسط با استفاده از مقادیر k استخراج شده از شکل ۴-۶ در جدول زیر ارائه شده است.

a_{i,iC_5}			
Component	131 °F	346.4 °F	Geometric mean
iC ₄	2.81	1.60	2.12
nC ₅	0.737	0.819	0.777
nC ₆	0.303	0.500	0.389
nC ₇	0.123	0.278	0.185
nC ₈	0.0454	0.167	0.0870
nC ₉	0.0198	0.108	0.0463

با جایگزاری مقادیر برای ایزوبوتان در رابطه ۴-۱۷ توزیع ایزوبوتان در پایین برج بدست می‌آید.

$$b_{iC_4} = \frac{12}{1 + \frac{13}{23}(2.12)^{8.88}} = 0.0268 \text{ lbmole/hr}$$

سپس توزیع ایزوبوتان برای بالای برج با استفاده از موازنه جرم بدست می‌آید.

$$d_{iC_4} = f_{iC_4} - b_{iC_4} = 12 - 0.0268 = 11.9732 \text{ lbmole/hr}$$

نتایج محاسبات مشابه برای بقیه اجزاء غیر کلیدی به صورت زیر خواهد بود.

Component	$(a_i, iC_5)_m^{N_{\min}}$	d_i	b_i
iC ₄	790	11.9732	0.0268
nC ₄	130	442.0	6.0
iC ₅	1.00	13.0	23.0
nC ₅	0.106	0.851	14.149
nC ₆	0.000228	0.00297	22.99703
nC ₇	3.11×10^{-7}	6.87×10^{-6}	39.1
nC ₈	3.83×10^{-10}	5.98×10^{-8}	272.2
nC ₉	1.41×10^{-12}	2.48×10^{-11}	31.0
		467.8272	408.4728

توزیع اجزاء غیر کلیدی (روش هنگستییک- گدس^۱)

توزیع اجزاء بین بالا و پایین برج را می‌توان توسط معادله هنگس تییک- گدس [۴,۳] بدست آورد.

$$\log(d_i/b_i) = A + B \log \alpha_i \quad ۲۳-۴$$

d_i : تعداد مولهای جزء i در محصول بالای برج

b_i : تعداد مولهای جزء i در محصول پایین برج

α_i : ضریب فراریت جزء i

A, B : ثابت‌های معادله

که موازنه جرم برای جزء i به صورت زیر خواهد بود.

$$f_i = d_i + b_i \quad ۲۴-۴$$

مقدار بازیابی ماده i در محصول بالای برج را می‌توان به صورت $\frac{d_i}{f_i}$ بیان کرد، میزان بازیابی ماده i در پایین

برج به صورت $\frac{b_i}{f_i}$ یا $1 - \frac{d_i}{f_i}$ خواهد شد. با جایگزاری این دو معادله در معادله ۲۳-۴ خواهیم داشت.

$$\log \left[\frac{(d_i/f_i)}{1 - (d_i/f_i)} \right] = A + B \log (\alpha_i) \quad ۲۵-۴$$

با حل معادله بالا برای جزء i بازیابی شده، معادله زیر حاصل خواهد شد.

$$d_i/f_i = (10^A \alpha_i^B)/(1 + 10^A \alpha_i^B) \quad 26-4$$

با استفاده از موازنه جرم خواهیم داشت.

$$b_i/f_i = 1/(1 + 10^A \alpha_i^B) \quad 27-4$$

ثابت‌های معادله ۲۶-۴ و ۲۷-۴ با استفاده از میزان بازیافت لازم برای جزء کلیدی سبک و میزان بازیافت لازم برای جزء کلیدی سنگین بدست می‌آیند.

$$A = -\log \left[\frac{(b_{hk}/f_{hk})}{1 - (b_{hk}/f_{hk})} \right] \quad 28-4$$

$$B = \frac{\log \left[\left(\frac{d_{lk}/f_{lk}}{1 - (d_{lk}/f_{lk})} \right) \left(\frac{b_{hk}/f_{hk}}{1 - (b_{hk}/f_{hk})} \right) \right]}{\log(\alpha_{lk})} \quad 29-4$$

مثال ۴-۵: خوراکی که غلظت و فراریت نسبی اجزاء آن به صورت جدول ۲-۴ می‌باشد در نظر بگیرید بازیافت لازم برای جزء کلیدی سبک (O) ۹۴/۸۴٪ و بازیافت لازم برای جزء کلیدی سنگین (P) ۹۵/۳۹٪ می‌باشد میزان بازیافت بقیه اجزاء را بدست آورید.

جدول ۲-۴: مشخصات خوراک برای مثال ۴-۵

Component	f_i	α_i
M	0.10	2.30
N	0.13	1.75
O (lk)	0.25	1.45
P (hk)	0.23	1.00
Q	0.15	0.90
R	0.08	0.83
S	0.06	0.65

Used by permission, Hydrocarbon Processing, Yaws, C, L, et al
V.58 No. 2 (1979), p.99, Gulf Pub. Co., all rights reserved

حل: قبل از محاسبه توزیع بقیه اجزاء، باید ثابت‌های معادله را مطابق معادله ۲۸-۴ و ۲۹-۴ بدست آوریم.

$$b_{hk}/f_{hk} = 0.9539 \Rightarrow A = -\log \left(\frac{0.9539}{1 - 0.9539} \right) = -1.3158$$

$$d_{lk}/f_{lk} = 0.9484, \alpha_{lk} = 1.45 \Rightarrow B = \frac{\log \left[\left(\frac{0.9484}{1 - 0.9484} \right) \times \left(\frac{0.9539}{1 - 0.9539} \right) \right]}{\log 1.45} = 15.988$$

میزان بازیافت جزء M در جریان بالای برج با استفاده از معادله ۴-۲۶ به صورت زیر خواهد بود.

$$d_M / f_M = (10^{-1.3158} 2.30^{15.988}) / (1 + 10^{-1.3158} 2.30^{15.988}) = 0.99997$$

میزان بازیافت جزء M در جریان پایین برج با استفاده از معادله ۴-۲۷ به صورت زیر خواهد بود.

$$b_M / f_M = 1 / (1 + 10^{-1.3158} 2.30^{15.988}) = 0.00003$$

همین محاسبات را برای بقیه اجزاء نیز تکرار می‌کنیم. نتایج این محاسبات در جدول ۴-۳ نشان داده شده است.

جدول ۴-۳ : نتایج محاسبات مثال ۴-۵

Component	Percent recovery	
	In distillate	In bottom
	(100 d_i/f_i)	(100 b_i/f_i)
M	99.997	0.003
N	99.731	0.269
O (lk)	94.840	5.160
P (hk)	4.610	95.390
Q	0.889	99.111
R	0.245	99.755
S	0.005	99.995

Used by permission, Hydrocarbon Processing, Yaws, C, L, et al V.58 No. 2 (1979), Gulf Pub. Co., all rights reserved

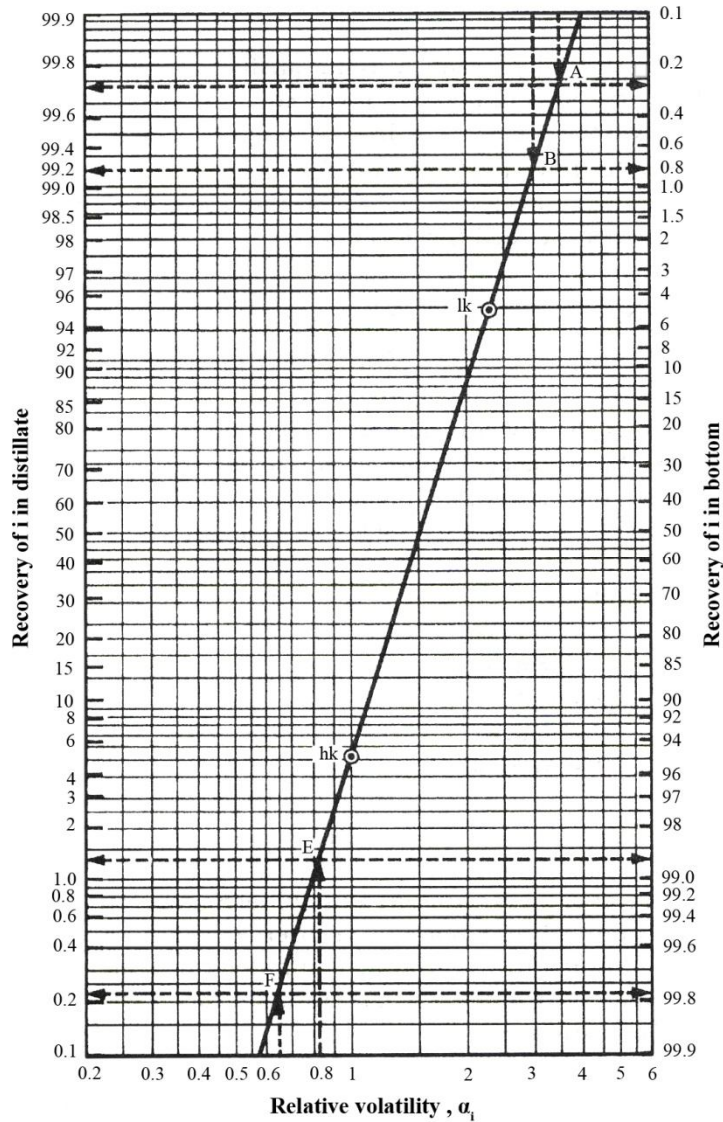
توزیع اجزاء غیر کلیدی (روش یاوس و همکاران^۱)

یک روش توسط یاوس و همکاران [۵] ارائه شده که با استفاده از آن می‌توان بازیابی اجزاء را در محصول بالا و پایین برج بدست آورد و توافق خوبی با روش سینی به سینی دارد مراحل این روش به صورت زیر است.

۱- نسبت $\frac{d_i}{b_i}$ را برای جزء سبک و سنگین بر حسب فراریت آنها (α_i) در سیستم لگاریتمی (log log) رسم

می‌کنیم. با استفاده از این دو نقطه یک خط مستقیم ایجاد می‌شود که $\frac{d_i}{b_i}$ و α_i بقیه اجزاء روی این

خط قرار می‌گیرد. که یک نمونه از آن در شکل ۴-۷ نشان داده شده است.



شکل ۴-۷: تخمین بازیابی اجزاء غیر کلیدی توسط روش یانوس و همکاران

با استفاده از معادله فنسکی می‌توان ثابت کرد $\log\left(\frac{d_i}{b_i}\right)$ بر حسب $\log(\alpha_i)$ به صورت یک خط مستقیم خواهد شد. معادله فنسکی به صورت زیر است.

$$N_{Min} = \frac{\log \left[\frac{x_D (1 - x_B)}{x_B (1 - x_D)} \right]}{\log \alpha_{lk}}$$

ابتدا صورت و منخرج عبارت داخل کروشه را در DB ضرب می‌کنیم.

$$N_{Min} = \frac{\log \left[\frac{D x_D B (1 - x_B)}{B x_B D (1 - x_D)} \right]}{\log \alpha_{lk}}$$

با مرتب کردن رابطه بالا خواهیم داشت :

$$\log\left(\frac{D x_D}{B x_B}\right) = (N_{Min}) \log \alpha_{lk} - \log\left[\frac{B(1-x_B)}{D(1-x_D)}\right]$$

رابطه بالا را در صورتی که به صورت دبی اجزاء بیان کنیم به صورت زیر خواهد شد.

$$\log\left(\frac{d_i}{b_i}\right) = (N_{Min}) \log \alpha_{lk} + \log\left(\frac{d'_i}{b'_i}\right)$$

پس $\log\left(\frac{d_i}{b_i}\right)$ بر حسب $\log(\alpha_i)$ خطی خواهد بود.

۲- با استفاده از α_i هر جزء و خط رسم شده می توان نسبت $\frac{d_i}{b_i}$ را برای هر جزء بدست آورد.

۳- با یک موازنه جرم حول کل برج خواهیم داشت.

$$d_i + b_i = f_i$$

با حل همزمان $\frac{d_i}{b_i}$ بدست آمده در مرحله ۲ و معادله کلی موازنه جرم در مرحله ۳ می توان d_i و b_i را

بدست آورد.

نسبت $\frac{d_i}{b_i}$ را می توان به درصد بازیافت (Y_{iD}) تبدیل کرد ارتباط بین نسبت $\frac{d_i}{b_i}$ و درصد بازیافت (Y_{iD}) در

جدول ۴-۴ نشان داده شده است.

جدول ۴-۴ : رابطه بین $\frac{d_i}{b_i}$ و درصد بازیافت $Y_{i,D} = \frac{d_i}{f_i}$

Y_{iD}	d_i/b_i	Y_{iD}	d_i/b_i	Y_{iD}	d_i/b_i	Y_{iD}	d_i/b_i
99.9	999	96	24.0	40	0.6670	2	0.02040
99.8	499	94	15.7	30	0.4290	1.0	0.01010
99.6	249	92	11.5	20	0.2500	0.8	0.00806
99.4	166	90	9.00	15	0.1760	0.6	0.00604
99.2	124	85	5.67	10	0.1110	0.4	0.00402
99.0	99.0	80	4.00	8	0.0870	0.2	0.00200
98.5	65.7	70	2.33	6	0.0638	0.1	0.00100
98.0	49.0	60	1.50	4	0.0417		
97.0	32.3	50	1.00	3	0.0309		

Used by permission , Chem.Eng., Yaws, G.L., et al Jan. 29 (1979) , p. 101, all rights reserved

رابطه بین $\frac{d_i}{b_i}$ و درصد بازیافت $Y_{i,D} = \frac{d_i}{f_i}$ را می‌توان به صورت زیر بدست آورد. با یک موازنه کلی برای جزء i حول برج خواهیم داشت.

$$d_i + b_i = f_i$$

طرفین را بر f_i تقسیم می‌کنیم.

$$\frac{d_i}{f_i} + \frac{b_i}{f_i} = 1$$

از طرفی $\frac{b_i}{f_i} = \frac{d_i}{f_i} \frac{b_i}{d_i}$ خواهد بود که با جایگزین کردن آن در رابطه بالا خواهیم داشت.

$$\frac{d_i}{f_i} (1 + b_i/d_i) = 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{d_i}{f_i} = \frac{1}{1 + \frac{b_i}{d_i}}$$

صورت و مخرج معادله اخیر را در $\frac{d_i}{b_i}$ ضرب می‌کنیم.

$$\frac{d_i}{f_i} = \frac{d_i/b_i}{d_i/b_i + 1} \quad \Rightarrow \quad Y_{i,D} = \frac{d_i/b_i}{d_i/b_i + 1}$$

و بالعکس خواهیم داشت.

$$d_i/b_i = \frac{Y_{i,D}}{1 - Y_{i,D}}$$

مثال ۴-۶ : اجزاء C و D توسط تقطیر از هم جدا می‌شوند. ۹۵٪ بازیافت ماده C در بالای برج و ۹۵٪ بازیافت ماده D در پایین برج مورد نیاز است. خوراک به صورت مایع اشباع و با ترکیب نشان داده شده در جدول ۴-۵ وارد برج تقطیر می‌شود. میزان بازیافت بقیه اجزاء را برای بالا و پایین برج بدست آورید.

جدول ۴-۵ : شرایط جریانها برای مثال ۴-۶

Feed Component	Composition, Mol. Fraction	Relative Volatility	Keys
A	0.05	3.5	
B	0.20	3.0	
C	0.30	2.3	Light
D	0.25	1.0	Heavy
E	0.15	0.83	
F	0.05	0.63	

Distillate Component	Recovery Desired %	Recovery Desired %
A		99.72**
B		99.20**
C	95	--
D	5	--
E		1.30**
F		0.22**

Bottom Component	Recovery Desired %	Recovery Desired %
A		0.28**
B		0.80**
C	5	--
D	95	--
E		98.70**
F		99.78**

* See calculations

** From Figure 4-7

Used by permission , Yaws, G.L., et al , Chem. Eng , Jan. 29 (1979) , p.101, all rights reserved

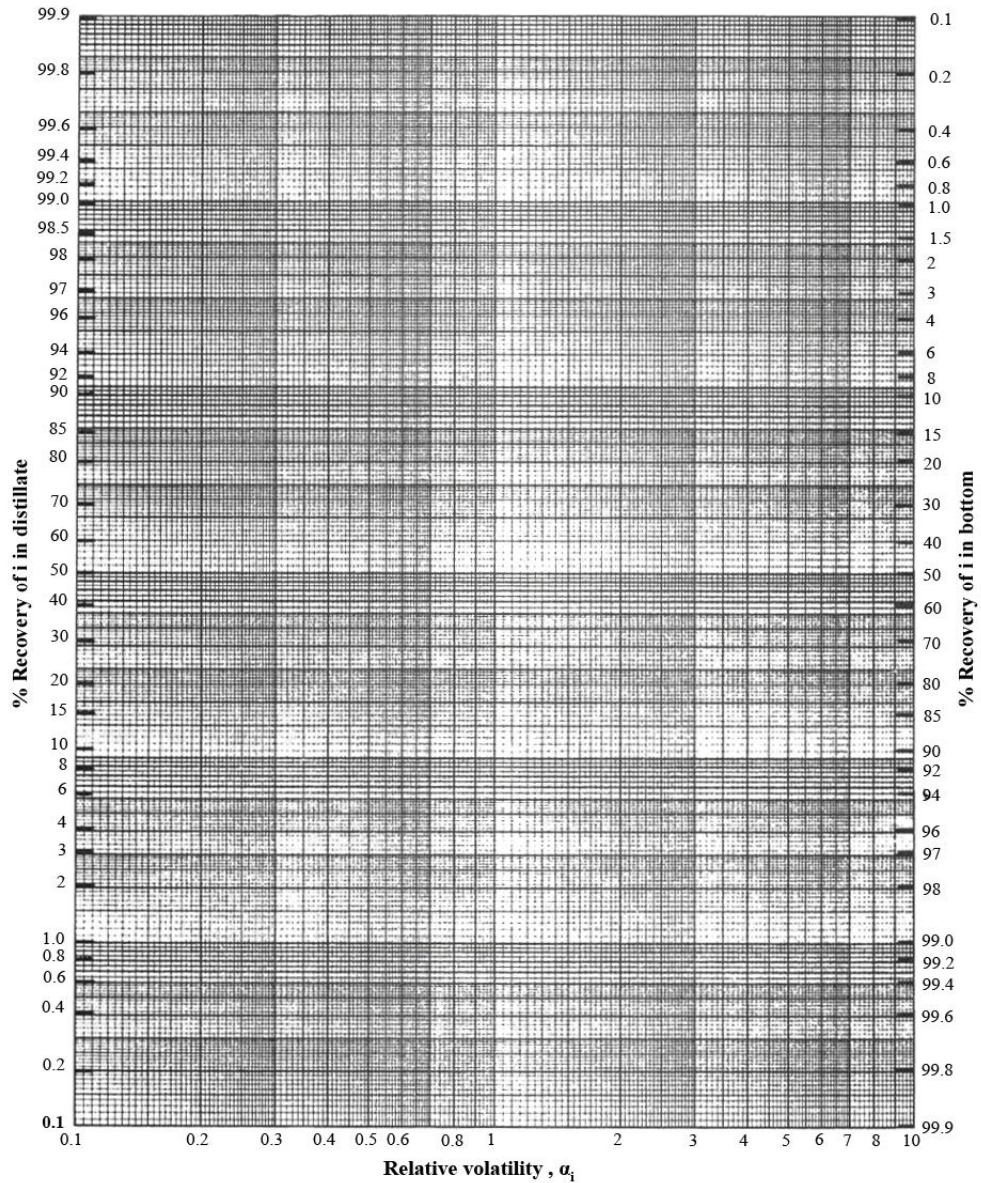
حل : مراحل به صورت زیر است.

۱- میزان $\frac{d_i}{b_i}$ را بر حسب α_i برای اجزاء سبک و سنگین در سیستم لگاریتمی (log log) که یک نمونه از آن

در شکل ۴-۸ نشان داده شده است رسم می‌گردد.

$$\text{for lk} \quad \alpha_l = 2.3 \quad Y_{i,D} = 0.95 \quad \Rightarrow \quad \frac{d_i}{b_i} = 19$$

$$\text{for hk} \quad \alpha_h = 1 \quad Y_{i,D} = 0.05 \quad \Rightarrow \quad \frac{d_i}{b_i} = 0.0526$$



شکل ۴-۸ : سیستم رسم لگاریتمی (log log)

۲- با استفاده از خط رسم شده و α_i بقیه مواد می‌توان نسبت $\frac{d_i}{b_i}$ و $Y_{i,D}$ آنها را بدست آورد که نتایج در جدول زیر آمده است.

Component	Recovery In distillate , %	Recovery In bottoms , %	Remarks
A	99.72	0.28	Graph
B	99.20	0.80	Graph
C (LK)	95	5	Specified
D (HK)	5	95	Specified
E	1.3	98.7	Graph
F	0.22	99.78	Graph

نتایج نشان داده شده در جدول ۴-۶ [۵] مقایسه بین روش اخیر برای توزیع مواد بین بالا و پایین برج و روش سینی به سینی را نشان می‌دهد. که تخمین بازیابی اجزاء با استفاده از روش اخیر توافق بسیار خوبی با روش سینی به سینی دارد. در مورد اول (Case I) بازیافت جزء سبک در بالای برج ۹۵٪ و بازیافت جزء سنگین در پایین برج ۹۴٪ می‌باشد. در مورد دوم (Case II) بازیافت جزء سبک در بالای برج ۹۰٪ و بازیافت جزء سنگین در پایین برج ۸۵٪ است. در مورد سوم (Case III) بازیافت جزء سبک در بالای برج ۸۵٪ و بازیافت جزء سنگین در پایین برج ۸۱٪ می‌باشد.

جدول ۴-۶: مقایسه روش تخمین بازیابی Yaws et al و روش سینی به سینی

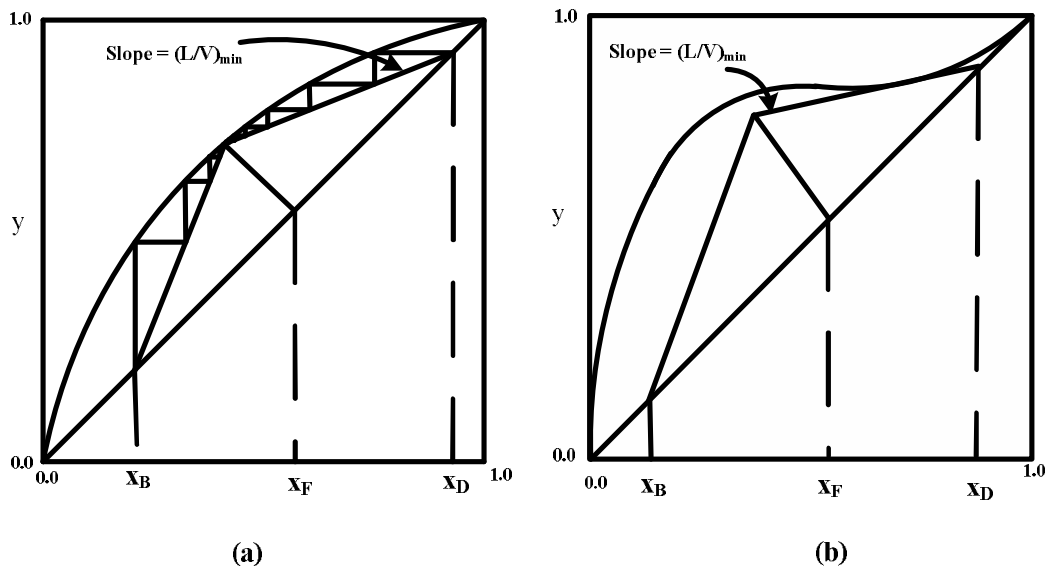
Composition X_i					
		Distillate		Bottoms	
Component		Nomograph	Plate to plate	Nomograph	Plate to plate
Case I High recovery (16 trays)	A	0.0901	0.0901	0.0002	0.0002
	B	0.3588	0.3591	0.0026	0.0023
	C (LK)	0.5197	0.5190	0.0269	0.0278
	D (LK)	0.0271	0.0271	0.5271	0.5271
	E	0.0041	0.0045	0.3314	0.3308
	F	0.0002	0.0002	0.1118	0.1118
Case II Inter Mediate recovery (13 trays)	A	0.0879	0.0880	0.0016	0.0012
	B	0.3466	0.3464	0.0128	0.0120
	C (LK)	0.4814	0.4770	0.0683	0.0726
	D (LK)	0.0668	0.0682	0.4839	0.4835
	E	0.0155	0.0187	0.3218	0.3187
	F	0.0018	0.0018	0.1116	0.1120
Case III Low recovery (9 trays)	A	0.0866	0.0872	0.0034	0.0028
	B	0.3376	0.3395	0.0250	0.0227
	C (LK)	0.4561	0.4552	0.1015	0.1027
	D (LK)	0.0844	0.0839	0.4606	0.4610
	E	0.0308	0.0295	0.3016	0.3031
	F	0.0045	0.0046	0.1079	0.1077

Used by permission, Chem. Eng., Yaws, C. L., et al Jan 29 (1979), p. 101. all rights reserved

مینیمم جریان برگشتی به برج^۱

حداقل جریان برگشتی، کمترین نسبت جریان برگشتی به محصول $\left(\frac{L}{D}\right)$ است که در آن جداسازی امکان پذیر است. اما این حالت در عملیات جداسازی پایا هرگز بوجود نمی آید بلکه دانستن این نسبت به ما کمک می کند تا بتوانیم نسبت جریان برگشتی که دارای مینیمم هزینه است را بدست آوریم. برای سیستم های هیدروکربنی جریان برگشتی $1/2$ تا 2 برابر جریان برگشتی مینیمم می باشد. باید خاطرنشان کرد اگر جریان برگشتی به برج زیاد باشد قطر برج، اندازه جوش آور^۲، اندازه میعان کننده^۳ و همچنین هزینه های عملیاتی شامل بخار مصرفی و ماده سرد کننده مصرفی زیاد خواهد شد اما در عوض تعداد مراحل تئوری کاهش پیدا خواهد کرد.

در تقطیر دو جزئی در حالتی که محلول ایده آل باشد همانطور که در قسمت A شکل ۴-۹ نشان داده شده در حداقل جریان برگشتی اکثر مراحل تعادلی در قسمت ورود خوراک تجمع یافته اند و تقریباً همه آنها در غلظت ثابت و برابر قرار گرفته اند. مایع و بخار خروجی از همه این سینی ها نیز برابر با خوراک ورودی می باشد. این منطقه تحت عنوان نقطه Pinch مورد بررسی قرار می گیرد. پس در حالتی که محلول ایده آل باشد نقطه تقاطع خطوط عملیاتی و منحنی تعادل، در محل ورود خوراک رخ می دهد که در قسمت A شکل ۴-۱۰ نیز نشان داده شده است.



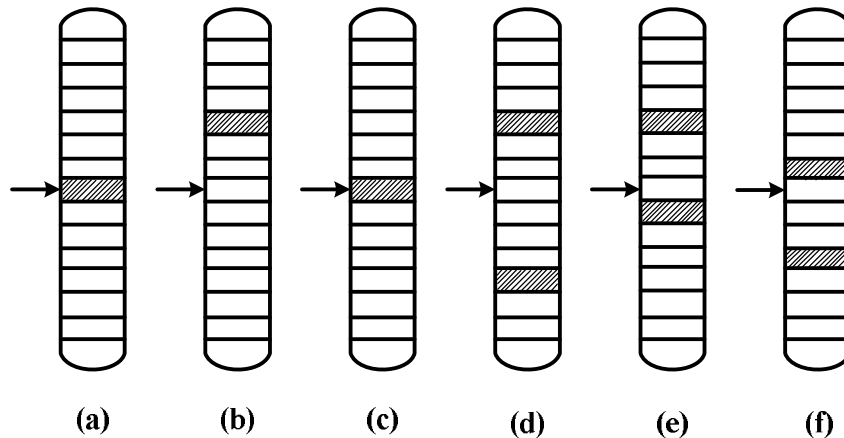
شکل ۴-۹ : شرایط حداقل جریان برگشتی (a) برای محلول های ایده آل (b) برای محلول های غیر ایده آل

- 1 - Minimum Reflux Ratio
- 2 - Reboiler
- 3 - Condenser

در تقطیر دو جزئی در صورتی که محلول مطابق آنچه که در قسمت B شکل ۴-۹ نشان داده شده ، غیر ایده-آل باشد در یک جریان برگشتی خاص ، خط عملیاتی بالای برج بر منحنی تعادل مماس می‌شود که در این حالت نیز برای انجام عملیات تقطیر بینهایت سینی لازم است در این حالت نیز اکثر سینی‌ها در قسمت برخورد خط عملیاتی بالای برج و منحنی تعادل واقع می‌شوند که غلظت مایع و بخار این سینی‌ها (مراحل تعادلی) بسیار به هم نزدیک است. پس وقتی محصول غیر ایده‌آل باشد ممکن است نقطه Pinch در قسمت خوراک ورودی رخ ندهد که این موضوع در قسمت B شکل ۴-۱۰ نشان داده شده است.

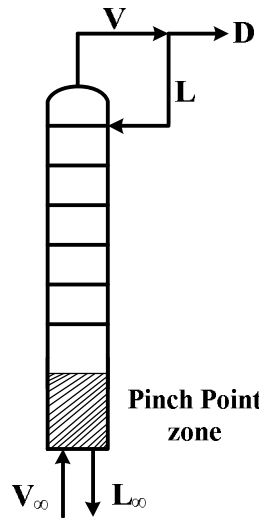
تحقیقات شیراس، هانسون و گیبسون^۱ [۶] نشان داد که در تقطیر چندجزئی برای حالت Pinch دو حالت وجود دارد. که به صورت زیر می‌باشند.

حالت اول : در این حالت کل اجزاء خوراک بین محصول بالا و پایین برج توزیع می‌شوند بدین معنا که همه اجزاء خوراک در محصول بالا و همچنین در محصول پایین برج یافت می‌شوند. در این حالت یک نقطه Pinch وجود دارد که آن هم در سینی خوراک رخ می‌دهد این حالت در قسمت C شکل ۴-۱۰ نشان داده شده است. این حالت از نظر عملیاتی زمانی رخ می‌دهد که دمای جوش اجزاء خوراک نزدیک به هم باشند یا اینکه جداسازی خیلی زیادی بین اجزاء لازم نباشد.



شکل ۴-۱۰ : محل قرار گرفتن نقطه Pinch در حداقل جریان برگشتی (a) سیستم دو جزئی ایده‌آل (b) سیستم دو جزئی غیر ایده‌آل (c) سیستم چند جزئی وقتی که کل اجزاء خوراک بین محصول بالا و پایین برج توزیع می‌شوند. (حالت اول) (d) سیستم چند جزئی وقتی که همه اجزاء سبک‌تر از جزء کلیدی سبک (LLK) و همه اجزاء سنگین‌تر از جزء کلیدی سنگین (HHK) بین محصول بالا و پایین برج توزیع نمی‌شوند. (حالت دوم) (e) سیستم چند جزئی وقتی که همه اجزاء سبک‌تر از جزء سبک (LLK) بین محصول بالا و پایین برج توزیع می‌شوند اما همه اجزاء سنگین‌تر از جزء سنگین (HHK) بین محصول بالا و پایین برج توزیع نمی‌شوند. (حالت دوم) (f) سیستم چند جزئی وقتی که همه اجزاء سبک‌تر از جزء سبک (LLK) بین

محصول بالا و پایین برج توزیع نمی‌شوند اما همه اجزاء سنگین‌تر از جزء سنگین (HHK) بین محصول بالا و پایین برج توزیع می‌شوند.



شکل ۴-۱۱ : نقطه Pinch بین خوراک و بالای برج

حالت دوم : در این حالت یک یا چند اجزاء خوراک فقط در یکی از محصولات برج ظاهر می‌شوند. در صورتی که محصول بالای برج و همچنین محصول پایین برج شامل همه اجزاء خوراک نباشند دو نقطه Pinch یکی در قسمت بالای برج^۱ و دیگری در قسمت پایین برج^۲ مطابق آنچه در قسمت D شکل ۴-۱۰ نشان داده شده رخ خواهد داد که بین خوراک و نقطه Pinch بالای برج ، اجزاء سنگینی جدا می‌شود که در محصول بالای برج ظاهر نمی‌شوند و بین خوراک و نقطه Pinch پایین برج ، اجزاء سبکی جدا می‌شود که در محصول پایین برج ظاهر نمی‌شود.

هرگاه همه اجزاء خوراک در محصول پایین برج وجود داشته باشد همانطور که در قسمت E شکل ۴-۱۰ نشان داده شده ، نقطه Pinch مربوط به پایین برج تا نقطه خوراک بالا کشیده می‌شود و زمانی که همه اجزاء خوراک در محصول بالای برج وجود داشته باشد همانطور که در قسمت F شکل ۴-۱۰ نشان داده شده ، نقطه Pinch مربوط به بالای برج تا نقطه خوراک پایین می‌آید.

وقتی که نقطه Pinch بین خوراک تا بالای برج باشد یا اینکه روی سینی خوراک باشد مطابق آنچه در شکل ۴-۱۱ نشان داده شده ، موازنه روی کل مراحل بالای نقطه Pinch به صورت زیر خواهد بود.

$$y_{i,\infty} V_{\infty} = x_{i,\infty} L_{\infty} + x_{i,D} D \quad 30-4$$

موازنه کلی جرم روی همین سیستم به صورت زیر خواهد بود.

$$V_{\infty} = L_{\infty} + D \quad 31-4$$

1 - Rectifying section
2 - Stripping Section

در نقطه Pinch غلظت فازها ثابت می‌ماند و با یکدیگر در حالت تعادل هستند، که رابطه تعادل آن به صورت زیر است.

$$y_{i,\infty} = k_{i,\infty} x_{i,\infty} \quad ۳۲-۴$$

با ترکیب معادله ۳۰-۴، ۳۱-۴ و ۳۲-۴ برای اجزاء i و j و حذف $y_{i,\infty}$ و V_{∞} ، جریان برگشتی (L_{∞}/D) به صورت معادله ذیل حاصل می‌شود.

$$\frac{L_{\infty}}{D} = \frac{\left[\frac{x_{i,D}}{x_{i,\infty}} - (\alpha_{i,j})_{\infty} \frac{x_{j,D}}{x_{j,\infty}} \right]}{(\alpha_{i,j})_{\infty} - 1} \quad ۳۳-۴$$

در معادله اخیر $(\alpha_{i,j})_{\infty} = k_{i,\infty}/k_{j,\infty}$ می‌باشد.

برای حالت اول نقطه Pinch، سینی مربوط به نقطه Pinch و خوراکی که در شرایط برج تبخیر ناگهانی شده است دارای غلظت یکسانی هستند. بنابراین $x_{i,\infty} = x_{i,F}$ خواهد بود و معادله ۳۳-۴ برای جزء کلیدی سبک (LK) و جزء کلیدی سنگین (HK) به صورت زیر بازنویسی می‌شود.

$$\frac{(L_{\infty})_{Min}}{F} = \frac{\frac{L_F}{F} \left[\frac{D x_{LK,D}}{L_F x_{LK,F}} - (\alpha_{LK,HK})_F \frac{D x_{HK,D}}{L_F x_{HK,F}} \right]}{(\alpha_{LK,HK})_F - 1} \quad ۳۴-۴$$

این معادله به آندروود^۱ [۷] نسبت داده می‌شود و برای حالتی که خوراک زیر نقطه اشباع^۲ باشد و همچنین زمانی که خوراک بخار فوق اشباع^۳ باشد بکار نمی‌رود. برای بقیه حالت‌های ترمودینامیکی خوراک ابتدا باید خوراک در شرایط ورودی به برج تبخیر ناگهانی شود سپس نتایج آن در رابطه ۴-۳۴ مورد استفاده قرار گیرد. رابطه ۴-۳۴ را می‌توان برای بقیه اجزاء غیر از اجزاء کلیدی نیز نوشت مثلاً می‌توان این معادله را برای اجزاء i و جزء کلیدی سبک نوشت. که با ترکیب معادله بدست آمده و معادله ۴-۳۴، معادله زیر بدست می‌آید. که از این معادله برای توزیع اجزاء خوراک بین بالا و پایین برج استفاده می‌شود.

$$\frac{D x_{i,D}}{L_F x_{i,F}} = \left[\frac{(\alpha_{i,HK})_F - 1}{(\alpha_{LK,HK})_F - 1} \right] \left(\frac{D x_{LK,D}}{L_F x_{LK,F}} \right) + \left[\frac{(\alpha_{LK,HK})_F - (\alpha_{i,HK})_F}{(\alpha_{LK,HK})_F - 1} \right] \left(\frac{D x_{HK,D}}{L_F x_{HK,F}} \right) \quad ۳۵-۴$$

برای نقطه Pinch در حالت اول باید شرط زیر برقرار باشد.

$$0 < \left(\frac{D x_{i,D}}{L_F x_{i,F}} \right) < 1$$

با استفاده از موازنه انرژی می‌توان جریان برگشتی خارجی را توسط جریان برگشتی داخلی بدست آورد.

$$\frac{(L_{Min})_{external}}{D} = (R_{Min})_{external} = \frac{(L_{\infty})_{Min} (H_{V_{\infty}} - H_{L_{\infty}}) - D (H_{V_{\infty}} - H_V)}{D (H_V - H_L)} \quad ۳۶-۴$$

-
- 1 - Underwood
 - 2 - Subcooled Liquid
 - 3 - Super heated Steam

که V بخار خارج شده از بالای برج و L مایع برگشتی به برج است. برای حالتی که بتوان جریان مایع و بخار را در طول برج ثابت در نظر گرفت (Constant molal over flow) می توان رابطه زیر را بکار برد.

$$(R_{Min})_{External} = (L_{\infty})_{Min} / D$$

حتی اگر معادله ۴-۳۴ در برخی موارد قابل قبول نباشد گیلیلاند نشان داد در صورتی که نقطه Pinch را از حالت اول در نظر بگیریم حداقل جریان برگشتی که از این رابطه محاسبه می شود مساوی یا بزرگتر از حداقل جریان برگشتی واقعی به برج است. که این مورد به خاطر چشم پوشی کردن از توزیع اجزاء غیر کلیدی در نقطه Pinch است.

مثال ۴-۷: با فرض اینکه نقطه Pinch برای مثال ۴-۳ از حالت اول باشد حداقل جریان برگشتی داخلی را برای آن بدست آورید سپس فرض حالت اول بودن نقطه Pinch را بررسی نمایید.

حل: با استفاده از شکل ۴-۶ ضریب فراریت بین نرمال بوتان (جزء کلیدی سبک) و ایزوپنتان (جزء کلیدی سنگین) برابر $1/93$ بدست می آید. شرایط خوراک را از مثال ۴-۲ و شرایط محصول بالای برج را از شکل ۴-۳ استخراج کرده و در رابطه ۴-۳۴ جایگزین می کنیم.

$$(L_{\infty})_{Min} = \frac{759.4 \left[\frac{442}{346.5} - 1.93 \left(\frac{13}{31.4} \right) \right]}{1.93 - 1} = 398 \text{ lbmole/hr}$$

توزیع اجزاء غیر کلید خوراک توسط رابطه ۴-۳۵ انجام می شود. از آنجا که ضریب فراریت نرمال پنتان به ایزوپنتان نزدیک است نرمال پنتان بین بالا و پایین برج توزیع می شود. میزان k مربوط به نرمال پنتان را می توان از شکل ۴-۶ بدست آورده، سپس با استفاده از آن ضریب فراریت را برای نرمال پنتان بدست می آوریم و در رابطه ۴-۳۵ جایگزین می کنیم تا توزیع نرمال پنتان بدست آید.

$$\frac{D x_{nC_5,D}}{L_F x_{nC_5,F}} = \left[\frac{0.765 - 1}{1.93 - 1} \right] \left(\frac{442}{346.5} \right) + \left[\frac{1.93 - 0.765}{1.93 - 1} \right] \left(\frac{13}{31.4} \right) = 0.1963$$

پس خواهیم داشت.

$$D x_{nC_5} = 0.1963(13.4) = 2.63 \text{ lbmole/hr}$$

از آنجا که مقدار نرمال پنتان ظاهر شده در محصول بالای برج کمتر از مقدار آن در خوراک است مقدار بدست آمده قابل قبول است. در صورتی که همین محاسبات را برای اجزاء سنگین تر از نرمال پنتان انجام دهیم مقادیر منفی بدست می آید و این بدین معناست که این اجزاء در محصول بالای برج اصلاً ظاهر نمی شوند. و اگر این محاسبات را برای ایزوبوتان انجام دهیم مقدار ایزوبوتان در محصول بالای برج بیشتر از مقدار خوراک خواهد شد و این بدین معناست که همه ایزوبوتان به محصول بالای برج هدایت می شود و ایزوبوتان اصلاً در محصول پایین برج ظاهر نمی شود.

در صورتی که به نتایج بالا توجه کنیم متوجه خواهیم شد که برخی از اجزاء در محصول بالای برج ظاهر نمی شوند پس نقطه Pinch از حالت اول نیست به همین دلیل مقدار محاسبه شده بیشتر از مقدار واقعی آن (289 lbmole/hr) است که توسط بچلر [۸] گزارش شده است.

برای حالت دوم نقطه Pinch ، معادلات ۴-۳۰ تا ۴-۳۳ همچنان صادق است اما معادله ۴-۳۳ را نمی‌توان برای بدست آوردن حداقل نسبت جریان برگشتی داخلی مستقیماً بکار برد زیرا $x_{i\infty}$ را برای این حالت نمی‌توان به سادگی به مشخصات خوراک ارتباط داد. یک روش ابتکاری توسط آندروود [۹] برای رفع این مشکل پیشنهاد شده است. وی برای قسمت بالای برج (بخش پالایش) مقدار Φ را به صورت زیر تعریف کرده است.

$$\sum \frac{(\alpha_{i,r})_{\infty} x_{i,D}}{(\alpha_{i,r})_{\infty} - \Phi} = 1 + (R_{\infty})_{Min} \quad ۳۷-۴$$

معادله ۳۷-۴ از حل همزمان معادلات ۴-۳۰ و ۴-۳۲ بدست آمده است.

$$\sum \frac{(\alpha_{i,r})_{\infty} x_{i,D}}{(\alpha_{i,r})_{\infty} - \frac{L_{\infty}}{[V_{\infty}(K_r)_{\infty}]}} = 1 + (R_{\infty})_{Min} \quad ۳۸-۴$$

که به مقدار $\frac{L_{\infty}}{[V_{\infty}(K_r)_{\infty}]}$ ضریب جذب در نقطه Pinch برای بالای برج گویند که به جای آن Φ جایگزاری شده است.

همچنین برای پایین برج (بخش دفع) مقدار Φ' به صورت زیر تعریف شده است.

$$\sum \frac{(\alpha'_{i,r})_{\infty} x_{i,B}}{(\alpha'_{i,r})_{\infty} - \Phi'} = 1 - (R'_{\infty})_{Min} \quad ۳۹-۴$$

که $R'_{\infty} = L'_{\infty}/B$ می‌باشد و مربوط به نقطه Pinch پایین برج است. در اثبات این روابط فرض Underwood بر این است که ضریب فراریت در محدوده بین نقطه Pinch بالا و پایین برج ثابت است سپس با فرض ثابت بودن دبی مایع و بخار مقادیر $(R_{\infty})_{Min}$ ، $(R'_{\infty})_{Min}$ و مشخصات خوراک را توسط رابطه زیر به یکدیگر ارتباط داد.

$$(L'_{\infty})_{Min} - (L_{\infty})_{Min} = qF \quad ۴۰-۴$$

و تحت این فرضیات نشان داد که یک مقدار θ (که $\theta = \Phi = \Phi'$ است) وجود دارد که در معادله ۴-۳۷ و ۴-۳۹ قرار می‌گیرد و هر دو نقطه Pinch را به یکدیگر ارتباط می‌دهد. برای اینکه یک رابطه برای θ بدست آوریم ابتدا معادله ۴-۳۷ و ۴-۳۹ را به ترتیب در D و B ضرب می‌کنیم و در رابطه ۴-۴۰ قرار می‌دهیم تا رابطه زیر بدست آید.

$$\sum \frac{(\alpha_{i,r})_{\infty} z_{i,F}}{(\alpha_{i,r})_{\infty} - \theta} = 1 - q \quad ۴۱-۴$$

که q حالت ترمودینامیکی خوراک ورودی به برج را نشان می‌دهد و اندیس r نشان دهنده جزء کلیدی سنگین می‌باشد. وقتی دو جزء کلیدی بین بالا و پایین برج توزیع می‌شوند با حل معادله ۴-۴۱ می‌توان مقدار θ ($1 < \theta < \alpha_{LK-HK}$) را بدست آورد سپس با قرار دادن θ در رابطه ۴-۳۷ می‌توان حداقل جریان برگشتی داخلی را محاسبه نمود.

$$\sum \frac{(\alpha_{i,r})_{\infty} x_{i,D}}{(\alpha_{i,r})_{\infty} - \theta} = 1 + (R_{\infty})_{Min} \quad ۴۲-۴$$

در صورتی که طرفین معادله اخیر را در D ضرب کنیم معادله زیر حاصل خواهد شد.

$$\sum \frac{(\alpha_{i,r})_{\infty} (D x_{i,D})}{(\alpha_{i,r})_{\infty} - \theta} = D + (L_{\infty})_{Min} \quad ۴۳-۴$$

و از طرفی

$$\sum (D x_{i,D}) = D \quad ۴۴-۴$$

دو معادله اخیر زمانی کاربرد دارد که دبی اجزاء کلیدی در محصول بالای برج معلوم باشد.

پیش‌بینی می‌شود در حداقل جریان برگشتی، جزء یا اجزاء دیگری غیر از اجزاء کلیدی بین بالا و پایین برج توزیع می‌شوند. تخمین مستقیم مقادیر $x_{i,D}$ در رابطه ۴-۴۲ امکان‌پذیر نیست این حالت زمانی رخ می‌دهد که یک یا چند جزء از نظر فرارایت بین اجزاء کلیدی واقع شوند یا در صورتی که هیچ جزئی بین آنها نباشد زمانی رخ می‌دهد که یک یا چند جزء دارای ضریب فرارایت نزدیک به اجزاء کلیدی باشند. در چنین حالتی معادله ۴-۴۱ برای محاسبه m ریشه θ مورد بررسی قرار می‌گیرد که تعداد m یکی کمتر از تعداد اجزائی است که بین بالا و پایین برج توزیع می‌شوند. مثلاً برای مثال ۴-۷ نرمال پنتان در حالت حداقل جریان برگشتی بین بالا و پایین برج توزیع می‌شود در صورتی که نرمال هگزان و اجزاء سنگین‌تر از آن فقط پایین برج ظاهر می‌شوند همچنین ایزوبوتان فقط در بالای برج ظاهر می‌شود پس نرمال بوتان، ایزوبوتان و نرمال پنتان بین بالا و پایین برج توزیع می‌شوند. از آنجا که سه جزء بین بالا و پایین برج توزیع می‌شوند به دو ریشه θ در معادله ۴-۴۱ نیاز داریم.

$$\alpha_{nC_4, iC_5} > \theta_1 > 1.0 > \theta_2 > \alpha_{nC_5, iC_5}$$

از آنجا که سه مجهول L_{∞} ، D و $D x_{nC_5, D}$ در رابطه ۴-۴۳ وجود دارند باید سه معادله نیز برای حل آن نوشته شود. دو معادله با استفاده از دو مقدار θ (θ_1, θ_2) و یک معادله با استفاده از $\sum D x_{i,D} = D$ می‌توان نوشت و مجهولات را بدست آورد.

مقدار حداقل جریان برگشتی داخلی $(R_{\infty})_{Min}$ با حل معادلات اخیر بدست می‌آید که با استفاده از موازنه انرژی ۴-۳۶ می‌توان حداقل جریان برگشتی خارجی را نیز بدست آورد. برای این منظور به غلظت اجزاء در نقطه Pinch بالای برج نیاز داریم برای محاسبه غلظت اجزاء در نقطه Pinch بالای برج رابطه زیر توسط آندروود [۹] ارائه شده است.

$$x_{i,\infty} = \frac{\theta x_{i,D}}{(R_{\infty})_{Min} ((\alpha_{i,r})_{\infty} - \theta)} \quad ۴۵-۴$$

ضمناً $y_{i,\infty}$ را می‌توان با استفاده از معادله ۴-۳۰ بدست آورد. مقدار θ که در معادله ۴-۴۵ استفاده می‌شود ریشه معادله ۴-۴۲ است که در محدوده زیر باشد.

$$0 < \theta < (\alpha_{HNK,r})_{\infty}$$

که اندیس HNK نشان دهنده سنگین‌ترین جزء غیر کلیدی در محصول بالای برج در حداقل جریان برگشتی است. وقتی که محدوده دمای جوش اجزاء خوراک زیاد باشد حداقل جریان برگشتی خارجی بسیار

زیادتر از حداقل جریان برگشتی داخلی خواهد بود مثلاً در یک نمونه که توسط بچلر [۸] مورد بررسی قرار گرفته جریان برگشتی خارجی ۵۵٪ بیشتر از جریان برگشتی داخلی می‌باشد. یک رابطه دیگر نیز توسط آندروود ارائه شده که غلظت اجزاء در نقطه Pinch پایین برج را نشان می‌دهد.

$$x'_{i,\infty} = \frac{\theta x_{i,B}}{[(R'_{\infty})_{Min} + 1] ((\alpha_{i,r})_{\infty} - \theta)} \quad ۴۶-۴$$

که در این حالت نیز θ باید ریشه معادله ۳۵-۱۲ و در محدوده زیر باشد.

$$0 < \theta < (\alpha_{HNK,r})_{\infty}$$

معادله آندروود به علت سادگی، بسیار مورد استفاده قرار می‌گیرد و معمولاً در استفاده از آن، توزیع اجزاء نیز صورت نمی‌گیرد و فرض می‌شود که حداقل جریان برگشتی داخلی و حداقل جریان برگشتی خارجی با هم برابرند. در صورتی که نتوان جریان مایع و بخار را بین نقاط Pinch بالا و پایین برج ثابت در نظر گرفت استفاده از معادله آندروود خطا خواهد داشت چون معادله ۴-۴۱ با فرض اینکه جریان مایع و بخار بین نقاط Pinch ثابت است نوشته شده است که این موضوع در مثال ۴-۸ نشان داده شده است. در صورتی که فرضیات روش آندروود قابل قبول باشد و مقدار جریان برگشتی منفی محاسبه شود بدین معناست که برای جداسازی مورد نظر به قسمت بالای برج (بخش پالایش) نیاز نیست. معادله آندروود نشان می‌دهد که حداقل جریان برگشتی تابع شرایط خوراک، ضریب فراریت و میزان جداسازی اجزاء کلیدی می‌باشد.

مثال ۴-۸: با فرض اینکه برای مثال ۴-۷ نقطه Pinch حالت دوم وجود دارد با استفاده از روش آندروود حداقل جریان برگشتی داخلی و حداقل جریان برگشتی خارجی را بدست آورید سپس فرضیات روش آندروود را برای این مسئله بررسی نمایید.

حل: فرض می‌کنیم دمای خوراک ($180^{\circ}F$) برای محاسبه ضریب فراریت در نقطه Pinch قابل قبول است. مقادیر زیر با استفاده از شکل ۴-۳ و شکل ۴-۶ استخراج شده است.

Species i	$z_{i,F}$	$\alpha_{i,HK}$
iC ₄	0.0137	2.43
lk nC ₄	0.5113	1.93
hk iC ₅	0.0411	1.00
nC ₅	0.0171	0.765
nC ₆	0.0262	0.362
nC ₇	0.0446	0.164
nC ₈	0.3106	0.0720
nC ₉	0.0354	0.0362
	1.000	

برای این مسئله مقدار q در مثال ۴-۲ محاسبه شده است و $q = 0.8666$ بدست آمده است. جایگزاری اطلاعات در رابطه ۴-۴۱ به صورت زیر خواهد بود.

$$\frac{2.43 (0.0137)}{2.43 - \theta} + \frac{1.93 (0.5113)}{1.93 - \theta} + \frac{1.00 (0.0411)}{1.00 - \theta} + \frac{0.765 (0.0171)}{0.765 - \theta} + \frac{0.0362 (0.0262)}{0.0362 - \theta} + \frac{0.164 (0.0446)}{0.164 - \theta} + \frac{0.072 (0.3106)}{0.072 - \theta} + \frac{0.0362 (0.0354)}{0.0362 - \theta} = 1 - 0.8666$$

معادله اخیر را می‌توان توسط روش نیوتن-رافسون برای چهار مقدار θ که در محدوده زیر قرار دارند حل کرد.

$$\alpha_{iC_4, iC_5} > \theta'_1 > \alpha_{nC_4, iC_5} > \theta_1 > \alpha_{iC_5, iC_5} > \theta_2 > \alpha_{nC_5, iC_5} > \theta'_2 > \alpha_{nC_6, iC_5}$$

$$2.43 > \theta'_1 > 1.93 > \theta_1 > 1 > \theta_2 > 0.765 > \theta'_2 > 0.362$$

که مقادیر θ به صورت زیر خواهد بود.

$$\theta'_1 = 2.4150235 \quad , \quad \theta_1 = 1.04504$$

$$\theta_2 = 0.78014 \quad , \quad \theta'_2 = 0.380591$$

فرض می‌کنیم ایزوبوتان و نرمال پنتان بین بالا و پایین برج توزیع شوند. با توجه به مقادیر θ و θ' و رابطه ۴-۴۳ خواهیم داشت.

$$D + (L_\infty)_{Min} = \frac{2.43 (D x_{iC_4, D})}{2.43 - 2.4150235} + \frac{1.93 (442)}{1.93 - 2.4150235} + \frac{1.0 (13)}{1 - 2.4150235} + \frac{0.765 (D x_{nC_5, D})}{0.765 - 2.4150235}$$

$$D + (L_\infty)_{Min} = \frac{2.43 (D x_{iC_4, D})}{2.43 - 1.04504} + \frac{1.93 (442)}{1.93 - 1.04504} + \frac{1.0 (13)}{1 - 1.04504} + \frac{0.765 (D x_{nC_5, D})}{0.765 - 1.04504}$$

$$D + (L_\infty)_{Min} = \frac{2.43 (D x_{iC_4, D})}{2.43 - 0.78014} + \frac{1.93 (442)}{1.93 - 0.78014} + \frac{1.0 (13)}{1 - 0.78014} + \frac{0.765 (D x_{nC_5, D})}{0.765 - 0.78014}$$

همچنین با استفاده از رابطه ۴-۴۴ می‌توان نوشت.

$$D = (D x_{iC_4, D}) + 442 + 13 + (D x_{nC_5, D})$$

با حل چهار معادله اخیر خواهیم داشت.

$$D = 472.727 \quad , \quad (L_{\infty})_{Min} = 222.301 \quad , \quad D x_{iC_4,D} = 15.187 \quad , \quad D x_{nC_5,D} = 2.540$$

از آنجا که مقدار ایزوبوتان در محصول بالای برج بیشتر از مقدار آن در خوراک است نتیجه می‌گیریم که ایزوبوتان کاملاً به بالای برج هدایت می‌شود و اصلاً پایین برج ظاهر نمی‌شود. اما مقدار نرمال پنتان کمتر از مقدار آن در خوراک است پس بین بالا و پایین برج توزیع می‌شود.

حال سعی می‌کنیم توزیع اجزاء سنگین‌تر از نرمال پنتان را نیز بررسی کنیم. فرض می‌کنیم نرمال پنتان و نرمال هگزان بین بالا و پایین برج توزیع می‌شود. که با توجه به اینکه $\theta'_2 = 0.380591$ است معادلات آن به صورت زیر خواهد بود.

$$D + (L_{\infty})_{Min} = \frac{2.43 (12)}{2.43 - 0.380591} + \frac{1.93 (442)}{1.93 - 0.380591} + \frac{1.0 (13)}{1 - 0.380591} + \frac{0.765 (D x_{nC_5,D})}{0.765 - 0.380591} + \frac{0.362 (D x_{nC_6,D})}{0.362 - 0.380591}$$

$$D + (L_{\infty})_{Min} = \frac{2.43 (12)}{2.43 - 0.78014} + \frac{1.93 (442)}{1.93 - 0.78014} + \frac{1.0 (13)}{1 - 0.78014} + \frac{0.765 (D x_{nC_5,D})}{0.765 - 0.78014} + \frac{0.362 (D x_{nC_6,D})}{0.362 - 0.78014}$$

$$D + (L_{\infty})_{Min} = \frac{2.43 (12)}{2.43 - 1.04504} + \frac{1.93 (442)}{1.93 - 1.04504} + \frac{1.0 (13)}{1 - 1.04504} + \frac{0.765 (D x_{nC_5,D})}{0.765 - 1.04504} + \frac{0.362 (D x_{nC_6,D})}{0.362 - 1.04504}$$

$$D = 12 + 442 + 13 + (D x_{nC_5,D}) + (D x_{nC_6,D})$$

با حل چهار معادله اخیر خواهیم داشت.

$$D = 464.404 \quad , \quad (L_{\infty})_{Min} = 227.63 \quad , \quad D x_{nC_5,D} = 2.595 \quad , \quad D x_{nC_6,D} = -5.191$$

از آنجا که مقدار نرمال هگزان در محصول بالای برج منفی است نتیجه می‌گیریم نرمال هگزان بالای برج ظاهر نمی‌شود پس نرمال هگزان و اجزاء سنگین‌تر از آن فقط در پایین برج ظاهر می‌شوند.

با توجه به محاسبات اخیر نتیجه می‌گیریم که فقط نرمال بوتان ، ایزوپنتان و نرمال پنتان بین بالا و پایین برج توزیع می‌شوند. پس ایزوبوتان کاملاً به بالای برج هدایت می‌شود ($D x_{iC_4,D} = 12$) و مقدار نرمال هگزان و اجزاء سنگین‌تر از آن در محصول بالای برج صفر می‌باشد. با قرار دادن اطلاعات در رابطه ۴-۴۳ و ۴-۴۴ خواهیم داشت.

$$D + (L_{\infty})_{Min} = \frac{2.43 (12)}{2.43 - 1.04504} + \frac{1.93 (442)}{1.93 - 1.04504} + \frac{1.0 (13)}{1 - 1.04504} + \frac{0.765(D x_{nC_5,D})}{0.765 - 1.04504}$$

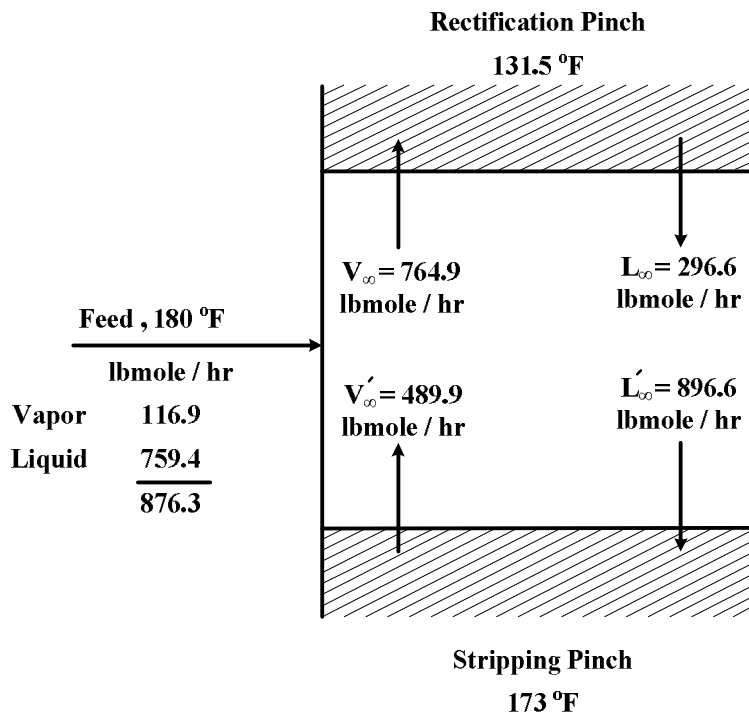
$$D + (L_{\infty})_{Min} = \frac{2.43 (12)}{2.43 - 0.78014} + \frac{1.93 (442)}{1.93 - 0.78014} + \frac{1.0 (13)}{1 - 0.78014} + \frac{0.765(D x_{nC_5,D})}{0.765 - 0.78014}$$

$$D = 12 + 442 + 13 + (D x_{nC_5,D})$$

با حل معادلات اخیر خواهیم داشت.

$$D x_{nC_5,D} = 2.56 \text{ lbmole/hr} \quad , \quad D = 469.56 \text{ lbmole/hr} \quad , \quad (L_{\infty})_{Min} = 219.8 \text{ lbmole/hr}$$

مقدار نرمال پنتان محاسبه شده ($D x_{nC_5} = 2.56$) بسیار نزدیک به مقدار $2/63$ محاسبه شده در مثال ۷-۴ است که در آن نقطه Pinch از حالت اول در نظر گرفته شده بود. حداقل جریان برگشتی داخلی نیز کمتر از مقدار محاسبه شده در مثال ۷-۴ (389 lbmole/hr) و همچنین کمتر از مقدار گزارش شده واقعی توسط بچلر [۸] (298 lbmole/hr) است. پس چون شرط ثابت بودن دبی مایع و بخار در این مثال صادق نیست جواب بدست آمده کمتر از مقدار واقعی بدست آمده است.



شکل ۴-۱۲: محل نقطه Pinch برای مثال ۷-۴ که توسط بچلر ارائه شده است.

مقادیر دبی مایع و بخار و دمای نقطه Pinch توسط بچلر ارائه شده که در شکل ۴-۱۲ نشان داده شده است. دمای متوسط محدوده بین نقاط Pinch، $152^\circ F (66.7^\circ C)$ است که پایین‌تر از دمای تبخیر ناگهانی خوراک در شرایط برج $(180^\circ F)$ است. خوراک گرم باعث تبخیر مایعات داخل برج و کم کردن q شده است.

$$q_{eff} = \frac{L'_\infty - L_\infty}{F} = \frac{896.6 - 296.6}{876.3} = 0.685$$

که این مقدار کمتر از مقدار محاسبه شده توسط محاسبات تبخیر ناگهانی ($q = 0.8666$) است. البته مقادیر $\alpha_{i,LK}$ در دمای $152^\circ F$ و $180^\circ F$ تفاوت چندانی ندارد اما استفاده از $q = 0.685$ در معادله ۴-۴۱ باعث می‌شود که $L_\infty = 287 \text{ lbmole/hr}$ بدست آید که $3/6\%$ کمتر از مقدار واقعی آن است اما در محاسبات امکان رسیدن به مقدار q میسر نیست.

برای محاسبه نسبت جریان برگشتی خارجی با استفاده از معادله ۴-۳۶، لازم است که غلظت مایع و بخار در نقطه Pinch توسط روابط ۴-۴۵ و ۴-۳۰ بدست آورده شود. مقدار θ که در معادله ۴-۴۵ مورد استفاده قرار می‌گیرد با استفاده از معادله ۴-۴۲ به صورت زیر بدست می‌آید.

$$\frac{2.43 (12)}{2.43 - \theta} + \frac{1.93 (442)}{1.93 - \theta} + \frac{1.00 (13)}{1.00 - \theta} + \frac{0.765 (2.56)}{0.765 - \theta} = 469.56 + 219.8$$

که مقدار θ باید در محدوده زیر باشد.

$$0 < \theta < 0.765$$

با حل معادله اخیر مقدار $\theta = 0.5803$ بدست می‌آید. غلظت مایع در نقطه Pinch با استفاده از رابطه ۴-۴۵ بدست می‌آید.

$$x_{i,\infty} = \frac{\theta (D x_{i,D})}{(L_\infty)_{Min} ((\alpha_{i,r})_\infty - \theta)}$$

که با استفاده از $(L_\infty)_{Min} = 219.8 \text{ lbmole/hr}$ برای ایزوبوتان خواهیم داشت.

$$x_{iC_4,\infty} = \frac{0.5803 (12)}{219.8 (2.43 - 0.5803)} = 0.0171$$

با ترکیب معادلات ۴-۳۰ و ۴-۳۱ خواهیم داشت.

$$y_{i,\infty} = \frac{x_{i,\infty} L_\infty + x_{i,D} D}{L_\infty + D}$$

که غلظت ایزوبوتان در فاز بخار در نقطه Pinch به صورت زیر خواهد بود.

$$y_{iC_4,\infty} = \frac{0.0171 (219.8) + 12}{219.8 + 469.56} = 0.0229$$

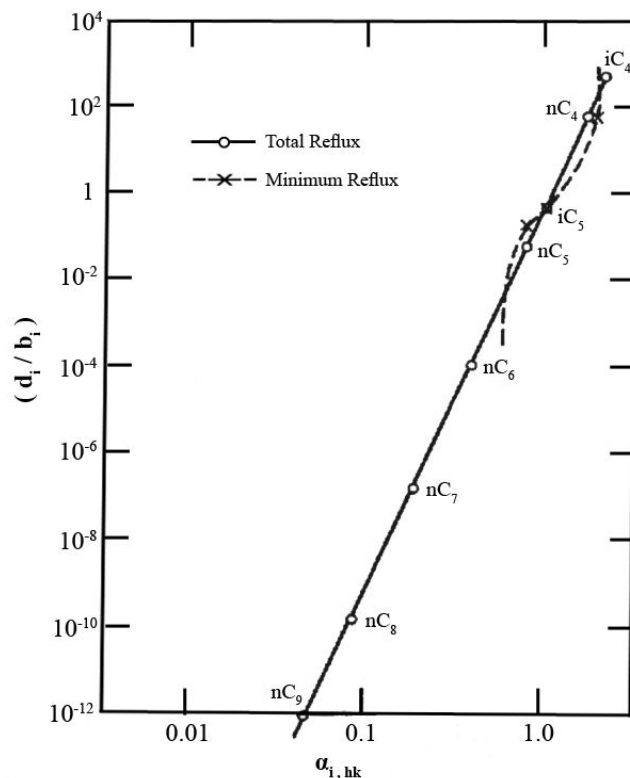
نتیجه محاسبات مشابه برای بقیه اجزاء به صورت زیر خواهد بود.

Component	$x_{i,\infty}$	$y_{i,\infty}$
i-C ₄	0.0171	0.0229
n-C ₄	0.8645	0.9168
i-C ₅	0.0818	0.0449
n-C ₅	0.0366	0.0154
	1.0000	1.0000

دمای نقطه Pinch را می‌توان با استفاده از محاسبات نقطه حباب روی مقادیر $x_{i,\infty}$ و یا محاسبات نقطه شبنم روی مقادیر $y_{i,\infty}$ بدست آورد که مقدار $126^\circ F$ بدست می‌آید. از آنجا که با استفاده از نقطه شبنم محصول خروجی از بالای برج، دمای محصول بالای برج $131^\circ F$ است می‌توان نتیجه گرفت که نقطه Pinch خیلی نزدیک به بالای برج رخ می‌دهد و می‌توان انتظار داشت حداقل جریان برگشتی داخلی $(R_\infty)_{Min}$ و حداقل جریان برگشتی خارجی $(R_{Min})_{External}$ تقریباً با هم برابر هستند. میزان حداقل جریان برگشتی داخلی توسط بچلر، 298 lbmole/hr محاسبه شده بود وی با استفاده از این مقدار، حداقل جریان برگشتی خارجی را 292 lbmole/hr بدست آورد.

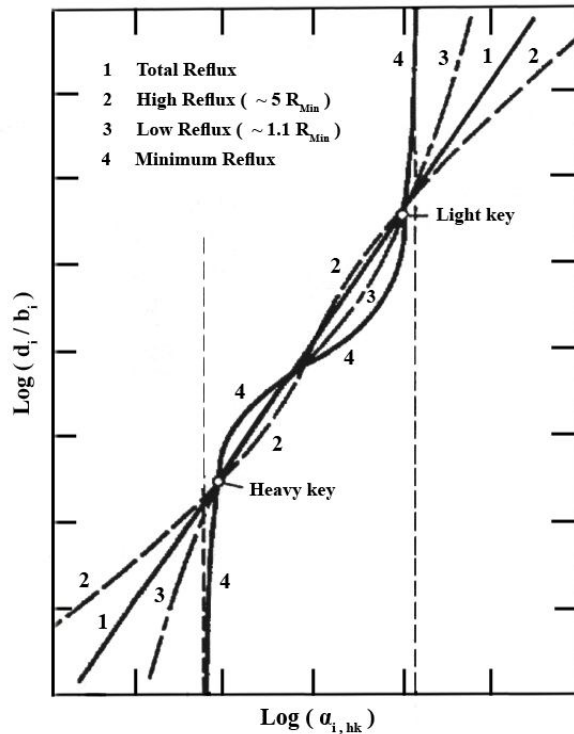
توزیع اجزاء غیر کلیدی در جریان برگشتی واقعی

برای یک مخلوط چندجزئی در حداقل جریان برگشتی تعداد کمی از اجزاء غیرکلیدی بین بالا و پایین برج توزیع می‌شوند در صورتی که در حالت جریان برگشتی بینهایت^۱ گستره بیشتری از اجزاء غیرکلیدی بین بالا و پایین برج توزیع می‌شوند. این دو حالت به عنوان حالت‌های حدی توزیع اجزاء غیر کلیدی شناخته می‌شوند. نسبت توزیع اجزاء غیرکلیدی برای برج جداکننده بوتان (که در شکل ۴-۳ نشان داده شده است) در شکل ۴-۱۳ نمایش داده شده است. برای حالت جریان برگشتی بینهایت نتایج مثال ۴-۴ که از رابطه فنسکی استفاده شده ترسیم شده است این ترسیم در مقیاس لگاریتمی (Log-Log) خطی است. برای حداقل جریان برگشتی نتایج مثال ۴-۸ که از معادله آندروود استفاده شده ترسیم شده است و با خط‌چین نشان داده شده است.



شکل ۴-۱۳: نسبت توزیع اجزاء غیر کلیدی در حالت جریان برگشتی بینهایت و حداقل جریان برگشتی

انتظار می‌رود که توزیع محصولات اجزاء غیر کلیدی بین بالا و پایین برج بین این دو شرایط حدی باشند. اما نتایج آزمایشگاهی استاپین و لاکهارت^۱ [۱۰] نشان داد که توزیع محصولات بین این دو شرایط حدی بسیار پیچیده است. یک نمونه از نتایج توزیع اجزاء غیرکلیدی در شکل ۴-۱۴ نشان داده شده است. برای نسبت‌های جریان برگشتی که به حداقل جریان برگشتی نزدیک‌اند (منحنی ۳) توزیع محصولات بین دو حالت حدی (منحنی ۱ و ۴) قرار می‌گیرد. در صورتی که برای نسبت‌های بالای جریان برگشتی (منحنی ۲) توزیع محصولات خارج از دو حالت حدی خواهند بود.



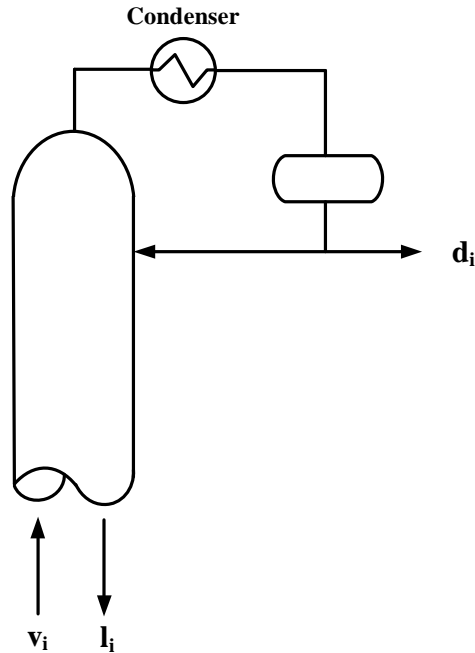
شکل ۴-۱۴: توزیع اجزاء بین محصول بالا و پایین برج در نسبت‌های مختلف جریان برگشتی

نتایج آزمایش‌های استاپین و لاکهارت نشان داد که در نسبت‌های جریان برگشتی بهینه (که بسیار به حداقل جریان برگشتی نزدیک است) توزیع محصولات شبیه به حداقل جریان برگشتی است که توزیع محصولات در این حالت را می‌توان از معادله فنسکی یا معادله وین بدست آورد.

محاسبه حداقل جریان برگشتی به برج (R_{Min}) بدون در نظر گرفتن توزیع اجزاء روش آندروود [۱۱] (سیستم‌های اجزاء مجاور)

این روش برای سیستم‌هایی شامل اجزاء مجاور، بدون وجود اجزاء میانی، کاربرد دارد. در این روش فراریت نسبی و میزان جریان مایع و بخار ثابت فرض می‌شود البته مشاهده شده است برای نمونه‌هایی که دارای این شرط نیستند نیز نتایج رضایت بخشی حاصل می‌شود. و برای بسیاری از مواد و سیستم‌های هیدروکربنی کاربرد دارد.

جریان مولی برای جزء i در بالای برج به صورت زیر است.



موازنه جزء i در بالای برج به صورت زیر است.

$$v_i = l_i + d_i \quad ۴۷-۴$$

و از طرفی روی هر سینی، تعادل $y_i = k_i x_i$ برقرار است که y_i و x_i به صورت زیر خواهند بود.

$$y_i = \frac{v_i}{V} \quad , \quad x_i = \frac{l_i}{L}$$

پس خواهیم داشت.

$$\frac{v_i}{V} = k_i \frac{l_i}{L} \quad \Rightarrow \quad l_i = \frac{L}{k_i V} v_i \quad ۴۸-۴$$

با جایگزینی معادله ۴۸-۴ در معادله ۴۷-۴ خواهیم داشت.

$$v_i \left(1 - \frac{L}{V k_i} \right) = d_i \quad \Rightarrow \quad v_i = \frac{d_i}{1 - \frac{L}{V k_i}} \quad ۴۹-۴$$

صورت و مخرج معادله را در $\alpha_i = \frac{k_i}{k_{hk}}$ ضرب می‌کنیم.

$$v_i = \frac{\alpha_i d_i}{\alpha_i - \frac{L}{V k_{hk}}} \quad ۵۰-۴$$

با توجه به اینکه L و V ثابت در نظر گرفته شده‌اند و همچنین k_{hk} مقداری ثابت است می‌توان $\frac{L}{V k_{hk}}$ را

مساوی θ قرار داد پس خواهیم داشت.

$$v_i = \frac{\alpha_i d_i}{\alpha_i - \theta} \quad ۵۱-۴$$

همچنین میزان کل مولهای بخار بالای برج از جمع مول همه اجزاء بدست می‌آید.

$$V_r = \sum v_i = \sum \frac{\alpha_i d_i}{\alpha_i - \theta} \quad ۵۲-۴$$

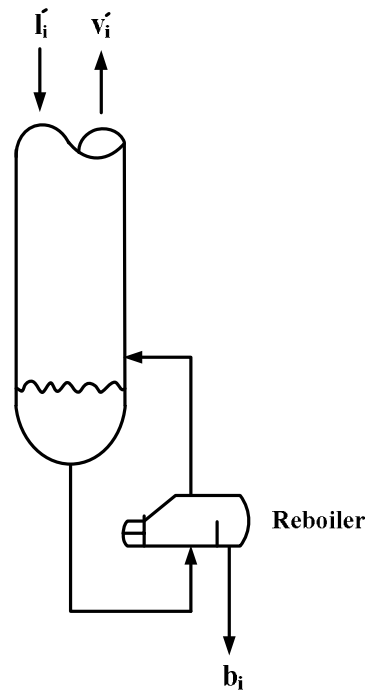
و با توجه به موازنه مولی کل در بالای برج خواهیم داشت. (چون هیچگونه واکنش شیمیایی رخ نمی‌دهد می‌توان به جای موازنه جرم موازنه را به صورت مولی نوشت)

$$V_r = L + D \Rightarrow L + D = \sum \frac{\alpha_i x_{Di} D}{\alpha_i - \theta} \quad ۵۳-۴$$

با تقسیم کردن طرفین بر D خواهیم داشت.

$$R_{Min} + 1 = \sum \frac{\alpha_i x_{Di}}{\alpha_i - \theta} \quad ۵۴-۴$$

جریان مولی برای جزء i در پایین برج در شکل زیر نشان داده شده است.



موازنه جزء i در پایین برج به صورت زیر است.

$$l'_i = v'_i + b_i \quad ۵۵-۴$$

و از طرفی تعادل روی سینی به صورت $y_i = k_i x_i$ است که y_i و x_i به صورت زیر خواهند بود.

$$y_i = \frac{v'_i}{V} \quad , \quad x_i = \frac{l'_i}{L}$$

پس خواهیم داشت.

$$\frac{v'_i}{V} = k_i \frac{l'_i}{L} \Rightarrow l'_i = \frac{L}{V k_i} v'_i \quad ۵۶-۴$$

با جایگزینی معادله ۵۶-۴ در معادله ۵۵-۴ خواهیم داشت.

$$v'_i \left(1 - \frac{L}{V k_i} \right) = -b_i \Rightarrow v'_i = \frac{-b_i}{1 - \frac{L}{V k_i}} \quad ۵۷-۴$$

صورت و مخرج معادله اخیر را در $\alpha_i = \frac{k_i}{k_{hk}}$ ضرب می‌کنیم.

$$v'_i = \frac{-\alpha_i b_i}{\alpha_i - \frac{L}{V k_{hk}}} \quad ۵۸-۴$$

با توجه به اینکه L و V ثابت در نظر گرفته شده‌اند و همچنین k_{hk} مقداری ثابت است می‌توان $\frac{L}{V} \frac{1}{k_{hk}}$ را

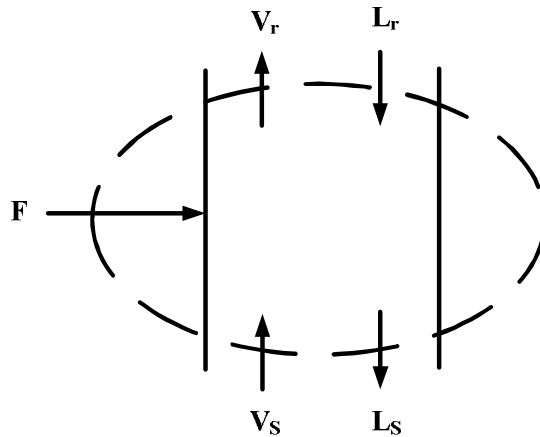
مساوی θ قرار داد پس خواهیم داشت.

$$v'_i = \frac{-\alpha_i b_i}{\alpha_i - \theta} \quad ۵۹-۴$$

همچنین میزان کل مولهای بخار پایین برج از جمع مول همه اجزاء بدست می‌آید.

$$V_s = \sum v'_i = \sum \frac{-\alpha_i b_i}{\alpha_i - \theta} \quad ۶۰-۴$$

قسمتی که خوراک وارد برج می‌شود در زیر نشان داده شده است.



که برای این قسمت موازنه کلی روی میزان بخار به صورت زیر است.

$$V_r - V_s = (1-q)F \quad ۶۱-۴$$

با قرار دادن معادلات ۵۲-۴ و ۶۰-۴ در معادله ۶۱-۴ خواهیم داشت.

$$\sum \frac{\alpha_i d_i}{\alpha_i - \theta} + \sum \frac{\alpha_i b_i}{\alpha_i - \theta} = (1-q)F \Rightarrow \sum \frac{\alpha_i (d_i + b_i)}{\alpha_i - \theta} = (1-q)F \quad ۶۲-۴$$

و از طرفی با موازنه جزء i حول کل برج به صورت زیر است.

$$f_i = d_i + b_i \quad ۶۳-۴$$

با جایگزینی معادله ۶۳-۴ در ۶۲-۴ خواهیم داشت.

$$\sum \frac{\alpha_i f_i}{\alpha_i - \theta} = (1-q) F \quad \Rightarrow \quad \sum \frac{\alpha_i x_{fi}}{\alpha_i - \theta} = (1-q) \quad ۶۴-۴$$

طرز استفاده از معادلات آندروود

۱- ابتدا با قرار دادن q و غلظت خوراک و مقادیر α_i در معادله ۶۴-۴ می‌توان θ را بدست آورد. θ بدست

آمده باید در محدوده $\alpha_{hk} < \theta < \alpha_{lk}$ باشد.

برای این منظور ابتدا معادله ۶۴-۴ را به صورت زیر مرتب می‌کنیم.

$$f(\theta) = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i x_{Fi}}{\alpha_i - \theta} - (1-q)$$

این نوع مرتب کردن برای این است که تابع مساوی صفر شود تا بتوان آن را از روش نیوتن رافسون یا سایر روشهای حل معادلات غیر خطی حل کرد.

برای حل معادله اخیر یک مقدار برای θ حدس می‌زنیم سپس $f(\theta)$ و $f'(\theta)$ را بدست می‌آوریم.

$$f'(\theta) = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i x_{Fi}}{(\alpha_i - \theta)^2}$$

حال با استفاده از روش نیوتن رافسون مقدار θ تصحیح شده بدست می‌آید.

$$\theta_{n+1} = \theta_n - \frac{f(\theta_n)}{f'(\theta_n)}$$

در صورتی که مقدار تصحیح شده و مقدار حدس زده شده با هم برابر نباشند مقدار تصحیح شده را به عنوان حدس بعدی در نظر می‌گیریم. این محاسبات را تا جایی انجام می‌دهیم تا مقدار حدس زده شده و مقدار تصحیح شده با هم برابر شوند.

۲- با قرار دادن غلظت اجزاء بالای برج و θ بدست آمده در معادله ۵۴-۴ می‌توان R_{Min} را بدست آورد.

مثال ۴-۹: خوراکی به صورت مایع اشباع با ترکیب زیر (جدول ۴-۷) وارد برج تقطیر می‌شود. با توجه به غلظت محصول بالای برج، مینیمم جریان برگشتی را با استفاده از روش آندروود بدست آورید.

جدول ۴-۷: شرایط خوراک و محصول بالای برج برای مثال ۴-۹

Component	α_i	x_{Fi}	x_{Di}
1	3.5	0.2	0.4
lk	2	2.2	0.3
hk	3	1	0.4
4	0.75	0.1	0

حل: ابتدا $\theta_1 = 1.5$ در نظر گرفته می‌شود و $f(1.5)$ و $f'(1.5)$ را بدست می‌آوریم.

$$f(1.5) = \frac{(3.5 \times 0.2)}{(3.5 - 1.5)} + \frac{(2.2 \times 0.3)}{(2.2 - 1.5)} + \frac{(1 \times 0.4)}{(1 - 1.5)} + \frac{(0.75 \times 0.1)}{(0.75 - 1.5)} - (1 - 1) = 0.3929$$

$$f'(1.5) = \frac{(3.5 \times 0.2)}{(3.5 - 1.5)^2} + \frac{(2.2 \times 0.3)}{(2.2 - 1.5)^2} + \frac{(1 \times 0.4)}{(1 - 1.5)^2} + \frac{(0.75 \times 0.1)}{(0.75 - 1.5)^2} = 3.2553$$

$$\theta_2 = \theta_1 - \frac{f(\theta_1)}{f'(\theta_1)} \Rightarrow \theta_2 = 1.5 - \frac{0.3929}{3.2553} = 1.3793$$

$$\theta_3 = 1.3889 \quad \theta_4 = 1.38906 \quad \theta_5 = 1.38906$$

$$R_{Min} + 1 = \sum \frac{\alpha_i x_{Di}}{\alpha_i - \theta}$$

$$R_{Min} + 1 = \frac{3.5 \times 0.4}{3.5 - 1.38906} + \frac{2.2 \times 0.5}{2.2 - 1.38906} + \frac{1 \times 0.1}{1 - 1.38906} \Rightarrow$$

$$R_{Min} = 0.7626$$

روش آندروود [۱۱] (سیستم‌های اجزاء میانی)

این روش برای سیستم‌هایی که اجزاء میانی دارند کاربرد دارد و یک روش طولانی محسوب می‌شود اما در هر

حال با یک دور حل کردن معادلات می‌توان $\left(\frac{L}{D}\right)_{Min}$ را بدست آورد.

مراحل بدست آوردن مینیمم جریان برگشتی به صورت زیر است:

قبل از اینکه از این روش استفاده شود باید سبک‌ترین جزء با شماره ۱ نشان داده شود و به ترتیب اجزاء سنگین‌تر شماره‌گذاری شوند به طور مثال در خوراک زیر جزء C، جزء کلیدی سبک و جزء F، جزء کلیدی سنگین می‌باشد که ترتیب شماره‌گذاری اجزاء و نحوه نوشتن ضرایب فراریت در زیر نشان داده شده است.

Componenet	Number	Relative Volatility
A	1	α_1
B	2	α_2
C	3	α_{13}
D	4	α_4
E	5	α_5
F	6	α_{h6}

α_{13} به این معناست که سومین جزء به عنوان جزء سبک (Light key) می‌باشد و دو جزء سبکتر از Light key وجود دارد و α_{h6} نشان می‌دهد که جزء ششم به عنوان جزء سنگین (Heavy key) است و جزء چهارم و جزء پنجم، اجزاء میانی هستند.

۱- θ_f را باید از رابطه ۴-۶۴ مطابق آنچه بیان گردید، بدست آوریم.

$$\sum \frac{\alpha_i x_{fi}}{\alpha_i - \theta_f} = 1 - q$$

لازم به ذکر است که تعداد θ_f یکی بیشتر از تعداد اجزاء میانی می‌باشد.

$$\alpha_{13} > \theta_{f3} > \alpha_4 > \theta_{f4} > \alpha_5 > \theta_{f5} > \alpha_{h6}$$

۲- مقدار V را از رابطه زیر محاسبه می‌کنیم.

$$V = \frac{\prod_{i=h-1}^L (\theta_{fi})}{\prod_{i=h-1}^{L+1} (\alpha_i)}$$

که برای سیستم فرضی اخیر، مقدار V برابر با ضرب $\theta_{f3} \theta_{f4} \theta_{f5}$ تقسیم بر $\alpha_4 \alpha_5$ خواهد بود.

$$V = \frac{\theta_{f3} \theta_{f4} \theta_{f5}}{\alpha_4 \alpha_5}$$

۳- مقدار w_j را با توجه به رابطه زیر برای جزء کلیدی سبک، جزء کلیدی سنگین و اجزاء سبکتر از جزء کلیدی سبک محاسبه می‌کنیم.

$$w_j = \frac{\prod_{i=h-1}^{L+1} \left(1 - \frac{\alpha_i}{\alpha_j} \right)}{\prod_{i=h-1}^L \left(1 - \frac{\theta_{fi}}{\alpha_j} \right)}$$

برای سیستم فرضی بالا w_3 و w_6 به صورت زیر خواهد بود.

$$w_3 \text{ (Light key)} = \frac{(1 - \alpha_s/\alpha_3)(1 - \alpha_4/\alpha_3)}{(1 - \theta_{f5}/\alpha_3)(1 - \theta_{f4}/\alpha_3)(1 - \theta_{f3}/\alpha_3)}, \quad w_6 \text{ (Heavy key)} = \frac{(1 - \alpha_s/\alpha_6)(1 - \alpha_4/\alpha_6)}{(1 - \theta_{f5}/\alpha_6)(1 - \theta_{f4}/\alpha_6)(1 - \theta_{f3}/\alpha_6)}$$

برای اجزاء سبک‌تر از جزء سبک نیز باید w_j محاسبه شود.

۴- مقدار حداقل جریان برگشتی داخلی $\left(\frac{L}{V}\right)_{Min}$ را با توجه به رابطه زیر محاسبه می‌کنیم.

Component, j	ω_j	α_j	$\frac{\omega_j}{\alpha_j}$	x_{Dj}	$\omega_j x_{Dj}$	$\frac{\omega_j}{\alpha_j} (x_{Dj})$
l (light key)	●	●	●	●	●	●
h (heavy key)	●	●	●	●	●	●
L_{l-1} } <i>Lighter</i>	●	●	●	●	●	●
L_{l-2} } <i>than light</i>	●	●	●	●	●	●
L_{l-3} } <i>key, etc</i>	●	●	●	●	●	●
					$\sum \omega_j x_{Dj}$	$\sum \frac{\omega_j}{\alpha_j} (x_{Dj})$

$$\left(\frac{L}{V}\right)_{Min} = (V) \frac{\sum_{j=H,L,l} D \left(\frac{w_j}{\alpha_j}\right) (x_{Dj})}{\sum_{j=H,L,l} D (w_j) (x_{Dj})}$$

۵- مقدار حداقل جریان برگشتی خارجی $\left(\frac{L}{D}\right)_{Min}$ را با توجه به رابطه زیر محاسبه می‌کنیم.

$$\left(\frac{L}{D}\right)_{Min} = \frac{1}{\frac{1}{\left(\frac{L}{V}\right)_{Min}} - 1}$$

مثال ۴-۱۰: خوراکی مطابق با جدول زیر به صورت دوفازی (۴۵٪ مایع اشباع و ۵۵٪ بخار اشباع) وارد برج می‌شود. با توجه به نوع محصولات خروجی، حداقل جریان برگشتی به برج را بدست آورید. فرض کنید اجزاء سبک‌تر از جزء کلیدی سبک، کاملاً بالای برج ظاهر شوند و اجزاء سنگین‌تر از جزء کلیدی سنگین، پایین برج ظاهر شوند.

Component	α_i	f_i	d_i	b_i
C ₁	5.7	200		
C ₂	4.1	250		
lk C ₃	2.4	500	490	10
n-C ₄	1.4	150		
hk n-C ₅	1.0	400	30	370

حل : دبی اجزاء (بدون در نظر گرفتن جزء میانی) در جریان‌های مختلف با توجه به فرضیات مسئله به صورت زیر خواهد بود.

Component	α_i	f_i	d_i	b_i
C ₁	5.7	200	200	0
C ₂	4.1	250	250	0
lk C ₃	2.4	500	490	10
n-C ₄	1.4	150		
hk n-C ₅	1.0	400	30	370

مراحل حل مسئله به صورت زیر است.

۱- θ_f را از رابطه زیر بدست آوریم.

$$\sum \frac{\alpha_i x_{F_i}}{\alpha_i - \theta} = 1 - q \quad , \quad 1 < \theta_{f4} < 1.4 < \theta_{f3} < 2.4$$

$$\frac{5.7 \times \frac{200}{1500}}{5.7 - \theta} + \frac{4.1 \times \frac{250}{1500}}{4.1 - \theta} + \frac{2.4 \times \frac{500}{1500}}{2.4 - \theta} + \frac{1.4 \times \frac{150}{1500}}{1.4 - \theta} + \frac{1 \times \frac{400}{1500}}{1 - \theta} = 1 - \frac{45}{100}$$

$$\theta_{f4} = 1.2105 \quad , \quad \theta_{f3} = 1.6471$$

۲- مقدار V از رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$V = \frac{\prod_3(\theta_{f_i})}{\prod_4(\alpha_i)} = \frac{\theta_{f3} \theta_{f4}}{\alpha_4} = \frac{1.6471 \times 1.2105}{1.4} = 1.4242$$

۳- مقدار w_j را برای جزء کلیدی سبک، جزء کلیدی سنگین و اجزاء سبکتر از جزء کلیدی سبک محاسبه می‌کنیم.

$$w_1 = \frac{\prod_4^4 \left(1 - \frac{\alpha_i}{\alpha_1}\right)}{\prod_4^3 \left(1 - \frac{\theta_{fi}}{\alpha_1}\right)} = \frac{\left(1 - \frac{\alpha_4}{\alpha_1}\right)}{\left(1 - \frac{\theta_{f3}}{\alpha_1}\right)\left(1 - \frac{\theta_{f4}}{\alpha_1}\right)} = 1.3470$$

$$w_2 = 1.5619 \quad , \quad w_3 = 2.6798 \quad , \quad w_5 = -2.9365$$

۴- مقدار حداقل جریان برگشتی داخلی $\left(\frac{L}{V}\right)_{Min}$ را با توجه به رابطه زیر محاسبه می‌کنیم.

$$\left(\frac{L}{V}\right)_{Min} = V \frac{\sum_{h,l,L} d_i \frac{w_i}{\alpha_i}}{\sum_{h,l,L} d_i w_i}$$

$$\left(\frac{L}{V}\right)_{Min} = 1.4242 \frac{\left(200 \times \frac{1.3470}{5.7}\right) + \left(250 \times \frac{1.5619}{4.1}\right) + \left(490 \times \frac{2.6798}{2.4}\right) + \left(30 \times \frac{-2.9365}{1}\right)}{(200 \times 1.3470) + (250 \times 1.5619) + (490 \times 2.6798) + (30 \times -2.9365)} = 0.4157$$

۵- مقدار حداقل جریان برگشتی خارجی $\left(\frac{L}{D}\right)_{Min}$ به صورت زیر بدست می‌آید.

$$\left(\frac{L}{D}\right)_{Min} = \frac{1}{\frac{1}{0.4157} - 1} = 0.7114$$

محاسبه حداقل جریان برگشتی (روش کلبرن^۱ [۱۲])

این روش کاربرد وسیعی دارد و طراحان معمولاً از این روش استفاده می‌کنند. مراحل بدست آوردن حداقل جریان برگشتی به صورت زیر است :

۱- با استفاده از داده‌های مسئله مقدار جریان بالای برج (D) ، جریان پایین برج (B) ، غلظت بالای برج (x_{Di}) و غلظت پایین برج (x_{Bi}) را بدست می‌آوریم.

۲- مشخصات خوراک شامل درصد مایع (q) و همچنین غلظت خوراک را مشخص می‌کنیم.

۳- نسبت جزء سبک به سنگین در خوراک را محاسبه می‌کنیم.

$$r_f = \frac{\text{Mole fraction of Light key}}{\text{Mole fraction of Heavy key}}$$

۴- غلظت مایع در محل برخورد خط تبادل و منحنی تعادل را با استفاده از رابطه زیر بدست می‌آوریم.

$$x_{ln} = \frac{r_f}{(1 + r_f) [1 + (\sum \alpha_i x_{Fi})_H]}$$

منظور از H در رابطه اخیر این است که اجزایی که سنگین‌تر از جزء کلیدی سنگین هستند در این رابطه شرکت داده می‌شوند.

۵- حداقل جریان برگشتی تقریبی $\left(\frac{L}{D}\right)_{Min}$ را محاسبه می‌کنیم.

$$\left(\frac{L}{D}\right)_{Min} = \frac{1}{\alpha_{lk} - 1} \left(\frac{x_{lD}}{x_{ln}} - \alpha_{lk} \frac{x_{hD}}{x_{hm}} \right)$$

α_{lk} : ضریب فراریت جزء سبک

x_{ln} : غلظت جزء سبک مایع در محل برخورد منحنی تعادل و خط تبادل (که در قسمت قبل محاسبه شده است)

x_{hm} : غلظت جزء سنگین مایع در محل برخورد منحنی تعادل و خط تبادل $x_{hm} = x_{ln} / r_f$

x_{lD} : غلظت جزء سبک مایع در بالای برج

x_{hD} : غلظت جزء سنگین در بالای برج

اگر $x_{hD} < 0.1$ باشد از قسمت دوم سمت راست معادله می‌توان صرف‌نظر کرد.

۶- با استفاده از $\left(\frac{L}{D}\right)_{Min}$ میزان جریان مایع و بخار در بالای برج و پایین برج را بدست می‌آوریم.

برای بالای برج خواهیم داشت:

$$L_r = \left(\frac{L}{D}\right)_{Min} \times D$$

$$V_r = L_r + D$$

و برای پایین برج با توجه به خوراک خواهیم داشت:

$$L_s = L_r + (q \times F)$$

$$V_s = V_r - (1 - q)F$$

۷- غلظت و دمای نقطه برخورد خط تبادل و منحنی تعادل را برای بالای برج بدست می‌آوریم.

$$\sum x_n = \sum_{\substack{i=hk \text{ and} \\ \text{lighter than} \\ \text{heavy key}}} \left(\frac{D x_{Di} / V_r}{k_i - L_r / V_r} \right) = 1$$

لازم به ذکر است اجزایی که در رابطه بالا دخالت دارند شامل جزء سنگین و اجزاء سبک‌تر از آن می‌باشند. در

این رابطه $k_i = k_{hk} \alpha_i$ خواهد بود و فقط k_{hk} مجهول است که با سعی و خطا بدست می‌آید و سپس با

استفاده از k_{hk} محاسبه شده می‌توان دما را بدست آورد.

۸- غلظت و دمای نقطه برخورد خط تبادل و منحنی تعادل را برای پایین برج بدست می‌آوریم

$$\sum x_m = \sum_{\substack{i=lk \text{ and} \\ \text{heavier than} \\ \text{light key}}} \frac{B x_{Bi} / V_s}{\frac{L_s}{V_s} - k_i} = 1$$

لازم به ذکر است جزء سبک و اجزاء سنگین‌تر از آن در رابطه بالا دخالت داده می‌شوند حتی اگر جزء میانی

هم داشته باشیم در رابطه بالا دخالت داده می‌شود. در این رابطه نیز $k_i = k_{hk} \alpha_i$ است و فقط k_{hk} مجهول

است که با سعی و خطا بدست می‌آید و سپس با استفاده از k_{hk} محاسبه شده می‌توان دما را بدست آورد.

۹- نسبت‌های مولی سبک به سنگین را بدست می‌آوریم.

الف : نسبت مولی سبک به سنگین مربوط به محل برخورد منحنی و خط تبادل بالای برج

$$r_{Pr} = \frac{\text{Light key}}{\text{Heavy key}} = \frac{(x_l)_{Pr}}{(x_h)_{Pr}}$$

$(x_l)_{pr}$: غلظت بدست آمده برای جزء کلیدی سبک در مرحله ۷

$(x_h)_{pr}$: غلظت بدست آمده برای جزء کلیدی سنگین در مرحله ۷

ب : نسبت مولی سبک به سنگین مربوط به محل برخورد منحنی و خط تبادل پایین برج

$$r_{ps} = \frac{\text{Light key}}{\text{Heavy key}} = \frac{(x_l)_{ps}}{(x_h)_{ps}}$$

$(x_l)_{ps}$: غلظت بدست آمده برای جزء کلیدی سبک در مرحله ۸

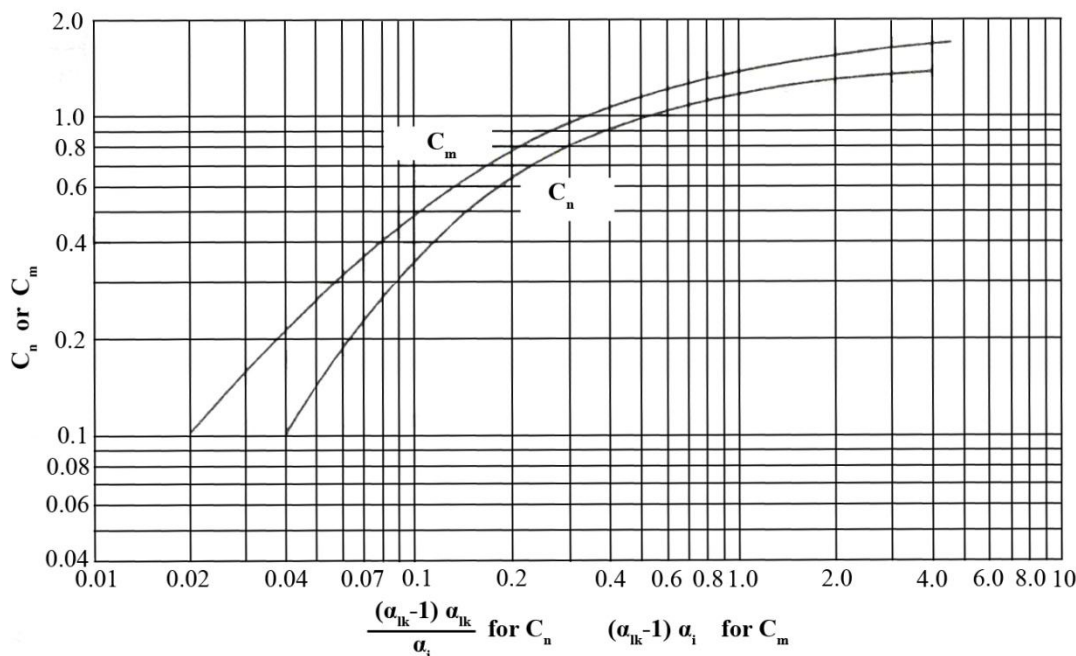
$(x_h)_{ps}$: غلظت بدست آمده برای جزء کلیدی سنگین در مرحله ۸

$$P = \frac{r_{ps}}{r_{pr}}$$

۱۰- ضرایب C_n را برای اجزاء سبک‌تر از جزء کلیدی سبک بدست می‌آوریم.

ابتدا برای هر جزء $\frac{(\alpha_{lk} - 1) \alpha_{lk}}{\alpha_i}$ را بدست می‌آوریم و با استفاده از شکل ۴-۱۵ ضرایب C_n را بدست می‌-

آوریم و برای هر جزء $C_{ni}(x_i)_{pr}$ را محاسبه می‌کنیم و سپس با هم جمع می‌کنیم. $(\sum C_{ni}(x_i)_{pr})$ $(x_i)_{pr}$: غلظت بدست آمده برای هر جزء در مرحله ۷



شکل ۴-۱۵ : فاکتورهای روش Colburn برای محاسبه حداقل جریان برگشتی

- ۱۱- ضرایب C_m را برای اجزاء سنگین تر از جزء کلیدی سنگین بدست می آوریم. ابتدا برای هر جزء $\alpha_i (\alpha_{lk} - 1)$ را محاسبه کرده و با استفاده از شکل ۴-۱۵ ضرایب C_m را بدست می آوریم. برای هر جزء $C_{mi} \alpha_i (x_i)_{ps}$ را محاسبه کرده و با هم جمع می کنیم. $\left(\sum C_{mi} \alpha_i (x_i)_{ps} \right)$
- ۱۲- مقدار P' را با استفاده از رابطه زیر محاسبه می کنیم.

$$P' = \frac{1}{(1 - \sum c_{ni} (x_i)_{Pr}) (1 - \sum c_{mi} \alpha_i (x_i)_{ps})}$$

وقتی که $P > P'$ شود مشخص است که $\left(\frac{L}{D} \right)_{Min}$ حدس زده شده بالا است و مقدار آن باید کم شود و دوباره محاسبات تکرار شود. وقتی که $P = P'$ شود $\left(\frac{L}{D} \right)_{Min}$ حدس زده شده صحیح است ضمناً با تغییر P ، $\left(\frac{L}{D} \right)_{Min}$ به مقدار زیاد تغییر می کند اما P' تغییر ناچیزی خواهد کرد.

مثال ۴-۱۱ : خوراک زیردر فشار 70 Psia و در نقطه جوش وارد برج می شود با استفاده از روش Colburn میزان حداقل جریان برگشتی را برای این برج محاسبه نمایید. دمای محصول بالای برج ، دمای خوراک و دمای محصول پایین برج به ترتیب $74^\circ F$ ، $80^\circ F$ و $88^\circ F$ می باشد.

Component	Relative volatility	f_i	d_i
1	0.5	10	-
Heavy key(n-Butane)	1	22.5	1.072
Light key	2	45	42.8
4	4	22.5	22.5

حل : مراحل حل مسئله به صورت زیر است.

۱- (x_{Di}) و (x_{Bi}) را بدست می آوریم.

Component	d_i	x_D	b_i	x_B
1	-	0	10	0.297
2	1.072	0.016	21.428	0.637
3	42.8	0.645	2.2	0.066
4	22.5	0.339	0	0

۲- غلظت خوراک مشخص است و با توجه به اینکه مایع در نقطه جوش وارد برج می‌شود $q = 1$ می‌باشد.

۳- نسبت جزء کلیدی سبک به سنگین در خوراک را محاسبه می‌کنیم.

$$r_f = \frac{45}{22.5} = 2$$

۴- غلظت مایع در محل برخورد خط تبادل و منحنی تعادل را بدست می‌آوریم.

$$\left(\sum \alpha_i \times x_{F_i} \right)_H = (0.5) \times (0.1) = 0.05$$

$$x_{in} = \frac{r_f}{(1+r_f) [1 + (\sum \alpha_i \times x_{F_i})_H]} = \frac{2}{(1+2)(1+0.05)} = 0.635$$

۵- حداقل جریان برگشتی تقریبی $\left(\frac{L}{D} \right)_{Min}$ به صورت زیر خواهد بود.

$$\left(\frac{L}{D} \right)_{Min} = \frac{1}{2-1} \left(\frac{0.645}{0.635} \right) = 1.016$$

۶- میزان جریان مایع و بخار را محاسبه می‌کنیم.

برای بالای برج

$$L_r = \left(\frac{L}{D} \right)_{Min} \times D = 1.016 \times 66.372 = 67.434$$

$$V_r = L_r + D = 133.806$$

برای پایین برج

$$L_s = L_r + (q \times F) = 67.434 + (1 \times 100) = 167.434$$

$$V_s = V_r - (1-q)F = 133.806$$

۷- غلظت و دمای نقطه برخورد خط تبادل و منحنی تعادل را برای بالای برج بدست می‌آوریم.

$$\sum x_n = \sum \frac{D x_{Di} / V_r}{k_i - L_r / V_r} = 1$$

در رابطه بالا همه موارد بجز k_i مشخص هستند که k_i از رابطه زیر بدست می‌آید.

$$k_i = k_{hk} \alpha_i$$

$$\sum x_n = \sum \frac{D x_{Di} / V_r}{k_{hk} \alpha_i - L_r / V_r} = 1$$

برای بدست آوردن دمای نقطه برخورد ابتدا باید دمای محصول بالای برج را بدانیم که با انجام محاسبات نقطه شبیم برای محصول بالای برج می‌توان دمای محصول بالای برج را بدست آورد حال یک دمای فرضی بیشتر از دمای محصول بالای برج در نظر گرفته و با استفاده از این دما و فشار برج، مقدار k_{hk} را بدست می‌آوریم سپس مقدار k_{hk} را در رابطه اخیر قرار می‌دهیم در صورتی که رابطه اخیر برقرار باشد دمای حدس زده شده صحیح است در غیر این صورت باید دمای دیگری حدس زده شود و محاسبات تکرار شود. نتیجه نهایی سعی و خطا برای این مسئله به صورت زیر است.

	<u>comp</u>	$(x_i)_{Pr}$
$T = 76 \text{ } ^\circ F \Rightarrow k_{hk} = 0.5291$	2	0.319
	3	0.577
	4	0.104

۸- غلظت و دمای نقطه برخورد خط تبادل و منحنی تعادل (Pinch Point) را برای پایین برج بدست می‌آوریم.

$$\sum x_m = \sum \frac{B x_{Bi}/V_S}{\frac{L_S}{V_S} - k_i} = \sum \frac{B x_{Bi}/V_S}{\frac{L_S}{V_S} - k_{hk} \alpha_i} = 1$$

برای بدست آوردن دمای نقطه برخورد ابتدا باید دمای محصول پایین برج را بدانیم که با انجام محاسبات نقطه حباب برای محصول پایین برج می‌توان دمای محصول پایین برج را بدست آورد حال یک دمای فرضی کمتر از دمای محصول پایین برج در نظر گرفته و با استفاده از این دما و فشار برج، مقدار k_{hk} را بدست می‌آوریم سپس مقدار k_{hk} را در رابطه اخیر قرار می‌دهیم در صورتی که رابطه اخیر برقرار باشد دمای حدس زده شده صحیح است در غیر این صورت باید دمای دیگری حدس زده شود و محاسبات تکرار شود. نتیجه نهایی سعی و خطا برای این مسئله به صورت زیر است.

	<u>comp</u>	$(x_i)_{ps}$
$T = 85 \text{ } ^\circ F \Rightarrow k_{hk} = 0.6134$	1	0.079
	2	0.251
	3	0.670

۹- نسبت‌های مولی سبک به سنگین به صورت زیر خواهد بود.

$$r_{ps} = \frac{0.67}{0.251} = 2.669$$

$$r_{Pr} = \frac{0.577}{0.319} = 1.809$$

$$P = \frac{r_{ps}}{r_{Pr}} = \frac{2.669}{1.809} = 1.475$$

۱۰- ضرایب C_n را برای اجزاء سبک‌تر از جزء سبک بدست می‌آوریم.

$$\frac{(\alpha_{lk} - 1) \alpha_{lk}}{\alpha_4} = \frac{(2-1) 2}{4} = 0.5$$

from Figure 4-15 $\rightarrow c_n = 1.0$

$$\sum c_{ni} (x_i)_{Pr} = 1 \times (0.104) = 0.104$$

۱۱- ضرایب C_m را برای اجزاء سنگین‌تر از جزء سنگین بدست می‌آوریم.

$$(\alpha_{lk} - 1) \alpha_i = (2-1) \times 0.5 = 0.5$$

from Figure 4-15 $\rightarrow c_m = 1.2$

$$\sum c_{mi} \alpha_i (x_i)_{ps} = 1.2 \times 0.5 \times 0.079 = 0.0474$$

۱۲- مقدار P' را محاسبه می‌کنیم.

$$P' = \frac{1}{(1-0.104)(1-0.0474)} = 1.172$$

چون $P > P'$ است مقدار حدس زده شده $\left(\frac{L}{D}\right)_{Min} = 1.016$ زیاد است و باید کاهش یابد و دوباره مراحل ششم به بعد تکرار شود.

روش آندروود [۱۱] برای ضریب فراریت متغیر (سیستم‌های اجزاء مجاور)

روش آندروود که برای ضریب فراریت متغیر مورد استفاده قرار می‌گیرد شامل مراحل زیر می‌باشد.

۱- یک مقدار فرضی برای $\left(\frac{L}{D}\right)_{Min}$ در نظر می‌گیریم و با استفاده از روش Colburn دمای نقاط محل برخورد

منحنی تعادل و خط تبادل را برای بالا و پایین برج بدست می‌آوریم.

۲- در این دماها ضرایب فراریت را محاسبه نموده و از آن به صورت هندسی $\left(\alpha_{Ave} = \sqrt[n]{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n}\right)$ متوسط‌گیری می‌کنیم. تحقیقات شیراس [۶] نشان داده است که در صورتی که ضریب فراریت را در دمای زیر محاسبه کنیم توافق خوبی خواهد داشت.

$$T_{ave} = \frac{(D T_D + B T_B)}{F}$$

T_D : دمای جوش محصول بالای برج

T_B : دمای جوش محصول پایین برج

T_{Ave} : دمای متوسط

۳- با استفاده از α بدست آمده و روش آندروود برای ضریب فراریت ثابت، میزان $\left(\frac{L}{D}\right)_{Min}$ را محاسبه می‌کنیم.

۴- $\left(\frac{L}{D}\right)_{Min}$ محاسبه شده را با $\left(\frac{L}{D}\right)_{Min}$ حدس زده شده مقایسه می‌کنیم در صورتی که با هم تفاوت داشته

باشند با $\left(\frac{L}{D}\right)_{Min}$ محاسبه شده به مرحله ۱ بازمی‌گردیم و محاسبات را دوباره انجام می‌دهیم و در صورتی که برابر باشند به جواب رسیده‌ایم.

رابطه تجربی شیل- مونتروس^۱

رابطه تجربی شیل- مونتروس [۱۳] برای سیستم‌های اجزاء مجاور در ضریب فراریت ثابت و متغیر کاربرد دارد. اگرچه در مقالات از این روش به عنوان یک روش دقیق یاد نمی‌شود و طراحان خیلی از این روش

استفاده نمی‌کنند اما توسط این روش مستقیماً می‌توان $\left(\frac{L}{D}\right)_{Min}$ را بدست آورد. خطای این روش ۸٪ - ۱٪ می‌باشد. اگر غلظت اجزاء کلیدی در خوراک زیر ۱۰٪ باشد خطای این روش از مقدار یاد شده بیشتر نیز خواهد بود. تحقیقات شیبیل نشان می‌دهد در صورتی که جزء میانی در سیستم وجود داشته باشد این روش دقت خوبی دارد. میزان حداقل جریان برگشتی از رابطه زیر بدست می‌آید.

$$(L/D)_{Min} = \frac{1}{x_{IF} + \sum x_{FL}} \left[x_{IF} R' + (x_{hF} + \sum x_{FH}) \sum \frac{x_{FH}}{\frac{\alpha_l}{\alpha_H} - 1} + \sum \frac{x_{FL}}{\alpha_L} \left(1 + \frac{\alpha_l}{\alpha_L}\right) \right] \quad ۶۵-۴$$

x_{IF} : کسر مولی جزء کلیدی سبک در خوراک

$\sum x_{FL}$: مجموع کسرهای مولی مواد سبک‌تر از جزء کلیدی سبک

R' : حداقل جریان برگشتی مجازی

$\sum x_{FH}$: مجموع کسرهای مولی مواد سنگین‌تر از جزء کلیدی سنگین

x_{hF} : کسر مولی جزء سنگین در خوراک

α_l : ضریب فرارایت نسبی جزء کلیدی سبک در دمای سینی خوراک

α_H : ضریب فرارایت نسبی اجزاء سنگین‌تر از جزء کلیدی سنگین در دمای سینی خوراک

α_L : ضریب فرارایت نسبی اجزاء سبک‌تر از جزء کلیدی سبک در دمای سینی خوراک

x_{it} : کسر مولی مایع در محل برخورد منحنی تعادل و خط تبادل

x_{lo} : کسر مولی جزء کلیدی سبک بر مبنای اجزاء کلیدی در بالای برج

حداقل جریان برگشتی مجازی از رابطه زیر بدست می‌آید.

$$R' = \frac{x_{lo}}{(\alpha_l - 1)x_{it}} - \frac{(1 - x_{lo}) \alpha_l}{(1 - x_{it})(\alpha_l - 1)} \quad ۶۶-۴$$

وقتی جریان بالای برج فقط شامل اجزاء خیلی سبک باشد و مقدار کمی از اجزاء سنگین در آن وجود داشته باشند قسمت دوم معادله می‌تواند حذف شود.

جزء مولی مایع در محل برخورد منحنی تعادل و خط تبادل از رابطه زیر بدست می‌آید.

$$x_{ii} = \frac{\pm \sqrt{\left[(\alpha_l - 1)(1 + m) \left(\frac{x_{lF}}{x_{lF} + x_{hF}} \right) - \alpha_l - m \right]^2 + 4m(\alpha_l - 1)(1 + m) \left(\frac{x_{lF}}{x_{lF} + x_{hF}} \right)}}{2m(\alpha_l - 1)} \quad ۶۷-۴$$

مقدار مثبت بدست آمده از رابطه اخیر که بین صفر تا یک باشد قابل قبول است. فاکتور نسبت مایع به بخار در خوراک به صورت زیر است.

$$m = \frac{q - \sum x_{FH}}{1 - q - \sum x_{FL}} = \frac{F_L - \sum f_H}{F_V - \sum f_L} \quad ۶۸-۴$$

q : کسر مولی خوراک که به صورت مایع است

F_L : مقدار مولهای خوراک که به صورت مایع است

F_V : مقدار مولهای خوراک که به صورت بخار است

$\sum f_H$: مجموع مولهای مواد سنگین تر از جزء سنگین در خوراک

$\sum f_L$: مجموع مولهای مواد سبک تر از جزء سبک در خوراک

مثال ۴-۱۲: خوراکی به صورت مایع اشباع با ترکیب زیر وارد برج تقطیر می شود با استفاده از روش شیبیل-مونترس مقدار حداقل جریان برگشتی را برای این برج بدست آورید.

Component	Feed Moles/hr	Overhead Moles/hr	Bottoms Moles/hr
A	30	30.0	--
B (light key)	20	19.5	0.5
C (heavy key)	20	0.5	19.5
D	30	--	30.0
	100	50.0	50.0

ضریب فراریت نسبی برای اجزاء به صورت زیر است.

$$\alpha_A = 4.0$$

$$\alpha_B = 2.0 = \alpha_1$$

$$\alpha_C = 1.0 = \alpha_h$$

$$\alpha_D = 0.5$$

حل: فاکتور نسبت مایع به بخار در خوراک به صورت زیر است.

$$m = \frac{x_L - \sum x_{FH}}{x_V - \sum x_{FL}} = \frac{1.0 - 0.30}{0 - 0.30} = -2.33$$

$$x_{it} = \frac{\left[\begin{array}{c} (2-1)(1-2.33)\left(\frac{0.2}{0.2+0.2}\right) - 2 - (-2.33) \\ \pm \sqrt{\left[(2-1)(1-2.33)\left(\frac{0.2}{0.2+0.2}\right) - 2 - (-2.33) \right]^2 + 4(-2.33)(2-1)(1-2.33)\left(\frac{0.2}{0.2+0.2}\right)} \end{array} \right]}{2(-2.33)(2-1)}$$

جوابهای معادله اخیر $x_{it} = 0.611$ ، -0.467 می باشد که مقدار $x_{it} = 0.611$ قابل قبول است چون مثبت و بین صفر و یک می باشد.

جزء مولی جزء سبک بر مبنای اجزاء کلیدی در بالای برج به صورت زیر محاسبه می شود.

$$x_{lo} = \frac{19.5}{19.5 + 0.5} = 0.975$$

$$R' = \frac{0.975}{(2-1)(0.611)} - \frac{(1.0-0.975)(2)}{(1-0.611)(2-1)} = 1.467$$

حداقل جریان برگشتی به صورت زیر بدست می آید.

$$(L/D)_{Min} = \frac{1}{0.2+0.3} \times \left[0.2(1.467) + (0.2+0.3) \left(\frac{0.3}{\frac{2}{0.5}-1} \right) + \frac{0.3}{4} \left(1 + \frac{2}{4} \right) \right]$$

$$(L/D)_{Min} = 0.9118$$

روش چائو و یاوس^۱

با استفاده از روش چائو و یاوس [۱۴] می توان برای برج هایی که بیش از یک خوراک داشته باشند یا شامل یک یا چند جریان جانبی باشند مقدار حداقل جریان برگشتی را بدست آورد. این روش برای سیستم هایی که فاقد جزء میانی هستند کاربرد دارد. روش انجام محاسبات برای بدست آوردن حداقل جریان برگشتی به صورت زیر است.

$$R_{Min} = R_F + R_{OF} + R_S \quad ۶۹-۴$$

R_F : حداقل جریان برگشتی ناشی از خوراک

R_{OF} : حداقل جریان برگشتی ناشی از بقیه خوراکها

R_S : حداقل جریان برگشتی ناشی از جریان های جانبی

R_{OF} و R_S در رابطه اخیر به صورت زیر جایگزین می شوند.

$$R_{Min} = R_F + \sum F_{FR,j} F_j + \sum F_{SR,K} S_K \quad ۷۰-۴$$

روش ارائه شده توسط چائو و یاوس شامل مراحل زیر می باشد.

۱- با استفاده از روش آندروود مقدار θ را برای هر خوراک بدست می‌آوریم. پس به تعداد خوراک‌ها، مقادیر θ $(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \dots, \theta_{nf})$ خواهیم داشت.

$$1 - q_{Fn} = \sum_{i=1}^c \frac{\alpha_i z_{i,F_n}}{\alpha_i - \theta_n} \quad ۷۱-۴$$

که مقدار θ_n باید در محدوده زیر باشد.

$$\alpha_h < \theta_n < \alpha_l$$

۲- حداقل جریان برگشتی را برای هر خوراک بدست می‌آوریم.

$$R_{Min,n} = R_F + R_{OF} + R_S = R_{F,n} + \sum_{j=1}^{n-1} F_{FR,j} F_j + \sum_{K=1}^m F_{SR,K} S_K$$

$$\text{where: } R_{F,n} = \sum_{i=1}^c \frac{\alpha_i x_{i,D}}{\alpha_i - \theta_n} - 1$$

۷۲-۴

$$F_{FR,j} = -\frac{1}{D} \left(\sum_{i=1}^c \frac{\alpha_i z_{i,F_j}}{\alpha_i - \theta_n} + q_{F_j} - 1 \right)$$

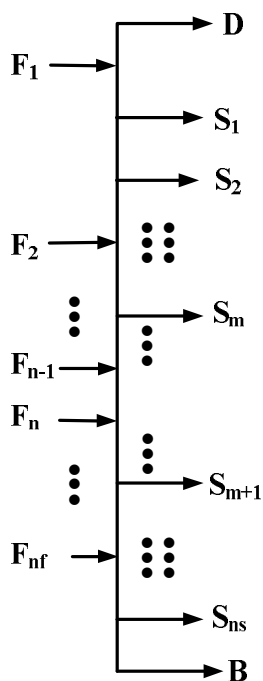
$$F_{SR,K} = \frac{1}{D} \left(\sum_{i=1}^c \frac{\alpha_i z_{i,S_K}}{\alpha_i - \theta_n} + q_{S_K} - 1 \right)$$

m : تعداد جریان‌های جانبی که بالاتر از خوراک F_n قرار می‌گیرند.

۳- مقادیر حداقل جریان برگشتی برای هر خوراک را با هم مقایسه می‌کنیم و ماکزیمم آنها را به عنوان حداقل جریان برگشتی برج در نظر می‌گیریم.

$$R_{Min} = MAX (R_{Min,1}, R_{Min,2}, \dots, R_{Min,nf})$$

The Column



B : دبی محصول پایین برج ($mole/hr$)

c : تعداد اجزاء

D : دبی محصول بالای برج ($mole/hr$)

F : دبی خوراک ($mole/hr$)

F_j : دبی خوراک زام ($mole/hr$)

F_{FR} : فاکتور تاثیر بقیه خوراکها بر حداقل جریان برگشتی

F_{SR} : فاکتور تاثیر جریانهای جانبی بر حداقل جریان برگشتی

$F_{SR,K}$: فاکتور تاثیر جریان جانبی k ام بر حداقل جریان برگشتی

hk : جزء کلیدی سنگین

lk : جزء کلیدی سبک

L : دبی مایع ($mole/hr$)

nf : تعداد خوراکها

ns : تعداد جریانهای جانبی

n : تعداد جریانهای جانبی بالاتر از خوراک

q_F : شرایط حرارتی خوراک ورودی

q_S : شرایط حرارتی جریان جانبی خروجی

R : جریان برگشتی

R_F : حداقل جریان برگشتی ناشی از خوراک
 $R_{F,n}$: حداقل جریان برگشتی ناشی از خوراک n
 R_{OF} : حداقل جریان برگشتی ناشی از بقیه خوراکیها
 R_{Min} : حداقل جریان برگشتی
 R_S : حداقل جریان برگشتی ناشی از جریان جانبی
 S_k : دبی جریان جانبی k ($mole/hr$)
 V : دبی بخار ($mole/hr$)
 x_i : کسر مولی جزء i در مایع
 y_i : کسر مولی جزء i در بخار
 Z_{i,F_j} : کسر مولی جزء i در خوراک j
 Z_{i,S_k} : کسر مولی جزء i در جریان جانبی k
 α_i : ضریب فراریت نسبی مربوط به جزء i
 θ : پارامتر رابطه آندروود

مثال ۴-۱۳ : یک برج شامل دو خوراک و دو جریان جانبی به صورت ذیل می‌باشد که جریان‌های ورودی و خروجی از برج در جدول زیر نشان داده شده است. حداقل جریان برگشتی را برای این برج بدست آوردید.

Component	Relative Volatility (α)	Mole Fraction				
		Feed		Distillate	Side stream	
		z_{i,F_1}	z_{i,F_2}	x_D	z_{i,S_1}	z_{i,S_2}
1 (lk)	2.0	0.58	0.45	0.999	0.975	0.900
2 (hk)	1.0	0.20	0.30	0.001	0.025	0.099
3 (hk+1)	0.5	0.22	0.25	0	0	0.001

Feeds:
 $F_1 = 50 \text{ gmole/hr}$, $q_{f_1} = 1$ (saturated liquid)
 $F_2 = 100 \text{ gmole/hr}$, $q_{f_2} = 0$ (saturated vapor)

Side streams :
 $S_1 = 20 \text{ gmole/hr}$, $q_{s_1} = 1$ (saturated liquid)
 $S_2 = 20 \text{ gmole/hr}$, $q_{s_2} = 1$ (saturated liquid)

Distillate:
 $D = 36 \text{ gmole/hr}$

حل : برای خوراک F_1 مقدار θ_1 به صورت زیر محاسبه می شود.

$$1 - q_{F_1} = \sum \frac{\alpha_i z_{i,F_1}}{\alpha_i - \theta_1} \Rightarrow 1 - 1 = \frac{2 \times 0.58}{2 - \theta_1} + \frac{1 \times 0.2}{1 - \theta_1} + \frac{0.5 \times 0.22}{0.5 - \theta_1} \Rightarrow \theta_1 = 1.164$$

برای خوراک F_2 مقدار θ_2 به صورت زیر محاسبه می شود.

$$1 - q_{F_2} = \sum \frac{\alpha_i z_{i,F_2}}{\alpha_i - \theta_2} \Rightarrow 1 - 0 = \frac{2 \times 0.45}{2 - \theta_2} + \frac{1 \times 0.3}{1 - \theta_2} + \frac{0.5 \times 0.25}{0.5 - \theta_2} \Rightarrow \theta_2 = 1.485$$

بقیه مراحل به صورت زیر می باشد.

$$R_{Min,1} = R_{F1} + \sum_{k=1}^m F_{SR,k} S_k$$

$$R_{F1} = \sum \frac{\alpha_i x_{i,D}}{\alpha_i - \theta_1} - 1 = \frac{2 \times 0.999}{2 - 1.164} + \frac{1 \times 0.001}{1 - 1.164} - 1 = 1.3839$$

$$F_{SR,1} = \frac{1}{D} \left[\sum \frac{\alpha_i z_{i,S_1}}{\alpha_i - \theta_1} + q_{S_1} - 1 \right] = \frac{1}{36} \left[\frac{2 \times 0.975}{2 - 1.164} + \frac{1 \times 0.025}{1 - 1.164} + 1 - 1 \right] = \frac{2.1801}{36}$$

$$F_{SR,2} = \frac{1}{D} \left[\sum \frac{\alpha_i z_{i,S_2}}{\alpha_i - \theta_1} + q_{S_2} - 1 \right] = \frac{1}{36} \left[\frac{2 \times 0.9}{2 - 1.164} + \frac{1 \times 0.099}{1 - 1.164} + \frac{0.5 \times 0.001}{0.5 - 1.164} + 1 - 1 \right] = \frac{1.5487}{36}$$

$$R_{Min,1} = 1.3839 + \left(\frac{2.1801}{36} \times 20 \right) + \left(\frac{1.5487}{36} \times 20 \right) = 3.4555$$

$$R_{Min,2} = R_{F2} + F_1 \times F_{FR,1} + \sum_{k=1}^m F_{SR,K} S_K$$

$$R_{F2} = \sum \frac{\alpha_i x_{i,D}}{\alpha_i - \theta_2} - 1 = \frac{2 \times 0.999}{2 - 1.485} + \frac{1 \times 0.001}{1 - 1.485} - 1 = 2.8775$$

$$F_{FR,1} = \frac{-1}{D} \left[\sum \frac{\alpha_i z_{i,F_1}}{\alpha_i - \theta_2} + q_{F_1} - 1 \right] = \frac{-1}{36} \left[\frac{2 \times 0.58}{2 - 1.485} + \frac{1 \times 0.2}{1 - 1.485} + \frac{0.5 \times 0.22}{0.5 - 1.485} + 1 - 1 \right] = -\frac{1.7284}{36}$$

$$F_{SR,1} = \frac{1}{D} \left[\sum \frac{\alpha_i z_{i,S_1}}{\alpha_i - \theta_2} + q_{S_1} - 1 \right] = \frac{1}{36} \left[\frac{2 \times 0.975}{2 - 1.485} + \frac{1 \times 0.025}{1 - 1.485} + 1 - 1 \right] = \frac{3.7349}{36}$$

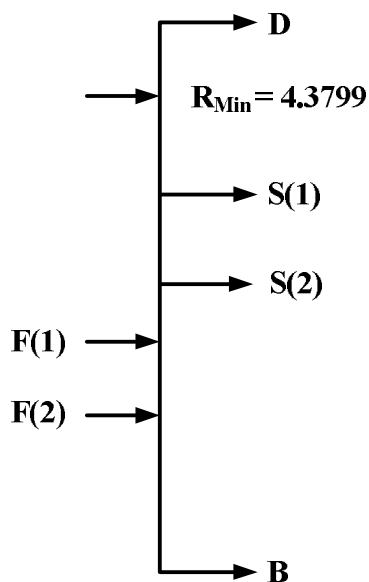
$$F_{SR,2} = \frac{1}{D} \left[\sum \frac{\alpha_i z_{i,S_2}}{\alpha_i - \theta_2} + q_{S_2} - 1 \right] = \frac{1}{36} \left[\frac{2 \times 0.9}{2 - 1.485} + \frac{1 \times 0.099}{1 - 1.485} + \frac{0.5 \times 0.001}{0.5 - 1.485} + 1 - 1 \right] = \frac{3.2905}{36}$$

$$R_{Min,2} = 2.8775 + \left(\frac{-1.7284}{36} \times 50 \right) + \left(\frac{3.7349}{36} \times 20 \right) + \left(\frac{3.2905}{36} \times 20 \right) = 4.3799$$

$$R_{Min} = MAX(R_{Min,1}, R_{Min,2}) = 4.3799$$

نتیجه کلی محاسبات در جدول ذیل آمده است.

۱- θ بدست آمده از روش آندروود	
$\theta_1 = 1.164$	برای خوراک ۱
$\theta_2 = 1.485$	برای خوراک ۲
۲- حداقل جریان برگشتی برای خوراکیها	
$R_{F,1} = 3.4555$	برای خوراک ۱
$R_{F,2} = 4.3799$	برای خوراک ۲
۳- حداقل جریان برگشتی برج	
$R_{Min} = 4.3799$	



تعداد مراحل تعادلی در نسبت‌های جریان برگشتی واقعی
روش گیلیلاند^۱

برای اینکه جداسازی در نظر گرفته شده بین دو جزء کلیدی انجام شود نسبت جریان برگشتی و تعداد مراحل تعادلی باید بیشتر از حداقل مقدار آنها باشند. جریان برگشتی واقعی توسط ملاحظات اقتصادی تعیین می‌شود که معمولاً به صورت ضرب یک ضریب بزرگتر از یک در مقدار حداقل جریان برگشتی بیان می‌شود

($R = A R_{Min}$, $A > 1$) سپس تعداد مراحل تعادلی توسط روش‌های گرافیکی یا نمودارهای تجربی بدست می‌آیند. یک نمونه جداسازی توسط فیر و بولز^۱ [۱۵] بررسی شده است که نتیجه اقتصادی آن در شکل ۴-۱۶ نشان داده شده است در این جداسازی در نسبت $R/R_{Min} = 1.05$ ، برج در حالت بهینه قرار دارد و کمترین هزینه را خواهد داشت. در صورتی که این نسبت افزایش یابد هزینه برج افزایش چندانی نخواهد داشت اما در صورتی که این نسبت کاهش یابد هزینه برج به شدت افزایش خواهد یافت معمولاً برای جداسازی اجزاء مختلف نسبت $R/R_{Min} = 1.3$ در نظر گرفته می‌شود.

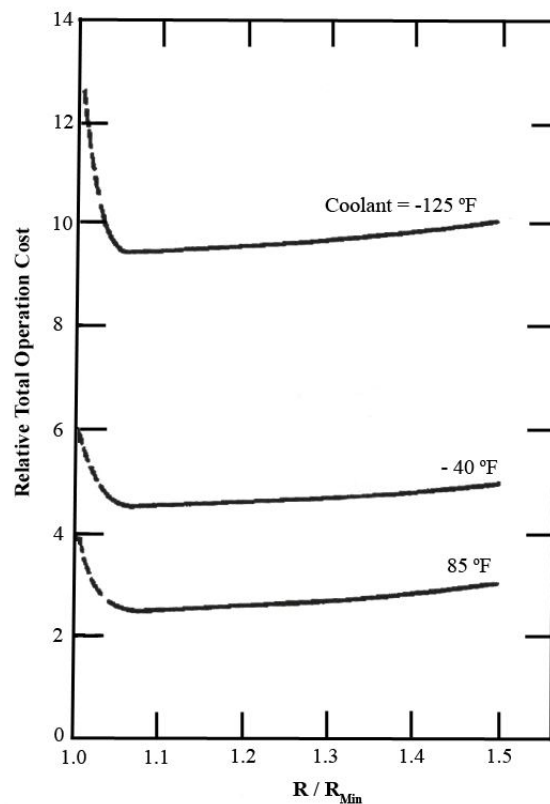
با فرض اینکه ضریب فراریت ثابت و جریان مایع و بخار نیز در طول برج ثابت است تعداد مراحل تعادلی لازم برای جداسازی دو جزء به عواملی همچون R ، q ، x_{iB} ، x_{iD} ، z_{iF} بستگی دارد. از طرفی حداقل تعداد مراحل تعادلی به x_{iB} ، x_{iD} و α وابسته است و حداقل جریان برگشتی به q ، x_{iD} ، z_{iF} و α بستگی دارد پس می‌توان تعداد مراحل تعادلی را تابعی از حداقل مراحل تعادلی، حداقل جریان برگشتی و جریان برگشتی واقعی در نظر گرفت.

$$N = N\{N_{Min}(x_{iD}, x_{iB}, \alpha), R_{Min}(z_{iF}, x_{iB}, q, \alpha), R\}$$

با اعمال فرضیات زیر می‌توان رابطه اخیر را برای تقطیر مخلوط‌های چندجزئی نیز در نظر گرفت.

۱- غلظت اجزاء غیرکلیدی روی ضریب فراریت متوسط تاثیرگذار خواهد بود.

۲- غلظت اجزاء غیرکلیدی روی حداقل جریان برگشتی به برج تاثیرگذار خواهد بود.



شکل ۴-۱۶: تاثیر جریان برگشتی به برج بر هزینه برج

ساده‌ترین و کاربردی‌ترین روشی که برای ارتباط تعداد مراحل تعادلی و جریان برگشتی پیشنهاد شده توسط گیلیلاند [۱۶] ارائه شده که در تحقیقات بعدی توسط رایبسون و گیلیلاند^۱ [۱۷] بازنگری شد. این تابعیت در شکل ۴-۱۷ نشان داده شده است که سه دسته داده از برج‌های واقعی از تحقیقات متفاوت توسط گیلیلاند [۱۶] روی یک منحنی قرار گرفته است. شرایط ۶۱ داده از برج‌های واقعی به صورت زیر بوده است.

۱- تعداد اجزاء بین ۲ تا ۱۱ است.

۲- مقدار q در این داده‌ها در محدوده $0.28 < q < 1.42$ می‌باشد.

۳- فشار از خلاء تا 600 Psia در نظر گرفته شده است.

۴- ضریب فراریت در محدوده $1.11 < \alpha < 4.05$ است.

۵- حداقل جریان برگشتی در محدوده $0.53 < R_{Min} < 9.09$ است.

۶- حداقل تعداد مراحل تعادلی در محدوده $3.4 < N_{Min} < 60.3$ می‌باشد.

این تابعیت توسط مولوکانو و همکاران^۲ [۱۸] به صورت زیر داده شده است.

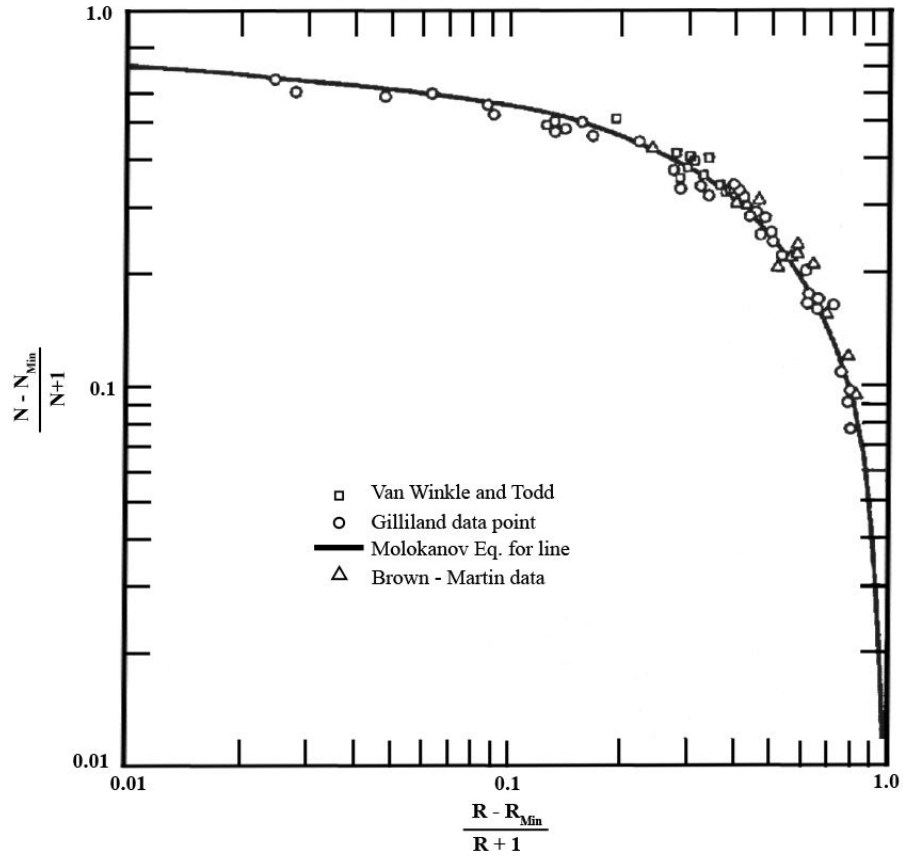
$$Y = \frac{N - N_{Min}}{N + 1} = 1 - \exp \left[\left(\frac{1 + 54.4X}{11 + 117.2X} \right) \left(\frac{X - 1}{X^{0.5}} \right) \right] \quad ۷۳-۴$$

که $X = \frac{R - R_{Min}}{R + 1}$ است. این معادله نقاط ابتدایی $(X = 0, Y = 1)$ و انتهایی $(X = 1, Y = 0)$ را نیز در بر

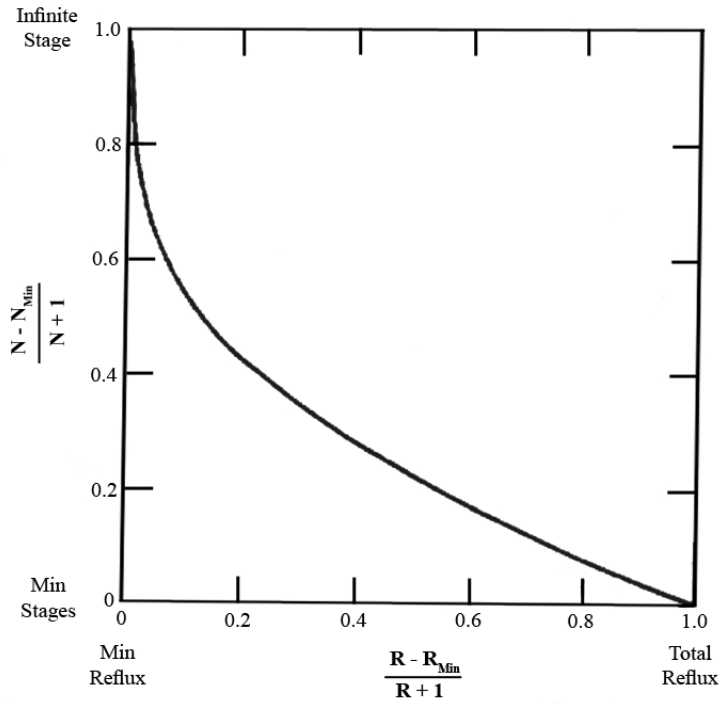
می‌گیرد و در شرایط نزدیک به نقطه بهینه که $R/R_{Min} = 1.3$ است با استفاده از شکل ۴-۱۷ مقدار N/N_{Min} تقریباً ۲ خواهد بود. تعداد مراحل تعادلی شامل کندانسور جزئی و جوش‌آور جزئی نیز می‌باشد.

1- Robinson and Gilliland

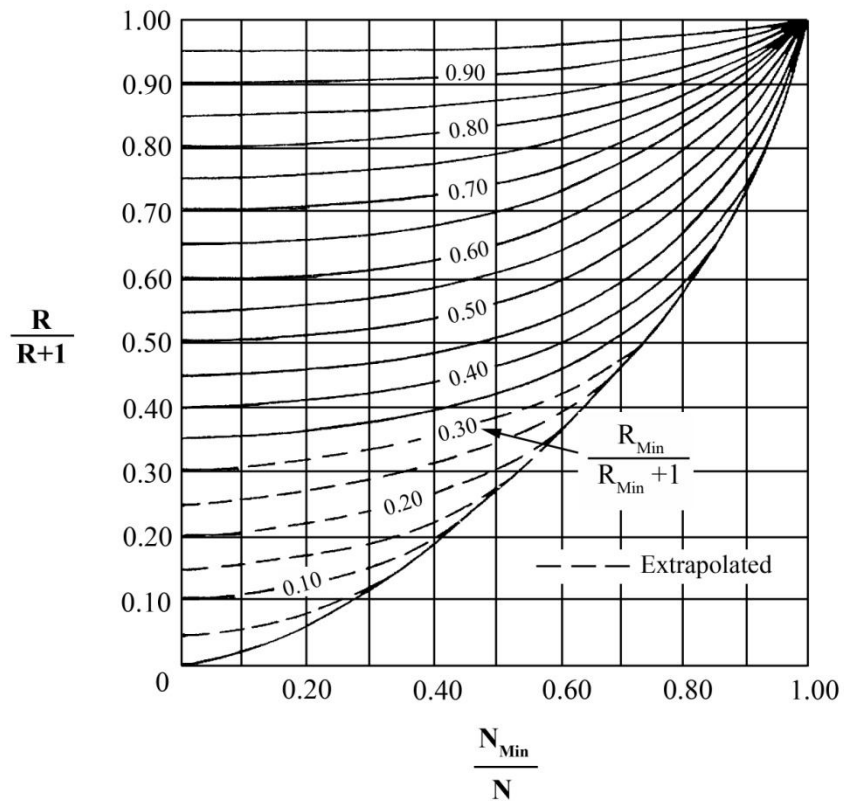
2- Molokanove et al



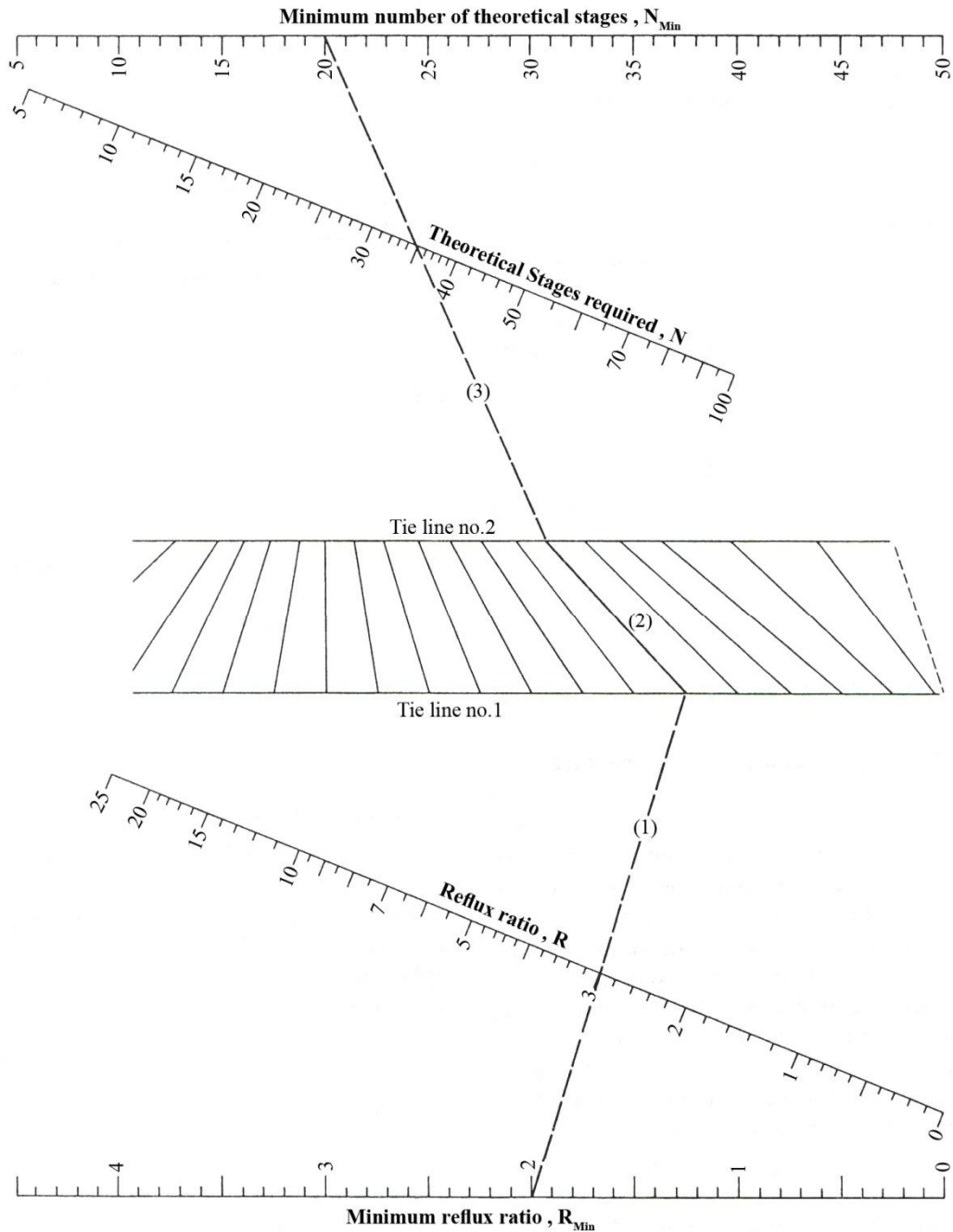
شکل ۴-۱۷: انطباق داده‌های برج‌های واقعی و منحنی ارائه شده توسط گیلیلاند در مختصات لگاریتمی



شکل ۴-۱۸: رابطه گلیلاندر در مختصات معمولی



شکل ۴-۱۹: روش اربار-مادوکس^۱ برای محاسبه تعداد سینی‌های تئوری در نسبت‌های مختلف جریان برگشتی (باید R_{Min} از روش آندروود محاسبه شود)



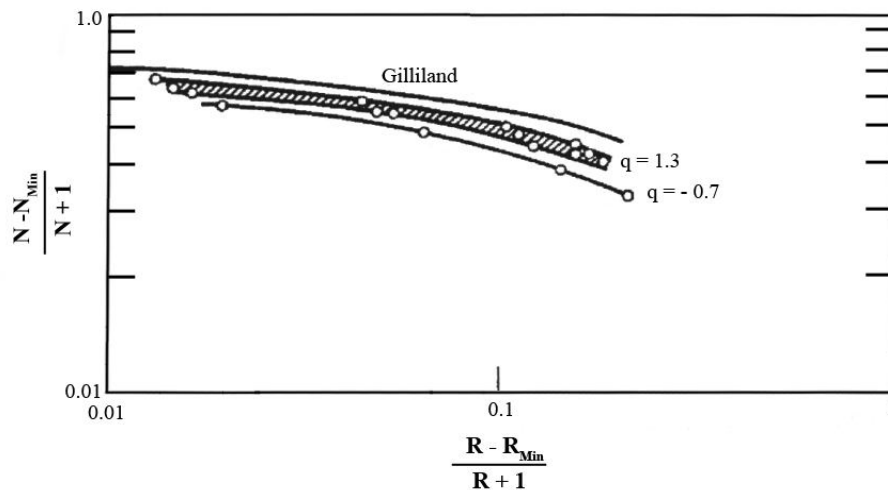
شکل ۴-۲۰: روش گیلیلاند برای محاسبه تعداد سینی‌های تئوری در نسبت‌های مختلف جریان برگشتی

رابطه گیلیلاند را می‌توان برای طراحی مقدماتی بکار برد. اگرچه این روش برای طراحی دقیق بسط داده نشده است اما گاهی اوقات از این روش برای طراحی دقیق بدون انجام محاسبات سینی به سینی نیز استفاده شده است. رابطه گیلیلاند در شکل ۴-۱۸ در مختصات معمولی نشان داده شده است. در این شکل مشهود است که در جریان‌های برگشتی نزدیک به حداقل جریان برگشتی، با افزایش جریان برگشتی تعداد مراحل

تعادلی به شدت کاهش می‌یابد. اما وقتی که جریان برگشتی خیلی زیاد می‌شود با افزایش جریان برگشتی، تعداد مراحل تعادلی چندان کاهش نمی‌یابد.

منحنی اربار- مادوکس که برای محاسبه تعداد سینی‌های تئوری در نسبت‌های مختلف جریان برگشتی بکار می‌رود نیز در شکل ۴-۱۹ نشان داده شده است البته برای استفاده از این منحنی باید R_{Min} از روش آندروود محاسبه شود.

یک رابطه دقیق‌تر توسط گیلیلاند و رابینسون [۱۷] ارائه شده است. در این روش برای بدست آوردن تعداد مراحل تعادلی از حالت ترمودینامیکی خوراک (q) نیز استفاده شده است. این رابطه که از داده‌های جداسازی بنزن و تلون (داده‌های گورری^۱ [۱۹]) بدست آمده در شکل ۴-۲۱ نشان داده شده است. این رابطه برای محدوده حالت ترمودینامیکی خوراک $0.7 < q < 1.3$ ارائه شده است و نشان می‌دهد با افزایش q ، تعداد مراحل تعادلی کاهش می‌یابد. رابطه گیلیلاند را برای مقادیر کم q باید به صورت محافظه‌کارانه بکار برد. تحقیقات دونل و کوپر^۲ [۲۰] نشان داد که با افزایش ضریب فراریت بین جزء کلیدی سبک و سنگین یا زمانی که اجزاء فرار در خوراک کم باشند اثر حالت ترمودینامیکی خوراک (q) بسیار مهم خواهد شد.

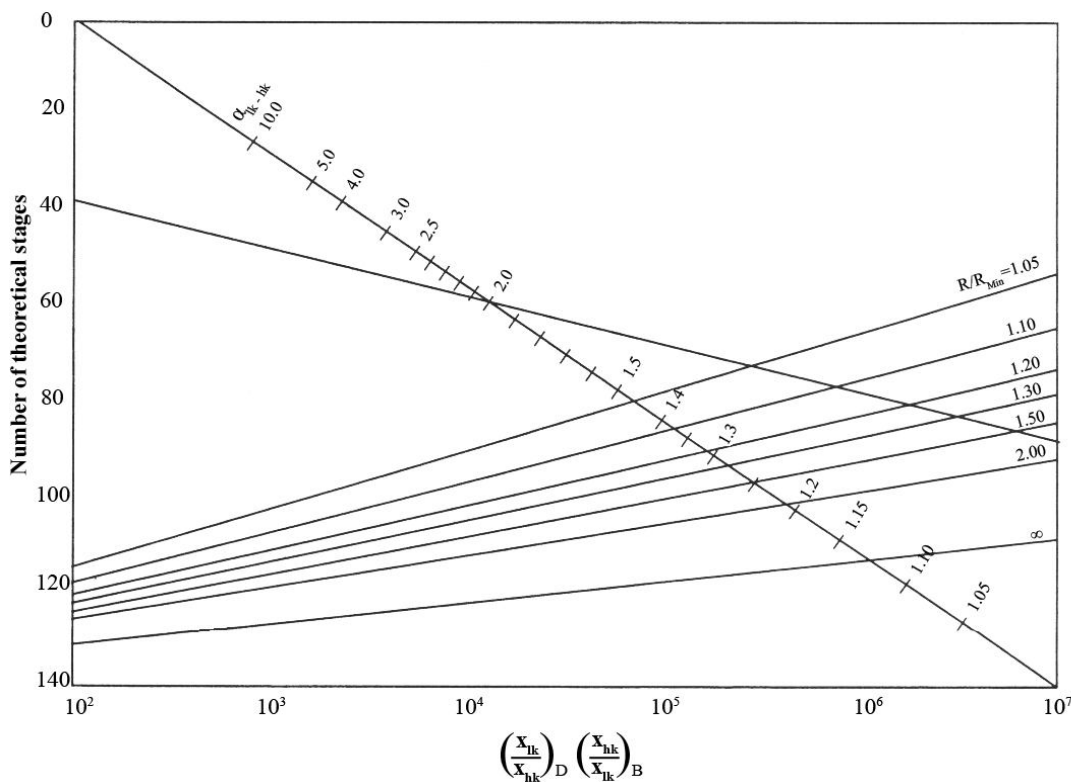


شکل ۴-۲۱: اثر حالت ترمودینامیکی خوراک بر رابطه گیلیلاند

وقتی که بخش دفع مهمتر و دارای سینی‌های بیشتری نسبت به بالای برج باشد رابطه گیلیلاند دارای خطای زیادی خواهد بود. برای مثال یک مورد تقطیر دوجزئی توسط Oliver مورد بررسی قرار گرفته است در این حالت بررسی شده، خوراک به صورت مایع اشباع ($q = 1$) با غلظت ۵٪ ماده سبک وارد برج می‌شود. محصول بالای برج شامل ۴۰٪ ماده سبک و محصول پایین برج شامل ۱٪ ماده سبک می‌باشد. ضریب فراریت بین دو جزء $\alpha = 5$ می‌باشد برای $R/R_{Min} = 1.2$ با حل دقیق، تعداد مراحل تعادلی لازم $15/7$ خواهد بود. حال برای اینکه جواب این مورد را با استفاده از رابطه گیلیلاند بدست آوریم باید N_{Min} و R_{Min} را داشته باشیم که

1- Guerrerri
2- Donnell and Cooper

با استفاده از معادله فنسکی حداقل مراحل تعادلی $N_{Min} = 4.04$ و با استفاده از معادله آندروود حداقل جریان برگشتی $R_{Min} = 1.21$ بدست می‌آید. حال با استفاده از رابطه گیلیلاند برای $R/R_{Min} = 1.2$ تعداد مراحل تعادلی $N = 10.3$ بدست می‌آید که این مقدار ۳۴٪ کمتر از مقدار واقعی آن می‌باشد. برای بدست آوردن تعداد مراحل تئوری می‌توان از شکل ۴-۲۲ که توسط فرانک^۱ ارائه شده است استفاده کرد این شکل برای سیستم دوجزئی و چند جزئی و همچنین برای حالتی است که خوراک به صورت مایع اشباع وارد برج تقطیر شود. البته غلظت ماده سبک و سنگین در بالا و پایین برج باید همان غلظت‌هایی باشند که در روش آندروود مورد استفاده قرار گرفته‌اند.



شکل ۴-۲۲: بدست آوردن تعداد مراحل تئوری توسط روش Frank

شکل ارائه شده توسط فرانک در حقیقت روش ترکیبی فنسکی- آندروود- گیلیلاند است. در این شکل برای بدست آوردن تعداد مراحل باید میزان خلوص بالا و پایین برج، جریان برگشتی عملیاتی، حداقل جریان برگشتی و فرارایت نسبی را داشته باشیم. البته تعداد مراحل بدست آمده مراحل تئوری (با راندمان ۱۰۰٪) است که باید راندمان سینی‌ها نیز بر آن اعمال شود این شکل برای سیستم‌های اجزاء مجاور معمول است. مثال ۴-۱۴: با استفاده از رابطه گیلیلاند، تعداد مراحل تعادلی را برای برج جداکننده بوتان که در مثال‌های ۴-۲، ۴-۳ و ۴-۸ ارائه شده برای دبی جریان برگشتی $L = 379.6 \text{ lbmole/hr}$ با استفاده از روش‌های زیر بدست آورید.

1- Frank

الف : حداقل تعداد مراحل تعادلی با استفاده از رابطه فنسکی و حداقل جریان برگشتی از رابطه آندروود محاسبه شود.

ب : حداقل تعداد مراحل تعادلی با استفاده از رابطه وین و حداقل جریان برگشتی از رابطه آندروود محاسبه شود.

ج : حداقل تعداد مراحل تعادلی با استفاده از رابطه وین و حداقل جریان برگشتی واقعی که توسط بچلر ارائه شده مورد استفاده قرار گیرد.

حل : با استفاده از مثال ۴-۸ مقدار $D = 469.56 \text{ lbmole/hr}$ است پس نسبت جریان برگشتی به صورت زیر خواهد بود.

$$R = \frac{379.6}{469.56} = 0.808$$

با استفاده از نتایج مثال ۴-۸ مقادیر R_{\min} برای قسمت‌های مختلف مسئله به صورت زیر خواهد بود.

Case	R_{\min}	$(R - R_{\min}) / (R + 1)$
A	$219.8 / 469.56 = 0.468$	0.188
B	0.468	0.188
C	$292 / 469.56 = 0.622$	0.103

الف : با استفاده از مثال ۴-۳ حداقل تعداد مراحل تعادلی $N_{\min} = 8.8$ است که با جایگزاری اطلاعات در معادله ۴-۷۳ خواهیم داشت.

$$\frac{N - N_{\min}}{N + 1} = 1 - \exp \left[\left(\frac{1 + 54.4(0.188)}{11 + 117.2(0.188)} \right) \left(\frac{0.188 - 1}{0.188^{0.5}} \right) \right] = 0.471$$

$$N = \frac{8.88 - 0.471}{1 - 0.471} = 17.68$$

نتایج برای بقیه قسمت‌های مسئله به صورت زیر است.

	Case	N_{\min}	N	N-1
(a)	Fenske-Underwood	8.88	17.68	16.68
(b)	Winn-Underwood	7.56	15.35	14.35
(c)	Winn-Exact R_{\min}	7.56	18.25	17.25

مقادیری که در ستون $N - 1$ نوشته شده تعداد مراحل تعادلی درون برج می‌باشد چون جوش‌آور جزئی به عنوان یک مرحله تعادلی عمل می‌کند پس تعداد مراحل تعادلی درون برج یکی کمتر خواهد شد اما چون در

کندانسور کلی ، بخار کاملاً میعان می‌شود مرحله تعادلی محسوب نمی‌شود. در صورتی که از کندانسور جزئی استفاده شود باید یک مرحله تعادلی نیز برای کندانسور جزئی کم شود.

روش براون و مارتین^۱

نتایج روش براون و مارتین [۲۲] نیز مشابه روش گیلیلاند خواهد بود با این تفاوت که نمودار بر حسب جریان برگشتی داخلی $\left(\frac{L}{V}\right)$ بیان شده است. مقادیر لازم برای استفاده از نمودار به صورت زیر است.

$$(L/V)_r = \frac{1}{1 + (D/L)} \quad ۷۴-۴$$

$$\left(\frac{D}{L}\right) = \frac{1}{(L/D)}$$

$$L_r = (L/D) \times D \quad , \quad L_s = L_r + (q \times F) \quad ۷۵-۴$$

$$V_r = \frac{(L/D) \times D}{(L/V)_r} \quad ۷۶-۴$$

$$V_s = V_r - F(1 - q) \quad ۷۷-۴$$

L_r : دبی مایع بخش بالای برج

L_s : دبی مایع بخش پایین برج

V_r : دبی بخار بخش بالای برج

V_s : دبی بخار بخش پایین برج

در این روش ابتدا باید پارامتر زیر را برای شرایط عملیاتی بدست آوریم.

$$\left[\left(\frac{L}{V}\right)_s \left(\frac{V}{L}\right)_r - 1 \right]_o$$

اندیس o نشان دهنده شرایط عملیاتی است.

و سپس پارامتر زیر را باید برای شرایط حداقل جریان برگشتی بدست آوریم.

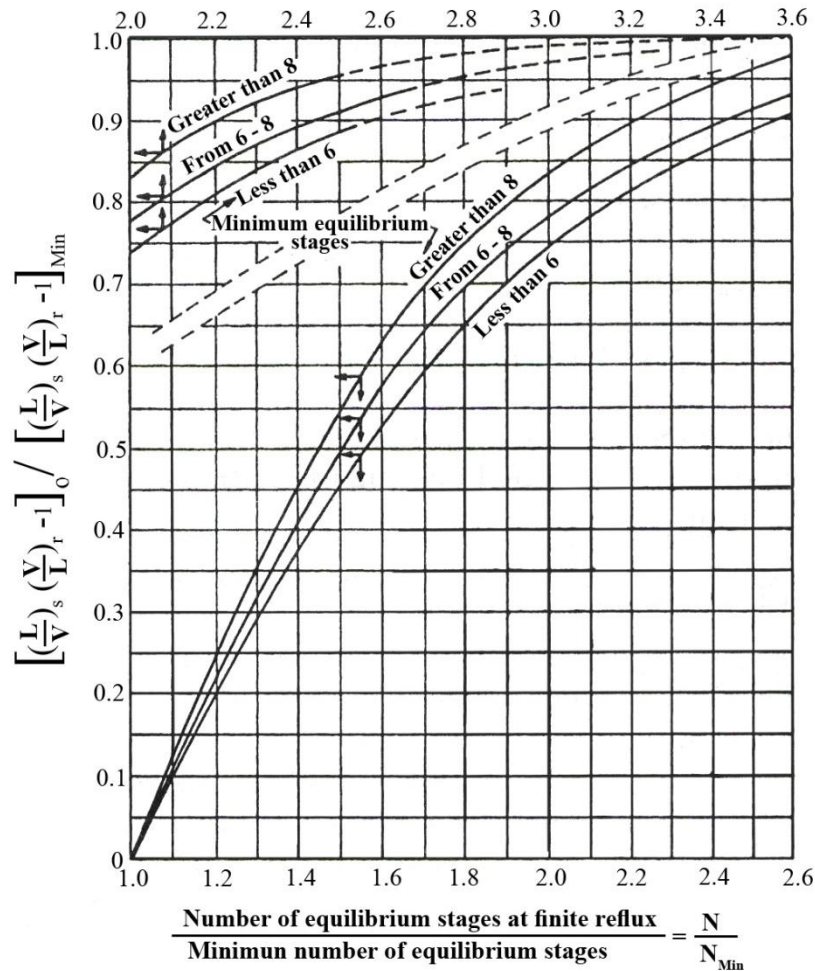
$$\left[\left(\frac{L}{V}\right)_s \left(\frac{V}{L}\right)_r - 1 \right]_{Min}$$

اندیس Min نشان دهنده شرایط حداقل جریان برگشتی است.

حال نسبت دو پارامتر اخیر را بدست می‌آوریم.

$$\frac{\left[\left(\frac{L}{V}\right)_s \left(\frac{V}{L}\right)_r - 1 \right]_o}{\left[\left(\frac{L}{V}\right)_s \left(\frac{V}{L}\right)_r - 1 \right]_{Min}}$$

و با استفاده از این نسبت و شکل ۴-۲۳ با داشتن حداقل مراحل تئوری می‌توان تعداد مراحل تئوری را بدست آورد.



شکل ۴-۲۳: روش براون و مارتین برای محاسبه تعداد سینی‌های تئوری در نسبت‌های مختلف جریان برگشتی

مثال ۴-۱۵: جهت یک جداسازی به یک برج با حداقل نسبت جریان برگشتی 1.017 نیاز است. حداقل تعداد مراحل تئوری برای این برج 22.1 می‌باشد. در صورتی که نسبت جریان برگشتی 1.5 برابر حداقل جریان برگشتی باشد تعداد مراحل تئوری را با استفاده از روش براون و مارتین بدست آورید. این برج شامل یک کندانسور کلی است و خوراک در نقطه جوش وارد برج تقطیر می‌شود میزان محصول $\frac{D}{F} = 0.664$ می‌باشد.

حل: ابتدا مبنای خوراک را $F = 1 \text{ grmole}$ در نظر می‌گیریم. سپس برای حداقل جریان برگشتی خواهیم داشت:

$$\left(\frac{L}{V}\right)_r = \frac{1}{1+(D/L)_{Min}} = \frac{1}{1+1/1.017} = 0.504$$

$$0.504 \times V_r = \left(\frac{L}{D}\right)_{Min} (D_r) = 1.017(0.664)$$

$$V_r = 1.340 \text{ mols/mol feed}$$

$$L_r = 1.017(0.664) = 0.675 \text{ mols/mol feed}$$

$$q = 1.0$$

$$L_s = (0.675) + (1)(1) = 1.675 \text{ mols/mol feed}$$

$$V_s = 1.340 - (1)(1-1) = 1.340 \text{ mols/mol feed}$$

$$\left(\frac{L}{V}\right)_s = \frac{1.675}{1.340} = 1.25$$

$$\left[\left(\frac{L}{V}\right)_s \left(\frac{V}{L}\right)_r - 1\right]_{Min} = (1.25) \left(\frac{1}{0.504}\right) - 1 = 1.480$$

برای شرایط عملیاتی خواهیم داشت :

$$\left(\frac{L}{D}\right)_o = 1.5 \left(\frac{L}{D}\right)_{Min} = 1.5 \times 1.017 = 1.526$$

$$\left(\frac{L}{V}\right)_o = \frac{1}{1+1/1.526} = 0.604$$

$$V_r = \frac{(1.526)(0.664)}{0.604} = 1.678 \text{ mols/mol feed}$$

$$L_r = (1.526)(0.664) = 1.013 \text{ mols/mol feed}$$

$$q = 1.0$$

$$L_s = 1.013 + (1)(1) = 2.013$$

$$V_s = 1.678 - (1)(1-1) = 1.678$$

$$(L/V)_s = 2.013/1.678 = 1.200$$

$$\left[\left(\frac{L}{V}\right)_s \left(\frac{V}{L}\right)_r - 1\right]_o = 1.200 \left(\frac{1}{0.604}\right) - 1 = 0.987$$

پس پارامتر شکل ۴-۲۳ به صورت زیر بدست می‌آید.

$$\frac{0.987}{1.480} = 0.667$$

با استفاده از شکل ۴-۲۳ خواهیم داشت.

$$\frac{N_o}{N_{Min}} = 1.64 \Rightarrow N_o = N_{Min} \times 1.64 = 22.1 \times 1.64 = 36.2$$

یکی از مراحل برای جوش‌آور کم می‌شود چون جوش‌آور به عنوان یک مرحله تئوری عمل می‌کند.

$$N_o = 36.2 - 1 (\text{for reboiler}) = 35.2 \text{ trays in column}$$

روش ادولج^۱

رابطه ادولج [۲۳] نیز ارتباط بین تعداد مراحل تئوری و جریان برگشتی را نشان می‌دهد که توافق بسیار خوبی با واقعیت دارد.

مرحله اول محاسبات

$$\text{When } 1.1 < R/R_{Min} \leq 2.0 \quad (N/N_{Min})(R/R_{Min}) = 2.82 \quad ۷۸-۴$$

$$\text{When } R/R_{Min} \geq 2.0 \quad (N/N_{Min})(R/R_{Min}) = 0.7 + 1.06(R/R_{Min})$$

اگر تعداد مراحل بدست آمده ۲۷ یا بیشتر باشد باید مراحل زیر انجام شود.

مرحله دوم محاسبات

$$\text{When } 1.1 < R/R_{Min} \leq 2.0 \quad N = 2.71(R/R_{Min})(N_{Min}) + 0.38 \quad ۷۹-۴$$

$$\text{When } R/R_{Min} > 2.0 \quad N = [0.67(R/R_{Min}) + 1.02](N_{Min}) + 0.38 \quad ۸۰-۴$$

R : نسبت جریان برگشتی

N : تعداد مراحل تئوری که شامل جوش‌آور نیز می‌شود

محل سینی خوراک را با استفاده از رابطه زیر می‌توان بدست آورد در این رابطه می‌توان تعداد سینی‌های بخش بالای برج را بدست آورد.

$$\text{For } 1.2 < R/R_{Min} < 3.6 \quad (N_r/N_{Min})(R/R_{Min}) = 1.1 + 0.9(R/R_m) \quad ۸۱-۴$$

N_r : تعداد سینی‌های بالای برج

تعداد مراحل واقعی

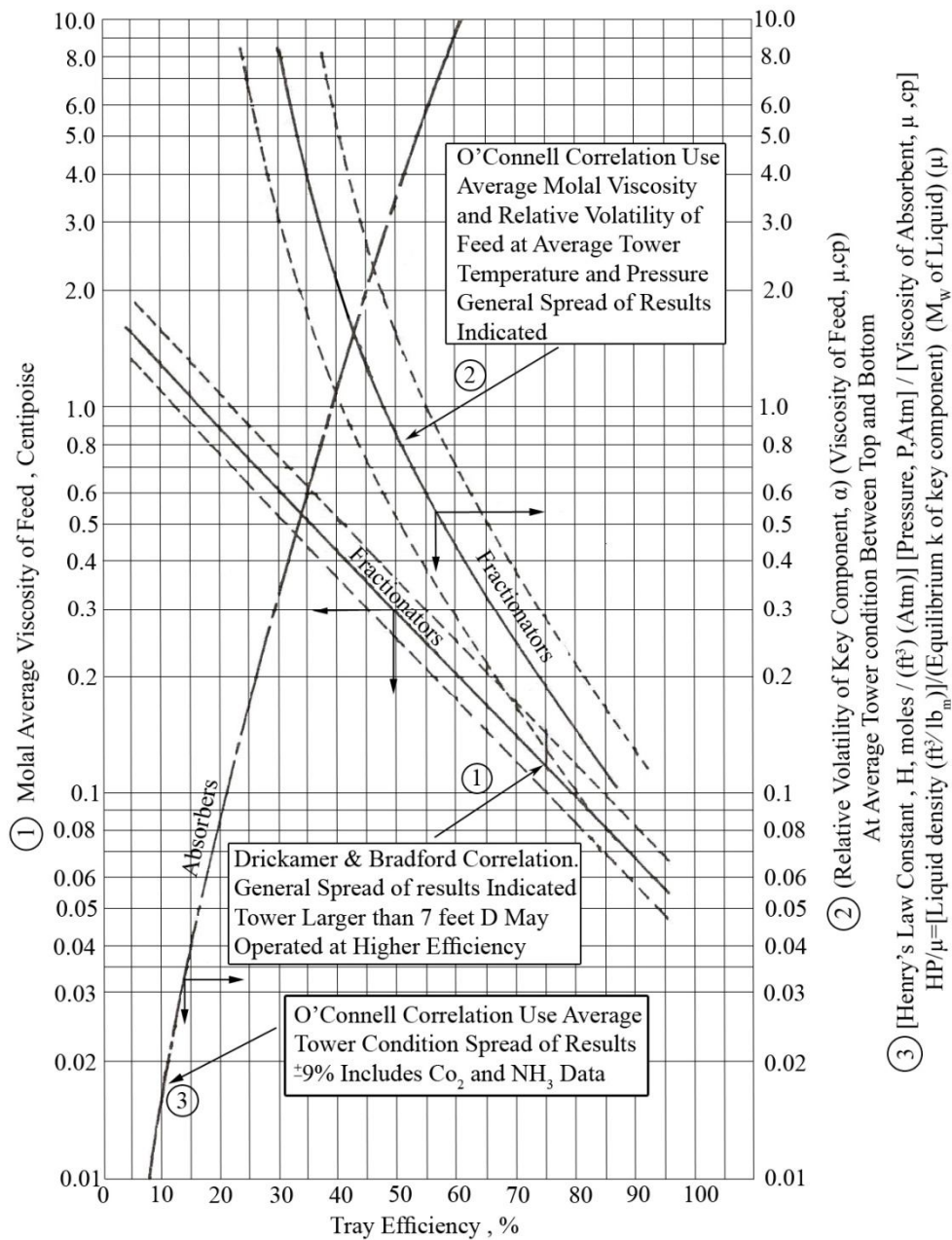
برای بدست آوردن تعداد مراحل واقعی باید تعداد مراحل تئوری را بر راندمان تقسیم کنیم.

$$N_{act} = N_o / E_o$$

N_o : تعداد سینی‌های برج با فرض راندمان ۱۰۰٪

E_o : راندمان کلی برج

البته باید ابتدا کندانسور جزئی و جوش‌آور جزئی (در صورتی که وجود دارند) از تعداد مراحل کم شوند. چون راندمان این دو مرحله ۱۰۰٪ می‌باشد. پس N_o تعداد مراحل تئوری داخل برج بجز کندانسور جزئی و جوش‌آور جزئی را نشان می‌دهد. E_o راندمان کلی برج را نشان می‌دهد که با استفاده از شکل ۴-۲۴ بدست می‌آید.



شکل ۴-۲۴: داده‌های تجربی راندمان کلی برای برج‌ها تقطیر و جذب

محل سینی خوراک

در رابطه گیلیلاند فرض شده است که مراحل تعادلی به صورت مناسب و بهینه بین بالا و پایین برج توزیع شده‌اند پس باید محل سینی خوراک نیز مشخص شود. برای بدست آوردن محل سینی خوراک یک روش توسط براون و مارتین [۲۲] ارائه شده است در این روش فرض شده است که نسبت سینی‌های بالا به پایین برج در هر نسبت جریان برگشتی برابر با نسبت سینی‌های بالا به پایین برج برای جریان برگشتی بینهایت

خواهد بود. با اعمال معادله فنسکی یک بار بین خوراک و بالای برج و بار دیگر بین خوراک و پایین برج و تقسیم آنها بر یکدیگر رابطه زیر بدست می‌آید.

$$\frac{N_R}{N_S} \approx \frac{(N_R)_{Min}}{(N_S)_{Min}} = \frac{\log[(x_{LK,D}/z_{LK,F})(z_{HK,F}/x_{HK,D})]}{\log[(z_{LK,F}/x_{LK,B})(x_{HK,B}/z_{HK,F})]} \frac{\log[(\alpha_B \alpha_F)^{1/2}]}{\log[(\alpha_D \alpha_F)^{1/2}]} \quad ۸۲-۴$$

با استفاده از رابطه اخیر نسبت $\frac{N_r}{N_s}$ را بدست می‌آوریم البته این نسبت برای حداقل جریان برگشتی بدست

آمده و دقیق نیست چون به ندرت غلظت سینی خوراک و خوراک با هم برابر هستند و همچنین با تغییر نسبت جریان برگشتی، محل سینی خوراک نیز تغییر می‌کند. اما می‌توان با استفاده از این روش محل سینی خوراک را با دو یا سه سینی اختلاف بدست آورد که بر حسب خصوصیات مواد و برج، درصد خطا متفاوت است. پس علاوه بر نازل نصب شده (روی سینی محاسبه شده توسط معادله بالا) باید یک نازل روی سینی-های بالاتر و یک نازل دیگر روی سینی‌های پایین‌تر نصب شود تا در عملیات اثر سینی‌های مختلف بررسی شود. پس باید حداقل سه نازل برای ورودی خوراک در نظر گرفته شود.

در صورتی که ضرایب فراریت در طول برج ثابت باشند رابطه اخیر به صورت زیر در می‌آید.

$$\frac{N_r}{N_s} \approx \frac{\log(x_l/x_h)_D (x_h/x_l)_F}{\log(x_l/x_h)_F (x_h/x_l)_B} \quad ۸۳-۴$$

معادله ۸۲-۴ یا ۸۳-۴ باید با معادله زیر به صورت همزمان حل شوند تا تعداد سینی‌های بالا و پایین برج بدست آیند.

$$N_{tot} = N_r + N_s \quad ۸۴-۴$$

N_s : تعداد سینی‌های تئوری بخش پایین برج

N_r : تعداد سینی‌های تئوری بخش بالای برج

N_{tot} : تعداد کل سینی‌های برج

تعداد سینی‌های واقعی بالای برج در صورتی که کندانسور کلی باشد به صورت زیر بدست می‌آید.

$$(N_{act})_r = N_r / E_0$$

تعداد سینی‌های واقعی بالای برج در صورتی که کندانسور جزئی باشد به صورت زیر بدست می‌آید.

$$(N_{act})_r = (N_r - 1) / E_0$$

تعداد سینی‌های واقعی پایین برج نیز در صورتی که جوش‌آور جزئی باشد به صورت زیر بدست می‌آید.

$$(N_{act})_s = (N_s - 1) / E_0$$

با استفاده از روش کرکبراید^۱ [۲۴] نیز می‌توان تعداد سینی‌های بالا و پایین برج و سینی خوراک را بدست آورد که معادله آن به صورت زیر است.

$$\log \frac{(N_r)}{(N_s)} = 0.206 \log \left[\frac{B}{D} \left(\frac{x_{hF}}{x_{IF}} \right) \left(\frac{x_{IB}}{x_{hD}} \right)^2 \right] \quad ۸۵-۴$$

N_r : تعداد سینی‌های بالای سینی خوراک

N_s : تعداد سینی‌های پایین سینی خوراک

D : دبی محصول بالای برج $mole/hr$

B : دبی محصول پایین برج $mole/hr$

اندیس‌ها نیز به صورت زیر می‌باشند.

h : جزء کلیدی سنگین

l : جزء کلیدی سبک

F : خوراک

D : محصول بالای برج

B : محصول پایین برج

برای بررسی صحت این رابطه، تقطیر یک خوراک دو جزئی توسط اولیور^۱ مورد بررسی قرار گرفته است. نسبت سینی‌های بالا به پایین برج برای حالت واقعی، با استفاده از رابطه ۴-۸۲ و با استفاده از رابطه ۴-۸۵ به صورت زیر می‌باشد.

Method	N_R / N_S
Exact	0.08276
Kirkbride (4-85)	0.1971
Fenske Ratio (4-82)	0.6408

گرچه رابطه کرکبراید خیلی دقیق نیست اما نتیجه روش Fenske مردود است.

مثال ۴-۱۶: در صورتی که برای برج جداکننده بوتان مثال ۴-۲ به ۱۸/۲۷ مرحله تعادلی نیاز داشته باشد با استفاده از رابطه کرکبراید تعداد سینی‌های بالا و پایین برج را بدست آورید.
حل: فرض کنیم توزیع محصولات بین بالا و پایین برج دقیقاً مانند مثال ۴-۳ باشد.

$$x_{nC_4,B} = \frac{6.0}{408.3} = 0.0147$$

$$x_{iC_5,D} = \frac{13}{468} = 0.0278$$

$$D = 468 \text{ lbmol } e/hr$$

$$B = 408.3 \text{ lbmol } e/hr$$

و با استفاده از شکل ۴-۳ غلظت اجزاء کلیدی در خوراک بدست می‌آیند.

$$z_{nC_4,F} = 448/876.3 = 0.5112$$

$$z_{iC_5,F} = 36/876.3 = 0.0411$$

با استفاده از رابطه ۴-۸۵ خواهیم داشت.

$$\frac{N_R}{N_S} = \left[\left(\frac{408.3}{468} \right) \left(\frac{0.0147}{0.0278} \right)^2 \left(\frac{0.0411}{0.5112} \right) \right] = 0.445$$

بنابراین تعداد سینی‌های بالا و پایین برج به صورت زیر بدست می‌آیند.

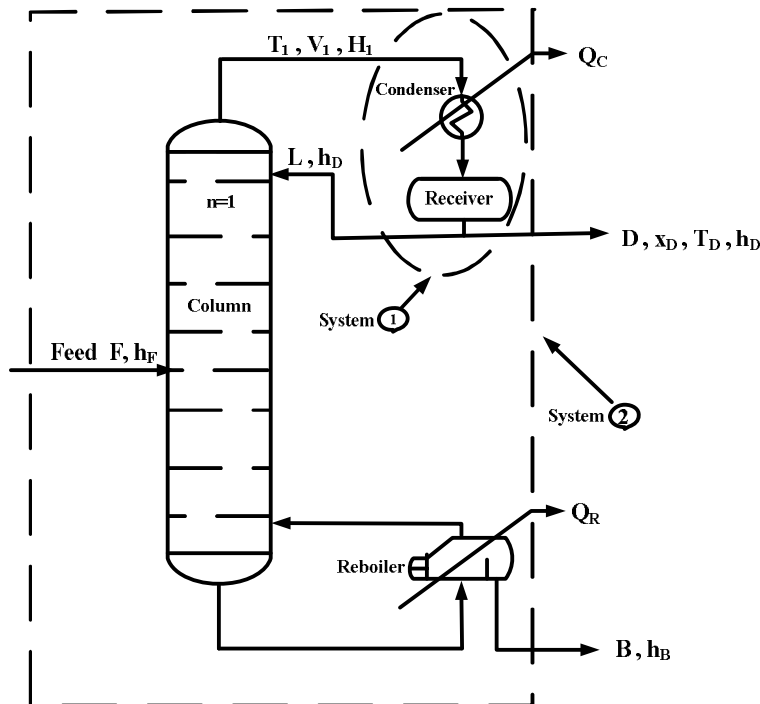
$$N_R = \frac{0.445}{1.445} (18.27) = 5.63 \text{ Stages}$$

$$N_S = 18.27 - 5.63 = 12.64 \text{ Stages}$$

پس شش سینی برای بالای برج و سیزده سینی برای پایین برج در نظر گرفته می‌شود از آنجا که در پایین برج از جوش‌آور جزئی استفاده شده و جوش‌آور جزئی مانند یک مرحله تعادلی عمل می‌کند برای پایین برج دوازده سینی لازم است.

موازنه انرژی حول برج

با توجه با شکل ۴-۲۵ مراحل بدست آوردن بار حرارتی کندانسور به صورت زیر است.



شکل ۴-۲۵ : موازنه انرژی حول برج

۱- با توجه به فشار کندانسور کلی و غلظت محصول بالای برج می‌توان با محاسبه نقطه حباب، دمای محصول بالا (T_D) را بدست آورد.

۲- با استفاده از فشار و دمای کندانسور می‌توان آنتالپی محصول خروجی بالای برج (h_D) که به صورت مایع است را بدست آورد. آنتالپی محصول خروجی بالای برج به صورت زیر بدست می‌آید.

$$h_D = \sum_1^i h_{Di} x_{Di}$$

۳- یک موازنه جرم حول کندانسور می‌نویسیم تا غلظت بخار ورودی به کندانسور بدست آید.

۴- با استفاده از فشار بالای برج و غلظت بخار ورودی به کندانسور (بخار سینی اول) می‌توان با محاسبه نقطه شبنم، دمای سینی اول (T_1) را بدست آورد. آنتالپی بخار ورودی به کندانسور به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$H_1 = \sum_1^i H_{1i} y_{1i} \quad \text{at } T_1 \quad ۸۶-۴$$

۵- مقدار بار حرارتی کندانسور به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$H_1 V_1 = [L h_D + D h_D] + Q_C \quad ۸۷-۴$$

با ساده کردن عبارت بالا رابطه زیر بدست می‌آید.

$$Q_C = V_1 (H_1 - h_D) \quad ۸۸-۴$$

۶- در صورتی که کندانسور بالای برج، کندانسور جزئی باشد ابتدا برای بدست آوردن دمای محصول بالای برج باید محاسبات نقطه شبنم انجام شود سپس با استفاده از رابطه زیر می‌توان بار حرارتی کندانسور را بدست آورد.

$$V_1 H_1 = L h_D + D H_D + Q_C$$

مرحل بدست آوردن بار حرارتی جوش آور به صورت زیر خواهد بود.

۱- با استفاده از فشار جوش‌آور و غلظت محصول پایین برج می‌توان با محاسبه نقطه حباب، دمای محصول پایین برج را بدست آورد.

۲- با استفاده از دما و فشار محصول پایین برج مقدار آنتالپی محصول پایین برج (h_B) بدست می‌آید.

۳- در صورتی که خوراک به صورت دوفازی وارد برج شود آنتالپی خوراک به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$h_F = \frac{\sum V_F (H_i y_i) + \sum L_F (h_i x_i)_F}{F} \quad ۸۹-۴$$

V_F : دبی مولی بخشی از خوراک که به صورت بخار وارد برج می‌شود.

L_F : دبی مولی بخشی از خوراک که به صورت مایع وارد برج می‌شود.

۴- با استفاده از یک موازنه انرژی کلی حول برج، میزان بار حرارتی جوش‌آور (Q_B) بدست می‌آید.

$$F h_F + Q_R = D h_D + B h_B + Q_C \quad ۹۰-۴$$

h_D : آنتالپی محصول مایع بالای برج $Btu/lbmol$

H_D : آنتالپی محصول بخار بالای برج $Btu/lbmol$

h_B : آنتالپی محصول پایین برج $Btu/lbmol$

منابع

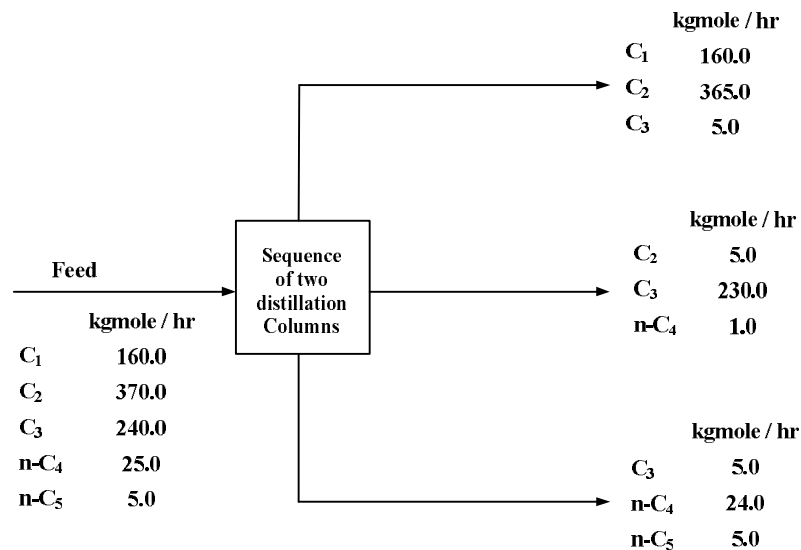
- 1- Fenske, M. R., *Ind. Eng. Chem.*, 24, 482-485 (1932).
- 2- Winn, F. W., *Petroleum Refiner*, 37 (5), 216-218 (1958).
- 3- Hengstebeck, R. J. *Trans. A.I.Ch.E.* V. 42 (1946) P. 309.
- 4- Geddes, R. L., *A.I.Ch.E., Jour.* V. 4 (1958), P. 389.
- 5- Yaws, C. L., C-S. Fang, and P. M. Patel, "Estimating Recoveries in Multicomponent Distillation," *Chem. Eng.* Jan. 29 (1979), p. 101.
- 6- Shiras, R. N., D. N. Hansen, C. H. Gibson, "Calculation of Minimum Reflux in Distillation Column." *Ind.Eng. Chem.* V.42 , p.871-876 , 1950
- 7- Underwood, A. J. V., *Trans. Inst. Chem. Eng.* (London), 10, 112-158 (1932).
- 8- Bachelor, J. B., *Petroleum Refiner*, 36(6), 161-170 (1957).
- 9- Underwood, A. J. V., *j. Inst. Petrol.*, 32, 614-626 (1946).
- 10- Stupin, W. J., and F. J. Lockhart, "The Distribution of Non-key Components in Multicomponent Distillation." Paper presented at the 61st Annual Meeting of AIChE, Los Angeles, California, December 1-5, 1968.
- 11- Underwood, A. J. V., "Fractional Distillation of Multicomponent Mixtures," *Chem. Eng.Prog.* V. 44, p.603 (1948).
- 12- Colburn, A. P., "Calculation of Minimum Reflux Ratio in Distillation of Multicomponent Mixtures," *Trans. A.I.Ch.E.* V. 37, p. 805 (1941).
- 13- Scheibel, E. G. and C. F. Montross, "Empirical Equation for Theoretical Minimum Reflux," *Ind. Eng. Chem.* V. 38, p. 268 (1946).
- 14- Chou, S-M. and C. L. Yaws, "Minimum Reflux for Complex Distillations," *Chem. Eng.* V. 95, No. 6 (1988), p. 79.
- 15- Fair, J. R., and W. L. Bolles, *Chem. Eng.*, 75(9), 156-178 (April 22, 1968).
- 16- Gilliland, E. R., *Ind. Eng. Chem.*, 32, 1220-1223 (1940).
- 17- Robinson, C. S., and E. R. Gilliland, *Elements of Fractional Distillation*, 4th ed, McGraw-Hill Book Co., New York, 1950, 347-350.
- 18- Molokanov, Y. K., T. P. Korablina, N. I. Mazurnia, and G. A. Nikiforov, *Int. Chem. Eng.*, 12 (2), 209-212 (1972).
- 19- Guerreri, G., *Hydrocarbon Processing*, 48 (8), 137-142(August, 1969).
- 20- Donnell, J. W., and C. M. Cooper, *Chem. Eng.*, 57, 121-124 (June, 1950).
- 21- Frank, O., "Shortcuts for Distillation Design," *Chem. Eng.* Mar. 14, (1977), p. 109.
- 22- Brown, G. G. and H. Z. Martin, "An Empirical Relationship Between Reflux Ratio and the Number of Equilibrium Plates in Fractionating Columns," *Trans. A.I.Ch.E.* V. 38, No. 5 (1939).
- 23- Eduljee, H. E., "Easy Way to Remember Reflux vs. Trays," *Hydro. Proc.* V. 42, No. 5 (1963), p. 185.
- 24- Kirkbride, C. G., *Petro. Refiner*, V. 23, No. 9 (1944) p. 87-102.

مسائل

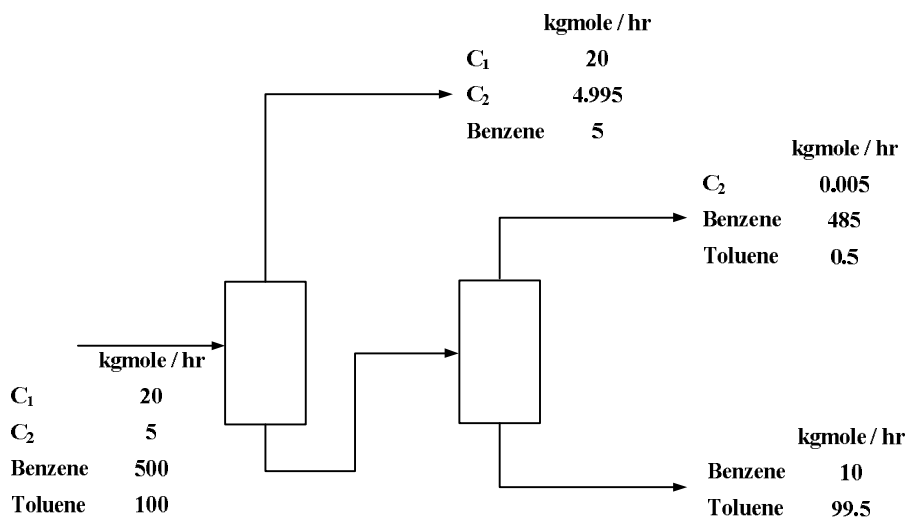
۱- مخلوطی شامل پروپیونیک اسید و نرمال بوتیریک اسید که یک مخلوط ایده‌آل فرض می‌شود وارد برج تقطیر می‌شود محصول بالای برج شامل ۹۵٪ مولی پروپیونیک اسید و محصول پایین برج شامل ۹۸٪ مولی نرمال بوتیریک اسید می‌باشد. فشار برج و نوع کندانسور را بدست آورید.

۲- از یک آرایش شامل دو برج برای جداسازی خوراک زیر استفاده می‌شود. فشار عملیاتی برج‌ها و نوع کندانسور آنها را برای حالت‌های زیر بدست آورید.

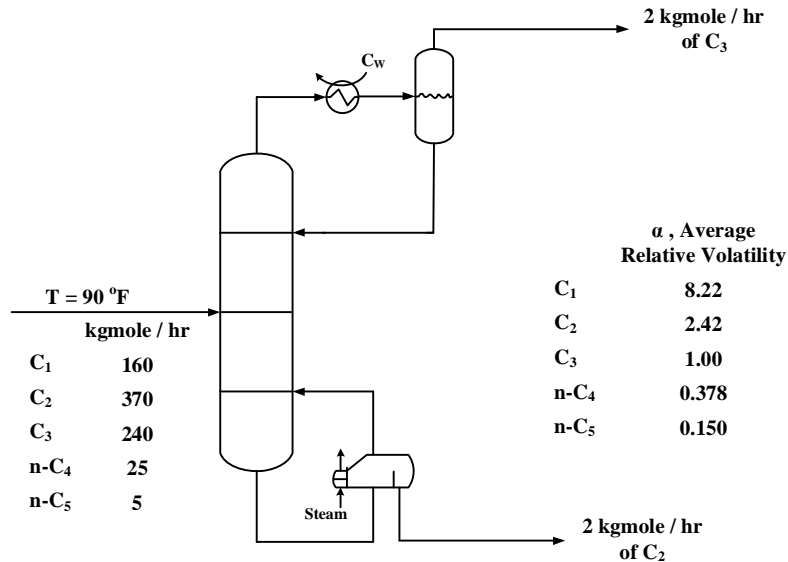
الف : برج جداکننده اتان - پروپان (C_2/C_3) به عنوان برج اول در نظر گرفته می‌شود.
ب : برج جداکننده پروپان - نرمال بوتان (C_3/nC_4) به عنوان برج اول در نظر گرفته می‌شود.



۳- برای دو برج زیر نوع کندانسور و فشار برج را بدست آورید.



۴- از برج جداساز اتان^۱ برای جداسازی خوراک زیر استفاده می‌شود. در صورتی که تعداد سینی‌های این برج، دو و نیم برابر حداقل تعداد سینی‌ها باشد تعداد سینی‌های برج را بدست آورید.

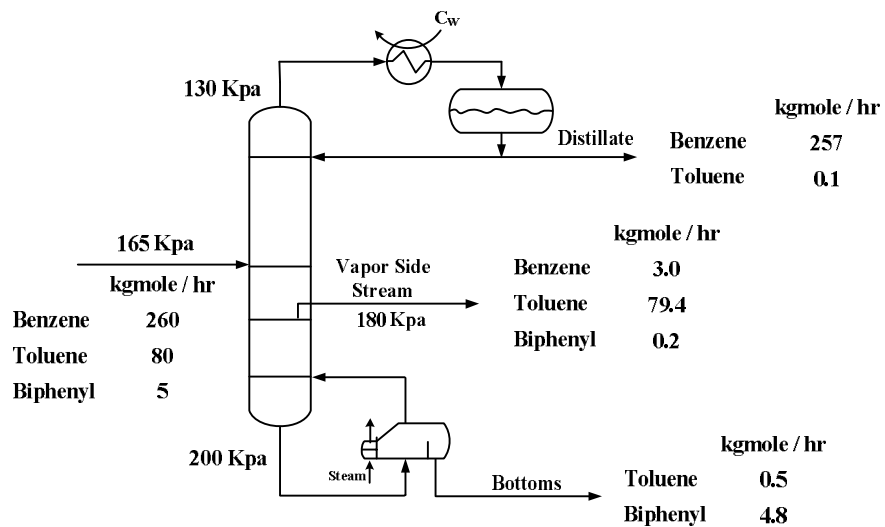


۵- از برج پیچیده زیر برای جداسازی خوراک استفاده می‌شود. با استفاده از معادله فنسکی مطلوبست بدست آوردن

الف : حداقل تعداد سینی‌ها بین محصول بالا و خوراک

ب : حداقل تعداد سینی‌ها بین خوراک و جریان جانبی

ج : حداقل تعداد سینی‌ها بین جریان جانبی و محصول پایین برج.
محلول ایده‌آل فرض می‌شود.

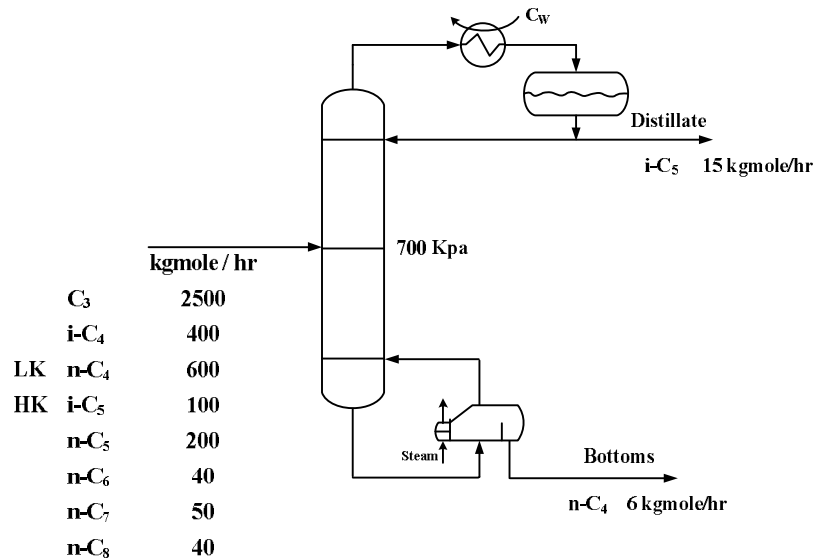


۶- مخلوطی شامل ۲۵٪ استن و ۷۵٪ آب وارد برج با فشار 130 kpa می‌شود. محصول بالای برج شامل ۹۵٪ استن و محصول پایین حاوی ۲٪ استن می‌باشد. ضریب اکتیویته محلول‌های رقیق به صورت زیر است.

$$\gamma_A^\infty = 8.12 \quad , \quad \gamma_W^\infty = 4.13$$

با استفاده از روش فنسکی، حداقل تعداد مراحل تعادلی را بدست آورید و نتیجه را با روش مک کیب^۱ مقایسه کنید.

۷- برای سیستم جداسازی زیر حداقل تعداد سینی‌ها و توزیع اجزاء خوراک بین بالا و پایین برج را بدست آورید.

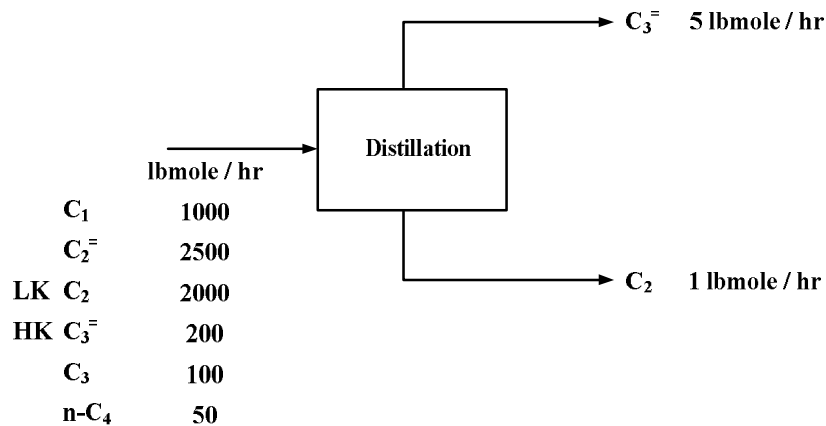


۸- برای سیستم جداسازی زیر مطلوبست

الف : حداقل تعداد مراحل تعادلی را بدست آورید.

ب : توزیع اجزاء خوراک بین بالا و پایین برج را بدست آورید.

ج : فشار برج و نوع کندانسور را بدست آورید.



۹- 1000 lbmole/hr خوراکی شامل Co_2 ۳٪، C_3 ۲۰٪، nC_4 ۳۷٪، nC_5 ۳۵٪ و nC_6 ۵٪ وارد برج تقطیر می‌شود برج در فشار 250 Psia کار می‌کند و حداقل تعداد مراحل تعادلی $N_{Min} = 15$ می‌باشد. میزان بازیافت پروپان (C_3) را بر حسب دبی محصول بالای برج رسم نمایید.

۱۰- خوراکی شامل ۳۰٪ پروپان و ۷۰٪ پروپیلن وارد برج می‌شود محصولات شامل ۹۹٪ پروپیلن و ۹۸٪ پروپان است در صورتی که فشار برج 300 Psia باشد و خوراک در شرایط زیر وارد برج شود با استفاده از معادله آندروود حداقل جریان برگشتی خارجی را محاسبه نمایید.

الف : خوراک در نقطه حباب وارد برج می‌شود.

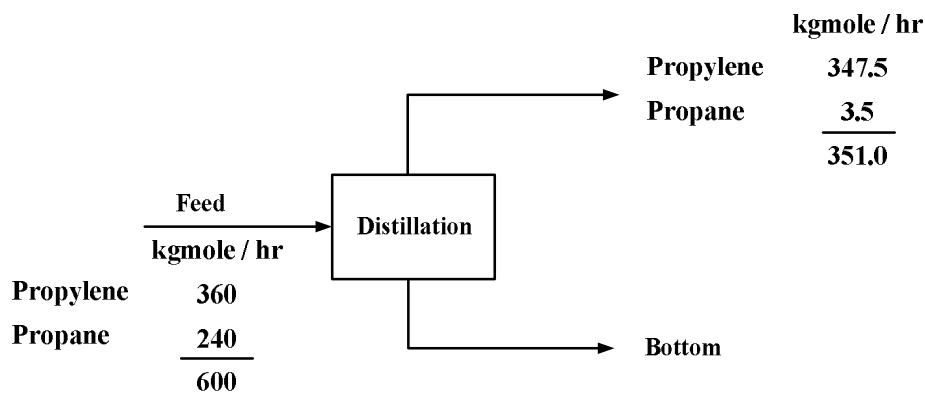
ب : ۵۰٪ از خوراک ورودی به برج تبخیر می‌شود.

ج : خوراک در نقطه شبیم وارد برج می‌شود.

۱۱- برای مسئله ۷ در صورتی که خوراک در فشار برج به صورت مایع اشباع وارد شود با استفاده از معادله آندروود حداقل جریان برگشتی خارجی و توزیع اجزاء خوراک را در این شرایط بدست آورید.

۱۲- خوراکی شامل ۵۰٪ نرمال بوتان و ۵۰٪ ایزوبوتان به صورت مایع اشباع وارد یک برج با فشار 100 Psia می‌شود. حداقل جریان برگشتی خارجی و حداقل تعداد مراحل تعادلی را بر حسب درصد خلوص ایزوبوتان بدست آورید. فرض کنید غلظت ایزوبوتان در بالای برج و غلظت نرمال بوتان پایین برج با هم مساوی هستند. این ترسیم را برای خلوص ۹۰٪ تا ۹۹/۹۹٪ ایزوبوتان در محصول بالای برج انجام دهید.

۱۳- خوراکی به صورت مایع اشباع وارد برج تقطیر می‌شود و تعداد سینی‌های لازم $N/N_{Min} = 2$ و ضریب فرار $\alpha = 1.11$ می‌باشد با استفاده از روش فنسکی- آندروود- گیلیلاند جریان برگشتی لازم را بدست آورید. فرض کنید برج دارای کندانسور کلی و جوش‌آور جزئی می‌باشد.



۱۴- خوراکی شامل ۶۲٪ پاراکلروبنزن و ۳۸٪ ارتودی‌کلروبنزن وارد یک برج تقریباً اتمسفری می‌شود. خوراک به صورت دوفازی بوده که ۹۰٪ آن مایع و ۱۰٪ به صورت بخار می‌باشد و ضریب فرار بین اجزاء سبک و سنگین $\alpha = 1.54$ است. برج دارای کندانسور کلی و جوش‌آور جزئی می‌باشد و محصول بالای برج شامل ۹۸٪ پارادی‌کلروبنزن و محصول پایین برج حاوی ۹۶٪ ارتودی‌کلروبنزن می‌باشد در صورتی که $R/R_{Min} = 1.15$ باشد با استفاده از روش فنسکی- آندروود- گیلیلاند تعداد سینی‌های لازم را بدست آورید.

۱۵- توضیح دهید چرا وقتی نسبت سینی‌های بالا به پایین برج کاهش می‌یابد روش گیلیلاند خطای زیادی خواهد داشت.

۱۶- خوراکی شامل $8\% C_2$ ، $15\% C_3$ ، $20\% nC_4$ ، $27\% nC_5$ ، $20\% nC_6$ و $10\% nC_7$ در نقطه حباب وارد برج تقطیر می‌شود.

الف : در صورتی که دمای خارج برج $120^\circ F$ باشد و جداسازی 100% بین nC_4 و nC_5 لازم باشد فشار برج و نوع کندانسور را بدست آورید.

ب : در حالت جریان برگشتی کامل تعداد سینی‌ها $N_{Min} = 8$ می‌باشد و محصول پایین برج شامل 1% نرمال بوتان است میزان جداسازی اجزاء را بدست آورید.

ج : برای حالت ب حداقل جریان برگشتی به برج را بدست آورید.

د : در صورتی که $R/R_{Min} = 1.5$ باشد تعداد سینی‌های لازم را بدست آورید.

۱۷- خوراک زیر وارد یک برج با فشار 120 Psia می‌شود محصول بالای برج شامل $92/5\%$ نرمال بوتان و محصول پایین برج حاوی 82% ایزوپنتان است.

Component	lbmole / hr
C_3	5
iC ₄	15
nC ₄	25
iC ₅	20
nC ₅	35
	100

الف : حداقل تعداد مراحل تعادلی را با استفاده از روش فنسکی بدست آورید.

ب : با استفاده از رابطه فنسکی توزیع محصولات بین بالا و پایین برج را بدست آورید.

ج : در صورتی که خوراک به صورت مایع اشباع وارد برج شود با استفاده از آندروود حداقل جریان برگشتی به برج را محاسبه نمایید.

د : در صورتی که $R/R_{Min} = 1.2$ باشد و برج شامل کندانسور کلی و جوش‌آور جزئی باشد تعداد مراحل تعادلی را بدست آورید.

ه : محل سینی خوراک را مشخص کنید.

۱۸- محصول واحد کلریناسیون برای بازیابی C_2H_5Cl به صورت مایع اشباع وارد یک برج تقطیر با فشار 240 Psia می‌شود. مقادیر k برای اجزاء به صورت زیر می‌باشد.

Component	Mole Fraction	k_i
C ₂ H ₄	0.05	5.1
HCl	0.05	3.8
C ₂ H ₆	0.10	3.4
C ₂ H ₅ Cl	0.80	0.15

در صورتی که جداسازی زیر مدنظر باشد.

$$(x_D/x_B) \text{ for } C_2H_5Cl = 0.01$$

$$(x_D/x_B) \text{ for } C_2H_6 = 75$$

حداقل مراحل تعادلی ، توزیع محصولات و حداقل جریان برگشتی را بدست آورید و در صورتی که $R/R_{Min} = 1.5$ باشد تعداد مراحل تعادلی و محل سینی خوراک را مشخص کنید برج دارای کندانسور جزئی و جوش آور جزئی می باشد.

۱۹- از خوراکی با غلظت زیر در نقطه حباب وارد برج تقطیر می شود.

Component	Mole Fraction	Relative Volatility
A	0.4	5
B	0.2	3
C	0.4	1

الف : در جریان برگشتی کامل ، حداقل تعداد سینی ها $N_{Min} = 5$ می باشد و دبی محصول بالای برج 60 kgmole/hr است با استفاده از رابطه فنسکی توزیع محصولات بین بالا و پایین برج را محاسبه نمایید.

ب : برای قسمت الف حداقل جریان برگشتی به برج را محاسبه نمایید.

ج : در صورتی که $R/R_{Min} = 1.2$ باشد تعداد سینی ها و محل سینی خوراک را بدست آورید.

۲۰- برای مسئله ۶ نسبت تعداد سینی های بالا به پایین برج را با استفاده از روش های زیر بدست آورید.

الف : معادله فنسکی

ب : معادله کرکبراید

ج : روش مک کیب

فصل پنجم

روش ادمیستر

مقدمه

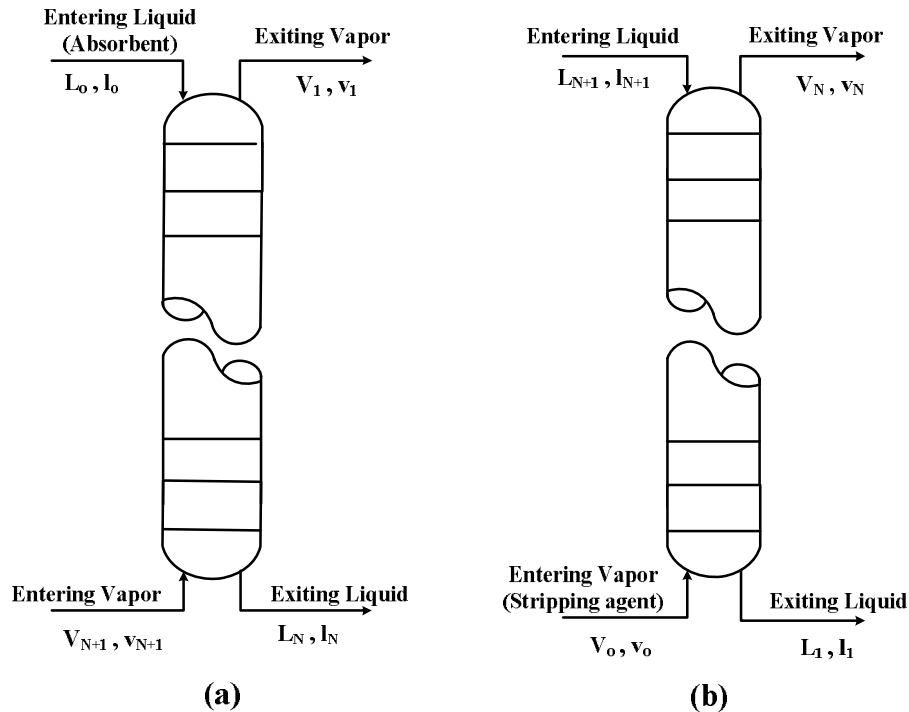
بسیاری از سیستم‌های جداسازی اجزاء چند جزئی به صورت مراحل تعادلی غیر همسو هستند بدین معنا که فازها به صورت غیر همسو حرکت می‌کنند. با استفاده از روش‌های تخمینی و با داشتن مشخصات جریان‌های ورودی و خروجی می‌توان تعداد مراحل تعادلی لازم را بدست آورد. این روش‌ها تحت عنوان روش‌های گروهی^۱ بررسی می‌شوند زیرا در این روش‌ها موازنه حول گروهی از مراحل تعادلی نوشته می‌شود و مشخصات مراحل تعادلی (شامل غلظت و دمای هر مرحله) در محاسبات دخالت داده نمی‌شود. در این قسمت یک گروه از مراحل تعادلی که تحت عنوان برج جذب^۲ یا برج دفع^۳ استفاده می‌شود مورد بحث قرار می‌گیرد.

روش ادمیستر^۴

روش‌های تخمینی گروهی توسط کرمسر^۵ [۱] پایه‌گذاری شده است. وی ابتدا با نوشتن موازنه جرم حول یک سیستم جذب شامل تعدادی مراحل تعادلی، اولین روش تخمینی را پیشنهاد کرد سپس این روش در مقالات بعدی توسط ساودرز و براون^۶ [۲]، هورتون و فرانکلین^۷ [۳] و ادمیستر^۸ [۴] بهبود بخشیده شد. روشی که در این قسمت ارائه می‌شود روشی است که توسط ادمیستر ارائه شده و برای جداسازی اجزاء بین فاز مایع و بخار مورد استفاده قرار می‌گیرد.

-
- 1- Group Methods
 - 2- Absorption tower
 - 3- Stripping tower
 - 4- Edmister
 - 5- Kremser
 - 6- Souders and Brown
 - 7- Horton and Franklin
 - 8- Edmister

روش کرمسر برای سیستم‌های چندجزئی با جریان غیرهمسو مانند جذب ، دفع و استخراج مایع-مایع مورد استفاده قرار می‌گیرد و روش ادمیستر برای سیستم‌های چندجزئی با جریان غیرهمسو که خوراک در مراحل تعادلی میانی وارد می‌شود مورد استفاده قرار می‌گیرد.



شکل ۵-۱ : سیستم آدیاباتیک غیرهمسو شامل N مرحله تعادلی (a) برج جذب (b) برج دفع

ابتدا یک سیستم آدیاباتیک غیرهمسو شامل N مرحله تعادلی که برای جذب یک یا چند جزء از بخار مورد استفاده قرار می‌گیرد مورد بررسی قرار می‌گیرد. این سیستم در قسمت A شکل ۵-۱ نشان داده شده است. فرض می‌شود اجزائی که از فاز بخار جذب می‌شوند در فاز مایع ورودی به برج وجود نداشته باشند. ضمناً مراحل تعادلی از بالا به پایین شماره گذاری می‌شوند. موازنه جرم حول بالای برج (شامل مرحله تعادلی اولی تا $N-1$) برای اجزائی که جذب می‌شوند به صورت زیر می‌باشد.

$$v_N = v_1 + l_{N-1} \quad 1-5$$

v_N : دبی جزء جذب شونده در فاز بخار که از مرحله تعادلی N ام خارج می‌شود.

l_{N-1} : دبی جزء جذب شونده در فاز مایع که از مرحله تعادلی $N-1$ ام خارج می‌شود.

که v و l به صورت زیر تعریف می‌شوند.

$$v = yV \quad 2-5$$

$$l = xL \quad 3-5$$

با توجه به اینکه فرض شده اجزاء جذب شونده در مایع ورودی وجود نداشته باشند $l_0 = 0$ می‌باشد. با استفاده از رابطه تعادل می‌توان غلظت مایع و بخار هر مرحله تعادلی را به یکدیگر ارتباط داد.

$$y_N = k_N x_N \quad 4-5$$

با ترکیب کردن معادله‌های ۲-۵ ، ۳-۵ و ۴-۵ می‌توان v_N را به صورت زیر بدست آورد.

$$v_N = \frac{l_N}{(L_N/k_N V_N)} \quad 5-5$$

ضریب جذب (A) برای هر مرحله به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$A = \frac{L}{kV} \quad 6-5$$

با ترکیب کردن معادله‌های ۵-۵ و ۶-۵ خواهیم داشت.

$$v_N = \frac{l_N}{A_N} \quad 7-5$$

با جایگزین کردن معادله ۷-۵ در معادله ۱-۵ رابطه زیر بدست می‌آید.

$$l_N = (l_{N-1} + v_1) A_N \quad 8-5$$

حال باید جریان مایع داخلی l_{N-1} را بدست آوریم برای این منظور حول مرحله اول تا $N-2$ موازنه می‌نویسیم که رابطه زیر حاصل می‌شود.

$$l_{N-1} = (l_{N-2} + v_1) A_{N-1} \quad 9-5$$

با جایگزین کردن رابطه ۹-۵ در رابطه ۸-۵ خواهیم داشت.

$$l_N = l_{N-2} A_{N-1} A_N + v_1 (A_N + A_{N-1} A_N) \quad 10-5$$

حال باید جریان مایع داخلی l_{N-2} را بدست آوریم. با انجام این کار و تکرار عملیات خواهیم داشت.

$$l_N = v_1 (A_1 A_2 A_3 \cdots A_N + A_2 A_3 \cdots A_N + A_3 \cdots A_N + \cdots + A_N) \quad 11-5$$

برای اینکه بتوان از معادله اخیر استفاده کرد باید این معادله را با موازنه کلی حول سیستم که به صورت زیر است ترکیب کرد.

$$l_N = v_{N+1} - v_1 \quad 12-5$$

برای اینکه بتوانیم بخار خروجی از سیستم را بر حسب بخار ورودی بدست آوریم رابطه زیر را تعریف می‌کنیم.

$$v_1 = v_{N+1} \phi_A \quad 13-5$$

ϕ_A کسری از بخار ورودی به سیستم است که جذب نمی‌شود. با ترکیب معادلات ۱۱-۵ ، ۱۲-۵ و ۱۳-۵ رابطه زیر برای ϕ_A بدست می‌آید.

*fraction of
species in*

$$\phi_A = \frac{1}{A_1 A_2 A_3 \cdots A_N + A_2 A_3 \cdots A_N + A_3 \cdots A_N + \cdots + A_N + 1} = \text{entering vapor} \quad 14-5$$

*that is
not absorbed*

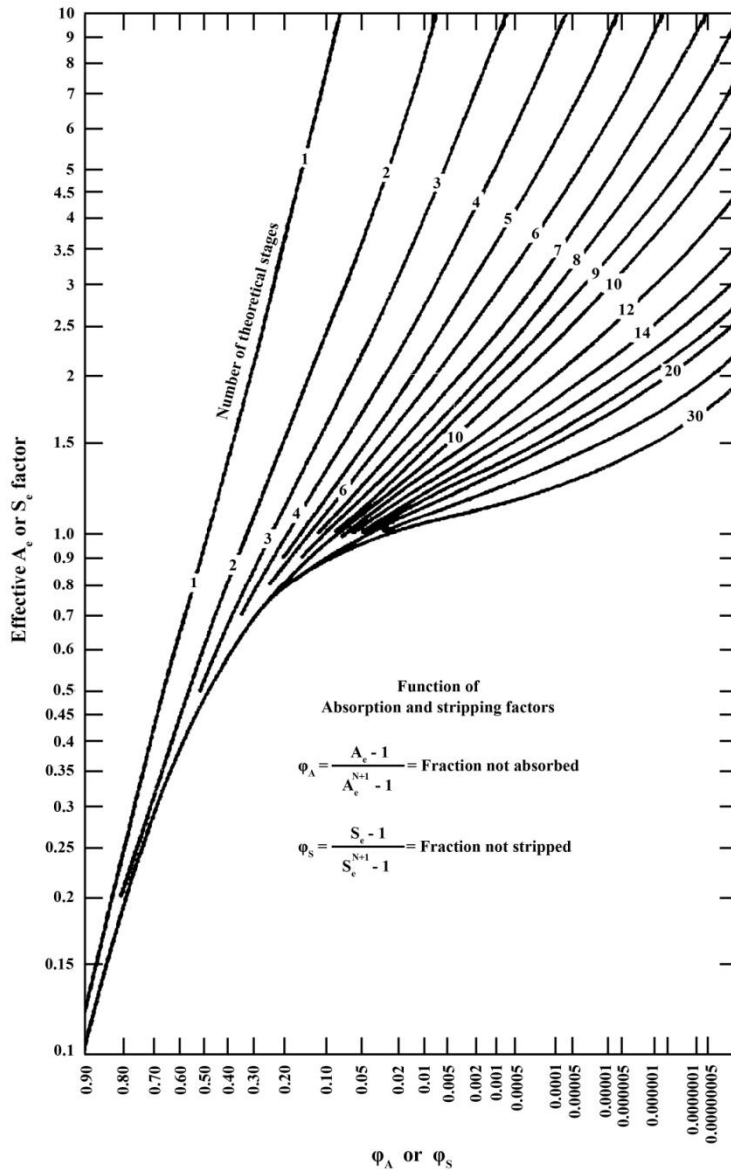
حال با جایگزین کردن یک ضریب جذب متوسط (A_e) به جای ضریب جذب هر مرحله تعادلی ، رابطه ۵-۱۴ به صورت زیر درمی‌آید.

$$\phi_A = \frac{1}{A_e^N + A_e^{N-1} + A_e^{N-2} + \dots + A_e + 1} \quad 15-5$$

در صورتی که صورت و مخرج سمت راست معادله ۱۵-۵ را در $(A_e - 1)$ ضرب کنیم رابطه ۱۵-۵ به صورت زیر در خواهد آمد.

$$\phi_A = \frac{A_e - 1}{A_e^{N+1} - 1} \quad 16-5$$

رابطه ۱۶-۵ توسط ادمیستر [۵] در مقیاس لگاریتمی ترسیم شده است که در شکل ۲-۵ نشان داده شده است. این رابطه ابتدا توسط کرمسر نیز در مقیاس خطی ترسیم شده بود.



شکل ۲-۵: ترسیم رابطه ۱۶-۵ در مقیاس لگاریتمی توسط ادمیستر

مراحل اخیر را برای یک برج دفع نیز می‌توان انجام داد. برای این منظور برج دفع نشان داده شده در قسمت B شکل ۵-۱ مورد بررسی قرار می‌گیرد. در این حالت فرض بر این است که اجزائی که از فاز مایع دفع می‌شوند در فاز بخار ورودی وجود نداشته باشند و از میعان اجزاء فاز بخار در فاز مایع صرف‌نظر می‌شود. در این برج مراحل تعادلی از پایین به بالا شماره‌گذاری می‌شوند. نتایج معادلات برج دفع به صورت زیر می‌باشد.

$$l_1 = l_{N+1} \phi_S \quad 17-5$$

که ϕ_S به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\phi_S = \frac{S_e - 1}{S_e^{N+1} - 1} \quad 18-5$$

$$S = \frac{kV}{L} = \frac{1}{A} \quad 19-5$$

S : ضریب دفع برای هر مرحله تعادلی

S_e : ضریب دفع متوسط موثر

ϕ_S : کسری از مایع ورودی که دفع نمی‌شود.

ترسیم معادله ۵-۱۸ در مقیاس لگاریتمی در شکل ۵-۲ ارائه شده است.

برج‌های جذب^۱

همانطور که در شکل ۵-۳ نشان داده شده معمولاً برج جذب به یک برج دفع یا یک برج تقطیر متصل است تا مایع جذب کننده احیاء شده و به برج جذب برگردانده شود. وقتی که برج دفع به صورت ایده‌آل عمل نکند مایع جذب کننده به طور کامل احیاء نمی‌شود و مقدار کمی از اجزاء بخار ورودی به برج جذب در آن باقی می‌مانند. پس فاز بخاری که از برج جذب عبور می‌کند باعث دفع اجزاء باقی مانده در مایع جذب کننده خواهد شد. معادله ۵-۱۳ برای حالتی است که در برج جذب فقط جذب رخ دهد و معادله ۵-۱۷ برای حالتی است که در برج دفع، فقط دفع رخ دهد. در صورتی که در برج جذب برخی از اجزاء جذب و برخی دیگر دفع شوند، باید دو حالت اخیر را ترکیب کرد. چون در برج جذب (قسمت A شکل ۵-۱) مراحل تعادلی از بالا به پایین شماره‌گذاری می‌شوند باید معادله ۵-۱۷ به صورت زیر بازنویسی شود.

$$l_N = l_0 \phi_S \quad 20-5$$

این معادله فقط برای اجزائی از مایع است که اصلاً در فاز بخار ورودی (V_{N+1}) وجود نداشته باشند. موازنه جرم برای همین اجزاء روی برج جذب که در قسمت A شکل ۵-۱ نشان داده شده، به صورت زیر است.

$$l_0 = v_1 + l_N$$

با ترکیب معادله اخیر و معادله ۵-۲۰، معادله زیر بدست می‌آید.

$$v_1 = l_0(1 - \phi_S) \quad 21-5$$

حال برای اجزائی که هم در فاز بخار ورودی (V_{N+1}) و هم در فاز مایع ورودی (L_0) وجود دارند می‌توان موازنه کلی جرم نوشت برای این منظور با ترکیب معادله ۵-۱۳ و ۵-۲۱ خواهیم داشت.

$$v_1 = v_{N+1} \phi_A + l_0(1 - \phi_S) \quad 22-5$$

که به طور کلی می‌توان این معادله را برای همه اجزاء بخار ورودی نوشت.

برای محاسبه ϕ_A و ϕ_S که در معادلات ۵-۲۰ تا ۵-۲۲ ظاهر می‌شوند ابتدا باید ضریب جذب موثر (A_e) و ضریب دفع موثر (S_e) را بدست آورد. این ضرایب با استفاده از معادله‌ای که توسط ادمیستر [۴] پیشنهاد شده است محاسبه می‌شوند.

$$A_e = [A_N(A_1 + 1) + 0.25]^{1/2} - 0.5 \quad 23-5$$

$$S_e = [S_1(S_N + 1) + 0.25]^{1/2} - 0.5 \quad 24-5$$

این معادله از حل دقیق برج جذب آدیباتیک با دو مرحله تعادلی بدست آمده که نتایج بسیار خوبی برای برج جذب با بیش از دو مرحله تعادلی نیز دارد.

مقادیر ضریب جذب و دفع برای بالا و پایین برج با استفاده از دبی مایع و بخار بالا و پایین برج و دمای بالا و پایین برج بدست می‌آید. دبی مایع و بخار برای بالا و پایین برج با استفاده از معادله هورتون و فرانکلین [۳] حدس زده می‌شود.

$$V_2 = V_1 \left(\frac{V_{N+1}}{V_1} \right)^{1/N} \quad 25-5$$

$$L_1 = L_0 + V_2 - V_1 \quad 26-5$$

$$V_N = V_{N+1} \left(\frac{V_1}{V_{N+1}} \right)^{1/N} \quad 27-5$$

معادلات اخیر حل دقیق نیست اما فرض شده است که درصد جذب همه سینی‌ها با هم برابرند.

$$\frac{V_{N+1}}{V_N} \times \frac{V_N}{V_{N-1}} \times \dots \times \frac{V_3}{V_2} \times \frac{V_2}{V_1} = \frac{V_{N+1}}{V_1} \quad 28-5$$

چون درصد جذب همه سینی‌ها با هم برابرند خواهیم داشت.

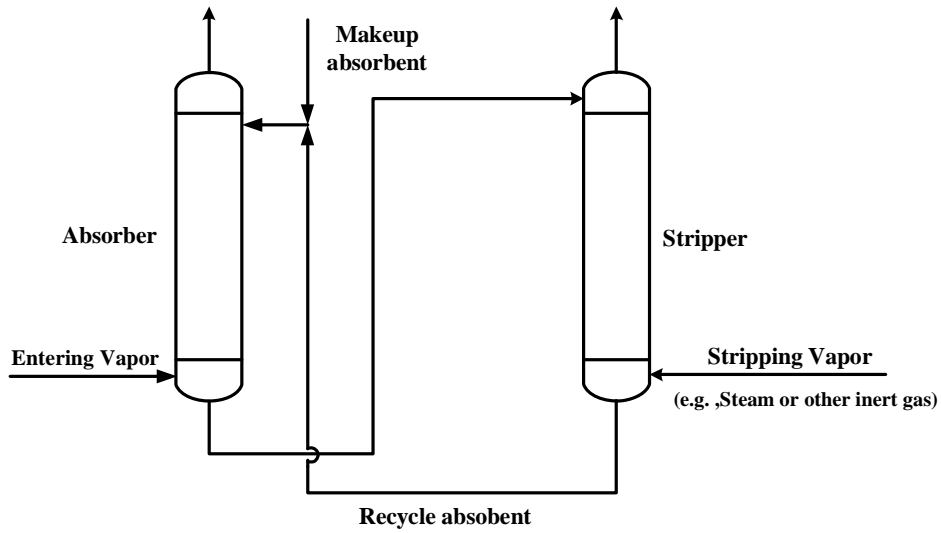
$$\frac{V_{N+1}}{V_N} = \frac{V_N}{V_{N-1}} = \dots = \frac{V_3}{V_2} = \frac{V_2}{V_1} \quad 29-5$$

با استفاده از معادله ۵-۲۹ همه اجزاء معادله با $\frac{V_2}{V_1}$ برابرند که با جایگزاری آن در معادله ۵-۲۸ خواهیم داشت.

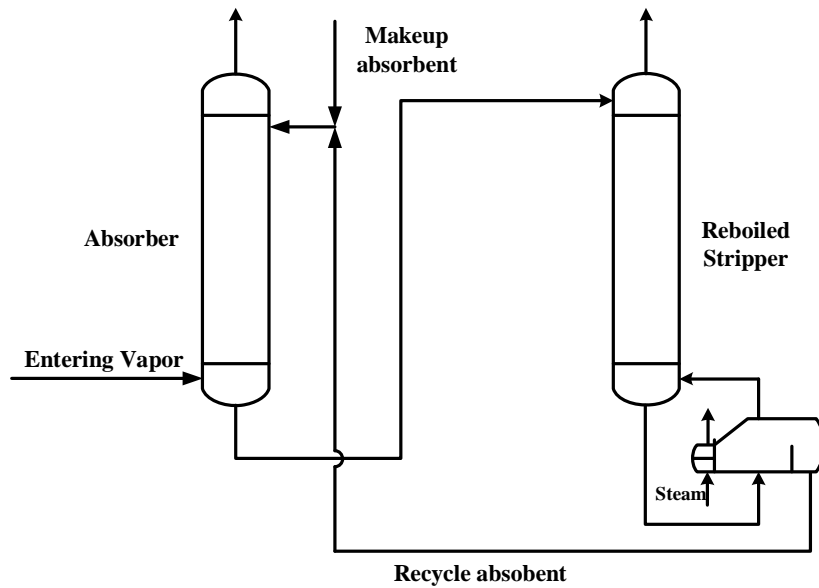
$$\left(\frac{V_2}{V_1} \right)^N = \frac{V_{N+1}}{V_1} \Rightarrow \frac{V_2}{V_1} = \left(\frac{V_{N+1}}{V_1} \right)^{1/N}$$

دوباره با استفاده از معادله ۲۹-۵ همه اجزاء معادله با $\frac{V_{N+1}}{V_N}$ برابرند که با جایگزاری آن در رابطه ۲۸-۵ خواهیم داشت.

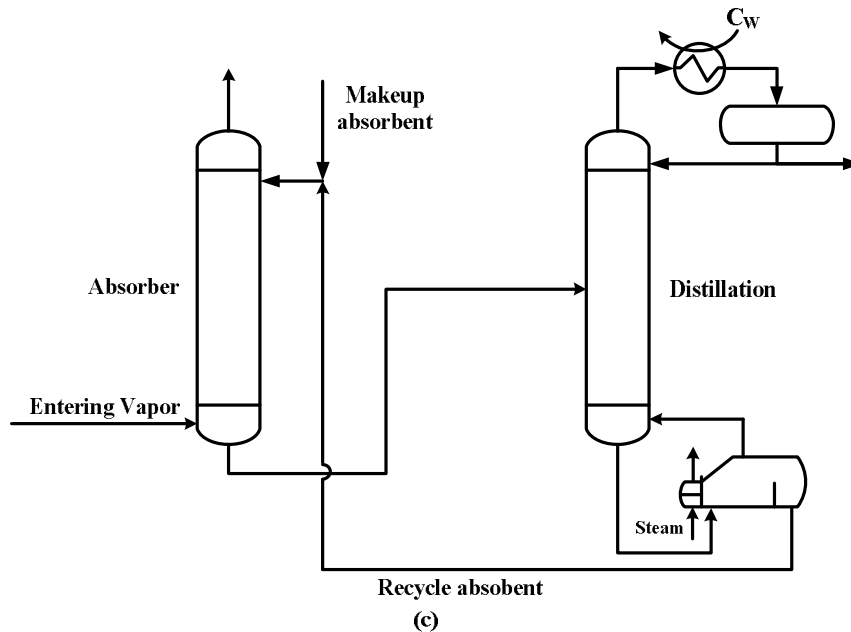
$$\left(\frac{V_{N+1}}{V_N}\right)^N = \frac{V_{N+1}}{V_1} \Rightarrow \frac{V_N}{V_{N+1}} = \left(\frac{V_1}{V_{N+1}}\right)^{1/N}$$



(a)



(b)



شکل ۳-۵: سیستم‌های مختلف برای بازیابی مایع جذب کننده (a) استفاده از بخار یا گاز بی‌اثر در برج دفع (b) استفاده از برج دفع مجهز به جوش‌آور (c) استفاده از برج تقطیر

برای محاسبه ضرایب جذب و دفع باید دمای بالا و پایین برج را داشته باشیم برای محاسبه دما فرض شده است که تغییرات دما بین سینی‌ها متناسب با حجم گاز جذب شده است بنابراین خواهیم داشت.

$$\frac{T_N - T_1}{T_N - T_0} = \frac{V_{N+1} - V_2}{V_{N+1} - V_1} \quad ۳۰-۵$$

معادله اخیر و معادله موازنه انرژی حول سیستم باید به طور همزمان حل شوند. به طور کلی در صورتی که $T_0 \approx T_{N+1}$ باشد مقدار $T_1 - T_0$ از صفر تا $20^\circ F$ متغیر است و به میزان گاز جذب شده وابسته است.

معادلات اخیر برای بررسی و مطالعه متغیرهای طراحی در طراحی مقدماتی بسیار مفید هستند. به طور کلی برای یک خوراک ورودی به برج جذب باید میزان جذب حداقل یک جزء مشخص باشد ضریب جذب موثر برای اجزاء کلیدی بزرگتر از یک می‌باشد. میزان جذب بقیه اجزاء به فشار برج جذب، دمای خوراک، غلظت مایع جذب کننده، دمای مایع جذب کننده، دبی مایع جذب کننده و تعداد مراحل تعادلی بستگی دارد. برای اینکه مقدار جذب ماکزیمم باشد باید دما پایین و فشار بالا باشد اما هزینه خنک کردن خوراک و افزایش فشار بخار ورودی باعث محدود کردن شرایط جذب می‌شود. همانطور که در شکل ۳-۵ نشان داده شده است افزایش تعداد مراحل تعادلی بسیار بیشتر از افزایش دبی مایع جذب کننده روی ماکزیمم انتخاب‌پذیری تاثیر گذار است. زمانی که تعداد مراحل تعادلی به سمت بینهایت میل می‌کند مقدار مایع جذب کننده به مینیمم مقدار آن میل خواهد کرد در صورتی که در معادله ۳-۵ تعداد مراحل تعادلی به سمت بینهایت میل داده شود $(N \rightarrow \infty)$ حداقل دبی مایع جذب کننده به صورت زیر بدست می‌آید.

$$(L_0)_{Min} = k_k V_{N+1} (1 - \phi_{A_k}) \quad ۳۱-۵$$

اندیس k ، جزء کلیدی را نشان می‌دهد. در رابطه اخیر فرض شده است که جزء کلیدی در مایع ورودی موجود نیست و $A_k < 1$ است و میزان کسر گاز جذب شده بسیار کوچک است. در فرآیندهایی شبیه به جذب گازوئیل از گاز طبیعی که کسر بسیار کوچکی از گاز جذب می‌شود محاسبه ضرایب جذب و دفع بسیار ساده خواهد بود زیرا می‌توان فرض‌های زیر را اعمال کرد.

$$L_1 \approx L_N \approx L_0$$

$$V_1 \approx V_N \approx V_{N+1}$$

$$T_1 \approx T_N \approx (T_0 + T_{N+1})/2$$

این فرض‌ها همان فرض‌های روش کرمسر می‌باشند در صورتی که میزان جذب زیاد باشد نیز می‌توان همین فرض‌های را اعمال کرد و نتیجه بدست آمده را به عنوان حدس اولیه در روش ادمیستر مورد استفاده قرار داد. مثال ۵-۱: همانطور که در شکل ۵-۴ نشان داده شده اجزاء سنگین موجود در یک خوراک هیدروکربنی تقریباً فوق اشباع در فشار $400 \text{ Psia} (2.76 \text{ Mpa})$ توسط یک مایع سنگین جذب می‌شود. مایع جذب کننده با دبی 165 lbmole/hr و دمای 90°F با ترکیب نشان داده شده از بالای برج وارد می‌شود و خوراک که به صورت بخار فوق اشباع است از پایین برج وارد می‌شود. این برج شامل شش مرحله تعادلی می‌باشد. مشخصات ترمودینامیکی شش جزء در $400 \text{ Psia} (2.76 \text{ Mpa})$ و در محدوده دمایی $0^\circ \text{F} < T < 300^\circ \text{F}$ به صورت زیر می‌باشند.

$$k_i = \alpha_i + \beta_i T + \gamma_i T^2 + \delta_i T^3$$

$$H_{V_i} = A_i + B_i T + C_i T^2$$

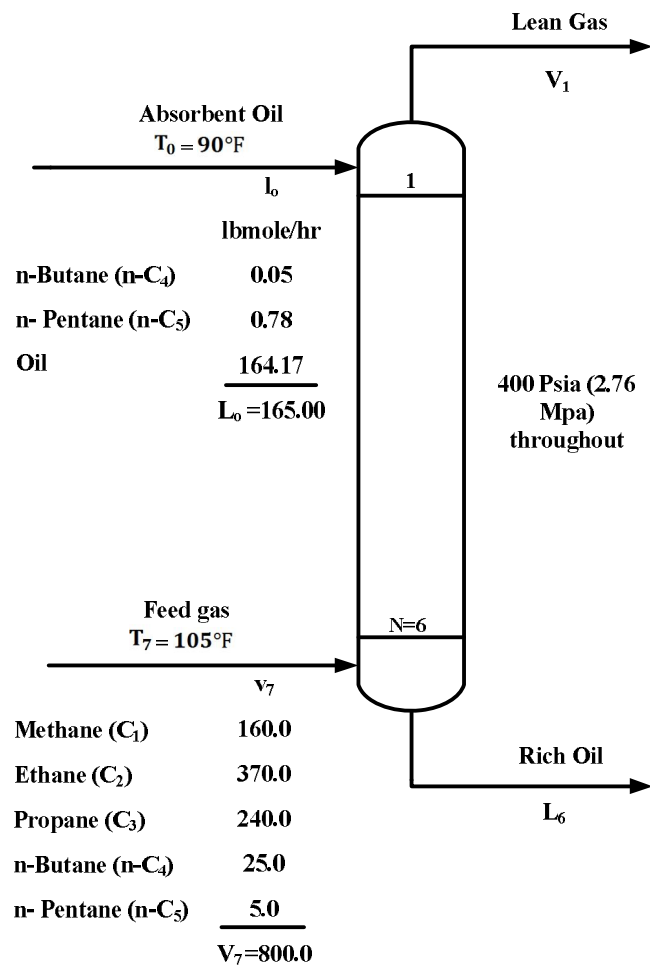
$$H_{L_i} = a_i + b_i T + c_i T^2$$

که دما بر حسب فارنهایت و آنتالپی بر حسب Btu/lbmole می‌باشد. ثابت‌های این معادله در جدول ۵-۱ موجود می‌باشند. با استفاده از روش گروهی دبی و غلظت بخار و مایع خروجی از برج را محاسبه نمایید.

جدول ۵-۱: ثابت‌های معادلات ترمودینامیکی اجزاء در در $400 \text{ Psia} (2.76 \text{ Mpa})$ و در محدوده دمایی $0^\circ \text{F} < T < 300^\circ \text{F}$

Species	α_i	β_i	γ_i	δ_i
C ₁	4.35	2.542×10^{-2}	-2.0×10^{-5}	8.333×10^{-9}
C ₂	0.65	8.183×10^{-3}	2.25×10^{-5}	-2.333×10^{-8}
C ₃	0.15	2.383×10^{-3}	2.35×10^{-5}	-2.333×10^{-8}
n-C ₄	0.0375	5.725×10^{-4}	1.075×10^{-5}	-2.5×10^{-10}
n-C ₅	0.0105	2.692×10^{-4}	2.55×10^{-6}	1.108×10^{-8}
Abs . Oil	1.42×10^{-5}	3.64×10^{-7}	3.44×10^{-9}	1.50×10^{-11}

Species	A_i	B_i	C_i	a_i	b_i	c_i
C_1	1604	9.357	1.782×10^{-3}	0	14.17	-1.782×10^{-3}
C_2	4661	15.54	3.341×10^{-3}	0	16.54	3.341×10^{-3}
C_3	5070	26.45	0	0	22.78	4.889×10^{-3}
n- C_4	5231	33.90	5.812×10^{-3}	0	31.97	5.812×10^{-3}
n- C_5	5411	42.09	8.017×10^{-3}	0	39.68	8.017×10^{-3}
Abs . Oil	8000	74.67	3.556×10^{-2}	0	69.33	3.556×10^{-2}



شکل ۵-۴ : مشخصات برج جذب مربوط به مثال ۵-۱

حل : برای تکرار اول از فرض‌های روش کرمسر استفاده می‌کنیم در این روش فرض بر این است که جریان مایع و بخار در طول برج ثابت ($V = V_7$, $L = L_0$) و دمای متوسط دو جریان ورودی به عنوان دمای برج در نظر گرفته می‌شود.

$$T = (T_0 + T_7)/2 = 97.5 \text{ } ^\circ\text{C}$$

حال با استفاده از رابطه ۵-۶ می‌توان ضرایب جذب و دفع را بدست آورد.

$$A_i = \frac{1}{S_i} = \frac{165}{(k_i)_{97.5 \text{ } ^\circ\text{F}}} = \frac{0.2063}{(k_i)_{97.5 \text{ } ^\circ\text{F}}}$$

بدین ترتیب مقادیر ϕ_A و ϕ_S را با داشتن ضرایب جذب و دفع و تعداد مراحل تعادلی ($N = 6$) با استفاده از شکل ۵-۲ یا رابطه ۵-۱۶ و ۵-۱۸ می‌توان بدست آورد. مقادیر $(v_i)_1$ با استفاده از رابطه ۵-۲۲ و مقادیر $(l_i)_6$ با استفاده از موازنه کلی جرم حول برج به صورت زیر بدست می‌آید.

$$(l_i)_6 = (l_i)_0 + (v_i)_7 - (v_i)_1 \quad \text{۵-۳۲}$$

که نتایج در جدول زیر ارائه شده است.

Component	$k_{97.9 \text{ } ^\circ\text{F}}$	A	S	ϕ_A	ϕ_S	Pound moles per hour	
						v_1	l_6
C ₁	6.646	0.0310	--	0.9690	--	155.0	5.0
C ₂	1.640	0.1258	--	0.8743	--	323.5	46.5
C ₃	0.5841	0.3531	--	0.6474	--	155.4	84.6
C ₄	0.1953	1.056	0.9468	0.1205	0.1673	3.05	22.0
C ₅	0.07126	2.894	0.3455	1.114×10^{-3}	0.6549	0.28	5.50
Abs . Oil	0.000096	--	4.669×10^{-4}	--	0.99953	0.075	164.095
Totals						637.305	327.695

تکرار دوم با استفاده از نتایج تکرار اول برای حدس زدن شرایط مراحل تعادلی اول و آخر با استفاده از معادلات ۵-۲۵ و ۵-۲۷ بدست می‌آید.

$$V_2 = 637.305 \left(\frac{800}{637.305} \right)^{1/6} = 661.9 \text{ lbmole/hr}$$

$$L_1 = 165 + 661.9 - 637.305 = 189.605 \text{ lbmole/hr}$$

$$V_6 = 800 \left(\frac{637.305}{800} \right)^{1/6} = 770.3 \text{ lbmole/hr}$$

بدست آوردن دمای مرحل تعادلی اول و آخر با استفاده از حل همزمان معادله ۵-۳۰ و موازنه کلی انرژی بدست می‌آید که با جایگذاری اطلاعات در رابطه ۵-۳۰ خواهیم داشت.

$$\frac{T_6 - T_1}{T_6 - 90} = \frac{800 - 661.9}{800 - 637.305} = 0.849$$

$$T_1 - 0.151T_6 = 76.41 \quad ۳۳-۵$$

موازنه انرژی حول برج به صورت زیر می‌باشد.

$$V_7 H_{V_7} + L_0 H_{L_0} = V_1 H_{V_1} + L_6 H_{L_6} \quad ۳۴-۵$$

دو معادله اخیر با استفاده از روش سعی و خطا حل خواهند شد بدین ترتیب که ابتدا T_1 را حدس می‌زنیم سپس توسط معادله ۳۳-۵ مقدار T_6 را بدست می‌آوریم حال صحت این حدس توسط معادله ۳۴-۵ بررسی می‌شود.

پس دمای مرحله تعادلی اول (T_1) به صورت $(37.8^\circ C)$ $T_1 = T_0 + 10 = 90 + 10 = 100^\circ F$ حدس زده می‌شود و دمای مرحله آخر به صورت زیر بدست می‌آید.

$$T_6 = \frac{100 - 76.41}{0.151} = 156^\circ F (58.9^\circ C)$$

با بررسی موازنه انرژی خواهیم داشت.

$$V_7 H_{V_7} + L_0 H_{L_0} - V_1 H_{V_1} + L_6 H_{L_6} = \Delta Q = -170800 \text{ Btu/hr}$$

از آنجا که باید $\Delta Q = 0$ شود حدس غلط بوده است و باید حدس دیگری در نظر بگیریم که حدس بعدی و نتایج آن به صورت زیر است.

$$T_1 = 105^\circ F \quad T_6 = 189^\circ F \quad \Delta Q = -798600 \text{ Btu/hr}$$

می‌توان بین دو حدس اخیر برون‌یابی کرد تا $T_1 = 98.6^\circ F$ برای $\Delta Q = 0$ بدست آید.

$$T_6 = 147^\circ F$$

با استفاده از نتایج تکرار اول نسبت‌های L_1/V_1 و L_6/V_6 به صورت زیر می‌باشند.

$$\frac{L_1}{V_1} = \frac{189.6}{637.305} = 0.298$$

$$\frac{L_6}{V_6} = \frac{327.695}{770.3} = 0.425$$

با توجه به نتایج اخیر ضریب جذب و دفع برای بالا و پایین برج به صورت زیر می‌باشد.

Component	98.6 °F		147 °F	
	A ₁	S ₁	A ₆	S ₆
C ₁	0.446	--	0.554	--
C ₂	0.1800	--	0.1879	--
C ₃	0.5033	--	0.4556	--
C ₄	1.501	0.6664	1.205	0.8298
C ₅	4.105	0.2436	3.032	0.3298
Abs . Oil	--	3.292×10 ⁻³	--	4.457×10 ⁻⁴

ضرایب جذب و دفع موثر را با استفاده از روابط ۲۳-۵ و ۲۴-۵ می‌توان بدست آورد سپس مقادیر ϕ_S و ϕ_A با استفاده از شکل ۲-۵ یا با استفاده از روابط ۱۶-۵ و ۱۸-۵ بدست می‌آیند. مقادیر $(v_i)_1$ با استفاده از رابطه ۵-۲۲ و مقادیر $(l_i)_6$ با استفاده از رابطه ۵-۳۲ بدست می‌آید.

Component	A _e	S _e	ϕ_A	ϕ_S	Pound moles per hour	
					v_1	l_6
C ₁	0.0549	—	0.9451	—	151.2	8.8
C ₂	0.1868	—	0.8132	—	300.9	69.1
C ₃	0.4669	—	0.5357	—	128.6	111.4
C ₄	1.307	0.7122	0.0557	0.3173	1.43	23.62
C ₅	3.466	0.2576	4.105×10^{-4}	0.7425	0.20	5.58
Abs . Oil	—	3.292×10^{-3}	—	0.99967	0.054	164.116
Totals					582.384	382.616

مقدار L_6 برای تکرار دوم $382.616 \text{ lbmole/hr}$ است که بیشتر از مقدار $L_6 = 327.695 \text{ lbmole/hr}$ برای تکرار اول است. همچنین میزان جذب گاز در تکرار اول $162.695 \text{ lbmole/hr}$ و در تکرار دوم $217.616 \text{ lbmole/hr}$ می‌باشد. مقدار بدست آمده در تکرار دوم ۳۴٪ بیشتر از مقدار بدست آمده در تکرار اول است پس هنوز مسئله همگرا نشده است جهت همگرا شدن مسئله باید تکرارهای بعدی شبیه به تکرار دوم انجام شود که میزان L_6 بدست آمده در هر تکرار به صورت زیر می‌باشد.

K , Iteration number	$l_6, \text{ lbmole / hr}$	$\frac{(l_6)_k - (l_6)_{k-1}}{(l_6)_{k-1}} \times 100$
1	327.695	---
2	382.616	16.8
3	402.8	5.3
4	410.3	1.9
5	413.1	0.68
6	414.2	0.27
7	414.6	0.097

پس از هفت مرحله سعی و خطا مقدار L_6 با $1/0.1\%$ خطا همگرا می‌شود. مقادیر نهایی $(v_i)_1$ و $(l_i)_6$ و نتایج روش کرمسر در جدول زیر مقایسه شده‌اند همچنین مقادیر دقیق نیز که در فصل ۱۳ توضیح داده خواهد شد برای بدست آوردن دقت هر کدام ارائه شده است.

Component	$(v_i)_1, lbmole/hr$			$(l_i)_6, lbmole/hr$		
	Kremser Approximation	Edmister Group Method	Exact Solution	Kremser Approximation	Edmister Group Method	Exact Solution
C ₁	155.0	149.1	147.64	5.0	10.9	12.36
C ₂	323.5	288.2	276.03	46.5	81.8	94.97
C ₃	155.4	112.0	105.42	84.6	128.0	134.58
C ₄	3.05	0.84	1.18	22.0	24.21	23.87
C ₅	0.28	0.17	0.21	5.50	5.61	5.57
Abs . Oil	0.075	0.045	0.05	164.095	164.125	164.12
Totals	637.305	550.355	530.53	327.695	414.645	434.47

تخمین روش کرمسر نسبت به نتایج دقیق ضعیف است در صورتی که تخمین روش ادمیستر توافق خوبی با داده‌های واقعی دارد. اما دمای مرحله تعادلی اول ($T_1 = 100.4^\circ F$) مرحله تعادلی آخر ($T_6 = 163.3^\circ F$) که توسط روش ادمیستر بدست آمده توافق خوبی با نتایج دقیق ندارد. داده‌های دقیق برای سینی اول ($T_1 = 150.8^\circ F$) و برای مرحله تعادلی آخر ($T_6 = 143.7^\circ F$) می‌باشد.

در مثال ۵-۱ میزان جذب هر کدام از اجزاء بدست می‌آید. حل دقیق نشان می‌دهد که بخار خروجی از برج جذب $530.53 lbmole/hr$ می‌باشد این مقدار شامل همه اجزاء فرار می‌باشد کسر مقادیر جذب نشده هر کدام از اجزاء در جدول زیر ارائه شده است.

Component	v_1/v_7	l_6/v_7
C ₁	0.923	0.077
C ₂	0.746	0.254
C ₃	0.439	0.561
C ₄	0.046 ^a	0.954 ^a
C ₅	0.008 ^a	0.992 ^a

a -Corrected to eliminate effect of stripping of this component due to presence of a small amount of it in the absorbent

این نتایج نشان می‌دهد که جداسازی بین اتان و پروپان ضعیف است. در این برج، جداسازی بسیار خوبی بین متان و بوتان صورت می‌گیرد و اجزاء میانی (اتان و پروپان) بین بالا و پایین برج توزیع می‌شوند. پس این برج در این شرایط دما و فشار برای جذب بوتان و پنتان مناسب است.

برج دفع

فاز بخار مورد استفاده در برج دفع معمولاً بخار آب یا گاز بی‌اثر می‌باشد معمولاً هیچکدام از اجزاء فاز بخار ورودی در فاز مایع وجود ندارند و همچنین میعان نمی‌شوند. پس جهت انتقال جرم از فاز مایع به فاز بخار است در نتیجه فقط ضریب دفع موثر (S_e) مورد استفاده قرار می‌گیرد که از معادلات ۵-۱۷ و ۵-۱۸ استفاده می‌شود. معادلات برج دفع شبیه به معادلات برج جذب (معادلات ۵-۲۳ تا ۵-۳۱) می‌باشد بنابراین مطابق شماره‌گذاری مراحل تعادلی که در قسمت B شکل ۵-۱ نشان داده شده ضریب دفع موثر به صورت زیر می‌باشد.

$$S_e = [S_N(S_1 + 1) + 0.25]^{1/2} - 0.5 \quad ۳۵-۵$$

برای اینکه ضرایب دفع را برای مرحله تعادلی اول (S_1) و مرحله تعادلی آخر (S_N) بدست آوریم باید دبی فاز مایع و بخار را در این مراحل داشته باشیم که به صورت زیر بدست می‌آیند.

$$L_2 = L_1 \left(\frac{L_{N+1}}{L_1} \right)^{1/N} \quad ۳۶-۵$$

$$V_1 = V_0 + L_2 - L_1 \quad ۳۷-۵$$

$$L_N = L_{N+1} \left(\frac{L_1}{L_{N+1}} \right)^{1/N} \quad ۳۸-۵$$

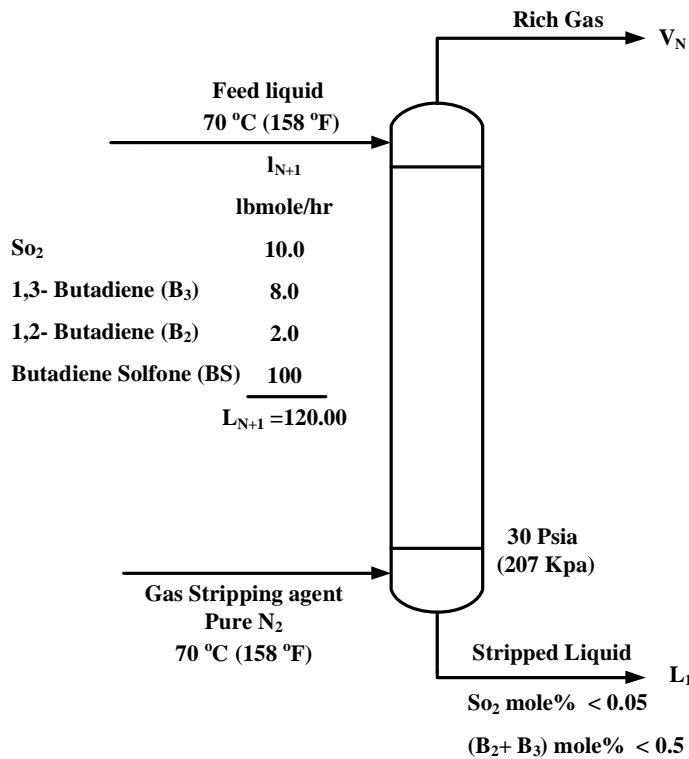
همچنین برای محاسبه این ضرایب باید دمای مرحله تعادلی اول و آخر را نیز داشته باشیم که از رابطه زیر بدست می‌آید.

$$\frac{T_{N+1} - T_N}{T_{N+1} - T_1} = \frac{L_{N+1} - L_N}{L_{N+1} - L_1} \quad ۳۹-۵$$

در این رابطه فرض شده که تغییرات دمایی بین مراحل تعادلی با مایع دفع شده متناسب می‌باشد. با حل همزمان معادله ۳۹-۵ و موازنه انرژی برای کل سیستم می‌توان T_1 و T_N را بدست آورد. معمولاً $T_{N+1} - T_N$ در محدوده صفر تا $20^\circ F$ می‌باشد که بستگی به میزان مایع دفع شده دارد. در یک برج دفع بهینه باید دما بالا و فشار پایین باشد اما نباید دما آنقدر بالا باشد که باعث تجزیه اجزاء شود. در صورتی که اجزاء خیلی سنگین باشند می‌توان از فشارهای نزدیک به خلاء نیز استفاده کرد. حداقل بخار لازم برای برج دفع را می‌توان با استفاده از معادله ۱۸-۵ بدست آورد. حداقل بخار برای حالتی است که تعداد مراحل تعادلی به سمت بینهایت میل کند پس در صورتی که در معادله ۱۸-۵، تعداد مراحل تعادلی را به سمت بینهایت میل دهیم معادله زیر حاصل می‌شود.

$$(V_0)_{\min} = \frac{L_{N+1}}{k_k} (1 - \phi_{S_k}) \quad ۴۰-۵$$

در این معادله فرض شده است که ضریب دفع برای جزء کلیدی کوچکتر از یک باشد ($S_k < 1$) یا اینکه میزان جزء کلیدی دفع شده کم باشد.



شکل ۵-۵: مشخصات برج دفع مربوط به مثال ۲-۵

مثال ۵-۲: دی اکسید گوگرد و بوتادین [۱ و ۳ بوتادین (B_3) ، ۱ و ۲ بوتادین (B_2)] موجود در بوتادین سولفونات مطابق شکل ۵-۵ توسط نیتروژن دفع می شوند. انتظار می رود در محصول مایع خروجی که عمدتاً بوتادین سولفونات است درصد دی اکسید گوگرد کمتر از ۰.۰۵٪ و درصد بوتادین ها کمتر از ۰.۰۵٪ مولی باشد. حداقل نیتروژن لازم برای فرآیند دفع و همچنین تعداد مراحل لازم را بدست آورید.

حل: با توجه به اینکه باید درصد دی اکسید گوگرد در خروجی کمتر از ۰.۰۵٪ و درصد بوتادین ها کمتر از ۰.۰۵٪ باشند دبی اجزاء خروجی به صورت زیر خواهند بود.

$$\frac{x}{100+x+y} = \frac{0.05}{100} \quad , \quad \frac{y}{100+x+y} = \frac{0.5}{100}$$

x : دبی دی اکسید گوگرد در مایع خروجی

y : دبی بوتادین ها در مایع خروجی

با حل دو معادله اخیر $x = 0.0503$ و $y = 0.503$ بدست می آید پس باید مقدار دی اکسید گوگرد در خروجی کمتر از 0.0503 lbmole/hr و مقدار بوتادین ها کمتر از 0.503 lbmole/hr باشد که با توجه به مقدار اولیه آنها ضریب جداسازی به صورت زیر خواهد بود.

Species	$l_1, \text{lbmole/hr}$	$\phi_s = \frac{l_1}{l_{N+1}}$
SO ₂	< 0.0503	< 0.00503
B ₃ + B ₂	< 0.503	< 0.0503
BS	100	---

فشار بخار همه اجزاء بجز بوتادین سولفونات در ضمیمه A داده شده است و فشار بوتادین سولفونات به صورت زیر است.

$$P_{BS}^S = \exp\left[17.30 - \frac{11142}{T + 459.67}\right]$$

که P_{BS}^S فشار بخار بوتادین سولفونات بر حسب P_{sia} می باشد و دما در این معادله بر حسب فارنهایت است. آنتالپی فاز مایع برای بوتادین سولفونات نیز به صورت زیر است.

$$(H_L)_{BS} = 50 T$$

که آنتالپی مایع بر حسب $Btu/lbmole$ و دما بر حسب فارنهایت است.

دبی سیال دفع کننده داده نشده است پس ابتدا باید با استفاده از رابطه ۵-۴۰ حداقل گاز ورودی را بدست آوریم برای این منظور باید یکی از اجزاء به عنوان جزء کلیدی انتخاب شود. فرض کنید ۱ و ۲ بوتادین را به عنوان جزء کلیدی سبک انتخاب کنیم که فشار بخار آن در دمای $70^\circ C$ برابر 90.4 Psia است با استفاده از فشار بخار و فشار کل می توان مقدار k را برای این جزء به صورت زیر بدست آورد.

$$k_{B2} = \frac{P_i^S}{P_{Total}} = \frac{90.4}{30} = 3.01$$

با استفاده از رابطه ۴۰-۵ و در نظر گرفتن $(\phi_S)_{B_2} = 0.503/10 = 0.0503$ خواهیم داشت.

$$(V_0)_{\min} = \frac{120}{3.01}(1 - 0.0503) = 37.9 \text{ lbmole/hr}$$

با استفاده از رابطه ۴۰-۵ و مقدار $(V_0)_{\min}$ می‌توان مقدار ϕ_S را برای B_3 و SO_2 بدست آورد. مقدار k برای B_3 و SO_2 به ترتیب ۴/۵۳ و ۶/۹۵ می‌باشد پس با استفاده از رابطه ۴۰-۵ و $V_0 = 37.9 \text{ lbmole/hr}$ خواهیم داشت.

$$(\phi_S)_{B_3} = 1 - \frac{4.53(37.9)}{120} = -0.43$$

$$(\phi_S)_{SO_2} = 1 - \frac{6.95(37.9)}{120} = -1.19$$

مقادیر منفی نشان می‌دهند که B_3 و SO_2 کاملاً دفع می‌شوند پس فقط B_2 در فاز مایع باقی می‌ماند که مقدار آن در مایع خروجی $0.0503 \times 2 = 0.1006$ خواهد بود که کمتر از مقدار مشخص شده 0.503 می‌باشد چون B_3 کاملاً دفع می‌شود.

برای اینکه $(V_0)_{\min}$ را با دقت بیشتری بدست آوریم باید به یاد داشته باشیم بوتادین دفع نشده فقط B_2 می‌باشد که بدین ترتیب ضریب دفع آن $(\phi_S)_{B_2} = 0.503/2 = 0.2515$ خواهد بود که با استفاده از این مقدار خواهیم داشت.

$$(V_0)_{\min} = \frac{L}{k_{B_2}} [1 - (\phi_S)_{B_2}] = \frac{120}{3.01}(1 - 0.2515) = 29.84 \text{ lbmole/hr}$$

با استفاده از رابطه ۴۰-۵ و مقدار $(V_0)_{\min}$ می‌توان مقدار ϕ_S را برای B_3 و SO_2 بدست آورد که به ترتیب 0.12646 و -0.72823 خواهد بود پس نشان می‌دهد که B_3 و SO_2 کاملاً دفع می‌شوند و $(V_0)_{\min}$ بدست آمده صحیح می‌باشد.

دبی فاز گاز ورودی به برج دفع باید بیشتر از حداقل مقدار آن باشد. برای تعیین تاثیر دبی فاز گاز ورودی (V_0) بر تعداد مراحل و همچنین درصد دفع اجزاء از روش کرمسر استفاده می‌شود. در این روش k در $70^\circ C$ و 30 Psia ثابت در نظر گرفته می‌شود. دبی جریان مایع در برج ثابت و $L = L_{N+1} = 120 \text{ lbmole/hr}$ است و جریان فاز گاز به صورت $V_0 = M \times (V_0)_{\min}$ در نظر گرفته می‌شود که $M > 1$ می‌باشد. برای راحت شدن محاسبات بهتر است که تعداد مراحل تعادلی (N) مشخص شود سپس مقادیر دبی فاز بخار (V_0) ، ضرایب دفع و درصد اجزاء دفع نشده از روی شکل مشخص شوند که مراحل آن به ترتیب زیر می‌باشند.

۱- تعداد مراحل تعادلی را مشخص می‌کنیم.

۲- یک مقدار برای $(\phi_S)_{B_2}$ در نظر گرفته و با استفاده از معادله ۵-۱۸ یا شکل ۵-۲ ضریب دفع را بدست آوریم.

۳- با استفاده از ضریب دفع و رابطه ۵-۱۹ می‌توان دبی فاز بخار را محاسبه نمود.

۴- با استفاده از ضرایب دفع می‌توان درصد اجزاء دفع نشده را محاسبه نمود.

۵- برای این مسئله باید $(\phi_S)_{B_2+B_3} < 0.0503$ و $(\phi_S)_{SO_2} < 0.00503$ باشد در صورتی که این شرایط برقرار نباشد باید $(\phi_S)_{B_2}$ را تصحیح کرده و دوباره به مرحله ۲ بازمی‌گردیم و مراحل را تکرار می‌کنیم. برای مثال در صورتی که $N = 10$ باشد انجام مراحل بعدی به صورت زیر خواهد بود. ابتدا $(\phi_S)_{B_2} = 0.25$ در نظر گرفته می‌شود که با استفاده از رابطه ۵-۱۸ یا شکل ۵-۲ می‌توان ضریب دفع را بدست آورد.

$$S_{B_2} = 0.76$$

سپس با استفاده از رابطه زیر می‌توان V_0 را بدست آورد.

$$S = \frac{kV}{L} \Rightarrow V_0 = \frac{LS}{k} = \frac{120 \times 0.76}{3.01} = 30.3 \text{ lbmole/hr}$$

حال ضریب دفع B_3 با استفاده از رابطه ۵-۱۹ بدست می‌آید.

$$S_{B_3} = \frac{(4.53)(30.3)}{120} = 1.143$$

با استفاده از رابطه ۵-۱۸ یا شکل ۵-۲ درصد B_3 دفع نشده $(\phi_S)_{B_3} = 0.04$ بدست می‌آید و در نهایت درصد $B_2 + B_3$ دفع نشده به صورت زیر بدست می‌آید.

$$(\phi_S)_{B_2+B_3} = \frac{0.25(2) + 0.04(8)}{10} = 0.082$$

از آنجا که این مقدار بیشتر از میزان مجاز آن (0.0503) است پس باید $(\phi_S)_{B_2}$ تصحیح شود که نتایج به صورت جدول زیر می‌باشد.

N	$V_0, \text{lbmole/hr}$	$V_0/(V_0)_{Min}$	Fraction Not stripped				
			ϕ_{SO_2}	ϕ_{B_3}	ϕ_{B_2}	$\phi_{B_2+B_3}$	ϕ_{BS}
∞	29.84	1.00	0.0	0.0	0.2515	0.0503	0.9960
10	33.9	1.134	0.0005	0.017	0.18	0.050	0.9955
5	45.4	1.518	0.0050	0.029	0.117	0.040	0.9940
3	94.3	3.154	0.0050	0.016	0.045	0.022	0.9874

در صورتی که $(\phi_S)_{SO_2} < 0.00503$ نشود باید SO_2 به عنوان جزء کلیدی در نظر گرفته شود. با استفاده از محاسبات اخیر وقتی که تعداد مراحل تعادلی $N = 5$ باشد می‌توان $(l_i)_1$ را با استفاده از معادله ۵-۱۷ بدست آورد و مقادیر $(v_i)_5$ با استفاده از موازنه جرم بدست می‌آید که نتایج به صورت زیر است.

Pound-moles per hour				
Component	l_{N+1}	V_0	l_1	V_1
SO ₂	10.0	0.0	0.05	9.95
B ₃	8.0	0.0	0.23	7.77
B ₂	2.0	0.0	0.23	1.77
BS	100.0	0.0	99.40	0.60
N ₂	0.0	45.4	0.00	45.40
	120.0	45.4	99.91	64.59

مقادیر V_5 و L_1 بدست آمده از روش کرمسر به عنوان حدس اولیه در روش ادمیستر مورد استفاده قرار می-گیرد. با استفاده از معادله ۵-۳۶ تا ۵-۳۸ خواهیم داشت.

$$L_2 = 99.91 \left(\frac{120}{99.91} \right)^{1/5} = 103.64 \text{ lbmole/hr}$$

$$V_1 = 45.4 + 103.64 - 99.91 = 49.13 \text{ lbmole/hr}$$

$$L_5 = 120 \left(\frac{99.91}{120} \right)^{1/5} = 115.68 \text{ lbmole/hr}$$

با استفاده از رابطه ۵-۳۹ خواهیم داشت.

$$\frac{158 - T_5}{158 - T_1} = \frac{120 - 115.68}{120 - 99.91} = 0.215$$

با حل همزمان معادله اخیر و موازنه انرژی T_5 و T_1 به صورت زیر بدست می-آیند.

$$T_1 = 124.6 \text{ } ^\circ\text{F} (51.4 \text{ } ^\circ\text{C}) \quad , \quad T_5 = 150.8 \text{ } ^\circ\text{F} (66.0 \text{ } ^\circ\text{C})$$

نسبت بخار به مایع برای بالا و پایین برج به صورت زیر می-باشد.

$$\frac{V_1}{L_1} = \frac{49.13}{99.91} = 0.4917$$

$$\frac{V_5}{L_5} = \frac{65.49}{115.68} = 0.5661$$

با فرض اینکه فشار بالای برج 29 Psia و فشار پایین برج 30 Psia است مقادیر ضریب دفع به صورت زیر هستند.

Component	Bottom Stage 124.6 °F , 30 psia		Top Stage 150.8 °F , 29 psia	
	K ₁	S ₁	K ₅	S ₅
SO ₂	4.27	2.10	650	3.68
B ₃	2.89	1.42	4.27	2.42
B ₂	1.84	0.905	2.82	1.60
BS	0.0057	0.0028	0.0133	0.0075

با استفاده از نتایج جدول اخیر می‌توان ضریب دفع موثر را از رابطه ۵-۳۵ محاسبه نمود سپس با استفاده از ضریب دفع موثر و رابطه ۵-۱۸ یا شکل ۵-۲ می‌توان درصد اجزاء دفع نشده (ϕ_s) را بدست آورد سپس مقادیر $(l_i)_1$ از معادله ۵-۱۷ و مقادیر $(v_i)_5$ با استفاده از موازنه جرم بدست می‌آید که نتایج به صورت زیر است.

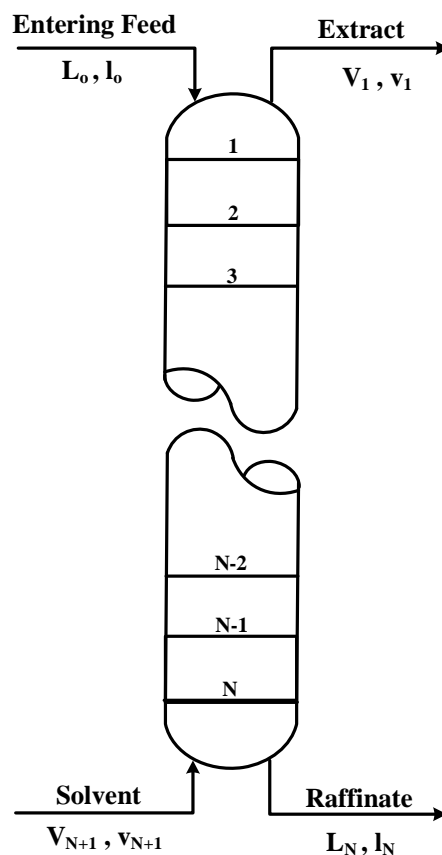
Component	S_e	ϕ_s	Pound-Moles Per hour	
			l_1	V_5
SO ₂	2.91	0.0032	0.032	9.968
B ₃	1.97	0.017	0.136	7.864
B ₂	1.32	0.075	0.150	1.850
BS	0.0075	0.9925	99.24	0.75
N ₂	—	—	0.00	45.40
			99.568	65.832

مقادیر l_1 و V_5 بدست آمده به حدس بسیار نزدیک است بنابراین نیازی به تکرار محاسبات وجود ندارد. مایع خروجی حاوی ۰/۰۳۲ مولی SO₂ و ۰/۰۲۹ مولی بوتادین است که کمتر از مقدار مشخص شده در مسئله می‌باشد. پس می‌توان دبی فاز بخار ورودی به برج دفع را کاهش داد.

استخراج مایع- مایع

در حل مسائل مایع- مایع نیز از روش موسوم به روش گروهی^۱ استفاده می‌شود. شمایی از یک سیستم استخراج مایع- مایع در شکل ۵-۶ نشان داده شده است که مراحل تعادلی از بالا به پایین شماره گذاری شده- اند. حلال ورودی با V_{N+1} نشان داده شده و از پایین وارد برج می‌شود (در مواردی که حلال دانسیته کمتری نسبت به خوراک داشته باشد از بالا وارد می‌شود و شماره گذاری از پایین به بالا خواهد بود تا یک سیستم یکتا بررسی شود). معادلات برج استخراج نیز شبیه به معادلات برج جذب می‌باشد فقط به جای مقدار k (k Value) از ضریب توزیع (K_{Di}) استفاده می‌شود.

$$K_{Di} = \frac{y_i}{x_i} = \frac{v_i/V}{l_i/L} \quad ۴۱-۵$$



شکل ۵-۶: شمایی از یک سیستم استخراج مایع- مایع غیرهمسو

که y_i غلظت جزء i در فاز حلال (یا استخراج شده) و x_i غلظت جزء i در فاز خوراک (یا پسماند) می‌باشد همچنین از ضریب استخراج (E_i) به جای ضریب جذب (A_i) استفاده می‌شود.

$$E_i = \frac{K_{D_i} V}{L} \quad ۴۲-۵$$

عکس ضریب استخراج نیز به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$U_i = \frac{1}{E_i} = \frac{L}{K_{D_i} V} \quad ۴۳-۵$$

معادله کار برای هر جزء به صورت زیر می‌باشد.

$$v_1 = v_{N+1} \phi_U + l_0 (1 - \phi_E) \quad ۴۴-۵$$

$$l_N = l_0 + v_{N+1} - v_1 \quad ۴۵-۵$$

که ϕ_U و ϕ_E به صورت زیر تعریف می‌شوند.

$$\phi_U = \frac{U_e - 1}{U_e^{N+1} - 1} \quad ۴۶-۵$$

$$\phi_E = \frac{E_e - 1}{E_e^{N+1} - 1} \quad ۴۷-۵$$

ضریب جذب موثر و بقیه معادلات به صورت زیر می‌باشند.

$$V_2 = V_1 \left(\frac{V_{N+1}}{V_1} \right)^{1/N} \quad ۴۸-۵$$

$$L_1 = L_0 + V_2 - V_1 \quad ۴۹-۵$$

$$V_N = V_{N+1} \left(\frac{V_1}{V_{N+1}} \right)^{1/N} \quad ۵۰-۵$$

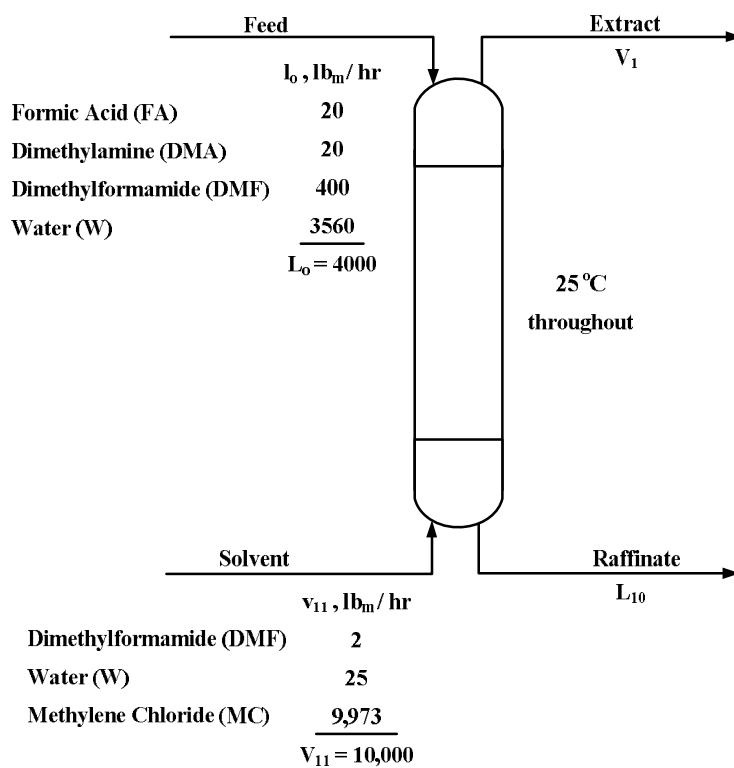
$$E_e = [E_1 (E_N + 1) + 0.25]^{1/2} - 0.5 \quad ۵۱-۵$$

$$U_e = [U_N (U_1 + 1) + 0.25]^{1/2} - 0.5 \quad ۵۲-۵$$

معادلات ۴۱-۵ تا ۵۲-۵ بر مبنای جرمی هستند. در استخراج مایع-مایع نیازی به موازنه انرژی نیست مگر اینکه دمای خوراک و حلال با هم متفاوت باشند یا اینکه نتوان از گرمای مخلوط‌شدن صرف‌نظر کرد. در مواردی که ضریب جداسازی به غلظت اجزاء بستگی داشته باشد این روش جواب مطلوبی نخواهد داد.

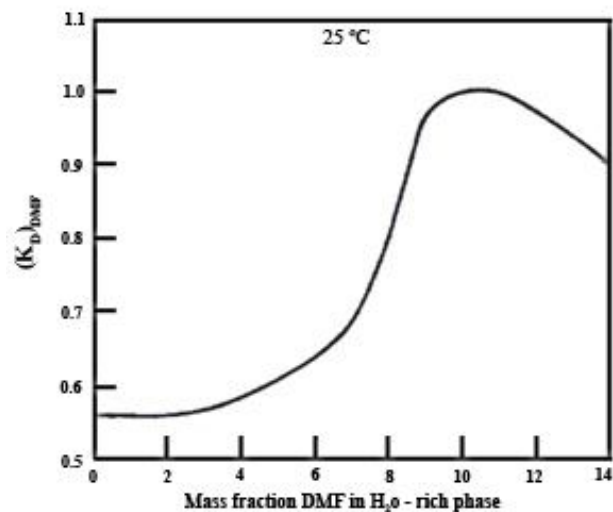
مثال ۳-۵: در یک سیستم استخراج غیرهمسو، دی‌متیل‌فرمامید موجود در آب توسط حلال متیلن‌کلراید در $25^\circ C$ استخراج می‌شود. با استفاده از روش موسوم به Group Method میزان دبی جریان استخراج شده، دبی جریان پسماند و غلظت آنها را بدست آورید. ضریب توزیع همه اجزاء بجز دی‌متیل‌فرمامید ثابت است و به صورت زیر می‌باشد.

Component	K_{Di}
MC	40.2
FA	0.005
DMA	2.2
W	0.003



شکل ۵-۷: مشخصات برج استخراج برای مثال ۵-۳

ضریب توزیع دی‌متیل‌فرمامید به غلظت آن در فاز پسماند بستگی دارد که به صورت ذیل می‌باشد.



شکل ۵-۸ : ضریب توزیع دی‌متیل‌فرمامید بر حسب غلظت آن در فاز پسماند

حل : اگرچه می‌توان از روش کرمسر به عنوان حدس اولیه استفاده کرد اما در این مسئله با استفاده از ضریب توزیع به راحتی می‌توان حدس‌های زیر را در نظر گرفت.

Component	Pound per Hour			
	Feed, l_0	Solvent, v_{11}	Raffinate, l_{10}	Extract, v_1
FA	20	0	20	0
DMA	20	0	0	20
DMF	400	2	2	400
W	3560	25	3560	25
MC	0	9973	88	9885
	4000	10000	3670	10330

وقتی که ضریب توزیع $K_{Di} \gg 1$ باشد آن جزء بیشتر در فاز استخراج شده ظاهر می‌شود و بالعکس هرگاه ضریب توزیع $K_{Di} \ll 1$ باشد آن جزء بیشتر در فاز پسماند ظاهر خواهد شد. با استفاده از رابطه ۵-۴۸ تا ۵-۵۰ خواهیم داشت.

$$V_2 = 10330 \left(\frac{10000}{10330} \right)^{1/10} = 10297 \text{ lb}_m/\text{hr}$$

$$L_1 = 4000 + 10297 - 10330 = 3967 \text{ lb}_m/\text{hr} \quad ۵۳-۵$$

$$V_{10} = 10000 \left(\frac{10330}{10000} \right)^{1/2} = 10330 \text{ lb}_m/\text{hr}$$

برای اینکه ضریب توزیع دی‌متیل‌فرمامید را در مرحله تعادلی اول بدست آوریم فرض می‌کنیم که غلظت آن ۹٪ باشد و سپس با استفاده از روابط ۴۲-۵، ۴۳-۵، ۵۱-۵ و ۵۲-۵ خواهیم داشت.

Component	E_1	E_{10}	U_1	U_{10}	E_e	U_e
FA	0.013	0.014	---	---	0.013	---
DMA	5.73	6.01	---	---	5.86	---
DMF	2.50	1.53	0.400	0.653	2.06	0.579
W	0.0078	0.0082	128	122	0.0078	125
MC	---	---	0.0096	0.0091	---	0.0091

با استفاده از روابط ۴۶-۵، ۴۷-۵ و همچنین با استفاده از ۴۴-۵ و ۴۵-۵ خواهیم داشت.

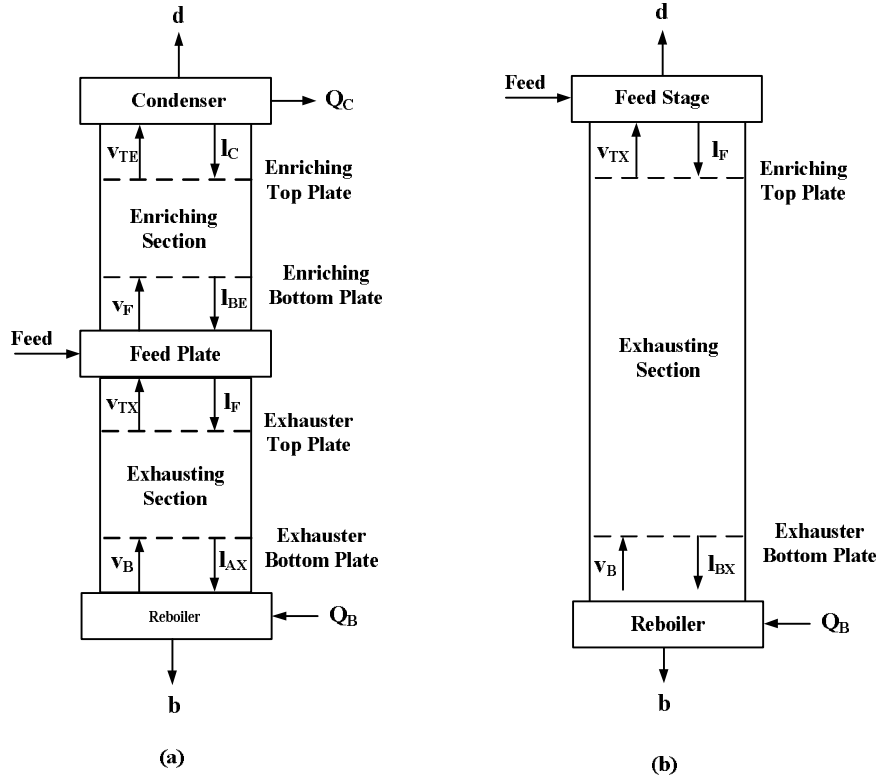
Pound per Hour

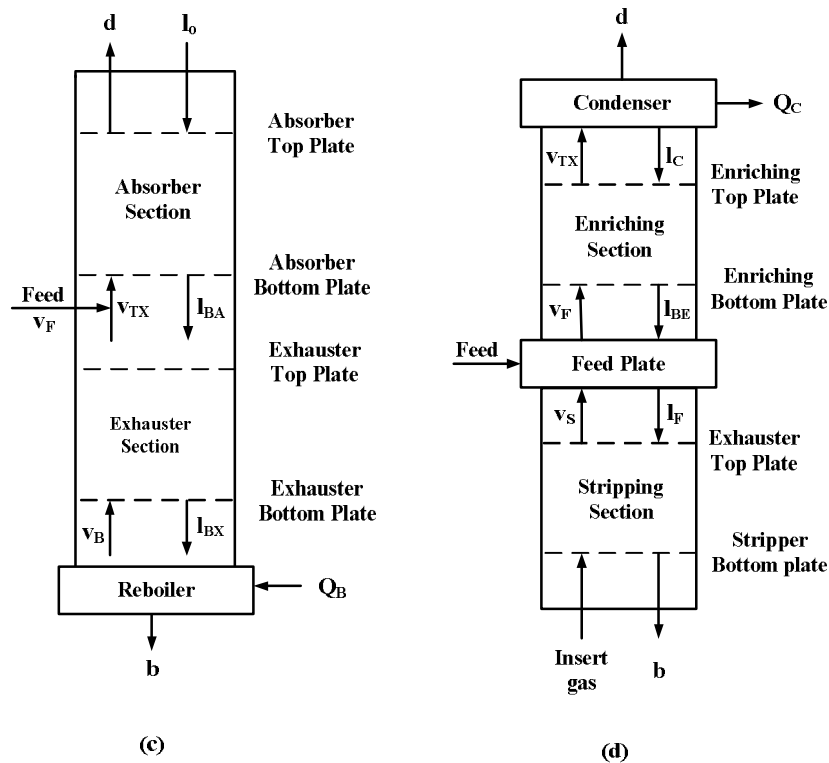
Component	ϕ_E	ϕ_U	Pound per Hour	
			Raffinate, l_{10}	Extract, V_1
FA	0.9870	---	19.7	0.3
DMA	0.0	---	0.0	20.0
DMF	0.000374	0.422	1.3	400.7
W	0.9922	0.0	3557.2	37.8
MC	---	0.9909	90.8	9882.2
			3669.0	10331.0

از آنجا که V_1 و L_{10} محاسبه شده به مقدار حدس بسیار نزدیک هستند نیازی به تصحیح دوباره نیست. میزان استخراج دی‌متیل‌فرمامید بسیار زیاد است پس بهتر است که دوباره با مقدار حلال کمتر یا تعداد مراحل تعادلی کمتری مسئله را تکرار کنیم.

حل سیستم‌های غیرهمسو پیچیده با روش ادمیستر

سیستم‌های غیرهمسوی پیچیده شامل تعدادی مرحله تعادلی هستند که جریان در آنها به صورت غیرهمسو برقرار است و به تجهیزاتی همچون کندانسور، جوش‌آور و یا مراحل تعادلی دیگر متصل شده‌اند تعدادی از این سیستم‌ها در شکل ۵-۹ نشان داده شده‌اند که شامل برج تقطیر، برج دفع مجهز به جوش‌آور، برج جذب مجهز به جوش‌آور و برج دفع همراه با جریان برگشتی می‌باشند.





شکل ۵-۹: سیستم‌های غیرهمسوی پیچیده (a) برج تقطیر (b) برج دفع مجهز به جوش‌آور (c) برج جذب مجهز به جوش‌آور (d) برج دفع همراه با جریان برگشتی

در شکل ۵-۹ پنج قسمت مختلف وجود دارد.

۱- کندانسور جزئی یا کلی

۲- قسمت جذب (بخش جذب)

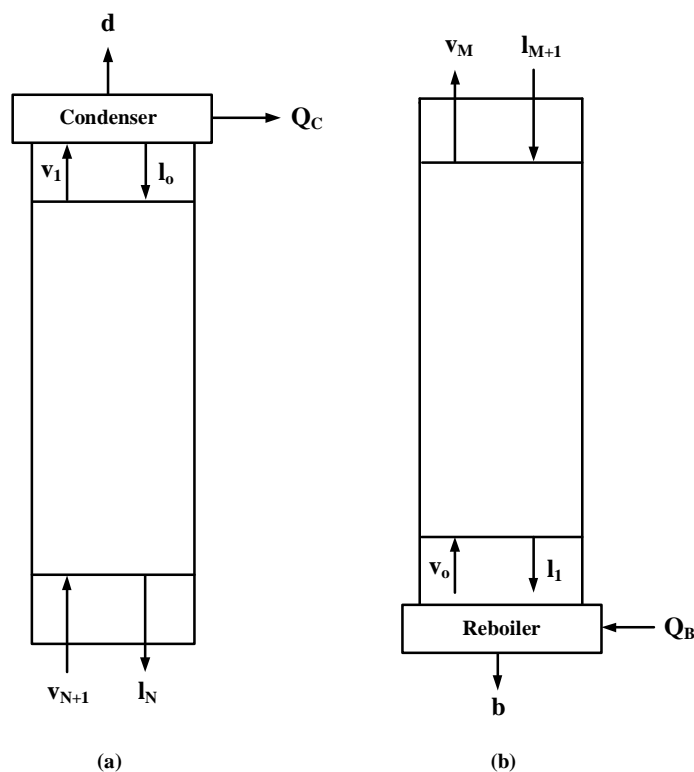
۳- مرحله تعادلی مربوط به خوراک ورودی

۴- قسمت دفع (بخش دفع)

۵- جوش‌آور جزئی یا کلی

ترکیب بخش جذب و کندانسور را اصطلاحاً بخش غنی‌سازی^۱ و ترکیب بخش دفع و جوش‌آور را اصطلاحاً بخش تهی‌سازی^۲ گویند. همانطور که در شکل ۵-۱۰ نشان داده شده برای بخش غنی‌سازی مراحل تعادلی از بالا به پایین شماره‌گذاری شده‌اند و محصول سبک نیز از بالای این قسمت خارج می‌شود. برای بخش تهی‌سازی مراحل تعادلی از پایین به بالا شماره‌گذاری شده‌اند. خوراک ورودی به بخش غنی‌سازی به صورت بخار و خوراک ورودی به بخش تهی‌سازی به صورت مایع می‌باشد. معادله کار (معادله بازیابی) برای بخش غنی‌سازی با استفاده از رابطه ۵-۲۲ و جایگزین کردن موازنه جرم و معادله تعادل در آن بدست می‌آید.

1- Enriching section
2- Exhausting section



شکل ۵-۱۰: شمایی از بخش غنی سازی و تهی سازی (a) بخش غنی سازی (b) بخش تهی سازی

موازنه جرم برای اجزاء حول کندانسور به صورت زیر می باشد.

$$v_1 = l_0 + d \quad ۵۴-۵$$

و موازنه جرم برای اجزاء حول بخش غنی سازی به صورت زیر است.

$$v_{N+1} = l_N + d \quad ۵۵-۵$$

برای کندانسور رابطه زیر برقرار است.

$$l_0 = d A_0 \quad ۵۶-۵$$

در صورتی که کندانسور جزئی^۱ باشد A_0 به صورت رابطه ۵۷-۵ و در صورتی که کندانسور کلی^۲ باشد A_0 به صورت رابطه ۵۸-۵ می باشد.

$$A_0 = \frac{L_0}{D k_0} \text{ (if partial condenser)} \quad ۵۷-۵$$

$$A_0 = \frac{L_0}{D} \text{ (if total condenser)} \quad ۵۸-۵$$

با اعمال رابطه ۲۲-۵ برای این بخش خواهیم داشت.

$$v_1 = v_{N+1} \phi_{AE} + l_0 (1 - \phi_{SE})$$

- 1- Partial condenser
- 2- Total condenser

سپس طرفین را بر d تقسیم می‌کنیم.

$$\frac{v_1}{d} = \frac{v_{N+1}}{d} \phi_{AE} + \frac{l_0}{d} (1 - \phi_{SE}) \quad ۵۹-۵$$

حال با جایگذاری رابطه ۵۶-۵ در ۵۴-۵ خواهیم داشت.

$$\frac{v_1}{d} = (A_0 + 1) \quad ۶۰-۵$$

همچنین با استفاده از رابطه ۵۶-۵ خواهیم داشت.

$$\frac{l_0}{d} = A_0 \quad ۶۱-۵$$

با جایگذاری رابطه ۶۰-۵ و ۶۱-۵ در ۵۹-۵ خواهیم داشت.

$$\frac{v_{N+1}}{d} = \frac{A_0 \phi_{SE} + 1}{\phi_{AE}} \quad ۶۲-۵$$

یا

$$\frac{l_N}{d} = \frac{A_0 \phi_{SE} + 1}{\phi_{AE}} - 1 \quad ۶۳-۵$$

که اندیس E نشان دهنده بخش غنی‌سازی می‌باشد. برای پایین برج نیز بدست آوردن معادله کار به صورت زیر است.

ابتدا حول کل بخش غنی‌سازی موازنه جرم می‌نویسیم.

$$l_{M+1} = v_M + b \quad ۶۴-۵$$

برای جوش‌آور جزئی نیز معادله زیر صادق است.

$$v_0 = S_0 b \quad , \quad S_0 = \frac{k_0 V_0}{B} \quad ۶۵-۵$$

برای این قسمت نیز رابطه ۲۲-۵ به صورت زیر خواهد بود.

$$v_M = v_0 \phi_{AX} + l_{M+1} (1 - \phi_{SX}) \quad ۶۶-۵$$

رابطه ۶۶-۵ را در ۶۴-۵ جایگزین کرده و طرفین را بر b تقسیم می‌کنیم.

$$\frac{l_{M+1}}{b} \phi_{SX} = \frac{v_0}{b} \phi_{AX} + 1 \quad ۶۷-۵$$

حال با جایگذاری رابطه ۶۵-۵ در ۶۷-۵ خواهیم داشت.

$$\frac{l_{M+1}}{b} = \frac{S_0 \phi_{AX} + 1}{\phi_{SX}} \quad ۶۸-۵$$

یا

$$\frac{v_M}{b} = \frac{S_0 \phi_{AX} + 1}{\phi_{SX}} - 1 \quad ۶۹-۵$$

برای محاسبه ϕ_A و ϕ_S به ترتیب از معادله‌های ۱۶-۵ و ۱۸-۵ استفاده می‌کنیم البته ابتدا باید ضریب جذب موثر (A_e) و ضریب دفع موثر (S_e) از روابط زیر محاسبه شوند.

$$A_e = [A_B (A_T + 1) + 0.25]^{\frac{1}{2}} - 0.5 \quad ۷۰-۵$$

$$S_e = [S_T (S_B + 1) + 0.25]^{\frac{1}{2}} - 0.5 \quad ۷۱-۵$$

B نشان دهنده پایین هر قسمت و T نشان دهنده بالای هر قسمت از بخش‌های غنی‌سازی و تهی‌سازی می‌باشند.

وقتی که بخش‌های مختلف در کنار یکدیگر قرار می‌گیرند مرحله تعادلی خوراک بین دو بخش غنی‌سازی و تهی‌سازی قرار می‌گیرد و جریان خوراک به صورت آدیاباتیک تبخیر ناگهانی می‌شود که مایع آن به بخش تهی‌سازی و بخار آن به بخش غنی‌سازی هدایت می‌شود. ضریب جذب برای مرحله تعادلی خوراک که به صورت آدیاباتیک تبخیر ناگهانی شده است به صورت زیر می‌باشد.

$$A_F = \frac{L_F}{k_F V_F} = \frac{L_F}{(v_F L_F / V_F l_F) V_F} = \frac{l_F}{v_F} \quad ۷۲-۵$$

برای برج تقطیر $l_{M+1} = l_F$ و $v_{N+1} = v_F$ می‌باشد با جایگذاری این موارد در روابط ۶۲-۵ و ۶۸-۵ و حل همزمان معادلات ۶۲-۵، ۶۸-۵ و ۷۲-۵ برای حذف L_f و V_f خواهیم داشت.

$$\frac{b}{d} = \frac{A_F \left(\frac{A_0 \phi_{SE} + 1}{\phi_{AE}} \right)}{\left(\frac{S_0 \phi_{AX} + 1}{\phi_{SX}} \right)} \quad ۷۳-۵$$

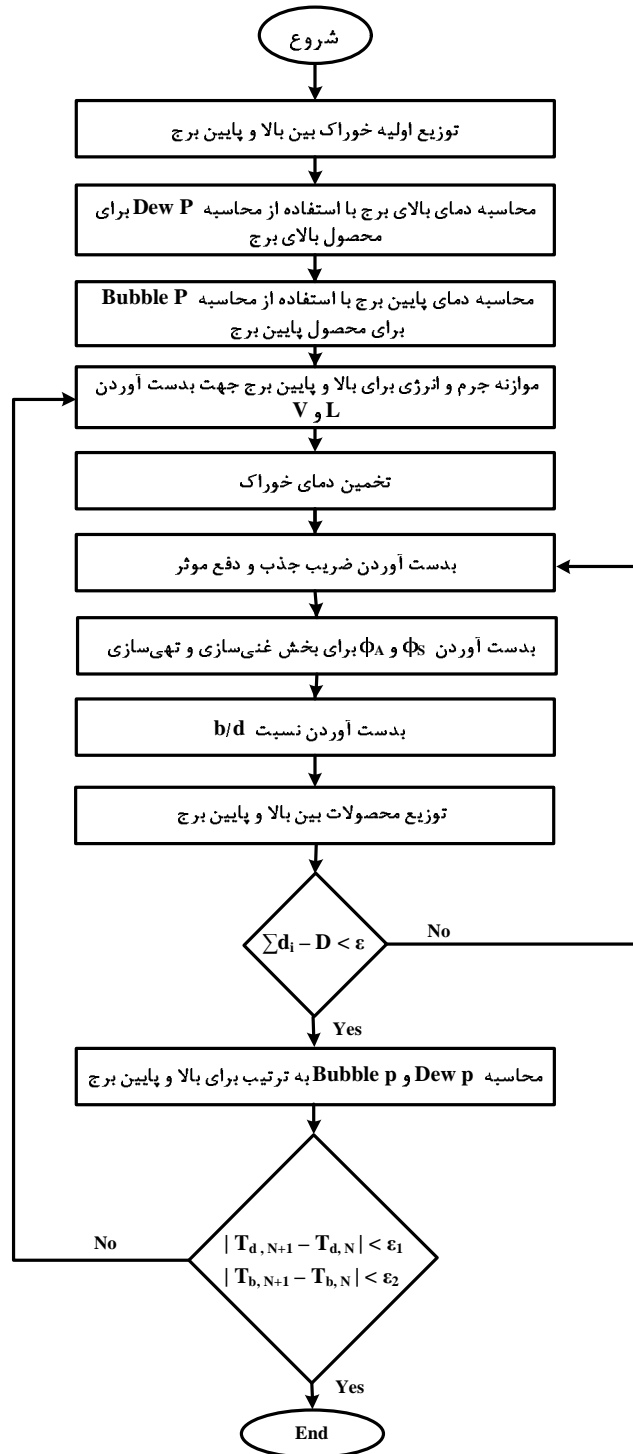
معادلات برج جذب، برج دفع، بخش غنی‌سازی برج تقطیر، بخش تهی‌سازی برج تقطیر و مرحله تعادلی خوراک در جدول ۲-۵ خلاصه شده است.

جدول ۵-۲: خلاصه‌ای از معادلات برج جذب و برج دفع برای روش گروهی

Cascade Type	Figure Number	Stage Group Equation	Equation Number
برج جذب ^۱	قسمت A شکل ۵-۱	$v_1 = v_{N+1} \phi_A + l_0 (1 - \phi_s)$	۷۴-۵
برج دفع ^۲	قسمت B شکل ۵-۱ (With Stage 1-M)	$l_1 = l_{M+1} \phi_s + v_0 (1 - \phi_A)$	۷۵-۵
بخش غنی‌سازی ^۳	قسمت A شکل ۵-۱۰	$\frac{v_{N+1}}{d} = \frac{A_0 \phi_{SE} + 1}{\phi_{AE}}$	۷۶-۵
بخش تهی‌سازی ^۴	قسمت B شکل ۵-۱۰	$\frac{l_{M+1}}{b} = \frac{S_0 \phi_{AX} + 1}{\phi_{SX}}$	۷۷-۵
سینی خوراک ^۵	قسمت A شکل ۵-۹	$\frac{l_F}{v_F} = A_F$	۷۸-۵

برای اینکه ضرایب جذب و دفع را بدست آوریم و در رابطه ۵-۷۳ جایگزین کنیم باید از روش سعی و خطا استفاده نماییم. فلوچارت حل مسائل با استفاده از این روش به صورت زیر می‌باشد.

-
- 1- Absorber
 - 2- Stripper
 - 3- Enricher
 - 4- Exhauster
 - 5- Feed Stage



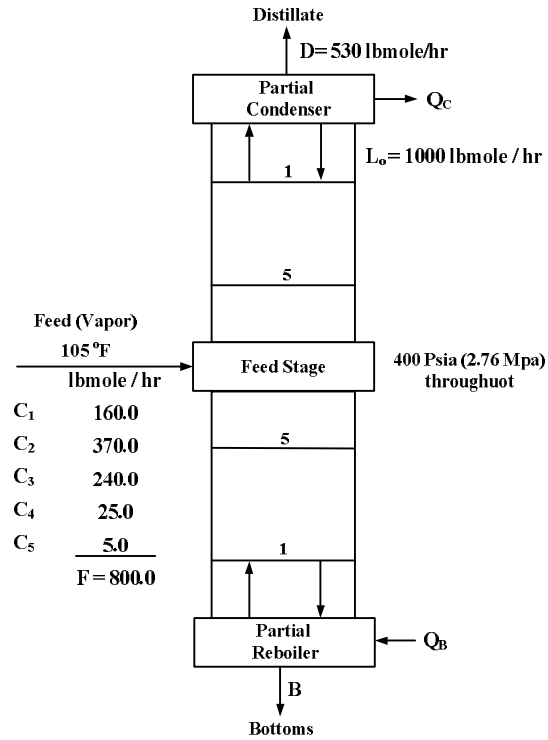
شکل ۵-۱۱: فلوجارت حل مسائل به روش ادمیستر

تقطیر

برای اعمال روش ادمیستر بر برج تقطیر ابتدا باید مشخصات برج و جریان‌ها معلوم باشد. معمول‌ترین مشخصات برج‌های تقطیر این است که در آن تعداد مراحل تعادلی بالای خوراک (N)، تعداد مراحل تعادلی پایین خوراک (M)، دبی جریان برگشتی خارجی (L_0) یا نسبت جریان برگشتی خارجی (L_0/D) و جریان محصول بالای برج معلوم است.

جهت اعمال روش ادمیستر ابتدا باید خوراک ورودی را به طور فرضی بین محصول بالا و پایین برج توزیع کنیم سپس با استفاده از محاسبات نقطه شبنم می‌توان دمای محصول بالای برج و با استفاده از محاسبات نقطه حباب نیز می‌توان دمای محصول پایین برج را بدست آورد. حال با استفاده از جریان محصول بالای برج، دمای محصول بالای برج و نسبت جریان برگشتی می‌توان حول کندانسور موازنه جرم و انرژی برقرار کنیم تا بار حرارتی کندانسور (Q_c) بدست آید و با نوشتن موازنه انرژی حول کل برج می‌توان بار حرارتی جوش‌آور (Q_r) را نیز بدست آورد. مایع و بخار عبوری از سینی خوراک را یک بار توسط موازنه جرم برای بالای برج و شرط ثابت بودن دبی مایع و بخار در قسمت بالای برج بدست آورده و بار دیگر توسط موازنه جرم برای پایین برج و شرط ثابت بودن دبی مایع و بخار در قسمت پایین برج محاسبه می‌کنیم و از دو مقدار بدست آمده متوسط می‌گیریم. حال دمای سینی خوراک را حدس زده و با استفاده از معادله ۵-۷۳، خوراک را بین محصول بالا و پایین برج توزیع می‌کنیم. با استفاده از این توزیع می‌توان دبی محصول بالای برج را بدست آورد در صورتی که این دبی با مقدار مشخص شده در مسئله برابر نباشد باید دمای سینی خوراک را تغییر دهیم. سپس باید دمای بالا و پایین برج را با انجام محاسبات نقطه شبنم برای محصول بالای برج و انجام محاسبات نقطه حباب برای محصول پایین برج بدست می‌آوریم در صورتی که این دماها با دماهای حدس قبلی برابر نباشد همین محاسبات را باید یک بار دیگر تکرار کنیم. جزئیات این روش در مثال زیر نشان داده شده است.

مثال ۵-۴: خوراک هیدروکربنی مثال ۵-۱ برای جداسازی اتان و پروپان وارد برج تقطیر می‌شود این برج تقطیر که در شکل ۵-۱۲ نشان داده شده در فشار 400 Psia (2.76 Mpa) کار می‌کند معادله مربوط به آنتالپی و مقادیر k برای اجزاء در مثال ۵-۱ داده شده است. با استفاده از روش ادمیستر غلظت محصول بالا و پایین برج را محاسبه نمایید.



شکل ۵-۱۲: مشخصات برج تقطیر برای مثال ۴-۵

حل: برای ابتدای کار فرض می‌کنیم که جداسازی کاملاً به صورت ایده‌آل باشد به طوری که اتان و پروپان کاملاً از هم جدا شوند مشخصات خوراک، محصول بالا و محصول پایین به صورت زیر می‌باشد.

Component	Pound-Mole per Hour		
	Feed	Assumed Distillate, d	Assumed Bottoms, b
C ₁	160	160	0
C ₂	370	370	0
C ₃	240	0	240
C ₄	25	0	25
C ₅	5	0	5
	800	530	270

با استفاده از مقادیر حدس زده شده و اعمال محاسبات نقطه شب‌نم برای محصول بالای برج ، دمای بالای برج $(-11.4\text{ }^{\circ}\text{C})$ $11.5\text{ }^{\circ}\text{F}$ بدست می‌آید و با اعمال محاسبات نقطه حباب برای محصول پایین برج ، دمای $(73.8\text{ }^{\circ}\text{C})$ $164.9\text{ }^{\circ}\text{F}$ بدست می‌آید همچنین با اعمال محاسبات نقطه شب‌نم برای محصول بالای برج مقادیر غلظت مایع برگشتی $(x_i)_0$ بدست می‌آید که با نوشتن موازنه جرم حول کندانسور جزئی می‌توان مقادیر $(y_i)_1$ را نیز به صورت زیر بدست آورد.

$$(y_i)_1 = \frac{d_i + (x_i)_0 L_0}{D + L_0} \quad 79-5$$

با اعمال محاسبات نقطه شب‌نم برای مقادیر $(y_i)_1$ می‌توان دمای سینی اول را محاسبه کرد که این مقدار $(-3.3\text{ }^{\circ}\text{C})$ $26.1\text{ }^{\circ}\text{F}$ می‌باشد حال با نوشتن موازنه انرژی حول کندانسور جزئی می‌توان بار حرارتی را محاسبه نمود.

$$Q_C = V_1 H_{V_1} - D H_D - L_0 H_{L_0} \quad 80-5$$

بار حرارتی کندانسور 4779000 Btu/hr بدست می‌آید و با نوشتن موازنه انرژی حول کل برج می‌توان بار حرارتی جوش‌آور را نیز محاسبه نمود.

$$Q_B = D H_D + B H_B + Q_C - F H_F \quad 81-5$$

بار حرارتی جوش‌آور نیز 3033000 Btu/hr بدست می‌آید.

حال باید دمای سینی خوراک را حدس بزنیم. برای این منظور محاسبات تبخیر ناگهانی را برای خوراک در شرایط برج انجام دهیم که دمای $(40.6\text{ }^{\circ}\text{C})$ $105\text{ }^{\circ}\text{F}$ بدست می‌آید و متوجه خواهیم شد که خوراک کمی گرمتر از بخار اشباع است.

حال باید برای جوش‌آور موازنه انرژی را اعمال کنیم. برای این منظور با استفاده از محاسبات نقطه حباب برای محصول پایین برج دمای جوش محصول پایین برج (T_B) و غلظت بخار V_0 که با $(y_i)_0$ نشان داده می‌شود را می‌توان محاسبه نمود. برای اعمال موازنه جرم و انرژی بر جوش‌آور باید یک روش سعی و خطایی را پیش بگیریم. ابتدا مقدار V_0 را حدس زده و با توجه به اینکه دبی محصول پایین برج (B) معلوم است می‌توان دبی مایع سینی اول پایین برج (L_1) را محاسبه نمود.

$$L_1 = V_0 + B \quad 82-5$$

با استفاده از L_1 بدست آمده می‌توان غلظت این جریان را نیز با نوشتن موازنه جرم جزئی حول جوش‌آور محاسبه نمود.

$$(x_i)_1 = \frac{(y_i)_0 V_0 + b_i}{L_1} \quad 83-5$$

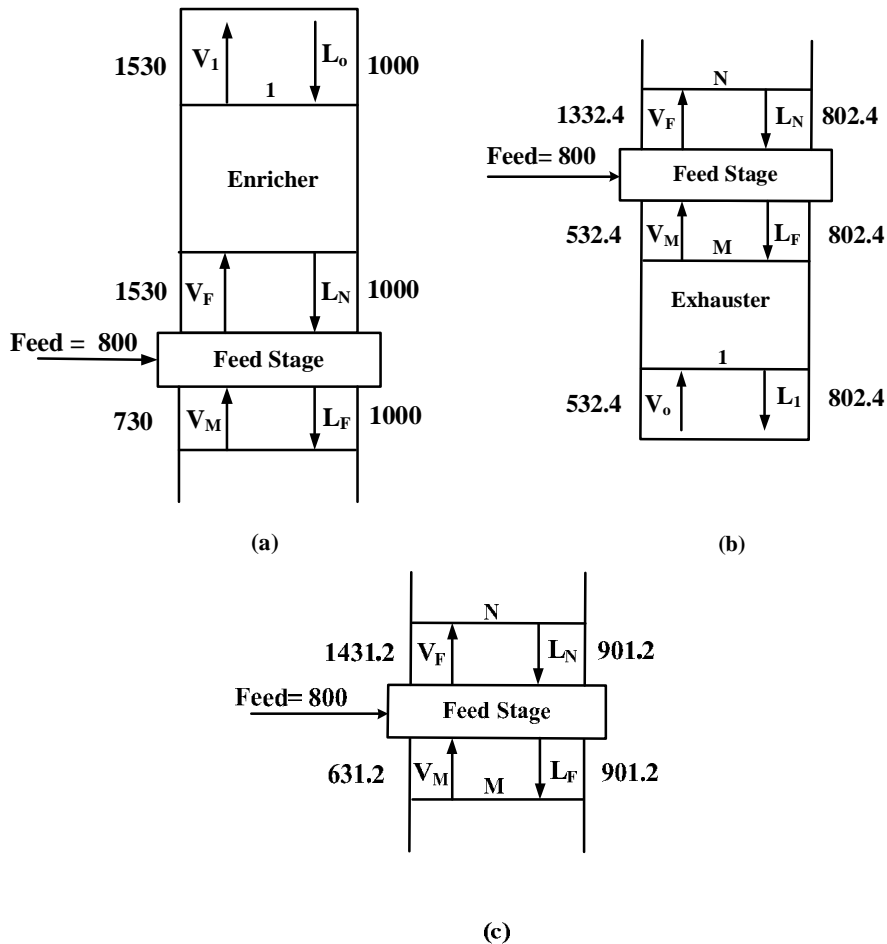
حال با استفاده از موازنه انرژی حول جوش‌آور می‌توان V_0 را بدست آورد.

$$V_0 = \frac{Q_B - B H_B + L_1 H_{L_1}}{H_{V_0}} \quad 84-5$$

در صورتی که V_0 بدست آمده و V_0 حدس زده شده با هم برابر نباشند باید محاسبات یک بار دیگر با V_0 بدست آمده تکرار شود با انجام این محاسبات نتایج زیر حاصل می شود.

$$V_0 = 532.4 \text{ lbmol/hr} \quad , \quad L_1 = 802.4 \text{ lbmol/hr} \quad , \quad T_1 = 169.8 \text{ } ^\circ\text{F} \quad (76.6 \text{ } ^\circ\text{C})$$

شرط ثابت بودن دبی مایع و بخار را به طور جداگانه برای بالا و پایین برج اعمال می کنیم تا دبی مایع و بخار در قسمت خوراک بدست آید که نتایج در قسمت A و B شکل ۵-۱۳ نشان داده شده است. از آنجا که این نتایج با هم توافق ندارند باید از آنها متوسط گرفته شود که نتایج این مرحله در قسمت C شکل ۵-۱۳ نشان داده شده و به صورت زیر می باشد.



شکل ۵-۱۳ : دبی مایع و بخار عبوری از سینی خوراک (a) با استفاده از دبی مایع و بخار بالای برج و شرط ثابت بودن دبی مایع و بخار (b) با استفاده از دبی مایع و بخار پایین برج و شرط ثابت بودن دبی مایع و بخار (c) با استفاده از متوسط قسمت a و b

ضریب جذب موثر (A_e) و ضریب دفع موثر (S_e) با استفاده از معادلات ۵-۷۰ و ۵-۷۱ برای بخش غنی سازی و بخش تهی سازی بر حسب شرایط بدست آمده محاسبه می شود.

	Enricher		Exhauster	
	Top Stage	Bottom Stage	Top Stage	Bottom Stage
$V, \text{ lbmole/hr}$	1530	1431.2	631.2	532.4
$L, \text{ lbmole/hr}$	1000	901.2	901.2	802.4
$T, ^\circ F$	26.1	105	105	169.8

ضریب جذب سینی خوراک با استفاده از شرایط زیر بدست می‌آید.

$$V_F = 1431.2 \text{ lbmol/hr}, \quad L_F = 901.2 \text{ lbmol/hr}, \quad T_1 = 105^\circ F (40.6^\circ C)$$

با استفاده از رابطه ۵-۷۳ می‌توان نسبت b/d را برای اجزاء محاسبه نمود و با موازنه جرم مقادیر b_i و d_i محاسبه می‌شوند.

$$d_i = \frac{f_i}{1 + (b_i/d_i)} \quad ۸۵-۵$$

$$b_i = f_i - d_i \quad ۸۶-۵$$

که نتایج به صورت زیر است.

Component	Pound-Moles Per Hour	
	d_i	b_i
C ₁	160.0	0.0
C ₂	363.8	6.2
C ₃	3.4	236.6
C ₄	0.0	25.0
C ₅	0.0	5.0
TOTAL	527.2	272.8

از آنجا که مقادیر d_i و b_i بدست آمده و حدس اولیه با هم برابر نیستند باید یک بار دیگر محاسبات را انجام دهیم که نتیجه محاسبات به صورت زیر می‌باشد.

Component	Pound-Moles per Hour	
	d_i	b_i
C ₁	160.0	0.0
C ₂	363.5	6.5
C ₃	4.3	235.7
C ₄	0.0	25.0
C ₅	0.0	5.0
TOTAL	527.8	272.2

همانطور که مشهود است وقتی دمای سینی خوراک را $105^\circ F$ ($40.6^\circ C$) در نظر می‌گیریم مقدار $D = 527 \text{ lbmole/hr}$ بدست می‌آید که با $D = 530 \text{ lbmole/hr}$ برابر نیست پس باید دمای سینی خوراک را تغییر دهیم برای حدس بعدی دمای سینی خوراک را $88.2^\circ F$ در نظر می‌گیریم که دبی محصول بالای برج $D = 519.7 \text{ lbmole/hr}$ بدست می‌آید. برای حدس‌های بعدی از رابطه خطی بین این دو مقدار استفاده می‌کنیم که نتایج به صورت زیر می‌باشد.

Iteration	Feed-Zone Temperature, °F	Distillate Rate, lbmole/hr
1	105	527.8
2	88.2	519.7
3	109.5	531.1
4	107.4	530.2

پس در نهایت مقادیر d_i و b_i بدست می‌آیند که توافق خوبی با روش حل لیستر و همکاران^۱ دارد در این روش از مقادیر θ و رابطه زیر استفاده می‌شود.

$$D = \sum_i \frac{f_i}{1 + \Theta (b_i/d_i)} \quad ۸۷-۵$$

$$d_i = \frac{f_i}{1 + \Theta (b_i/d_i)} \quad ۸۸-۵$$

همچنین مقادیر d_i و b_i بدست آمده با حل سینی به سینی ارائه شده در فصل ۱۳ نیز مقایسه شده است که در جدول زیر ارائه شده است.

Component	d , lbmole / hr		b , lbmole / hr	
	Edmister Group Method	Exact Method	Edmister Group Method	Exact Solution
C ₁	160.0	160.00	0.00	0.00
C ₂	364.36	365.39	5.64	4.61
C ₃	5.64	4.61	234.36	235.39
C ₄	0.00	0.00	25.00	25.00
C ₅	0.00	0.00	5.00	5.00
TOTALS	530.00	530.00	270.00	270.00

در روش ادمیستر میزان بازیافت اتان و پروپان به ترتیب ۹۸/۵٪ و ۹۷/۷٪ بدست می‌آید که این مقادیر با استفاده از روش سینی به سینی به ترتیب ۹۸/۸٪ و ۹۸/۱٪ محاسبه شده‌اند. مقایسه بقیه فاکتورهای روش ادمیستر و روش سینی به سینی در جدول زیر ارائه شده است.

	Edmister Group Method	Exact Solution
Temperatures, °F		
Distillate	15.5	14.4
Bottoms	161.4	161.6
Feed zone	107.4	99.3
Exchanger duties, Btu/hr		
Condenser	4996660	4947700
Reboiler	3254400	3195400
Vapor flow rates lbmole/hr		
V ₀ (exhauster)	564.3	555.5
V _M	647.2	517.9
V _{N+1}	1447.2	1358.2

به جزء دمای سینی خوراک ، توافق خوبی بین روش ادمیستر و محاسبات سینی به سینی وجود دارد. نتایج جداسازی با استفاده از برج تقطیر با نتایج برج جذب مثال ۵-۱ بسیار متفاوت است اگرچه دبی محصول بالای هر دو برج $D = 530 \text{ lbmole/hr}$ است اما جداسازی در برج تقطیر بسیار بیشتر از برج جذب می‌باشد. در برج جذب ، پروپان زیادی همراه با اتان از بالای برج خارج می‌شود در صورتی که برای جلوگیری از خارج شدن پروپان از بالای برج ، دبی مایع جذب کننده را دو برابر کنیم میزان جذب پروپان در مایع تقریباً به ۱۰۰٪ خواهد رسید اما از طرفی بیش از ۵۰٪ اتان نیز در فاز مایع جذب خواهد شد و همراه با فاز مایع خارج می‌شود.

منابع

- 1- Kremser, A., *Nat. Petroleum News*, 22 (21), 43-49 (May 21, 1930).
- 2- Souders, M., and G. G. Brown, *Ind. Eng. Chem.*, 24, 519-522 (1932).
- 3- Horton, G., and W. B. Franklin, *Ind. Eng. Chem.*, 32, 1384-1388 (1940).
- 4- Edmister, W. C., *Ind. Eng. Chem.*, 35, 837-839 (1943).
- 5- Edmister, W. C., *AICHE J.*, 3, 165-171 (1957).

مسائل

- ۱- مثال ۵-۱ را برای حالتی که دبی حلال 330 lbmole/hr و تعداد مراحل تعادلی $N = 3$ باشد با استفاده از روش Kremser حل نمایید. نتیجه حل را با مثال ۵-۱ مقایسه نمایید.
- ۲- با استفاده از رابطه ۵-۱۴ و ۵-۱۵، رابطه ۵-۲۳ را بدست آورید.
- ۳- در صورتی که در مثال ۵-۱، پروپان ماده کلیدی باشد حداقل حلال لازم را بدست آورید چه مقدار حلال لازم است تا دبی جریان بخار خروجی 105.4 lbmole/hr شود.
- ۴- مثال ۵-۱ را برای حالتی که دمای همه مراحل در مقادیر زیر ثابت باشد حل نمایید.

الف : $100^\circ F$

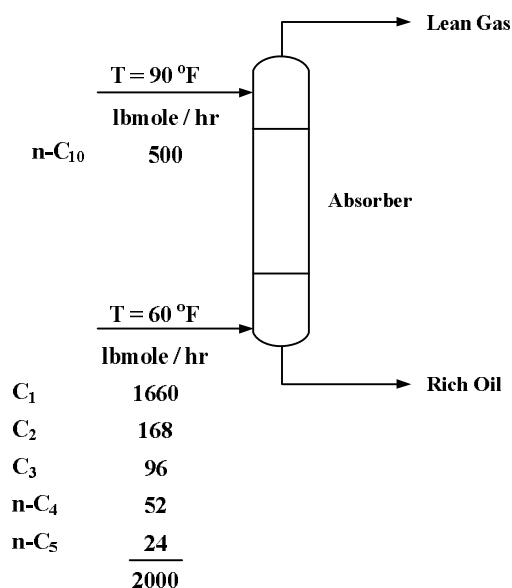
ب : $125^\circ F$

ج : $150^\circ F$

- ۵- یک میلیون پوند بر ساعت از خوراکی با غلظت زیر برای جذب ۵۰٪ از اتان وارد برج جذب می‌شود. برج جذب در فشار 550 Psia و دمای $30^\circ F$ - کار می‌کند و از حلال نرمال اکتان استفاده می‌شود. با استفاده از Group Method حداقل حلال لازم و توزیع اجزاء خوراک را بین جریان‌های خروجی بدست آورید.

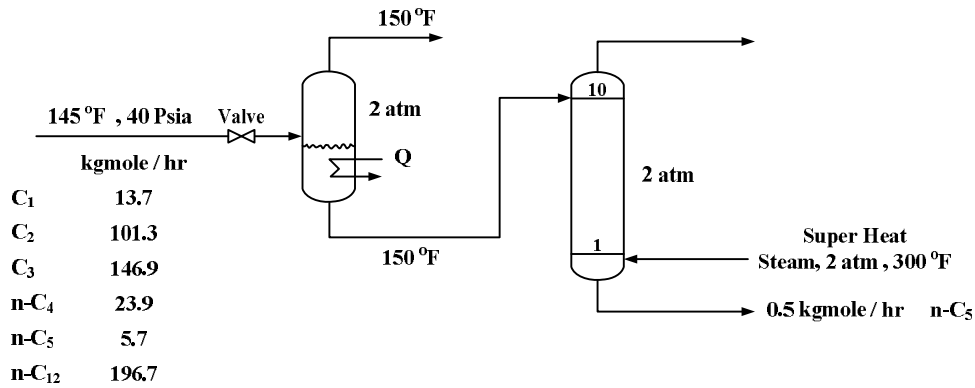
Component	Mole % in feed gas	k value @ -30 °F and 550 psia
C ₁	94.9	2.85
C ₂	4.2	0.36
C ₃	0.7	0.066
nC ₄	0.1	0.017
nC ₅	0.1	0.004

۶- برای برج جذب زیر با استفاده از روش گروهی برای حالت‌های داده شده میزان جذب را بدست آورید.
 الف : برج دارای شش مرحله تعادلی است و در فشار 75 Psia کار می‌کند.
 ب : برج دارای سه مرحله تعادلی است و در فشار 150 Psia کار می‌کند.
 ج : برج دارای شش مرحله تعادلی است و در فشار 150 Psia کار می‌کند.



۷- 100 kgmole/hr از گازی شامل C₁ ۲۵٪، C₂ ۱۵٪، C₃ ۲۵٪، nC₄ ۲۰٪ و nC₅ ۱۵٪ مولی در دمای 70 °C وارد یک برج جذب با فشار 4 atm می‌شود و با 500 kgmole/hr از nC₁₀ در دمای 90 °F تماس حاصل می‌نماید با استفاده از روش گروهی میزان جذب هر کدام از اجزاء را در شرایط زیر بدست آورید.
 الف : برج جذب دارای چهار مرحله تعادلی است.
 ب : برج جذب دارای ده مرحله تعادلی است.
 ج : برج جذب دارای سیزده مرحله تعادلی است.

۸- سیستمی شامل یک مخزن تبخیر ناگهانی و یک برج دفع به صورت زیر به یکدیگر متصل می‌باشند در صورتی که برج دفع در فشار 2 atm کار کند و دارای پنج سینی باشد دبی بخار ورودی به برج دفع را بدست آورید.



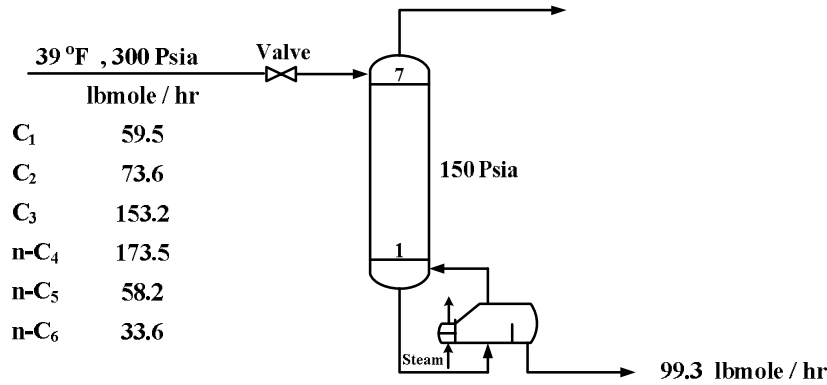
۹- 100 kgmole/hr از خوراک مایعی شامل C_1 ۰.۳٪، C_2 ۰.۲۲٪، C_3 ۱.۸۲٪، nC_4 ۴.۴۷٪، nC_5 ۸.۵۹٪ و nC_{10} ۸۴.۸۷٪ در دمای 250°F وارد برج دفع می‌شود و با 100 kgmole/hr بخار فوق اشباع در دمای 300°F و 50 Psia تماس حاصل می‌نماید برج دارای سه مرحله تعادلی در فشار 50 Psia کار می‌کند با استفاده از روش گروهی، غلظت و دبی اجزاء خروجی را بدست آورید.

۱۰- 100 kgmole/hr از مخلوط هم مولاری شامل بنزن (B)، تلوئن (T)، نرمال هگزان (nC_6) و نرمال هپتان (nC_7) در دمای 150°C وارد برج استخراج مایع-مایع می‌شود و با 300 kgmole/hr دی-اتیلن گلایکول (DEG) در یک سیستم غیر همسو شامل پنج مرحله تعادلی تماس حاصل می‌نماید. با استفاده از روش گروهی غلظت و دبی اجزاء خروجی را بدست آورید. ضریب توزیع هیدروکربن‌ها (بر حسب درصد مولی) برای اجزاء ثابت در نظر گرفته شده که به صورت زیر است.

Component	$K_{Di} = y(\text{Solvent phase})/x(\text{Raffinate phase})$
B	0.33
T	0.29
nC_6	0.050
nC_7	0.043

برای دی‌اتیلن گلایکول نیز $K_D = 30$ می‌باشد.

۱۱- گاز طبیعی مطابق شکل زیر وارد برج دفع مجهز به جوش‌آور می‌شود تا پروپان و اجزاء سبکتر از آن دفع شوند با استفاده از روش گروهی غلظت و دبی اجزاء خروجی را بدست آورید.



۱۲- مثال ۴-۵ را برای جریان برگشتی (L_0) زیر حل نمایید.

الف : $L_0 = 1500 \text{ lbmole/hr}$

ب : $L_0 = 2000 \text{ lbmole/hr}$

ج : $L_0 = 2500 \text{ lbmole/hr}$

مقدار d_{C_3}/b_{C_3} را بر حسب L_0 در محدوده $1000 < L_0 < 2500 \text{ lbmole/hr}$ رسم نمایید. فرض کنید دمای سینی‌ها شبیه به دمای سینی‌های مثال ۴-۵ است. این فرض را مورد بحث قرار دهید.

۱۳- مثال ۴-۵ را برای حالت‌های زیر حل نمایید.

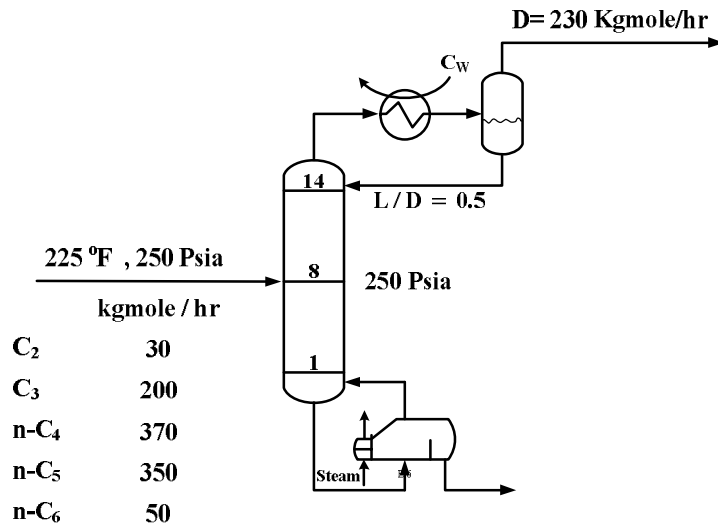
الف : $M = 10$ و $N = 10$

ب : $M = 15$ و $N = 15$

M : تعداد سینی‌های پایین برج
 N : تعداد سینی‌های بالای برج

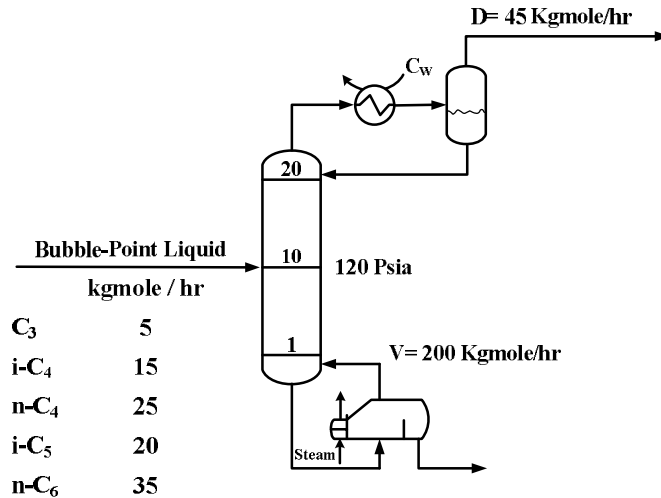
مقدار d_{C_3}/b_{C_3} را بر حسب $M + N$ در محدوده $10 < M + N < 30$ رسم نمایید فرض کنید که دمای سینی‌ها و دبی جریان‌ها مانند مثال ۴-۵ باشند.

۱۴- با استفاده از روش ادمیستر غلظت و دبی اجزاء خروجی از برج زیر را بدست آورید.



۲۳٪ خوراک در شرایط ورودی به برج تبخیر می‌شود.

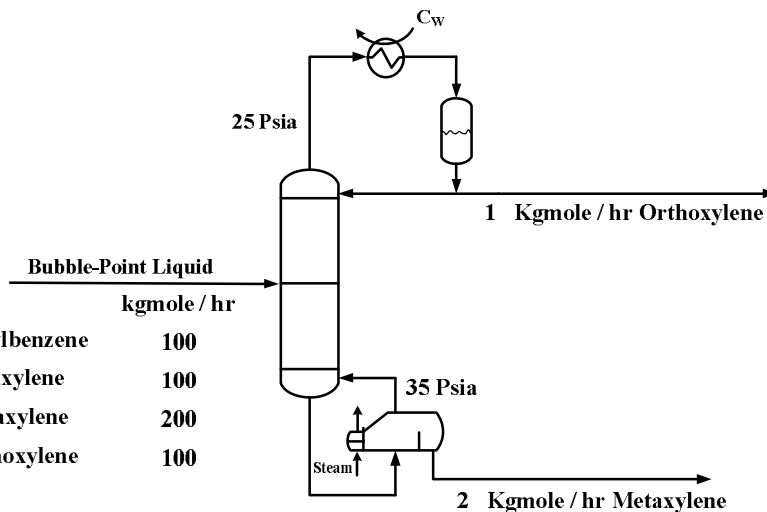
۱۵- خوراکی در نقطه حباب وارد برج می‌شود. با استفاده از روش ادمیستر غلظت و دبی اجزاء محصولات خروجی از برج را بدست آورید. برای حدس اولیه دمای بالا و پایین برج را به ترتیب $150^{\circ}F$ و $250^{\circ}F$ در نظر بگیرید.



۱۶- مخلوطی شامل اتیل‌بنزن و گزیلین وارد برج می‌شوند فرض کنید که مخلوط از قانون راولت و قانون دالتون تبعیت می‌کند.

الف : با استفاده از روش فنسکی- آندروود- گیلیلاند تعداد مراحل تعادلی را در حالتی که $R/R_{Min} = 1.1$ باشد بدست آورید و با استفاده از روش کرکبراید محل سینی خوراک را بدست آورید.

ب : با استفاده از نتایج قسمت الف برای جریان برگشتی ، تعداد مراحل و جریان محصولات و همچنین استفاده از روش ادمیستر غلظت محصولات بالا و پایین برج را محاسبه نمایید.



فصل ششم

روش تخمینی سینی به سینی

مقدمه

محاسبه دقیق سینی به سینی برای سیستم چندجزئی وقتی که اجزاء بیشتر از سه جزء باشند حتی برای زمانی که موازنه انرژی نیز در نظر گرفته نشود خسته کننده است. حل این روش‌ها بیشتر توسط برنامه‌نویسی کامپیوتری امکان‌پذیر است.

در فرآیندهای شیمیایی و پالایشگاهی، تقطیر چند جزئی بسیار بیشتر از تقطیر دو جزئی کاربرد دارد. برنامه‌های کامپیوتری زیادی برای این منظور ارائه شده است تا برج‌هایی شامل سه جزء تا ده جزء را پوشش دهد. به منظور حل مسائل تقطیر چندجزئی باید برای هر سینی موازنه جرم و موازنه انرژی نوشته شود برای این منظور روابط فشار بخار (مانند رابطه آنتوان^۱، رابطه ویلسون^۲ و رابطه رنون^۳)، گرمای تبخیر مواد، آنتالپی هر جزء در فاز مایع و بخار و معادلات تعادل مورد نیاز است. روش‌های تخمینی باعث کاهش زمان رسیدن به جواب خواهد شد. در روش حل مستقیم آکرس و واد^۴ [۱] تلاش شده است تا میزان محاسبات سعی و خطا کاهش یابد. با استفاده از این روش می‌توان دمای هر سینی را با محاسبه نقطه شبنم بدست آورد.

روش محاسبه سینی به سینی

محاسبات بخش پالایش^۵

جزء سنگین به عنوان ماده مبنا در نظر گرفته می‌شود. و غلظت همه اجزاء مایع روی سینی n با استفاده از رابطه زیر بدست می‌آید.

-
- 1- Antoine
 - 2- Wilson
 - 3- Renon
 - 4- Akers and Wade
 - 5- Rectifying Section

$$\left(\frac{x_i}{x_h}\right)_n = \frac{1}{\alpha_i} \left[\frac{(L/D)(x_i)_{n-1} + x_{Di}}{(L/D)(x_h)_{n-1} + x_{Dh}} \right] \quad ۱-۶$$

از آنجا که $\sum x_i = 1$ می باشد خواهیم داشت.

$$\sum \left(\frac{x_i}{x_h}\right)_n = \left(\frac{1}{x_h}\right)_n$$

پس مقدار x_i را می توان به صورت زیر بدست آورد.

$$(x_i)_n = \frac{\left(\frac{x_i}{x_h}\right)_n}{\sum \left(\frac{x_i}{x_h}\right)_n}$$

مقدار k جزء کلیدی سنگین برای هر سینی با استفاده از رابطه زیر بدست می آید.

$$k_h = \frac{1}{\sum \alpha_i x_i} \quad ۲-۶$$

که با داشتن مقدار k_h و فشار برج می توان دمای سینی را بدست آورد.

محاسبات بخش دفع^۱

جزء سنگین به عنوان ماده مینا در نظر گرفته می شود. و غلظت همه اجزاء بخار روی سینی m با استفاده از رابطه زیر بدست می آید.

$$\left(\frac{y_i}{y_h}\right)_m = \alpha_i \left[\frac{(V_s/B)(y_i)_{m-1} + x_{Bi}}{(V_s/B)(y_h)_{m-1} + x_{Bh}} \right] \quad ۳-۶$$

از آنجا که $\sum y_i = 1$ می باشد خواهیم داشت.

$$\sum \left(\frac{y_i}{y_h}\right)_m = \left(\frac{1}{y_h}\right)_m$$

پس مقدار y_i را می توان به صورت زیر بدست آورد.

$$(y_i)_m = \frac{(y_i/y_h)_m}{\sum (y_i/y_h)_m}$$

مقدار k جزء کلیدی سنگین برای هر سینی با استفاده از رابطه زیر بدست می آید.

$$k_h = \sum y_i / \alpha_i \quad ۴-۶$$

که با داشتن مقدار k_h و فشار برج می توان دمای سینی را بدست آورد.

مراحل حل به صورت زیر می باشد.

محاسبات برای بخش پالایش به صورت زیر است.

۱- با استفاده از موازنه جرم مقدار محصول بالای برج (D) و محصول پایین برج (B) را بدست می‌آوریم و با استفاده از نسبت جریان برگشتی میزان مایع برگشتی به برج (L) را محاسبه می‌نماییم.

الف : وقتی که کندانسور کلی باشد غلظت مایع برگشتی به برج با محصول بالای برج برابر است.

ب : وقتی که کندانسور جزئی باشد چون محصول بالای برج به صورت بخار است غلظت مایع برگشتی به برج را می‌توان با استفاده از محاسبات نقطه شبنم بدست آورد.

۲- برای بالای برج دما را با استفاده از محاسبات نقطه شبنم برای بخار اولین سینی بدست می‌آوریم.

الف : در صورتی که کندانسور کلی باشد غلظت بخار اولین سینی با غلظت محصول برابر است.

ب : در صورتی که کندانسور جزئی باشد غلظت بخار اولین سینی را با نوشتن موازنه روی کندانسور بدست می‌آوریم و سپس محاسبات نقطه شبنم را برای آن انجام می‌دهیم.

با استفاده از دمای بدست آمده ، فراریت نسبی اجزاء را بدست می‌آوریم.

۳- مقادیر $\left(\frac{x_i}{x_h}\right)$ را برای هر سینی بدست می‌آوریم.

۴- مقادیر x_i به صورت زیر بدست می‌آیند.

$$x_i = \frac{(x_i/x_h)}{\sum (x_i/x_h)} \quad 5-6$$

۵- با استفاده از معادله ۶-۲ مقدار k_h را محاسبه می‌کنیم سپس با استفاده از فشار برج و مقدار k_h ، دمای سینی را بدست می‌آوریم.

۶- با استفاده از دمای بدست آمده و فشار برج مقادیر k_i را برای هر جزء بدست می‌آوریم و ضریب فراریت را به صورت زیر محاسبه می‌کنیم.

$$\alpha_i = \frac{k_i}{k_h}$$

البته مراحل ۵ و ۶ را می‌توان هر چند سینی یک بار انجام داد.

۷- مراحل اخیر را تا زمانی که نسبت جزء کلیدی سبک به سنگین در فاز مایع برابر نسبت جزء کلیدی سبک به سنگین خوراک شود (یا نزدیک به آن شود) ادامه می‌دهیم و یک سینی برای خوراک در نظر می‌گیریم.

۸- اگر جزئی در خوراک وجود داشته باشد که در محصول بالای برج ظاهر نمی‌شود باید در محاسبات دخالت داده شود. مقدار تخمینی این جزء برای سینی بالاتر از سینی خوراک به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$\frac{x_{Fi}}{x_a} = \left[\frac{1}{(1+D/L) k_i} \right]^{P''} \quad 6-6$$

x_{Fi} : کسر مولی ماده‌ای که در خوراک موجود است و در بالای برج ظاهر نمی‌شود.

x_a : کسر مولی تخمینی جزء در فاز مایع روی سینی P''

P'' : تعداد سینی‌های بالای سینی خوراک

محاسبات بخش دفع به صورت زیر است.

۱- محاسبه نقطه حباب را برای بخار ایجاد شده در جوش آور انجام می‌دهیم و در دمای بدست آمده ضرایب فراریب را محاسبه می‌نماییم.

۲- با استفاده از غلظت بخار ایجاد شده در جوش آور و استفاده از معادله ۳-۶ می‌توان مقادیر $\frac{y_i}{y_h}$ را برای اولین سینی پایین برج بدست آورد.

۳- مقادیر y_i با استفاده از رابطه زیر بدست می‌آید.

$$y_i = \frac{(y_i/y_h)}{\sum y_i/y_h}, \quad \sum y_i/y_h = 1/y_h \quad ۷-۶$$

۴- با استفاده از رابطه ۴-۶ مقدار k_h را محاسبه می‌کنیم و سپس با استفاده از فشار برج و مقدار k_h ، دمای سینی را بدست می‌آوریم.

۵- با استفاده از دمای بدست آمده و فشار برج مقادیر k_i را برای هر جزء بدست می‌آوریم و ضریب فراریت را به صورت زیر محاسبه می‌کنیم.

$$\alpha_i = \frac{k_i}{k_h}$$

۶- برای بقیه سینی‌ها نیز محاسبات به همین صورت خواهد بود.

۷- برای اجزایی که سبک‌تر از جزء سبک هستند و در محصول پایین برج ظاهر نمی‌شوند محاسبه کسر مولی اجزاء روی سینی به صورت زیر است.

$$x_{Fi}/x_a = [(1 + D/L)k_i]^{p'} \quad ۸-۶$$

P' : تعداد سینی‌های پایین سینی خوراک است.

۸- محاسبات را تا جایی انجام می‌دهیم که نسبت جزء کلیدی سبک به سنگین در فاز مایع برابر نسبت جزء کلیدی سبک به سنگین خوراک شود (یا نزدیک به آن باشد)

۹- تعداد سینی‌ها برابر سینی‌های بالا و پایین برج به اضافه یک سینی برای خوراک است که این مراحل تئوری شامل کندانسور جزئی و جوش آور جزئی نمی‌باشد.

مثال ۶-۱: خوراکی با مشخصات نشان داده شده در جدول زیر در دمای $158^\circ F$ وارد برج می‌شود. فشار بالای برج 10 Psig می‌باشد مشخصات محصول بالا و پایین برج نیز در جدول زیر داده شده است. محاسبات سینی به سینی را برای این برج انجام دهید.

Feed		Overhead		Bottoms	
Component	Mole Fraction	Moles	Mole Fraction	Moles	Mole Fraction
(A) Trichloroethylene	0.456	0.451	0.999	0.00549	0.010
(B) β Trichloroethane	0.0555	0.00045	0.001	0.05505	0.101
(C) Perchloroethylene	0.3625	0.36250	0.661
(D) Tetras (1)	0.0625	0.0625	0.114
(E) Tetras (2)	0.0635	0.0625	0.114
Total	1.0000	0.45145	1.000	0.54804	1.000

Note the material balance for overhead and bottoms is based on:

- (a) 99.9 mol % trichlor in overhead
- (b) 1.0 mol% trichlor in bottoms
- (c) 1.0 mol feed total
- (d) Light key = trichloroethylene and Heavy key = β trichloroethane

حل : ابتدا دمای بالای برج را محاسبه می‌کنیم. چون غلظت تری‌کلرو اتیلن در محصول بالای برج ۹۹/۹٪ است با استفاده از فشار 10 Psig که معادل با 24.7 Psia (1280 mmHg) است و رابطه فشار بخار تری‌کلرو اتیلن می‌توان دمای جوش $T = 223^\circ \text{F}$ را بدست آورد. سپس دمای پایین برج را با استفاده از محاسبه نقطه حباب بدست می‌آوریم. افت فشار را 10 Psi در نظر می‌گیریم پس فشار پایین برج 20 Psig که معادل با 34.7 Psia (1800 mmHg) می‌باشد خواهد شد. با توجه به محاسبات زیر $T = 320^\circ \text{F}$ بدست می‌آید.

Try $T = 320^\circ \text{F}$				
Component	x_{iB}	Vapor Press.		$(y_i)_B$
		mm Hg	x_i (vp)	
A	0.01	4500	45	0.0249
B	0.101	2475	250	0.1382
C	0.661	1825	1210	0.67
D	0.114	1600	183	0.1012
E	0.114	1050	120	0.0664
			1808	1.0007
			mm Hg abs	

که مقدار 1808 mmHg با فشار کل 1800 mmHg مقایسه می‌شود از آنجا که اختلاف آنها کم است $T = 320^\circ \text{F}$ قابل قبول است.

ضریب فراریت برای بالا و پایین برج به صورت زیر است.

$$\text{At top: } \alpha = \frac{vp \text{ of Tri}}{vp \text{ of } \beta \text{ Tri}} = \frac{1280}{600} = 2.13$$

$$\text{At bottoms: } \alpha = \frac{vp \text{ of Tri}}{vp \text{ of } \beta \text{ Tri}} = \frac{4500}{2275} = 1.98$$

$$\alpha \text{ (average)} = [(2.13)(1.98)]^{1/2} = 2.06$$

حداقل تعداد سینی‌های تئوری در جریان برگشتی بینهایت به صورت زیر است.

$$\begin{aligned} N_{\min} &= \frac{\log(x_{ID}/x_{hD})(x_{hB}/x_{lB})}{\log \alpha_{avg}} \\ &= \frac{\log[(0.999/0.001)(0.101/0.01)]}{\log 2.06} \\ &= \frac{4.003}{0.318} = 12.76 \text{ theoretical stages} \end{aligned}$$

حداقل تعداد سینی‌های تئوری بالای خوراک نیز به صورت زیر است.

$$\begin{aligned} N_r &= \frac{\log[(0.999/0.001)(0.0555/0.456)]}{\log 2.13} \\ &= \frac{2.085}{0.328} = 6.36 \text{ theoretical stages} \end{aligned}$$

شرایط حرارتی خوراک

فرض می‌شود که سینی خوراک در فشار 15 Psig است پس دمای جوش خوراک 266°F است مقدار q به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$q = \frac{\text{Heat to bring feed to boiling point} + \text{Heat to vaporize feed}}{\text{Latent Heat of one mol of feed}}$$

با استفاده از رابطه اخیر $q = 1.298$ خواهد بود.

حداقل جریان برگشتی

فرض می‌شود که دمای نقطه تقاطع خط عملیاتی و منحنی تعادل (Pinch Point) در $\frac{1}{3}$ و $\frac{2}{3}$ اختلاف دمای بالا و پایین برج در نظر گرفته می‌شود.

$$\text{Lower pinch} = 320 - \frac{1}{3}(320 - 223) = 288 \text{ } ^\circ F$$

$$\text{Upper pinch} = 320 - \frac{2}{3}(320 - 223) = 255 \text{ } ^\circ F$$

Component	@ 255 °F		@ 288 °F		α_i (Avg)
	V.P	α	V.P	α	
A	2050	2.00	3050	1.91	1.955
B	1025	1.00	1600	1.00	1.00
C	750	0.732	1180	0.737	0.735
D	650	0.634	1035	0.647	0.641
E	390	0.380	650	0.406	0.393

چون $\alpha_{lk} = 1.955$ و $\alpha_{hk} = 1.0$ می باشد θ حدس زده شده باید بین این مقادیر باشد که $\theta = 1.113$ در نظر گرفته می شود.

Component	x_{Fi}	$\alpha_i x_{Fi}$	$(\alpha_i - \theta)$	$(\alpha_i x_{Fi}) / (\alpha_i - \theta)$	$(\alpha_i x_{Fi}) / (\alpha_i - \theta)^2$
A	0.456	0.891	0.842	1.058	1.252
B	0.0555	0.0555	-0.113	-0.491	4.33
C	0.3625	0.266	-0.378	-0.704	1.86
D	0.0625	0.0401	-0.472	-0.085	0.18
E	0.0625	0.0246	-0.720	-0.0342	0.0472
				$\Sigma = -0.2562$	$\Sigma = 7.669$

$$\theta_c = 1.113 - (-0.2562/7.669) = 1.146$$

مقدار θ بدست آمده به حد کافی به جواب نزدیک است و نیازی به تصحیح مجدد ندارد. با استفاده از این مقدار خواهیم داشت.

$$1 - q = \sum \frac{x_{Fi}}{1 - \theta/\alpha_i} = \sum \frac{\alpha_i x_{Fi}}{\alpha_i - \theta} = -0.256$$

$$1 - 1.298 = -0.298 \approx -0.256$$

مقدار $\left(\frac{L}{D}\right)_{Min}$ از رابطه زیر بدست می‌آید.

$$\left(\frac{L}{D}\right)_{min} + 1 = \frac{(\alpha_A x_A)_D}{\alpha_A - \theta} + \frac{(\alpha_B x_B)_D}{\alpha_B - \theta}$$

با جایگذاری اطلاعات مسئله در رابطه بالا خواهیم داشت.

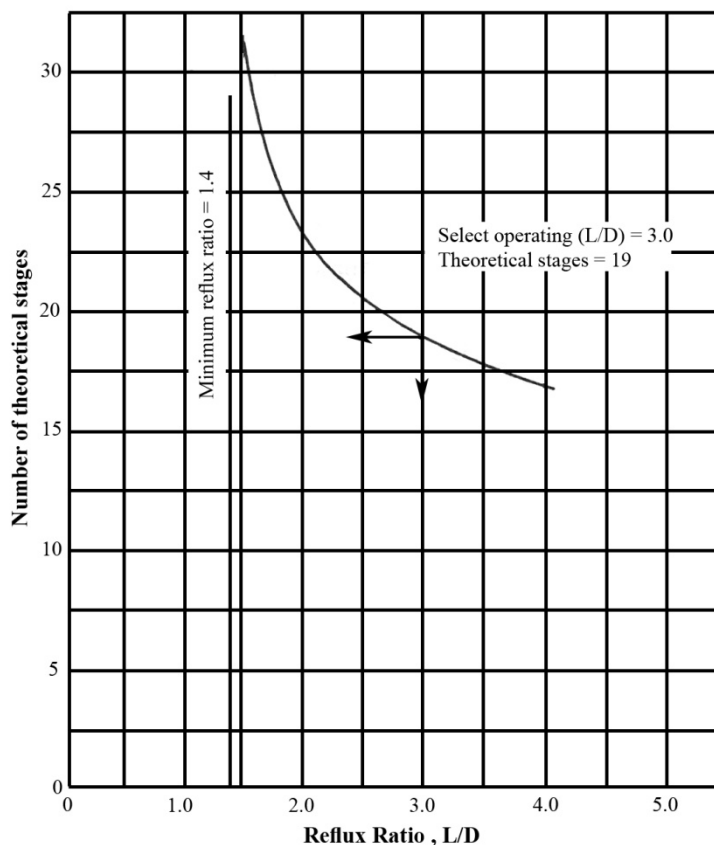
$$\begin{aligned} \left(\frac{L}{D}\right)_{min} + 1 &= \frac{(1.955)(0.999)}{(1.955 - 1.146)} + \frac{1.00(0.001)}{(1.00 - 1.146)} \\ &= 2.41 + (-0.00685) \\ &= 2.404 \end{aligned}$$

$$\left(\frac{L}{D}\right)_{min} = 2.404 - 1.0 = 1.40$$

با استفاده از روش گیلیلاند برای جریان‌های برگشتی مختلف خواهیم داشت.

Assume $(L/D)_o$	$\frac{(L/D)_o - (L/D)_{Min}}{(L/D)_o + 1}$	Read : $(N - N_{Min}) / (N + 1)$	Theoretical Stages N
1.4	0	∞	∞
1.6	0.0768	0.546	29
2.0	0.20	0.445	23.5
3.0	0.40	0.312	18.8
4.0	0.52	0.245	17
∞	----	---	12.6

که نتایج اخیر در شکل ۶-۱ رسم شده است. با توجه به این شکل $\left(\frac{L}{D}\right) = 3$ و تعداد سینی‌ها $N = 19$ خواهد بود.



شکل ۶-۱ : رسم محاسبات مثال ۶-۱

محاسبات سینی به سینی

محاسبات سینی به سینی با استفاده از روش آکرس و واد انجام خواهد شد. تری کلرو اتیلن به عنوان جزء کلیدی سبک و β تری کلرو اتان به عنوان جزء کلیدی سنگین در نظر گرفته می شود. ضریب فراریت برای شروع به صورت زیر است که ضریب فراریت متوسط بین بالای برج و خوراک می باشد.

	α_{avg}
A	2.05
B	1.00
C	0.734

از اجزاء سنگین تر از پرکلرو اتیلن در قسمت بالای برج صرف نظر می شود. برای اینکه پرکلرواتیلن در محاسبات بالای برج در نظر گرفته شود فرض می شود که در جریان برگشتی ۰.۱٪ پرکلرو اتیلن ، ۰.۵٪ β تری کلرو اتان و بقیه تری کلرو اتیلن باشد. محاسبات برای سینی اول به صورت زیر است. برای اجزاء مختلف از معادله زیر استفاده می کنیم تا غلظت اجزاء روی سینی اول بدست آید.

$$\left(\frac{x_i}{x_h}\right)_1 = \frac{1}{\alpha_i} \left[\frac{(L/D)(x_i)_0 + x_{Di}}{(L/D)(x_h)_0 + x_{Dh}} \right]$$

برای جزء A (تری کلرو اتیلن) محاسبات به صورت زیر است.

$$\left(\frac{x_i}{x_h}\right)_1 = \frac{1}{2.05} \left[\frac{(3)(0.9994) + 0.9994}{(3)(0.0005) + 0.0005} \right] = 975.02$$

برای جزء B (β تری کلرو اتان) محاسبات به صورت زیر است.

$$\left(\frac{x_i}{x_h}\right)_1 = \frac{1}{1.00} \left[\frac{3(0.0005) + 0.0005}{3(0.0005) + 0.0005} \right] = 1.00$$

برای جزء C (پر کلرو اتیلن) محاسبات به صورت زیر است.

$$\left(\frac{x_i}{x_h}\right)_1 = \frac{1}{0.734} \left[\frac{3(0.0001) + 0.0001}{3(0.0005) + 0.0005} \right] = 0.272$$

جزء مولی اجزاء نیز به صورت زیر بدست می آید.

$$(x_A)_1 = 975.02/976.293 = 0.9984$$

$$(x_B)_1 = 1.00/976.293 = 0.001024$$

$$(x_C)_1 = 0.273/976.293 = 0.000280$$

محاسبات برای سینی دوم به صورت زیر است.

برای جزء A محاسبات به صورت زیر است.

$$\left(\frac{x_i}{x_h}\right)_2 = \frac{1}{2.05} \left[\frac{3(0.9984) + 0.9994}{3(0.001024) + 0.0005} \right] = 545.5$$

برای جزء B محاسبات به صورت زیر است.

$$\left(\frac{x_i}{x_h}\right)_2 = \frac{1}{1.00} \left[\frac{3(0.001024) + 0.0005}{3(0.001024) + 0.0005} \right] = 1.00$$

برای جزء C محاسبات به صورت زیر است.

$$\left(\frac{x_i}{x_h}\right)_2 = \frac{1}{0.734} \left[\frac{3(0.00028) + 0.0001}{3(0.001024) + 0.0005} \right] = 0.359$$

نتایج سینی اول و دوم در جدول زیر نشان داده شده است.

Component	$x_{iD}=x_i$ (Reflux)	$(x_i / x_h)_1$	$(x_i)_1$	$(x_i / x_h)_2$	$(x_i)_2$
A	0.9994	975.02	0.9984	545.5	0.9971
B	0.0005	1.00	0.001024	1.0	0.001828
C	0.0001	0.273	0.000280	0.359	0.000656
		$\Sigma = 976.293$	0.999704	546.859	

نتایج محاسبات برای بقیه سینی‌ها به صورت زیر است.

	$(x_i / x_h)_3$	$(x_i)_3$	$(x_i / x_h)_4$	$(x_i)_4$	$(x_i / x_h)_5$	$(x_i)_5$
A	325.24	0.9952	200.81	0.9916	126.61	0.9851
B	1.0	0.00306	1.0	0.004938	1.0	0.007781
C	0.514	0.001573	0.682	0.00337	0.908	0.007065
	$\Sigma = 326.754$		$\Sigma = 202.492$		$\Sigma = 128.518$	

	$(x_i / x_h)_6$	$(x_i)_6$	$(x_i / x_h)_7$	$(x_i)_7$	$(x_i / x_h)_8$	$(x_i)_8$
A	80.60	0.9736	52.05	0.9520	33.97	0.9138
B	1.0	0.01208	1.0	0.01829	1.0	0.0269
C	1.213	0.01465	1.633	0.02987	2.21	0.05945
	$\Sigma = 82.813$		$\Sigma = 54.683$		$\Sigma = 37.18$	

	$(x_i / x_h)_9$	$(x_i)_9$	$(x_i / x_h)_{10}$	$(x_i)_{10}$	$(x_i / x_h)_{11}$	$(x_i)_{11}$
A	22.47	0.8491	15.196	0.7501	7.716	0.5421
B	1.0	0.03779	1.0	0.04936	1.0	0.07026
C	2.994	0.1131	4.061	0.2005	5.516	0.3876
	$\Sigma = 26.464$		$\Sigma = 20.257$		$\Sigma = 14.232$	

نسبت جزء کلیدی سبک به سنگین در خوراک $\frac{0.456}{0.0555} = 8.2$ است و از طرفی برای سینی دهم نسبت جزء کلیدی سبک به سنگین $\frac{0.7501}{0.04936} = 15.2$ و برای سینی یازدهم این نسبت $\frac{0.5421}{0.07026} = 7.7$ است پس سینی یازدهم به عنوان سینی خوراک در نظر گرفته می‌شود. البته در این محاسبات فرض شده بود که ضریب فراریب خیلی تغییر نمی‌کند و از ضریب فراریب متوسط استفاده می‌کنیم. محاسبات برای بخش دفع به صورت زیر خواهد بود.

برای میزان خوراک وارد شده مقدار بخار پایین برج (V_s) را بدست می‌آوریم.

$$(L/V)_r = \frac{1}{1 + \frac{1}{\left(\frac{L}{D}\right)}} = \frac{1}{1 + \frac{1}{3}} = 0.75$$

$$V_r = \frac{(L/D)D}{(L/V)} = \frac{3(0.45145)}{0.75} = 1.806$$

$$L_r = (L/D)(D) = 3(0.45145) = 1.35 \text{ mols/mol feed}$$

$$L_s = L_r + (q \times F) = 1.35 + 1.298(1.0) = 2.648$$

$$V_s = V_r - F(1 - q) = 1.806 - (1.0)(1 - 1.298) = 2.104$$

$$V_s/B = 2.104/0.54804 = 3.84$$

ضریب فراریت در دمای متوسط پایین برج و خوراک محاسبه می‌شود. محاسبات برای پایین برج از سینی پایین شروع می‌شود.

برای جزء A روی سینی اول محاسبات به صورت زیر است.

$$(y_i/y_h)_1 = \alpha_i \left[\frac{(V_s/B)(y_i)_{m-1} + x_{Bi}}{(V_s/B)(y_h)_{m-1} + x_{Bh}} \right]$$

$$= 1.905 \left[\frac{(3.84)(0.0249) + 0.010}{(3.84)(0.1382) + 0.101} \right]$$

$$(y_i/y_h)_1 = 0.319$$

$$(y_i)_1 = 0.319/5.877 = 0.0543$$

برای جزء A روی سینی دوم محاسبات به صورت زیر است.

$$(y_i/y_h) = 1.905 \left[\frac{(3.84)(0.0543) + 0.010}{(3.84)(0.170) + 0.101} \right] = 0.552$$

نتایج محاسبات برای دو سینی پایین برج به صورت زیر است.

Component	x_{iB}	y_{iB}	$(\alpha_i)_{avg}$	$(y_i / y_h)_1$	$(y_i)_1$	$(y_i / y_h)_2$	$(y_i)_2$
A	0.010	0.0249	1.905	0.319	0.0543	0.552	0.107
B	0.101	0.1382	1.00	1.000	0.170	1.00	0.194
C	0.660	0.6700	0.740	3.800	0.647	3.08	0.597
D	0.114	0.1012	0.648	0.517	0.088	0.389	0.0754
E	0.114	0.0664	0.411	0.241	0.0411	0.1476	0.0286
				5.877		5.1686	

با ادامه محاسبات نسبت جزء سبک به سنگین روی سینی دهم (شمارش از پایین برج) نزدیک به نسبت جزء کلیدی سبک به سنگین در خوراک خواهد شد. پس خوراک باید وارد سینی دهم از پایین برج شود یا وارد سینی یازدهم از بالای برج شود.

کسر مولی اجزاء در فاز مایع با استفاده از کسر مولی اجزاء در فاز بخار به صورت زیر بدست می‌آید.

$$(x_i / x_h) = \frac{(y_i / y_h)}{\alpha_i / \alpha_h}$$

نسبت جزء سبک به سنگین برای سینی نهم و دهم و خوراک به صورت زیر است.

$$\text{Ratio on tray no 9} = 15.018 / 1.905 = (x_i / x_h) = 7.9$$

$$\text{Ratio on tray no 10} = 19.16 / 1.905 = 10.05$$

$$\text{Ratio in feed} = 8.2$$

پس تعداد سینی‌های تئوری به صورت زیر خواهد بود.

$$\begin{aligned} \text{Total theoretical trays} &= 11 + 10 - 1 \quad (\text{common feed tray count}) \\ &= 20 \quad \text{not including reboiler} \end{aligned}$$

این تعداد سینی شامل جوش‌آور نمی‌باشد. با در نظر گرفتن جوش‌آور خواهیم داشت.

$$\text{Total theoretical stages} = 20 + 1 \quad (\text{reboiler}) = 21$$

این نتیجه را می‌توان با نتیجه بدست آمده توسط رسم گیلیلاند مقایسه کرد که در این روش تعداد سینی‌ها ۱۹ می‌باشد.

راندمان سینی

با استفاده از دمای متوسط برج $T = 271^\circ F$ و آنالیز خوراک می‌توان ویسکوزیته متوسط را برای خوراک بدست آورد.

Component	x_{iF}	μ (cp)	$\mu \times x_{iF}$	VP	$\alpha_{l/h}$
A	0.456	0.28	0.128	2500	1.94
B	0.0555	0.36	0.020	1290	
C	0.362	0.37	0.134		
D	0.0625	0.40	0.025		
E	0.0625	0.48	0.030		

$$\Sigma = 0.337 \text{ cp}$$

$$\alpha \Sigma (\mu \times x_{iF}) = 1.94 \times 0.337 = 0.654$$

با استفاده از شکل ۴-۲۳ راندمان کلی برج بدست می‌آید.

Drickamer and Bradford curve, $E_o = 46\%$

O'Connell curve, $E_o = 53.8\%$

توصیه می‌شود که از راندمان‌ها متوسط‌گیری شود.

$$E_o = (46 + 53.8) / 2 = 49.6\%$$

تعداد سینی‌های واقعی به صورت زیر خواهد بود.

$$N_{act} = 20 / 0.496 = 40.3 \text{ trays}$$

محل سینی خوراک نیز (از پایین برج) به صورت زیر است.

$$\frac{10}{0.496} = 20.1 \approx 21$$

جهت اطمینان بیشتر بهتر است ۲۲ سینی برای بالای برج، ۱ سینی برای خوراک و ۲۲ سینی برای پایین برج در نظر گرفته شود.

	NO

Rectifying trays	22
Feed	1
Stripping	22

	45

برای تاثیر محل سینی خوراک باید روی سینی‌های ۲۱، ۲۳ و ۲۵ نازل ورودی خوراک داشته باشیم.

منابع

- 1- Akers, W. W. and D. E. Wade, "New Plate-to-Plate Method," *Pet. Ref.* V. 36, p. 199 (1954).

فصل هفتم روش اسمیت^۱

مقدمه

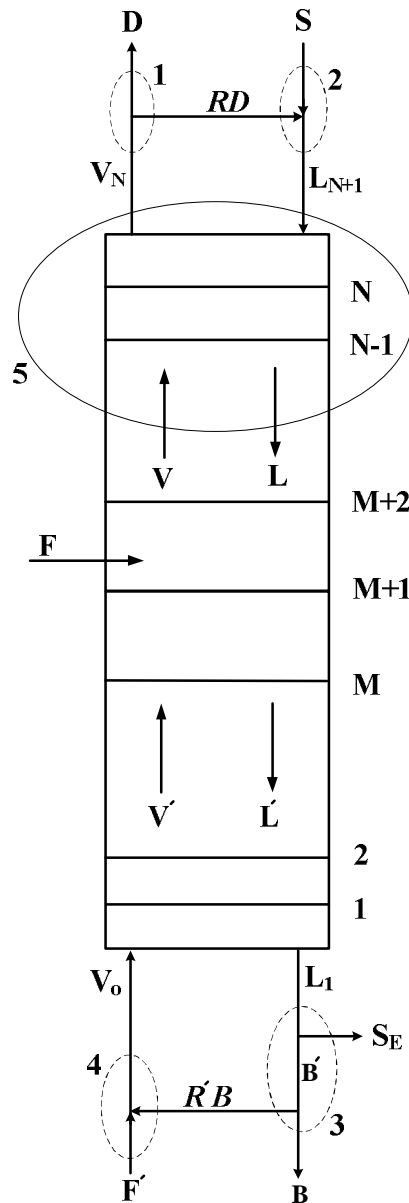
روش‌های میان‌بر روش‌هایی هستند که با استفاده از آنها می‌توان جداسازی مخلوط‌های چندجزئی را در سیستم‌هایی که شامل مراحل تعادلی هستند به طور تقریبی حل نمود. استفاده از روش‌های دقیق مستلزم داشتن اطلاعات دقیق در مورد تعادل اجزاء در فازهای مختلف و همچنین صرف وقت زیاد و استفاده از کامپیوترهایی با سرعت بالا می‌باشد. از طرفی در روش‌های میان‌بر اطلاعات تعادلی زیادی لازم نیست و سرعت این روش‌ها ده‌ها برابر بیشتر از روش‌های دقیق است. گاهی اوقات در یک سیستمی که عملیات جداسازی انجام می‌شود فقط باید عملیات بهینه‌سازی شود. برای این منظور باید پارامترهای جداسازی را بهینه کنیم. در این مورد لازم نیست که از روش‌های دقیق استفاده کنیم چون باید جواب سیستم در حالت‌های مختلف مورد مقایسه قرار گیرند و در استفاده از روش‌های دقیق، زمان اجرای برنامه کامپیوتری بسیار افزایش خواهد یافت در نتیجه برای این حالت‌ها از روش‌های میان‌بر استفاده می‌شود.

روش اسمیت

در این فصل یک روش میان‌بر که توسط اسمیت و برینکلی^۲ [۱۲] ارائه شده مورد بررسی قرار می‌گیرد. این روش را می‌توان روی همه جداسازی‌های چندجزئی اعمال نمود. در این روش میزان بازیابی اجزاء در محصول پایین برج تخمین زده می‌شود. این روش میان‌بر در واقع برای شکل ۷-۱ (که یک فرآیند استخراج مایع-مایع را نشان می‌دهد) بدست آورده شده است. این فرآیند شامل سه خوراک ورودی است (حلال نیز جزء خوراک‌های ورودی محسوب می‌شود) که این برج شامل جریان برگشتی محصول استخراج شده^۳ و جریان برگشتی

1- Smith
2- Smith and Brinkley
3- Extract

پسماند^۱ می‌باشد. در این روش خوراک ممکن است شامل یک یا همه اجزاء باشد. این روش را می‌توان برای هر تعدادی از اجزاء و هر تعدادی از مراحل تعادلی اعمال نمود. فرآیند شکل ۱-۷ یک فرآیند جداسازی جامع را در بر می‌گیرد تا بتوان از روابط آن در فرآیندهای جداسازی ساده‌تر نیز استفاده نمود. فرآیندهای جداسازی ساده‌تر و همچنین انواع مختلف جداسازی‌های چندجزئی غیر از استخراج مایع-مایع در ادامه ذکر خواهد شد که از نتایج این قسمت در مورد بقیه فرآیندها نیز استفاده می‌شود.



شکل ۱-۷ : سیستم استخراج مایع-مایع همراه با سه خوراک، شامل جریان برگشتی محصول استخراج شده و جریان برگشتی محصول پسماند

بدست آوردن رابطه روش میان بر اسمیت - برینکلی

برای بدست آوردن یک معادله برای روش میان بر اسمیت- برینکلی، ابتدا با استفاده از روش اختلاف محدود^۱ غلظت اجزاء مختلف را روی سینی‌های مجاور یکدیگر به هم ارتباط می‌دهیم. با انجام این کار ارتباط بین غلظت‌های اجزاء در یک قسمت از برج بدست می‌آید سپس اگر برج شامل چندین قسمت باشد باید برای هر قسمت معادله آن بدست آورده شود سپس با استفاده از موازنه جرم حول نقطه خوراک این معادلات را با یکدیگر ترکیب نمود تا یک معادله کلی برای کل برج بدست آید. برای اینکه یک معادله ساده برای کل برج بدست آوریم فرض می‌کنیم که دبی فازها و همچنین ضریب توزیع هر جزء (نسبت یک جزء در یک فاز به فاز دیگر) در هر قسمت از برج ثابت باشد. اثبات کامل یک معادله برای این روش در ضمیمه B آورده شده است. در این قسمت خلاصه‌ای از این روش آورده شده است. روش اختلاف محدود توسط مارشال و پیگفورد^۲ [۱۱]، تیلر و تور^۳ [۱۶] و تیلر [۱۵] شرح داده شده است.

با نوشتن موازنه جرم برای هر جزء حول مرحله تعادلی $n+1$ در بالای برج و حذف y_i مربوط به هر مرحله تعادلی و مرتب کردن روابط در قالب اجزاء محدود، برای قسمت بالای برج خواهیم داشت.

$$x_{n+2} - \left(\frac{k_{n+1} V_{n+1}}{L_{n+2}} + \frac{L_{n+1}}{L_{n+2}} \right) x_{n+1} + \frac{k_n V_n}{L_{n+2}} x_n = 0$$

از آنجا که در مسئله فرض بر این است که دبی فازها و همچنین ضریب توزیع هر جزء در هر قسمت ثابت است پس ضرایب معادله اخیر ثابت خواهند بود و می‌توان معادله اخیر را به صورت زیر بر حسب اپراتورها^۴ نوشت.

$$\left[E^2 - \left(\frac{kV}{L} + 1 \right) E + \frac{kV}{L} \right] x_n = 0$$

معادله اخیر دارای دو ریشه 1.0 و $\frac{kV}{L}$ می‌باشد پس جواب معادله اجزاء محدود اخیر به صورت زیر خواهد بود.

$$x_n = c_1 (S_n)^n + c_2 \quad 1-7$$

که c_1 و c_2 ثابت‌های معادله و $S_n = \frac{kV}{L}$ ضریب دفع متوسط برای قست بالای برج است. مقادیر x_n نیز غلظت هر جزء را در فاز سنگین یا فاز استخراج شده که سینی n را ترک می‌نماید نشان می‌دهد و n نشان دهنده شماره سینی یا مرحله تعادلی می‌باشد. چنین رابطه‌ای را نیز می‌توان برای قسمت پایین برج بدست آورد که در زیر نشان داده شده است.

$$x_m = c_3 (S_m)^m + c_4 \quad 2-7$$

-
- 1- Finite difference
 - 2- Marshal and Pigford
 - 3- Tiller and Tour
 - 4- Operators

که $S_m = \frac{k' V'}{L'}$ ضریب دفع متوسط برای بخش پایین برج است و m نیز نشان دهنده شماره سینی است.

مقدار c_1 و c_2 را در معادله ۱-۷ می توان به صورت زیر حذف نمود.

مقدار کل هر جزء در همه ورودی های برج با A نشان داده می شود و به صورت زیر تعریف می شود.

غلظت خوراک با y نشان داده می شود چون ترکیب فاز خوراک شبیه به فاز پسماند است و غلظت فاز پسماند نیز با y نشان داده می شود. حال یک ضریب بازیابی (f) تعریف می شود که نشان می دهد چه کسری از ماده i بازیابی شده است که به صورت زیر نوشته می شود.

$$D y_N = (1 - f)A \quad ۳-۷$$

موازنه جرم حول سیستم ۱ به صورت زیر است.

$$V_N y_N = D y_N + R D y_N = (1 + R) D y_N \quad ۴-۷$$

با جایگذاری رابطه ۳-۷ در رابطه ۴-۷ خواهیم داشت.

$$y_N = \frac{(1 + R)(1 - f)A}{V_N}$$

$$x_N = \frac{(1 + R)(1 - f)A}{k_N V_N}$$

مقدار x_N بدست آمده را در رابطه ۱-۷ جایگزین می کنیم.

$$\frac{(1 + R)(1 - f)A}{k_N V_N} = c_1 (S_n)^N + c_2$$

برای اینکه c_1 و c_2 بدست آیند علاوه بر معادله اخیر ، یک معادله دیگر نیز لازم است برای این منظور حول سینی N یک موازنه جرم نوشته می شود. بدین ترتیب c_1 و c_2 محاسبه می شوند. به طریق مشابه ثابت های c_3 و c_4 نیز در معادله ۲-۷ برای پایین برج بدست می آیند سپس با نوشتن موازنه جرم حول نقطه خوراک ، معادله بالا و پایین برج را به یک معادله تبدیل می کنیم که معادله زیر حاصل می شود.

$$f = \frac{(1 - S_n^{N-M}) + q_S (S_n^{N-M} - S_n) + R(1 - S_n) + h q_{F'} S_n^{N-M} (1 - S_m^M)}{(1 - S_n^{N-M}) + h S_n^{N-M} (1 - S_m^M) + R(1 - S_n) + h [(1 + R') / (1 + gR')] S_m^M S_n^{N-M} (1 - S_m)} \quad ۵-۷$$

که q_S و $q_{F'}$ کسری از کل جرم i ورودی هستند که به ترتیب در حلال ورودی و خوراک پایین برج وجود دارد در ضمن R و R' نیز به ترتیب جریان برگشتی بالا و پایین برج هستند و g ضریب بازیابی حلال در دستگاه بازیابی پایین برج است در صورتی که حلال ها در دستگاه بازیابی پایین برج کاملاً از مواد دیگر جدا شوند مقدار g برای حلال ها برابر 1.0 و برای بقیه اجزاء صفر خواهد بود و مقدار h به ترکیب خوراک و حالت آن بستگی دارد وقتی که خوراک حاوی مواد سبک (در تقطیر فاز بخار و در استخراج فاز پسماند) باشد به صورت زیر تعریف می شود.

$$h = \frac{L}{L'} \frac{1 - S_n}{1 - S_m} \quad ۶-۷$$

و در صورتی که خوراک حاوی مواد سنگین (در تقطیر فاز مایع و در استخراج فاز استخراج شده) باشد به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$h = \frac{k' L}{k L'} \frac{1 - S_n}{1 - S_m} \quad 7-7$$

در تقطیر معادله 6-7 برای زمانی که خوراک بخار باشد و معادله 7-7 برای زمانی که خوراک مایع باشد مورد استفاده قرار می‌گیرد.

پس با استفاده از معادله 5-7 می‌توان مقدار f (میزان بازیابی هر جزء در محصول پایین برج) را بدست آورد. در صورتی که ضریب دفع موثر مشخص باشد استفاده از این معادله در یک مرحله صورت می‌گیرد اما برای بدست آوردن ضریب دفع موثر مستلزم انجام روش سعی و خطا خواهد بود.

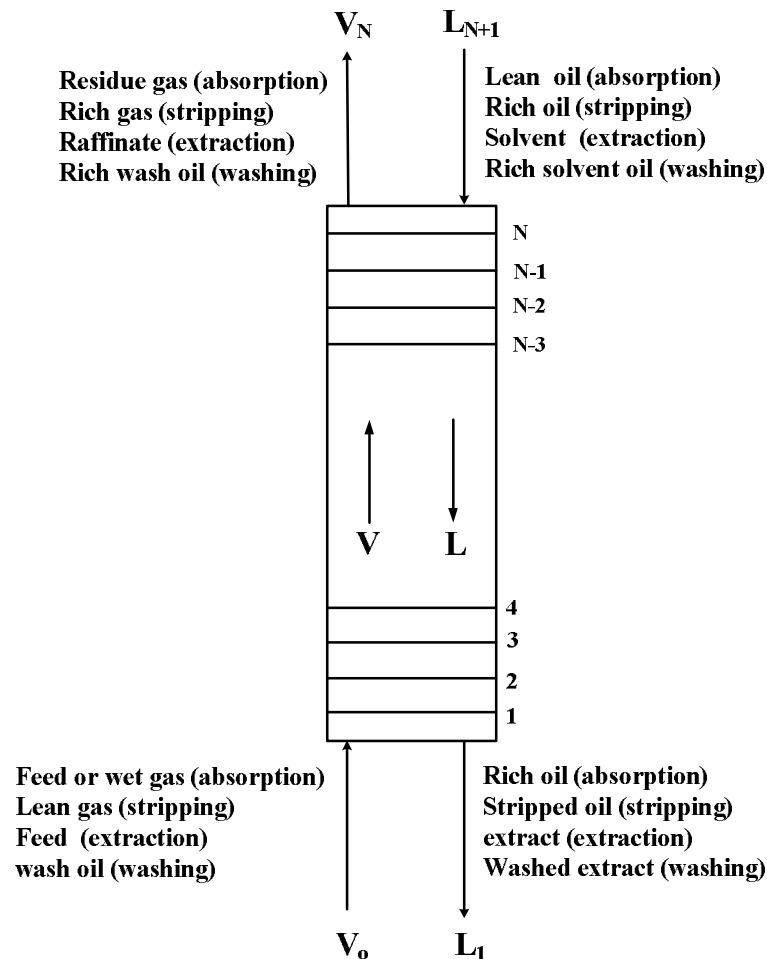
فرآیندهای ساده

معادله 5-7 برای یک سیستم کامل و جامع نوشته شده است تا بتوان آن را برای سیستم‌های ساده‌تر نیز بکار برد. برخی از فرآیندهای جداسازی شامل یک قسمت می‌باشند و در آنها از جریان برگشتی استفاده نشده است از جمله این دستگاه‌های جداسازی می‌توان دستگاه‌های جذب، دفع، استخراج و شستشو¹ را نام برد که شکل کلی این دستگاه‌ها و جریان‌های ورودی و خروجی آنها در شکل 7-2 نشان داده شده است.

در شکل 7-2 شباهت بین ماده جذب کننده در فرآیند جذب و حلال در فرآیند استخراج نشان داده شده است که ماده جذب کننده باعث جذب یک یا چند جزء از فاز خوراک شده و حلال در فرآیند استخراج نیز باعث استخراج یک یا چند جزء از فاز خوراک می‌شود. در فرآیند جذب، خوراک به صورت بخار و در فرآیند استخراج خوراک به صورت مایع است اما در هر دو مورد انتقال جرم از فاز خوراک به سمت فاز دیگر می‌باشد در صورتی که غلظت اجزاء سبک در خوراک کم باشد جهت انتقال جرم برعکس خواهد شد که فرآیندهای جذب و استخراج به ترتیب به فرآیندهای دفع و شستشو تبدیل خواهند شد.

یک تفاوت ممکن است بین فرآیندهای جذب و دفع با فرآیندهای استخراج و شستشو وجود داشته باشد. در فرآیندهای جذب و دفع فاز حلال، مایع است و از بالا به پایین حرکت می‌کند اما برای حلال در فرآیندهای استخراج و شستشو یکی از دو حالت زیر بوجود می‌آید.

- ۱- فاز حلال دانسیته بیشتری نسبت به فاز پسماند دارد و از بالا به سمت پایین حرکت می‌کند.
- ۲- فاز حلال دانسیته کمتری نسبت به فاز پسماند دارد و از پایین به سمت بالا حرکت می‌کند.



شکل ۷-۲: شکل کلی فرآیندهایی شامل مراحل تعادلی با یک خوراک و بدون جریان برگشتی به برج

برای انجام محاسبات از این تفاوت چشم‌پوشی می‌شود و جریان‌های ورودی و خروجی دقیقاً مانند شکل ۷-۲ در نظر گرفته می‌شود و شماره‌گذاری سینی‌ها نیز باید به همین ترتیب باشد. در نتیجه اگر بخواهیم معادله ۷-۵ را برای شکل ۷-۲ بکار ببریم باید $M = R = R' = q_{F'} = 0$ و همچنین $S_n = S_m$ قرار داده شود که در نهایت معادله ۷-۵ به معادله زیر تبدیل خواهد شد که به معادله کرمسر [۸] معروف است.

$$f = \frac{(1 - S^N) + q_S (S^N - S)}{1 - S^{N+1}} \quad ۸-۷$$

که $S = \frac{kV}{L}$ ضریب دفع و q_S کسری از جزء i است که توسط حلال (در فرآیند استخراج) یا مایع جذب کننده (در فرآیند جذب) وارد فرآیند می‌شود. در صورتی که یک جزء فقط توسط خوراک وارد شود $q_S = 0$ خواهد بود و معادله ۸-۷ به صورت زیر در می‌آید.

$$f = \frac{1 - S^N}{1 - S^{N+1}} \quad ۹-۷$$

و در صورتی که یک جزء فقط توسط فاز حلال وارد شود $q_s = 1$ خواهد بود و معادله ۷-۸ به صورت زیر در می‌آید.

$$f = \frac{1-S}{1-S^{N+1}} \quad ۱۰-۷$$

در صورتی که $S = 1.0$ باشد باید از سمت راست این معادلات مشتق گرفته شود و مشتق آنها برابر f قرار داده شود مثلاً در صورتی که $S = 1.0$ باشد معادله ۷-۸ به صورت زیر خواهد شد.

$$f = \frac{N}{N+1}$$

تقطیر

معادله ۷-۵ را می‌توان برای یک برج تقطیر مجهز به کندانسور کلی و جوش‌آور کلی مورد استفاده قرار داد برای این منظور باید پارامترهای زیر مساوی صفر قرار گیرند.

$$q_s = q_{F'} = R' = g = 0$$

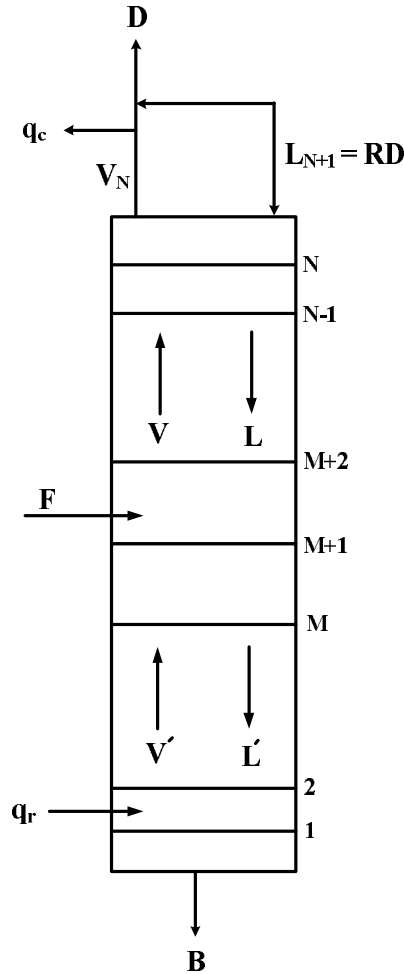
با قرار دادن موارد اخیر در رابطه ۷-۵ خواهیم داشت.

$$f = \frac{(1-S_n^{N-M}) + R(1-S_n)}{(1-S_n^{N-M}) + R(1-S_n) + h S_n^{N-M} (1-S_m^{M+1})} \quad ۱۱-۷$$

معادله اخیر را می‌توان برای شکل ۷-۳ اعمال نمود با مقایسه شکل ۷-۳ و شکل ۷-۱ متوجه خواهیم شد که پارامترهای زیر صفر می‌باشند.

$$S = F' = R' = S_E = 0$$

همچنین در شکل ۷-۳ با دو پیکان حرارت ورودی به جوش‌آور و حرارت خروجی از کندانسور نشان داده شده است.



شکل ۷-۳: برج تقطیر مجهز به کندانسور کلی و جوش‌آور کلی

البته معادله ۷-۱۱ را می‌توان برای برج تقطیر مجهز به جوش‌آور جزئی نیز بکار برد با این شرط که جوش‌آور جزئی به عنوان سینی اول پایین برج محسوب شود و در شماره‌گذاری سینی‌ها آورده شود همچنین در صورتی که برج مجهز به کندانسور جزئی باشد در شماره‌گذاری یک سینی به سینی‌های برج اضافه شود. برای حل مسائل برج‌های تقطیر به این روش باید مشخصات زیر معلوم باشد.

۱- تعداد کل مراحل تعادلی (N)

۲- تعداد مراحل تعادلی که زیر سینی خوراک واقع می‌شوند. (M)

۳- ماکزیمم دبی بخار در یک قسمت از برج (V_{Max}) یا نسبت جریان برگشتی به برج (R)

۴- دبی محصول بالای برج (D)

وقتی که مشخصات بالا معلوم باشد استفاده از معادله ۷-۱۱ معمول است. وقتی که دبی محصول بالای برج (D)، دبی خوراک و دبی بخار در یک قسمت از برج (یا جریان برگشتی به برج) معلوم باشد با فرض ثابت بودن دبی مایع و بخار در هر قسمت از برج می‌توان دبی مایع و بخار را در قسمت‌های مختلف برج بدست

آورد و از آنجا که ضرایب دفع در بالا و پایین برج برابر $\frac{kV}{L}$ هستند برای محاسبه این مقادیر باید مقدار k را بدست آورد. در صورتی که بتوان محلول را ایده‌آل فرض نمود مقادیر k فقط تابعی از دما و فشار برج خواهند بود و چون افت فشار هر سینی ناچیز است می‌توان مقدار k در برج را تابعی از دما در نظر گرفت پس برای بدست آوردن k و در نهایت محاسبه ضرایب دفع ابتدا باید توزیع دما در برج را بدست آوریم. برای این منظور ابتدا باید خوراک را به طور فرضی بین بالا و پایین برج توزیع کنیم سپس با استفاده از محاسبات نقطه شبنم برای محصول بالای برج و محاسبات نقطه حباب برای محصول پایین برج می‌توان دمای بالا و پایین برج را بدست آورد حال برای تخمین دمای سینی خوراک دو راه زیر پیشنهاد می‌شود.

۱- برای خوراک می‌توان محاسبات تبخیر ناگهانی را انجام داد تا دمای سینی خوراک بدست آید.
 ۲- فرض می‌کنیم دما از پایین تا بالای برج به صورت خطی افزایش می‌یابد و با استفاده از این فرض دمای سینی خوراک را بدست می‌آوریم.

برای حل مسئله دبی مایع و بخار را در هر قسمت از برج ثابت در نظر می‌گیریم و مقادیر k را برای بالای برج با استفاده از دمای متوسط بالای برج و سینی خوراک و مقادیر k را برای پایین برج با استفاده از دمای متوسط پایین برج و سینی خوراک بدست می‌آوریم. در طول محاسبات دمای بالا و پایین برج را تغییر نمی‌دهیم پس ضریب جذب و محاسبات، وابسته به دمای سینی خوراک است. مراحل حل مسئله به صورت سعی و خطا می‌باشد که به صورت زیر است.

۱- دمای بالا و پایین برج به ترتیب با استفاده از محاسبات نقطه شبنم برای محصول فرضی بالای برج و محاسبات نقطه حباب برای محصول فرضی پایین برج بدست می‌آید.

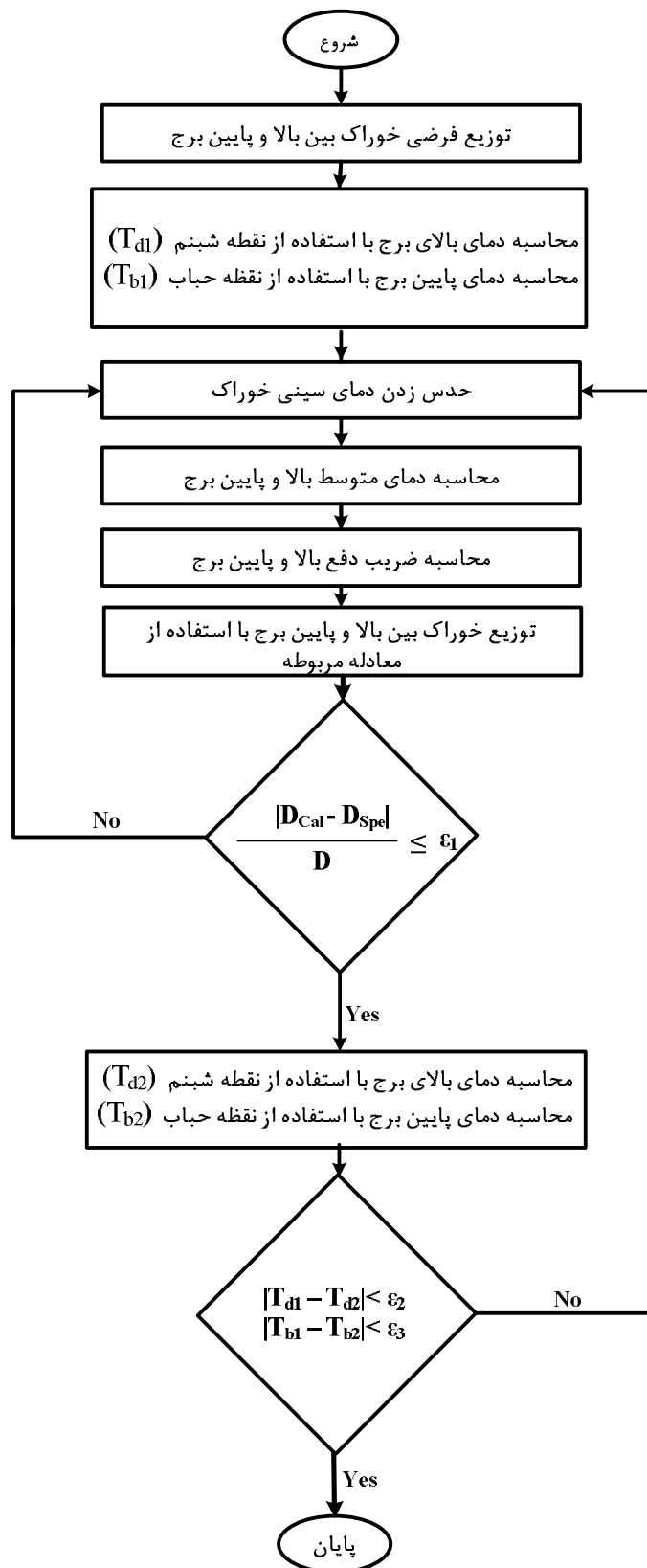
۲- دمای سینی خوراک با یکی از دو روش ذکر شده حدس زده می‌شوند.

۳- با استفاده از رابطه ۷-۱۱ توزیع محصولات بین بالا و پایین برج بدست می‌آید.

۴- در صورتی که با استفاده از توزیع محصولات، دبی محصول بالای برج با دبی مشخص شده در مسئله برابر نباشد باید به مرحله ۲ برگشته و محاسبات را با دمای دیگری برای سینی خوراک انجام می‌دهیم. در صورتی که دبی محصول بالای برج با دبی مشخص شده در مسئله برابر باشد به مرحله بعد می‌رویم.

۵- با استفاده از توزیع محصولات دمای بالا و پایین برج بدست آورده می‌شود که باید با دمای حدس زده شده برای بالا و پایین برج برابر باشد در صورتی که دمای حدس زده شده برای بالا و پایین با مقادیر بدست آمده یکی نباشند با دماهای بدست آمده به مرحله ۱ برمی‌گردیم و محاسبات را تکرار می‌کنیم.

فلوچارت حل مسئله در شکل ۷-۴ نشان داده شده است.



شکل ۷-۴: فلوچارت حل مسائل تقطیر با استفاده از روش اسمیت

این روش نتایج قابل قبولی دارد و نتایج این روش بهتر از بقیه روش‌های میان‌بر است چون توزیع دما در طول برج نیز در نظر گرفته شده می‌شود. جواب این روش را می‌توان به عنوان حدس اولیه برای روش‌های پیچیده بکار برد تا مسئله در زمان کوتاه‌تری حل شود.

مثال ۷-۱: یک برج جداکننده نرمال بوتان-ایزوپنتان جهت پاره‌ای تعمیرات متوقف شده است و خوراک آن به یک برج دارای ۱۱ سینی از نوع کلاهی^۱ که مجهز به جوش‌آور جزئی است فرستاده می‌شود. تجربه نشان داده است که یازده سینی این برج همراه با جوش‌آور تعادلی جزئی مانند ۱۰ مرحله ایده‌آل عمل می‌کنند و ماکزیمم مقدار بخار در این برج می‌تواند ۱.۷۵ برابر خوراک باشد کندانسور در فشار 120 Psia کار می‌کند و خوراک با ترکیب زیر در نقطه حباب وارد میانه برج می‌شود.

Component	$F x_F$
C ₃	5
i-C ₄	15
n-C ₄	25
i-C ₅	20
n-C ₅	35

نسبت محصول بالای برج به خوراک $D/F = 0.489$ است می‌خواهیم غلظت مولی $i-C_5$ در محصول بالای برج کمتر از ۰.۷٪ و غلظت مولی $n-C_4$ در محصول پایین برج کمتر از ۰.۳٪ باشد آیا این درجه از خلوص با نسبت محصول بالای برج به خوراک $D/F = 0.489$ امکان‌پذیر است؟

حل: از افت فشار در طول برج صرف‌نظر می‌شود و می‌توان فشار کل برج را 120 Psia در نظر گرفت بدین ترتیب با داشتن دماهای هر قسمت می‌توان مقادیر k را با استفاده از نمودار دیپریستر بدست آورد. در صورتی که دبی مایع و بخار در طول هر قسمت از برج ثابت در نظر گرفته شود دبی هر قسمت با فرض $F = 100 \text{ grmole/hr}$ به صورت زیر خواهد بود.

<i>Top section</i>	<i>Bottom section</i>
$D = (0.489)(100) = 48.9$	$B = 100 - 48.9 = 51.1$
$V = (1.75)(100) = 175$	$V' = V = 175$
$L = 175 - 48.9 = 126.1$	$L' = L + (q \times F) = 226.1$
$\frac{L}{V} = 1.388$	$\frac{V'}{L'} = 0.7739$
$\frac{L}{L'} = \frac{126.1}{226.1} = 0.5577$	
$R = \frac{126.1}{48.9} = 2.579$	

از آنجا که در مسئله ذکر شده که خوراک در میانه برج وارد می‌شود $M = 5$ می‌باشد.

خوراک را به طور فرضی بین بالا و پایین برج توزیع می‌کنیم در توزیع خوراک سعی می‌کنیم که غلظت $n-C_4$ و $i-C_5$ نزدیک به محدودیت‌های مسئله باشد.

Component	$F x_F$	$D x_D$	$B x_B$	x_D	x_B
C ₃	5	5.0	0.0	0.102	0.0
i-C ₄	15	14.5	0.5	0.296	0.010
n-C ₄	25	23.5	1.5	0.481	0.020
i-C ₅	20	3.4	16.6	0.070	0.325
n-C ₅	35	2.5	32.5	0.051	0.636
	100	48.9	51.1	1.000	1.000

با انجام محاسبات نقطه شبنم برای محصول بالا برج ، دمای $165^\circ F$ و با انجام محاسبات نقطه حباب برای محصول پایین برج ، دمای $236^\circ F$ بدست می‌آید از آنجا که در مسئله ذکر شده که خوراک در نقطه حباب وارد برج می‌شود برای بدست آوردن دمای سینی خوراک محاسبات نقطه حباب را برای خوراک انجام می‌دهیم که دمای $185^\circ F$ بدست می‌آید. برای بدست آوردن مقادیر k برای بالای برج و مقادیر k' برای پایین برج باید دمای متوسط این قسمت‌ها را بدست آوریم.

$$\frac{165 + 185}{2} = 175^\circ F \quad , \quad \frac{185 + 236}{2} = 210^\circ F$$

حال باید ضرایب دفع برای قسمت‌های بالا و پایین برج محاسبه شوند و با استفاده از معادله ۷-۱۱ توزیع خوراک بین بالا و پایین برج انجام شود که این مرحله در جدول ۷-۱ نشان داده شده است. در این قسمت h از رابطه ۷-۷ محاسبه می‌شود چون خوراک به صورت مایع اشباع وارد برج می‌شود.

جدول ۷-۱ : محاسبات حدس اول برای مثال ۷-۱

Component	K_{176}	S_n	K_{210}	S_m	$\frac{K'}{K}$	$\frac{1-S_n}{1-S_m}$	h
C ₃	3.03	4.21	3.83	2.96	1.26	1.63	1.15
i-C ₄	1.53	2.12	2.07	1.60	1.35	1.87	1.41
n-C ₄	1.17	1.62	1.62	1.25	1.38	2.46	1.90
i-C ₅	0.575	0.798	0.825	0.638	1.43	0.558	0.447
n-C ₅	0.485	0.673	0.720	0.557	1.48	0.738	0.611

Component	S_n^5	$1-S_n^5$	$R(1-S_n)$	Numer-ator	S_m^6	$h S_n^5(1-S_m^6)$
C ₃	1290	-1289	-8.27	-1297	700	-1037000
i-C ₄	43	-42	-2.90	-44.9	17.3	-987.7
n-C ₄	11.6	-10.6	-1.61	-12.2	3.81	-61.7
i-C ₅	0.323	0.677	0.521	1.20	0.069	0.1344
n-C ₅	0.140	0.860	0.843	1.70	0.036	0.0826

Component	Denominator	f	$B x_B$	$D x_D$	x_B	x_D
C3	-1038000	0.00125	0.006	4.994	0.000	0.114
i-C4	-1032	0.0435	0.625	14.375	0.011	0.328
n-C4	-73.9	0.165	4.13	20.87	0.074	0.476
i-C5	1.33	0.899	18.0	2.0	0.320	0.046
n-C5	1.79	0.953	33.4	1.6	0.595	0.036
			56.16	43.83	1.000	1.000

دبی محصول بالای برج محاسبه شده (D_{Cal}) کمتر از میزان مشخص شده در مسئله ($D_{Spec} = 48.9$) است پس میزان بخار در قسمت بالای برج به صورت زیر خواهد بود.

$$V_N = (1 + R)D = (3.579)(43.8) = 156.8$$

که میزان بخار بدست آمده کمتر از ظرفیت برج ($V = 175$) است. پس باید توزیع دمایی در برج افزایش یابد. در این مسئله چون مقدار دبی محصول بالای برج محاسبه شده (D_{Cal}) خیلی کمتر از میزان مشخص شده در مسئله است نمی‌توان با استفاده از غلظت‌های بدست آمده محاسبات نقطه شبنم را نوشت زیرا غلظت‌های بدست آمده از واقعیت دور هستند و چون محصول سبک است دمای بدست آمده از $165^\circ F$ کمتر خواهد بود. پس برای افزایش توزیع دمایی در برج بهتر است دمای بالا و پایین برج ثابت نگه داشته شوند و فقط دمای سینی خوراک تغییر کند تا زمانی که دبی محصول بالای برج محاسبه شده و میزان دبی محصول بالای برج مشخص شده به هم نزدیک شوند.

در صورتی که دمای سینی خوراک $210^\circ F$ در نظر گرفته شود دمای متوسط بالا و پایین برج به ترتیب $187.5^\circ F$ و $223^\circ F$ خواهد شد که با استفاده از این دماها، توزیع خوراک بین محصول بالا و پایین برج به صورت زیر خواهد شد.

Component	f	B x_B	D x_D	x_B	x_D
C ₃	0.000789	0.001	4.996	0.000	0.101
i-C ₄	0.0232	0.348	14.65	0.007	0.296
n-C ₄	0.0900	2.25	22.75	0.045	0.459
i-C ₅	0.8125	16.25	3.75	0.322	0.076
n-C ₅	0.9031	31.61	3.39	0.627	0.067
		50.41	49.54	1.000	1.000

در این مرحله دبی محصول بالای برج محاسبه شده $D_{Cal} = 49.54$ است که به میزان مشخص شده در مسئله نزدیک است و می‌توان محاسبات نقطه شبنم و حباب را به ترتیب برای بالا و پایین برج انجام داد. نتیجه این محاسبات برای بالای برج $163.5^\circ F$ و برای پایین برج $234^\circ F$ خواهد بود که از دمای سینی خوراک فرض شده ($210^\circ F$) برای بدست آوردن متوسط دمای بالا و پایین برج استفاده می‌شود که به ترتیب $186.7^\circ F$ و $222^\circ F$ خواهد بود. با استفاده از دمای متوسط بدست آمده، توزیع خوراک بین محصول بالا و پایین برج را انجام می‌دهیم که نتیجه محاسبات به صورت زیر خواهد بود. اعداد درون پرانتز مربوط به محاسبات سینی به سینی با استفاده از روش تیلی-گدس¹ است که برای مقایسه آورده شده است.

1- Thiele-Geddes

Component	f	B x _B		D x _D	
C ₃	0.000825	0.004	(0.002)	4.996	(4.998)
i-C ₄	0.0253	0.379	(0.330)	14.6	(14.6)
n-C ₄	0.0964	2.41	(1.90)	22.6	(23.1)
i-C ₅	0.8216	16.4	(16.4)	3.57	(3.56)
n-C ₅	0.9098	31.8	(32.4)	3.16	(2.61)
		51.0		48.9	

غلظت مولی نرمال بوتان ($n-C_4$) در محصول پایین برج ۴/۷٪ است که از میزان مشخص شده در مسئله (۳٪) تجاوز کرده است همچنین غلظت مولی ایزوپنتان ($i-C_5$) در محصول بالای برج ۷/۳٪ است که از میزان مشخص شده در مسئله (۷٪) تجاوز کرده است. پس استفاده از برج کوچکتر با دبی محصول بالای برج $D = 48.9$ قادر به جداسازی خواسته شده در مسئله نیست. با افزایش دبی محصول بالای برج، میزان نرمال بوتان در محصول پایین برج کاهش می‌یابد اما میزان ایزوپنتان در محصول بالای برج نیز افزایش می‌یابد و برعکس با کاهش دبی محصول پایین برج، میزان ایزوپنتان موجود در محصول بالای برج کاهش می‌یابد اما میزان نرمال بوتان در محصول پایین برج نیز افزایش خواهد یافت.

غلظت محصول بدست آمده با استفاده از این روش همخوانی بسیار خوبی با روش‌های پیچیده دارد همچنین دمای بالا و پایین برج بدست آمده در روش اسمیت به ترتیب $163.5^\circ F$ و $234^\circ F$ است که در مقایسه با دمای بالا و پایین برج بدست آمده در روش سینی به سینی که به ترتیب $165.7^\circ F$ و $234^\circ F$ است نتیجه قابل قبولی دارد. در روش اسمیت ممکن است دمای سینی خوراک خیلی دقیق نباشد. دمای بدست آمده برای سینی خوراک در روش اسمیت برابر $202.3^\circ F$ است در صورتی که در محاسبات سینی به سینی $210^\circ F$ بدست آمده است.

منابع

- 1- Alders, L.: "Liquid-liquid Extraction," Elsevier Publishing Company, Amsterdam, 1955.
- 2- Brancker, A. V., T. G. Hunter, and A. W. Nash, *J. Phys. Chem.*, 44, 683 (1940).
- 3- Edmister, W. C., *Ind. Eng. Chem.*, 35, 837 (1943).
- 4- Edmister, W. C., *Trans. AIChE.*, 42, 15, 403, 575 (1946).
- 5- Edmister, W. C., *Chem. Eng. Progr.*, 44, 615 (1948).
- 6- Edmister, W. C., *AIChE J.*, 3, 165 (1957).
- 7- Horton, G., and W. B. Franklin, *Ind. Eng. Chem.*, 32, 1384 (1940).
- 8- Kremser, A., *Natl. Petrol. News*, 22 (May 21, 1930).
- 9- Landes, S. H., and F. W. Bell, *Petrol. Refiner*, 39 (6) (1960).

- 10- Lyster, W. N., S. L. Sullivan, Jr., D. S. Billingsley, and C. D. Holland, *Petrol. Refiner*, 38 (6), 221 (1959); 38(7),151 (1959); 38(10), 139 (1959).
- 11- Marshall, W. R., and R. L. Pigford : “The Application of Differential Equations to Chemical Engineering Problems,” University of Delaware, Network, Del., 1947.
- 12- Smith, B. D., and W. K. Brinkley , *AIChE. J.*, 6, 446 (1960).
- 13- Smith, J. C., *Ind. Eng. Chem.*, 36, 68 (1944).
- 14- Souders, M., Jr., and G. G. Brown , *Ind. Eng. Chem.*, 24, 519 (1932).
- 15- Tiller, F. M. , *Chem. Eng. Progr.*, 45, 391 (1949).
- 16- Tiller, F. M., and R. S. Tour , *Trans. AIChE.*, 40, 317 (1944).

مسائل

۱- خوراکی شامل ۳۰٪ مولی پروپان (C_3) ، ۳۰٪ مولی نرمال بوتان ($n - C_4$) و ۴۰٪ مولی نرمال پنتان ($n - C_5$) وارد میانه یک برج تقطیر می‌شود. برج تقطیر مجهز به کندانسور کلی و پنج مرحله تعادلی (شامل جوش‌آور جزئی) می‌باشد. فشار کندانسور 100 Psia است و می‌توان از افت فشار مراحل تعادلی صرف‌نظر نمود ماکزیمم ظرفیت عبور بخار در برج $(V_N/F) = 2.0$ و نسبت محصول بالای برج به خوراک $D/F = 0.3$ می‌باشد در صورتی که برج در ماکزیمم ظرفیت خود کار کند چه فرضیات دیگری لازم است تا بتوان توزیع اجزاء بین بالا و پایین برج را با استفاده از معادله ۳-۸ بدست آورد. سپس توزیع اجزاء را با اعمال این فرضیات بدست آورید.

۲- پارازایلین توسط کریستالیزاسیون در دمای پایین از مخلوط زایلین جداسازی می‌شود غلظت محصول پارازایلین تولیدی از این روش ۹۸٪ است و محلول خروجی پس از فیلتراسیون شامل ۷٪ پارازایلین می‌باشد جهت بازیابی بیشتر جریان خروجی از کریستالیزاسیون ، می‌توان ارتوزایلین را توسط تقطیر جداسازی نمود برای اینکه ۹۸٪ از پارازایلین بازیابی شود مقدار بهینه D/F را برای برج با مشخصات زیر بدست آورید.

Number of plates	50
Reboiler	Fired furnace
Feed location	20 th plate
V_N/F Maximum	4.75
Plate efficiency	80%
Operating pressure	3atm
Tray pressure drop	Neglect
condenser	Total

غلظت مخلوط زایلین به صورت زیر می‌باشد.

Component	Mole %
Toluene	1.0
Ethylbenzene	20.8
Paraxylene	18.0
Metaxylene	39.0
Orthoxylene	20.0
C ₉₊	1.2
	100

تذکر : جهت بدست آوردن مقدار بهینه D/F ، مقادیر ۰/۸۶ ، ۰/۹ و ۰/۹۴ را امتحان نمایید.

فصل هشتم روش لویس-ماتسون^۱

مقدمه

یک روش توسط لویس و ماتسون [۱۳] ارائه شده که از آن می‌توان برای بدست آوردن تعداد مراحل تعادلی و جریان برگشتی مورد نیاز استفاده نمود. در این روش دبی مایع و بخار در هر قسمت از برج ثابت در نظر گرفته شده است. با اعمال این فرض به موازنه انرژی در طول برج نیازی نیست و فقط باید موازنه جرم و معادله تعادل را همزمان حل کنیم.

روش لویس-ماتسون

معادلات ارائه شده توسط لویس و ماتسون شبیه به معادلات ارائه شده توسط سورل^۲ برای سیستم دوجزئی می‌باشد. در روش لویس-ماتسون از دبی اجزاء به جای کسر مولی آنها استفاده می‌شود. چون در تقطیر چندجزئی کسر مولی یک جزء نمی‌تواند بیانگر کسر مولی بقیه اجزاء باشد. با توجه به اینکه دبی مایع و بخار در هر قسمت از برج ثابت است موازنه جرم کلی برای شکل ۸-۱ به صورت زیر می‌باشد.

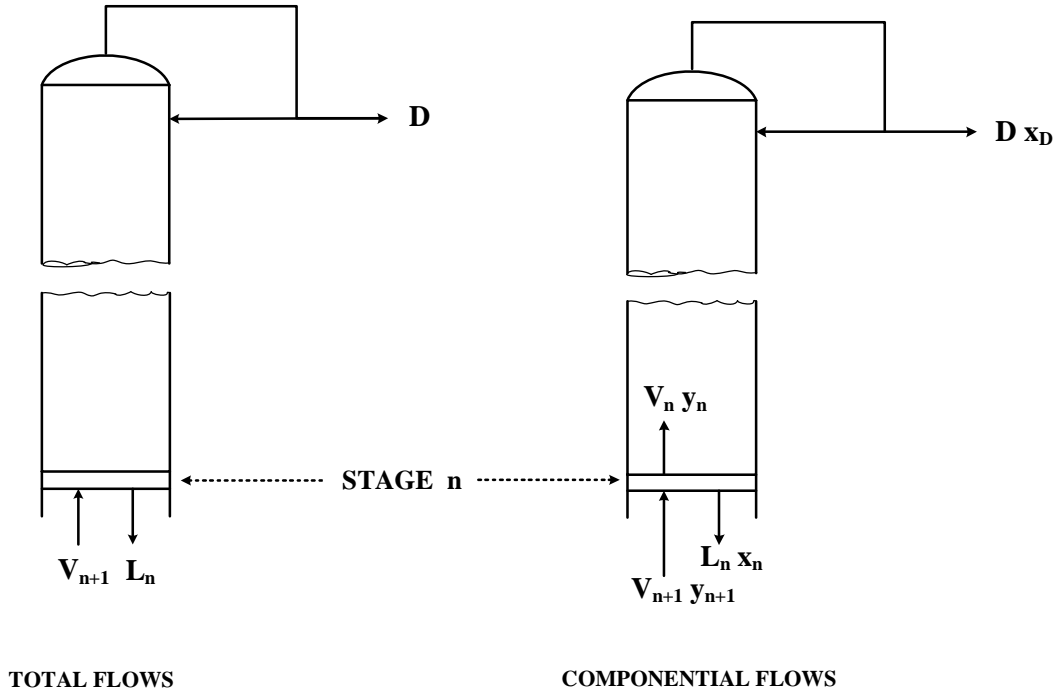
$$V = L + D \quad ۱-۸$$

موازنه جرم برای هر یک از اجزاء و معادله تعادلی مربوط به هر جزء به صورت زیر است.

$$V y_{n+1} = L x_n + D x_D \quad ۲-۸$$

$$y = k_n x_n \quad ۳-۸$$

1- Lewis-Matheson
2- Sorel



شکل ۸-۱ : موازنه جرم برای قسمت بالای برج

شماره سینی با اندیس n نشان داده می‌شود که از بالا به پایین شماره‌گذاری شده است. k_n مقادیر ثابت تعادل k روی سینی n برای جزء مورد نظر است. در هر سینی مجموع کسر مولی‌های فاز بخار برابر یک می‌باشد.

$$\sum y_n = \sum k_n x_n = 1.0 \quad ۴-۸$$

گاهی اوقات معادلات موازنه جرم و تعادل به صورت بالا نوشته می‌شود، اما استفاده از دبی اجزاء متداول‌تر از کسر مولی اجزاء می‌باشد. دبی هر جزء در فاز بخار، فاز مایع و محصول خروجی به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$V \times y = v$$

$$L \times x = l$$

$$D \times x_D = d$$

در صورتی که با استفاده از تعاریف بالا، معادلات ۲-۸ و ۳-۸ را بر حسب دبی اجزاء مرتب کنیم معادلات زیر حاصل می‌شود.

$$v_{n+1} = l_n + d \quad ۵-۸$$

$$v_n = k_n \frac{V}{L} l_n \quad ۶-۸$$

و معادله ۴-۸ به صورت زیر در می‌آید.

$$\sum v_n = V \quad ۷-۸$$

$$\sum l_n = L \quad 8-8$$

دبی کلی مایع و بخار برای پایین برج به ترتیب با L' و V' نشان داده می‌شود و دبی هر جزء در فاز بخار ، فاز مایع و محصول خروجی به صورت زیر نشان داده می‌شود.

$$V'y = v' \quad , \quad L'x = l' \quad , \quad Bx_B = b$$

موازنه کلی برای پایین برج به صورت زیر است.

$$L' = V' + B \quad 9-8$$

موازنه جرم برای هر یک از اجزاء و معادله تعادل مربوط به هر جزء به صورت زیر می‌باشد.

$$l'_{n+1} = v'_n + b \quad 10-8$$

$$v'_n = k_n \frac{V'}{L'} l'_n \quad 11-8$$

برای هر مرحله تعادلی مجموع دبی اجزاء در فاز بخار برابر با دبی بخار و مجموع دبی اجزاء در فاز مایع برابر با دبی مایع خواهد بود.

$$\sum v'_n = V' \quad 12-8$$

$$\sum l'_n = L' \quad 13-8$$

اندیس n نشان دهنده شماره سینی می‌باشد.

انتخاب اجزاء کلیدی^۱

قبل از حل هر مسئله تقطیر چندجزئی ابتدا باید اجزاء کلیدی مشخص شوند. اجزاء کلیدی به اجزائی اطلاق می‌شود که بین آنها جداسازی انجام می‌شود برای مثال در بنزین ، وجود بوتان مطلوب است و نباید پروپان در آن وجود داشته باشد پس بنزین خام که وارد برج تقطیر می‌شود باید در خروجی عاری از پروپان باشد در این تقطیر قسمت عمده پروپان از بالای برج خارج می‌شود و بوتان همراه با بنزین در پایین برج ظاهر خواهد شد. در این مثال پروپان و بوتان اجزاء کلیدی هستند.

البته ممکن است انتخاب اجزاء کلیدی به این سادگی نباشد مثلاً هیدروکربن‌های دارای چهار کربن موجود در بنزین شامل بوتان‌ها و پنتان‌ها می‌باشند که دارای دمای جوش نزدیک به هم هستند. گاهی اوقات مجموعه‌ای از اجزاء به عنوان جزء کلیدی در نظر گرفته می‌شوند و در مواردی که جداسازی همه اجزاء مد نظر است یکی از اجزاء به عنوان جزء کلیدی انتخاب می‌شود.

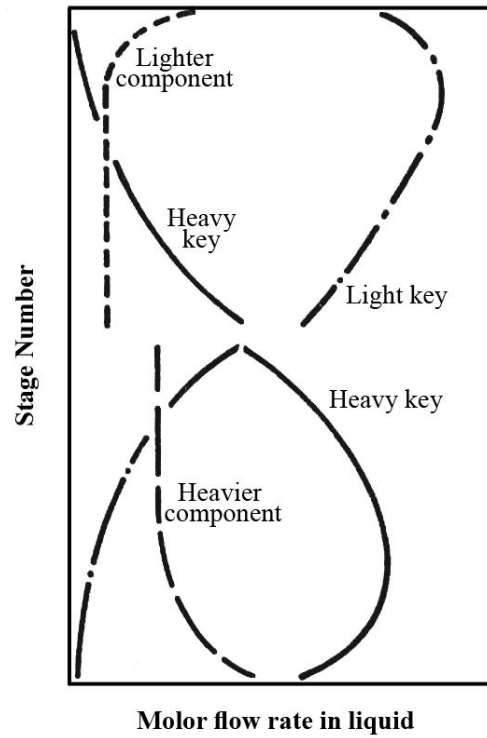
روش حل

جهت شروع محاسبات سینی به سینی لازم است که غلظت محصول بالا و پایین برج را داشته باشیم سپس با اعمال محاسبات سینی به سینی می‌توان غلظت همه سینی‌ها را بدست آورد. وقتی که غلظت محصول بالای برج و جریان برگشتی معلوم باشد عملاً دبی اجزاء در بخار خروجی از بالای برج را می‌توان با اعمال موازنه

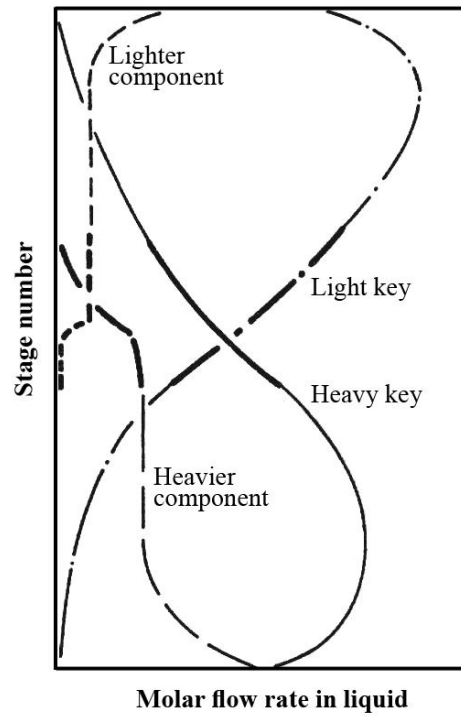
جرم حول کندانسور بدست آورد. برای بالای برج وقتی دبی اجزاء در بخار خروجی مشخص باشد با اعمال معادلات ۸-۶ و ۸-۸ برای همه اجزاء می‌توان غلظت مایع روی سینی اول را بدست آورد سپس بخار خروجی از سینی دوم را می‌توان با اعمال معادله ۸-۵ روی همه اجزاء بدست آورد. این روند را برای بقیه سینی‌ها نیز انجام می‌دهیم تا به سینی خوراک برسیم. به طور مشابه برای پایین برج، غلظت محصول خروجی از برج برابر با غلظت مایع خروجی از آخرین سینی است. از آنجا که دبی مایع در هر قسمت از برج ثابت در نظر گرفته می‌شود دبی اجزاء در مایع خروجی از آخرین سینی معلوم است و با اعمال معادلات ۸-۱۱ و ۸-۱۲ برای همه اجزاء می‌توان غلظت بخار خروجی از سینی آخر را بدست آورد سپس با اعمال معادله ۸-۱۰ برای همه اجزاء می‌توان غلظت مایع خروجی از سینی بالاتر را بدست آورد. این روند را برای بقیه سینی‌ها نیز انجام می‌دهیم تا به سینی خوراک برسیم.

برای حدس اولیه فرض می‌کنیم که اجزاء سنگین‌تر از اجزاء کلیدی در محصول بالای برج وجود نداشته باشند و محاسبات را از سینی بالا به سمت سینی خوراک انجام می‌دهیم همچنین فرض می‌کنیم که اجزاء سبک‌تر از اجزاء کلیدی نیز در محصول پایین برج وجود نداشته باشند و محاسبات را از سینی پایین برج به سمت سینی خوراک ادامه می‌دهیم.

محاسبات سینی به سینی برای بالای برج که از سینی بالا به سمت سینی خوراک انجام می‌شود تا جایی ادامه می‌یابد که نسبت اجزاء کلیدی در بخار ورودی به آخرین سینی بالای برج برابر با نسبت اجزاء کلیدی در قسمت بخار خوراک شود در صورتی که خوراک کاملاً مایع باشد باید فاز بخاری که با خوراک در حال تعادل است ملاک سنجش باشد. محاسبات سینی به سینی برای پایین برج که از سینی پایین برج به سمت سینی خوراک انجام می‌شود تا جایی ادامه می‌یابد که نسبت اجزاء کلیدی در مایع ورودی به بالاترین سینی این بخش برابر با نسبت اجزاء کلیدی در قسمت مایع خوراک شود. در صورتی که خوراک کاملاً بخار باشد باید فاز مایعی که با خوراک در حال تعادل است ملاک سنجش باشد. همانطور که در شکل ۸-۲ نشان داده شده است نتایج محاسبات سینی به سینی برای بالا و پایین برج در نقطه خوراک با هم توافق نخواهند داشت.



شکل ۸-۲: نتایج محاسبات لوپس-ماتسون برای حدس اولیه



شکل ۸-۳: نتایج محاسبات لوپس-ماتسون برای زمانی که محاسبات سینی به سینی برای بالا و پایین برج توافق داشته باشند.

برای اینکه نتایج محاسبات بالا و پایین برج توافق داشته باشند رابینسون و گلیلیلاند^۱ [۱۶] پیشنهاد کردند که مقادیر کمی از اجزاء سنگین‌تر از اجزاء کلیدی برای محصول بالای برج و مقادیر کمی از اجزاء سبک‌تر از اجزاء کلیدی برای محصول پایین برج در نظر گرفته شود و محاسبات تکرار شود تا زمانی که نتایج محاسبات سینی به سینی برای بالا و پایین برج در نقطه خوراک توافق داشته باشند. با استفاده از این روش نتایج محاسبات برای بالا و پایین برج در نقطه خوراک یکسان خواهند بود که این مطلب در شکل ۸-۳ نشان داده شده است.

این روش زمانی مفید است که تعداد اجزاء در خوراک کم باشد در صورتی که تعداد اجزاء زیاد باشد استفاده از این روش معمول نیست. برای رفع این مشکل، هنگستیبک^۲ [۲۳] پیشنهاد کرد که مشخصات مایع و بخار سینی خوراک حدس زده شوند سپس محاسبات را یک بار برای سینی‌های بالای برج انجام دهیم تا مشخصات محصول بالای برج بدست آید. بار دیگر محاسبات را برای سینی‌های پایین برج انجام دهیم تا مشخصات محصول پایین برج بدست آید. با انجام این کار، نیازی به محاسبات سعی و خطا نیست. برای استفاده از روش پیشنهاد شده توسط هنگستیبک، لازم است که مشخصات مایع و بخار ورودی به سینی خوراک حدس زده شوند برای این منظور دبی اجزاء سبک‌تر از اجزاء کلیدی در قسمت بالای برج ثابت در نظر گرفته می‌شود همچنین دبی اجزاء سنگین‌تر از اجزاء کلیدی در قسمت پایین برج نیز ثابت در نظر گرفته می‌شود. طبق فرضیات اخیر، دبی هر جزء از مایعی که از بخش بالای برج وارد سینی خوراک می‌شود به صورت زیر محاسبه می‌شوند.

۱- محاسبات سینی به سینی را برای بالای برج از بالا به سمت سینی خوراک به عنوان حدس اولیه انجام می‌دهیم.

۲- محاسبات سینی به سینی را برای پایین برج از پایین به سمت سینی خوراک به عنوان حدس اولیه انجام می‌دهیم.

۳- دبی اجزاء سبک‌تر از اجزاء کلیدی در مایعی که از بخش بالای برج وارد سینی خوراک می‌شود را می‌توان با دبی این اجزاء در مایع خروجی از آخرین سینی بالای برج در محاسبات سینی به سینی که در مرحله ۱ به عنوان حدس اولیه انجام شد برابر قرار داد.

۴- دبی اجزاء سنگین‌تر از اجزاء کلیدی در مایعی که از بخش بالای برج وارد سینی خوراک می‌شود را می‌توان مساوی با مجموع دبی این اجزاء در بخار خروجی از بالاترین سینی پایین برج در محاسبات سینی به سینی که در مرحله ۲ به عنوان حدس اولیه انجام شد و دبی این اجزاء در قسمتی از خوراک که به صورت بخار است در نظر گرفت. (با این کار دبی اجزاء سنگین‌تر از اجزاء کلیدی در بخار و مایع عبوری از بالای برج یکسان خواهد بود و عملاً دبی اجزاء سنگین‌تر از اجزاء کلیدی در محصول بالا صرف‌نظر می‌شوند.)

1- Robinson and Gilliland
2- Hengestebeck

۵- نسبت دبی جزء سبک کلیدی به جزء سنگین کلیدی در مایعی که از بخش بالای برج وارد سینی خوراک می‌شود را می‌توان برابر با نسبت همین اجزاء در مایع خروجی از آخرین سینی بالای برج در محاسبات سینی به سینی بالای برج که در مرحله ۱ به عنوان حدس اولیه انجام شده در نظر گرفت.

۶- دبی مایعی که از بخش بالای برج وارد سینی خوراک می‌شود برابر با دبی مایع خروجی از آخرین سینی بالای برج در محاسبات سینی به سینی بالای برج که در مرحله ۱ به عنوان حدس اولیه انجام شد در نظر گرفته می‌شود.

۷- قسمت‌های ۵ و ۶ منجر به دو معادله و دو مجهول خواهند شد که این دو مجهول دبی اجزاء کلیدی هستند که می‌توان آنها را بدست آورد.

بدین ترتیب دبی همه اجزاء در مایع ورودی به سینی خوراک بدست می‌آیند. به طور مشابه دبی اجزاء بخار ورودی به سینی خوراک را می‌توان به صورت زیر بدست آورد.

۱- محاسبات سینی به سینی را برای بالای برج از بالا به سمت سینی خوراک به عنوان حدس اولیه انجام می‌دهیم.

۲- محاسبات سینی به سینی را برای پایین برج از پایین به سمت سینی خوراک به عنوان حدس اولیه انجام می‌دهیم.

۳- دبی اجزاء سنگین‌تر از اجزاء کلیدی در فاز بخاری که از بخش پایین برج وارد سینی خوراک می‌شود را می‌توان برابر با دبی این اجزاء در بخار خروجی از بالاترین سینی پایین برج در محاسبات سینی به سینی پایین برج که به عنوان حدس اولیه انجام شده در نظر گرفت.

۴- دبی اجزاء سبک‌تر از اجزاء کلیدی در فاز بخاری که از بخش پایین برج وارد سینی خوراک می‌شود را می‌توان برابر با مجموع دبی این اجزاء در مایع خروجی از بخش بالای برج و دبی این اجزاء در بخشی از خوراک که به صورت مایع است در نظر گرفت.

۵- نسبت دبی جزء سبک کلیدی به جزء سنگین کلیدی در فاز بخاری که از بخش پایین برج وارد سینی خوراک می‌شود را می‌توان برابر با نسبت همین اجزاء در بخار خروجی از آخرین سینی پایین برج در محاسبات سینی به سینی که به عنوان حدس اولیه انجام شده در نظر گرفت.

۶- دبی فاز بخاری که از بخش پایین برج وارد سینی خوراک می‌شود برابر با دبی بخار خروجی از بالاترین سینی پایین برج که به عنوان حدس اولیه انجام شده در نظر گرفته می‌شود.

۷- قسمت‌های ۵ و ۶ منجر به دو معادله و دو مجهول خواهد شد که این دو مجهول دبی اجزاء کلیدی هستند که با حل این دو معادله بدست می‌آید.

بدین ترتیب دبی همه اجزاء در بخار ورودی به سینی خوراک بدست می‌آید.

حال باید محاسبات را از خوراک به سمت بالای برج و بار دیگر محاسبات را از خوراک به سمت پایین برج انجام دهیم. وقتی محاسبات سینی به سینی را از خوراک به سمت بالای برج انجام می‌دهیم دبی اجزاء سبک‌تر از اجزاء کلیدی در فاز بخار روی هر سینی برابر با دبی این اجزاء روی همان سینی‌ها در محاسبات

حدس اولیه خواهد بود و زمانی که محاسبات سینی به سینی را از خوراک به سمت پایین برج انجام می‌دهیم دبی اجزاء سنگین‌تر از اجزاء کلیدی در فاز مایع روی هر سینی برابر با دبی این اجزاء روی همان سینی‌ها در محاسبات حدس اولیه خواهد بود.

محل بهینه سینی خوراک

انتخاب محل صحیح سینی خوراک باعث مینیمم شدن تعداد سینی‌ها در برج خواهد شد. وقتی که در محاسبات سینی به سینی نسبت جزء کلیدی سبک به جزء کلیدی سنگین برای مایع خروجی پایین‌ترین سینی بالای برج برابر با این نسبت در مایع خوراک در نظر گرفته شود و همچنین نسبت جزء کلیدی سبک به جزء کلیدی سنگین در بخار خروجی از بالاترین سینی پایین برج برابر با نسبت جزء کلیدی سبک به جزء کلیدی سنگین در بخار موجود در خوراک در نظر گرفته شود خود به خود محل بهینه سینی خوراک بدست می‌آید.

مثال ۸-۱: خوراکی به صورت مایع اشباع با ترکیب زیر وارد برج تقطیر می‌شود. مشخصات محصولات خروجی نیز در جدول زیر نشان داده شده است. نسبت جریان برگشتی به برج $R=3$ می‌باشد. برج مجهز به کندانسور کلی و جوش‌آور جزئی می‌باشد. تعداد مراحل لازم برای این جداسازی را با استفاده از روش لوپس-ماتسون بدست آورید.

Component	α	Flow Rates, Moles / hr		
		f	d	B
A	8.0	10	10	
B	4.0	15	15	
C	2.0	30	28	2
D	1.0	25	2	23
E	0.5	15		15
F	0.3	5		5
		100	55	45

حل: در این مسئله مقادیر ضریب فراریت (α) ثابت در نظر گرفته شده و به جای مقادیر k در معادلات ۸-۶ و ۸-۱۱ بکار برده شده است. در ابتدا لازم است که معادلات ۸-۶ و ۸-۱۱ بر حسب ضریب فراریت نوشته شوند.

معادله ۸-۶ بر حسب مقادیر ضریب فراریت (α) به صورت زیر می‌باشد.

$$(l_n)_i = \frac{L}{\sum \left(\frac{v_n}{\alpha}\right)_i} \left(\frac{v_n}{\alpha}\right)_i \quad ۱۴-۸$$

اثبات رابطه اخیر در ضمیمه C موجود می‌باشد.

معادله ۸-۱۱ بر حسب مقادیر α به صورت زیر می‌باشد.

$$(v'_n)_i = \frac{V'}{\sum (\alpha l'_n)_i} (\alpha l'_n)_i \quad ۱۵-۸$$

اثبات رابطه اخیر در ضمیمه D موجود می‌باشد.

با استفاده از معادلات ۸-۱۴ و ۸-۱۵ می‌توان محاسبات سینی به سینی را برای بالا و پایین برج انجام داد. ابتدا باید دبی مایع و بخار را در قسمت بالا و پایین برج بدست آوریم. دبی مایع بالای برج به صورت زیر بدست می‌آید.

$$L = \frac{L}{D} \times D = R \times D = 3 \times 55 = 165$$

و از طرفی با موازنه جرم حول بالای برج خواهیم داشت.

$$V = L + D = 165 + 55 = 220$$

دبی مایع و بخار پایین برج نیز به صورت زیر بدست می‌آید.

$$L' = L + (q \times F) = 165 + (1 \times 100) = 265$$

$$V' = V - [(1 - q) \times F] = 220 - (0 \times 100) = 220$$

محاسبات سینی به سینی مربوط به بالای برج

محاسبات سینی به سینی از بالای برج به سمت سینی خوراک به صورت زیر خواهد بود.

ابتدا با اعمال موازنه جرم حول کندانسور می‌توان دبی اجزاء در فاز بخار خروجی از سینی اول را بدست آورد.

$$v_{li} = l_{li} + d_i = (R \times d_i) + d_i = (R + 1) \times d_i$$

$$v_{1A} = 4 \times 10 = 40$$

$$v_{1B} = 4 \times 15 = 60$$

$$v_{1C} = 4 \times 28 = 112$$

$$v_{1D} = 4 \times 2 = 8$$

سپس مقادیر $\frac{v_{li}}{\alpha_i}$ را بدست می‌آوریم که در جدول ۸-۱ نشان داده شده است حال با استفاده از معادله ۸-۱۴

می‌توان مقادیر l_{li} را بدست آورد.

$$l_{1A} = \frac{165}{84} \times 5 = 9.8$$

$$l_{1B} = \frac{165}{84} \times 15 = 29.5$$

$$l_{1C} = \frac{165}{84} \times 56 = 110$$

$$l_{1D} = \frac{165}{84} \times 8 = 15.7$$

حال با استفاده از موازنه جرم می‌توان دبی اجزاء بخار خروجی از سینی دوم را بدست آورد.

$$v_{2i} = l_{1i} + d_i$$

$$v_{2A} = 9.8 + 10 = 19.8$$

$$v_{2B} = 29.5 + 15 = 44.5$$

$$v_{2C} = 110 + 28 = 138.0$$

$$v_{2D} = 15.7 + 2 = 17.7$$

با داشتن مقادیر v_{2i} می‌توان همین محاسبات را برای سینی دوم نیز انجام داد که نتیجه این محاسبات در قسمت بالای جدول ۸-۱ نشان داده شده است.

محاسبات سینی به سینی مربوط به پایین برج

محاسبات پایین برج، از جوش‌آور جزئی شروع می‌شود چون جوش‌آور جزئی یک مرحله تعادلی محسوب می‌شود. در صورتی که جوش‌آور جزئی نداشته باشیم محاسبات را از سینی زیرین پایین برج انجام می‌دهیم. با استفاده از رابطه ۸-۱۵ می‌توان دبی اجزاء خروجی از جوش‌آور (v_r) را بدست آورد.

$$(v_r)_i = \frac{V'}{\sum (\alpha \times b)_i} (\alpha \times b)_i$$

$$(v_r)_C = \frac{220}{36} \times 4 = 24.4$$

$$(v_r)_D = \frac{220}{36} \times 23 = 140.5$$

$$(v_r)_E = \frac{220}{36} \times 7.5 = 45.9$$

$$(v_r)_F = \frac{220}{36} \times 1.5 = 9.2$$

سپس با استفاده از موازنه جرم می‌توان مایع خروجی از سینی اول پایین برج را بدست آورد.

$$l'_{1i} = (v_r)_i + b_i$$

$$l'_{1C} = 24.4 + 2 = 26.4$$

$$l'_{1D} = 140.5 + 23 = 163.5$$

$$l'_{1E} = 45.9 + 15 = 60.9$$

$$l'_{1F} = 9.2 + 5 = 14.2$$

با استفاده از مقادیر l'_i و رابطه ۸-۱۵ می‌توان مقادیر v'_{1i} را بدست آورد همین مراحل را برای سینی‌های بعدی نیز انجام می‌دهیم که نتیجه آن در قسمت پایین جدول ۸-۱ نشان داده شده است.

چون خوراک کاملاً مایع اشباع است ابتدا تعداد سینی‌های پایین برج را بدست می‌آوریم. نسبت جزء کلیدی سبک به جزء کلیدی سنگین $1.2 = \frac{30}{25}$ است از طرفی این نسبت برای مایعی که از سینی چهارم پایین برج خارج می‌شود برابر $0.85 = \frac{106.8}{126.1}$ و برای مایعی که از سینی پنجم پایین برج خارج می‌شود برابر $1.33 = \frac{134.5}{101.3}$ است. از نسبت جزء کلیدی سبک به سنگین می‌توان دریافت که تعداد سینی‌های پایین برج بیشتر از چهار و کمتر از پنج می‌باشد که در نهایت عدد بزرگتر انتخاب می‌شود و خوراک وارد سینی پنجم پایین برج خواهد شد (سینی‌های پایین برج از پایین به سمت بالا شماره‌گذاری می‌شوند).

چون خوراک کاملاً مایع اشباع است بخار پایین برج بدون تغییر در ترکیب آن وارد بخش بالای برج می‌شود بنابراین بخار سینی پنجم پایین برج وارد بخش بالای برج خواهد شد که نسبت جزء کلیدی سبک به جزء کلیدی سنگین در آن $2.66 = \frac{154.4}{58}$ می‌باشد همین نسبت برای فاز بخاری که از سینی چهارم بالای برج خارج شده و وارد سینی سوم بالای برج می‌شود $2.76 = \frac{132.2}{47.9}$ و برای فاز بخاری که از سینی پنجم بالای برج خارج شده و وارد سینی چهارم بالای برج می‌شود $1.76 = \frac{117.1}{66.5}$ می‌باشد که با درون‌یابی خطی بین داده‌های فوق 3.1 سینی لازم است.

Ratio of Light key to heavy key	Tray
2.76	3
2.66	T=3.1
1.76	4

پس برای این جداسازی به پنج سینی برای پایین برج و 3.1 سینی برای بالای برج نیاز داریم البته در این قسمت از وجود اجزاء سنگین‌تر از اجزاء کلیدی در بالای برج و همچنین از وجود اجزاء سبک‌تر از اجزاء کلیدی در پایین برج صرف‌نظر شده است. با در نظر گرفتن همه اجزاء در محصول بالا و پایین برج، تعداد سینی‌ها کمی افزایش خواهد یافت.

جدول ۸-۱ : حدس اولیه محاسبات سینی به سینی از روش لویس-ماتسون

Comp	d	α	v_1	$\frac{v_1}{\alpha}$	l_1	v_2	$\frac{v_2}{\alpha}$	l_2	v_3	$\frac{v_3}{\alpha}$	l_3	v_4	$\frac{v_4}{\alpha}$	l_4	v_5	$\frac{v_5}{\alpha}$	l_5	v_6
A	10	8	40	5.0	9.8	19.8	2.4	4.0	14.0	1.8	2.7	12.7	1.6	2.2	12.2	1.6	2.0	12.0
B	15	4	60	15.0	29.5	44.5	11.1	18.3	33.3	8.3	12.2	27.2	6.8	9.2	24.2	6.0	7.5	22.5
C	28	2	112	56.0	110.0	138.0	69.0	113.5	141.5	70.8	104.2	132.2	66.1	89.1	117.1	58.6	73.0	101.0
D	2	1	8	8.0	15.7	17.7	17.7	29.2	31.2	31.2	45.9	47.9	47.9	64.5	66.5	66.5	82.5	84.5
Σ	55		220	84.0	165.0	220.0	100.2	165.0	220.0	112.1	165.0	220.0	122.4	165.0	220.0	132.7	165.0	220.0

Comp	b	α	αb	v_r	l'_1	$\alpha l'_1$	v'_1	l'_2	$\alpha l'_2$	v'_2	l'_3	$\alpha l'_3$	v'_3	l'_4	$\alpha l'_4$	v'_4	l'_5	$\alpha l'_5$	v'_5
C	2	2.0	4.0	24.4	26.4	52.8	46.3	48.3	96.6	74.4	76.4	152.8	104.8	106.8	213.6	132.5	134.5	269.0	154.4
D	23	1.0	23.0	140.5	163.5	163.5	143.1	166.1	166.1	127.4	150.4	150.4	103.1	126.1	126.1	78.3	101.3	101.3	58.0
E	15	0.5	7.5	45.9	60.9	30.5	26.8	41.8	20.9	16.1	31.1	15.6	10.7	25.7	12.9	8.0	23.0	11.5	6.6
F	5	0.3	1.5	9.2	14.2	4.3	3.8	8.8	2.7	2.1	7.1	2.1	1.4	6.4	1.9	1.2	6.2	1.8	1.0
Σ	45		36.0	220.0	265.0	251.1	220.0	265.0	286.3	220.0	265.0	320.9	220.0	265.0	354.5	220.0	265.0	383.6	220.0

از آنجا که در محاسبات بالا، اجزاء سبک‌تر از اجزاء کلیدی در پایین برج و اجزاء سنگین‌تر از اجزاء کلیدی در بالای برج در نظر گرفته نشده‌اند لازم است که این اجزاء نیز در محصول بالا و پایین برج در نظر گرفته شوند. برای این منظور باید دبی اجزاء در مایع و بخار ورودی به سینی خوراک مشخص شوند. دبی اجزاء در مایع و بخار ورودی به سینی خوراک با استفاده از مطالبی که قبلاً ذکر شد در قسمت A جدول ۸-۲ بدست آمده است. محاسبات دبی اجزائی که توسط مایع بالای برج وارد سینی خوراک می‌شود به صورت زیر است.

$$(l_{f+1})_A = (l_3)_A = 2.7$$

$$(l_{f+1})_B = (l_3)_B = 12.2$$

$$(l_{f+1})_E = (v'_5)_E + (f_v)_E = 6.6$$

$$(l_{f+1})_F = (v'_5)_F + (f_v)_F = 1.0$$

مقادیر $(l_{f+1})_C$ و $(l_{f+1})_D$ با توجه به نسبت‌شان در جریان L_3 بدست می‌آیند.

$$(l_{f+1})_C = \frac{(l_3)_C}{(l_3)_C + (l_3)_D} \left[\left(\sum l_{f+1} \right) - (l_{f+1})_A - (l_{f+1})_B - (l_{f+1})_E - (l_{f+1})_F \right]$$

$$(l_{f+1})_C = \frac{104.2}{104.2 + 45.9} [165 - 2.7 - 12.2 - 6.6 - 1.0] = 98.9$$

$$(l_{f+1})_D = \frac{(l_3)_D}{(l_3)_C + (l_3)_D} \left[\left(\sum l_{f+1} \right) - (l_{f+1})_A - (l_{f+1})_B - (l_{f+1})_E - (l_{f+1})_F \right]$$

$$(l_{f+1})_D = \frac{45.9}{104.2 + 45.9} [165 - 2.7 - 12.2 - 6.6 - 1.0] = 43.6$$

مقادیر دبی اجزائی که توسط بخار پایین برج وارد سینی خوراک می‌شوند نیز به طریق مشابه بدست می‌آید که نتایج در قسمت A جدول ۸-۲ ارائه شده است.

جدول ۸-۲: در نظر گرفتن اجزاء دیگر غیر از اجزاء کلیدی برای بالا و پایین برج از روش لوپس-ماتسون

A. Composition at the feed inlet.

Comp	l_3	v'_5	f_l	f_v	l_{f+1}	v'_f	
A	2.7	-	10.0	-	2.7	(l_3)	$(l_3 + f_l)$
B	12.2	-	15.0	-	12.2	(l_3)	$(l_3 + f_l)$
C	-	-	-	-	98.9		125.3
D	-	-	-	-	43.6		47.2
E	-	6.6	-	0.0	6.6	$(v'_5 + f_v)$	(v'_5)
F	-	1.0	-	0.0	1.0	$(v'_5 + f_v)$	(v'_5)
Σ					165.0		220.0

B. Calculations up from the feed inlet.

Comp	l_{f+1}	αl_{f+1}	v_{f+1}	l_{f+2}	αl_{f+2}	v_{f+2}	l_{f+3}	αl_{f+3}	v_{f+3}
A	2.7		14.0*			19.8*			40.0*
B	12.2		33.3*			44.5*			60.0*
C	98.9	197.8	139.5	111.5	223.0	137.4	109.4	218.8	111.9
D	43.6	43.6	30.7	28.7	28.7	17.6	15.6	15.6	8.0
E	6.6	3.3	2.3	2.3	1.2	0.7	0.7	0.3	0.1
F	1.0	0.3	0.2	0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Total	165.0	-	220.0	-	-	220.0	-	-	220.0
A, B		-	47.3	-	-	64.3	-	-	100.0
C, D, E, F		245.0	172.7	142.7	252.9	155.7	125.7	234.7	120.0

C. Calculations down the feed inlet.

Comp	v'_f	$\frac{v'_f}{\alpha}$	l'_f	v'_{f-1}	$\frac{v'_{f-1}}{\alpha}$	l'_{f-1}	v'_{f-2}	$\frac{v'_{f-2}}{\alpha}$	l'_{f-2}
A	12.7	1.6	3.2	3.2	0.4	0.7	0.7	0.1	0.1
B	27.2	6.8	13.6	13.6	3.4	5.8	5.8	1.4	2.0
C	125.3	62.7	125.0	123.0	61.5	105.0	103.0	56.5	81.6
D	47.2	47.2	94.0	71.0	71.0	121.4	98.4	98.4	143.1
E	6.6	-	23.0*	-	-	25.7*	-	-	31.1*
F	1.0	-	6.2*	-	-	6.4*	-	-	7.1*
Total	220.0	-	265.0	-	-	265.0	-	-	265.0
A, B		-	29.2	-	-	32.1	-	-	38.2
C, D, E, F		118.3	235.8	210.8	136.3	232.9	207.9	156.4	226.8

حال باید محاسبات سینی به سینی را یک بار از خوراک به سمت بالای برج و بار دیگر از خوراک به سمت پایین برج انجام می‌دهیم. محاسبات سینی به سینی از سینی خوراک به سمت بالای برج به صورت زیر می‌باشد. وقتی محاسبات را از سینی خوراک به سمت بالای برج انجام می‌دهیم دبی اجزاء سبک‌تر از اجزاء کلیدی را از محاسبات حدس اولیه استخراج می‌کنیم سپس با استفاده از رابطه ۸-۱۵ خواهیم داشت.

$$v_{f+1} = \frac{V - v_A - v_B}{\sum (\alpha \times l_{f+1})_i} (\alpha \times l_{f+1})_i$$

$$(v_{f+1})_C = \frac{220 - 14 - 33.3}{245} \times 197.8 = 139.5$$

$$(v_{f+1})_D = \frac{220 - 14 - 33.3}{245} \times 43.6 = 30.7$$

$$(v_{f+1})_E = \frac{220 - 14 - 33.3}{245} \times 3.3 = 2.3$$

$$(v_{f+1})_F = \frac{220 - 14 - 33.3}{245} \times 0.3 = 0.2$$

در محاسبات اخیر مقادیر $(v_{f+1})_A = 14$ و $(v_{f+1})_B = 33.3$ از محاسبات حدس اولیه (قسمت بالای برج که در بالای جدول ۸-۱ آمده است) استخراج شده است و بقیه بر مبنای عاری از A و B محاسبه شده است پس دبی این اجزاء باید از دبی بخار کسر شود که این کار در محاسبات اخیر انجام شده است. مقادیر $(l_{f+2})_i$ با استفاده از موازنه جرم بدست می‌آیند.

$$(l_{f+2})_i = (v_{f+1})_i - d_i$$

برای بقیه سینی‌ها نیز همین محاسبات انجام می‌شود که نتیجه این محاسبات در قسمت B جدول ۸-۲ ارائه شده است. این محاسبات را تا جایی انجام می‌دهیم که دبی اجزاء سنگین‌تر از اجزاء کلیدی در فاز بخار قابل صرف‌نظر باشد از مقایسه v_{f+3} در این محاسبات و v_1 در محاسبات حدس اولیه می‌توان تشخیص داد که اجزاء سنگین‌تر از اجزاء کلیدی تاثیر بسیار ناچیزی بر محاسبات بالای برج دارند و تعداد سینی‌ها را به مقدار ناچیزی افزایش می‌دهند این مقدار ناچیز به صورت زیر محاسبه می‌شود.

Top Tray	Ratio of Light key to heavy key
v_{f+3}	$111.9 / 8.0 = 13.9875$
v_1	$112 / 8 = 14$
v_2	$138 / 17.7 = 7.797$

جدول بالا نشان می‌دهد وقتی اجزاء سنگین‌تر از اجزاء کلیدی در محاسبات بالای برج در نظر گرفته نمی‌شوند (محاسبات حدس اولیه) با قرار دادن 3.1 مرحله تعادلی می‌توان نسبت جزء کلیدی سبک به جزء کلیدی

سنگین را به 14 رساند اما وقتی اجزاء سنگین تر از اجزاء کلیدی در نظر گرفته شوند با قرار دادن سه مرحله تعادلی، نسبت جزء کلیدی سبک به جزء کلیدی سنگین به 13.9875 خواهد رسید پس باید تعداد مراحل تعادلی را به مقدار خیلی ناچیزی افزایش دهیم که این مقدار با میان‌یابی روی جدول اخیر به صورت زیر خواهد بود.

$$\frac{14 - 13.9875}{14 - 7.797} = 0.002015$$

پس تعداد سینی‌ها 0.002015 افزایش می‌یابد و به 3.1002015 سینی برای بالای برج نیاز است. وقتی محاسبات را از سینی خوراک به سمت پایین برج انجام می‌دهیم دبی اجزاء سنگین تر از اجزاء کلیدی را از محاسبات حدس اولیه استخراج می‌کنیم سپس با استفاده از رابطه ۸-۱۴ خواهیم داشت.

$$(l'_f)_i = \frac{L' - l'_A - l'_B \left(\frac{v_f}{\alpha} \right)_i}{\sum \left(\frac{v_f}{\alpha} \right)_i}$$

$$(l'_f)_A = \frac{265 - 23 - 6.2}{118} \times 1.6 = 3.2$$

$$(l'_f)_B = \frac{265 - 23 - 6.2}{118} \times 6.8 = 13.6$$

$$(l'_f)_C = \frac{265 - 23 - 6.2}{118} \times 62.7 = 125$$

$$(l'_f)_D = \frac{265 - 23 - 6.2}{118} \times 47.2 = 94$$

مقادیر $(v'_{f-1})_i$ با استفاده از موازنه جرم حول پایین برج بدست می‌آیند.

$$(v'_{f-1})_i = (l'_f)_i - b_i$$

سپس برای بقیه سینی‌ها نیز همین محاسبات تکرار می‌شود که نتیجه محاسبات در قسمت C جدول ۸-۲ ارائه شده است. این محاسبات را تا جایی انجام می‌دهیم که دبی اجزاء سبک تر از اجزاء کلیدی در فاز مایع قابل صرف نظر باشد. از مقایسه l'_{f-2} در این محاسبات و l'_3 در محاسبات حدس اولیه می‌توان تشخیص داد که اجزاء سبک تر از اجزاء کلیدی بر محاسبات پایین برج تاثیر خواهد گذاشت و تعداد سینی‌ها را کمی افزایش خواهد داد این مقدار از مقایسه l'_{f-2} با l'_3 و l'_4 بدست می‌آید که به صورت زیر خواهد بود.

Bottom Tray	Ratio of Light key to heavy key
l'_3	0.51
l'_{f-2}	0.57
l'_4	0.85

جدول اخیر نشان می‌دهد وقتی اجزاء سبک‌تر از اجزاء کلیدی در محاسبات پایین برج در نظر گرفته نمی‌شوند (محاسبات حدس اولیه) با قرار دادن سه مرحله تعادلی، نسبت جزء سبک به سنگین در مایع خروجی از سینی سوم به 0.51 و با قرار دادن چهار مرحله تعادلی این نسبت برای سینی چهارم به 0.85 خواهد رسید اما وقتی اجزاء سبک‌تر از اجزاء کلیدی در نظر گرفته شود با قرار دادن سه مرحله تعادلی، این نسبت به 0.57 می‌رسد پس وقتی که اجزاء سبک‌تر از اجزاء کلیدی در نظر گرفته نمی‌شوند جداسازی راحت‌تر است و زمانی که این اجزاء در نظر گرفته می‌شوند جداسازی سخت‌تر است و باید مراحل تعادلی را کمی افزایش دهیم که این مقدار با میان‌یابی روی جدول اخیر به صورت زیر خواهد بود.

$$\frac{0.85 - 0.51}{0.57 - 0.51} = \frac{4 - 3}{x - 3} \Rightarrow x = 3.18$$

پس در نظر گرفتن اجزاء سبک‌تر از اجزاء کلیدی در پایین برج تعداد سینی‌ها را 0.18 افزایش خواهد داد. بنابراین تعداد سینی‌های پایین برج که در محاسبات حدس اولیه 5 بدست آمده بود باید به 5.18 افزایش یابد.

Top Tray	3.1002015
Bottom Tray	5.18
Total Tray	8.28002015

منابع

- 1- Benedict, M., C. A. Johnson, E. Solomon, and L. C. Rubin, *Trans. Am. Inst. Chem. Engrs.*, 41,371 (1945).
- 2- Benedict, M., and L. C. Rubin, *Trans. Am. Inst. Chem. Engrs.*, 41, 353 (1945).
- 3- Drickamer, H. G., G. G. Brown, and R. R. White, *Trans. Am. Inst. Chem. Engrs.*, 41, 555 (1945).
- 4- Drickamer, H. G., and H. H. Hummel, *Trans. Am. Inst. Chem. Engrs.*, 41, 607 (1945).
- 5- Dunn, C. L., R. W. Millar. G. J. Pierotti, R. N. Shiras, and M. Souders, *Trans. Am. Inst. Chem. Engrs.*, 41, 631 (1945).
- 6- Edmister, W. C., "Hydrocarbon Absorption and process Design Methods," bound reprints from *The Refining Engineer*.
- 7- Erbar, J. H., and R. N. Maddox, *Petroleum Refiner*, 40 (5), 183 (1961).
- 8- Fling, W. A., and R. N. Maddox, *Petro/Chem. Eng.*, 33 (3), C-37 (1961).
- 9- Gilliland, E. R., *Ind. Eng. Chem.*, 32, 1220 (1940).
- 10- Gunness, R. C., *Ind. Eng. Chem.*, 29, 1092 (1937).
- 11- Hummel, H. H., *Trans. Am. Inst. Chem. Engrs.*, 40, 445 (1944).
- 12- Kusak, L. J.(American Oil Co.), Personal communication.
- 13- Lewis, W. K., and G. L. Matheson, *Ind. Eng. Chem.*, 24, 494 (1932).
- 14- Packie, J. W., *Trans. Am. Inst. Chem. Engrs.*, 37, 51 (1941).
- 15- Peiser, A. M., *Chem. Eng.*, 67 (14), 129 (1960).
- 16- Robinson, C. S., and E. R. Gilliland, "Elements of Fractional Distillation," 4th Ed., PP. 265-70, McGraw-Hill (1950).
- 17- Ibid, pp. 158-60 and 276-89.
- 18- Ibid., pp, 347-50.
- 19- Thiele, E., W., and R. L. Geddes, *Ind. Eng. Chem.*, 25, 289 (1933).
- 20- Underwood, A. J. V., *J. Inst. of Petroleum*, 32, 614 (1946); *Chem. Eng. Prog.*, 44, 603 (1948).

- 21- Wheeler, H. K., (American Oil Co.), Personal Communication.
22- Winn, F. W., *Petroleum Refiner*, 37 (5), 216 (1958).
23- Hengstebeck, R. J., "DISTILLATION principles and design procedure," pp. 112-130 ,
REINHOLD PUBLISHING CORPORATION, New York, 1961

مسائل

- ۱- مثال ۸-۱ را برای حالتی زیر حل نمایید.
الف : خوراک به صورت بخار اشباع باشد.
ب : ۵۰٪ از خوراک به صورت مایع و ۵۰٪ از خوراک به صورت بخار اشباع وارد برج شود.
۲- مثال ۸-۱ را برای جریان برگشتی $R = 4$ حل نمایید.

فصل نهم

روش ترسیمی هنگستییک^۱

مقدمه

برای حل جداسازی چند جزئی یک روش ترسیمی توسط هنگستییک [۱] ارائه شده است. گرچه محاسبات ترسیمی ممکن است باعث کاهش دقت شود اما مسئله را از حالت سعی و خطا خارج کرده و باعث حل سریع مسئله خواهد شد. از حل به روش ترسیمی زمانی استفاده می‌شود که تعداد مراحل تعادلی زیاد نباشد و همچنین زمانی که دبی مایع و بخار در هر قسمت را بتوان ثابت در نظر گرفت. ضمناً استفاده از روش ترسیمی بسیار ساده‌تر خواهد بود.

روش ترسیمی هنگستییک

اولین گام در روش ترسیمی این است که مسائل چند جزئی به گونه‌ای ساده‌سازی شوند که برای هر تعدادی از اجزاء قابل استفاده باشد. برای ساده‌سازی مسائل چند جزئی سعی می‌شود که این مسائل به سیستم دو جزئی تبدیل شده سپس جریان برگشتی لازم و تعداد مراحل تعادلی لازم بدست آید [۲]. که این کار توسط روش اصلاح شده مک‌کیب-تیلی^۲ انجام می‌شود. معادله‌های اساسی برای این کار در ادامه ذکر خواهد شد.

معادلات اساسی

در قسمت بالای برج می‌توان برای هر جزء معادلات ۵-۸ و ۶-۸ را نوشت.

$$v_{n+1} = l_n + d$$
$$v_n = k_n \frac{V}{L} l_n$$

1- Hengestebeck
2- McCabe-Thiele

همچنین در قسمت پایین برج معادلات ۸-۱۰ و ۸-۱۱ را برای هر جزء می‌توان نوشت.

$$l'_{n+1} = v'_n + b$$

$$v'_n = k_n \frac{V'}{L'} l'_n$$

این معادلات نشان می‌دهند در صورتی که مقادیر k_N روی سینی‌ها معلوم باشد محاسبات سینی به سینی را می‌توان انجام داد بدون اینکه جزئی را به عنوان مبنا در نظر گرفت. بنابراین اجزاء غیر کلیدی روی هر سینی می‌توانند روی مقادیر k_N تاثیرگذار باشند و به طور غیر مستقیم روی جداسازی تاثیر خواهند گذاشت.

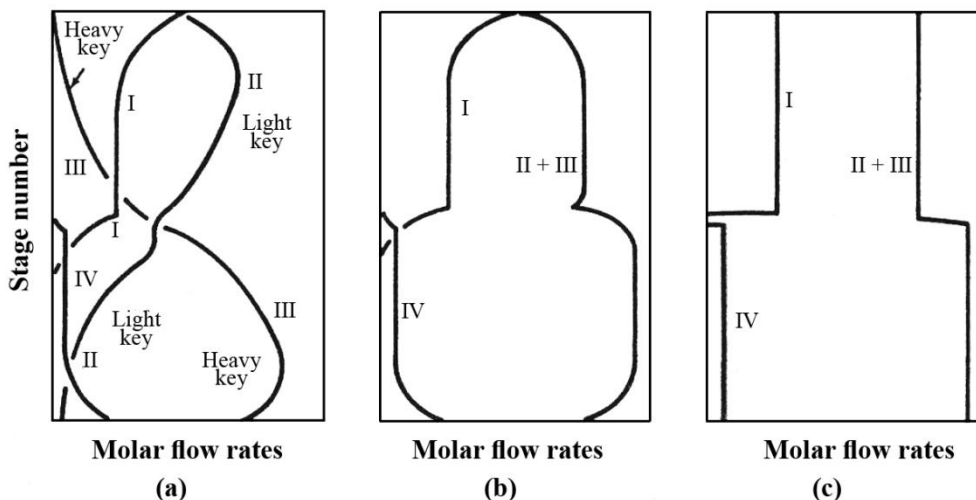
از آنجا که بقیه خواص فیزیکی اجزاء غیر کلیدی تاثیری بر جداسازی ندارند می‌توان این جداسازی را به صورت دو جزئی در نظر گرفت و برای این کار باید موارد زیر را بدست آورد.

۱- ضریب فراریت بین اجزاء کلیدی را بدست می‌آوریم لازم به ذکر است که اجزاء غیر کلیدی نیز روی فراریت نسبی بین اجزاء کلیدی تاثیرگذار خواهند بود.

۲- مجموع دبی اجزاء کلیدی بدون در نظر گرفتن اجزاء غیر کلیدی برای هر قسمت از برج باید محاسبه شود. به راحتی می‌توان ضریب فراریت بین اجزاء کلیدی را بدست آورد اما برای بدست آوردن مجموع دبی اجزاء کلیدی بدون در نظر گرفتن اجزاء غیر کلیدی باید راه‌کاری ارائه شود که در ادامه مورد بحث قرار می‌گیرد.

الگوی دبی اجزاء در طول برج

در قسمت A شکل ۹-۱ الگوی دبی اجزاء در طول برج برای یک جداسازی چندجزئی نشان داده شده است. در قسمت B شکل ۹-۱ نیز الگوی دبی اجزاء در طول برج همان سیستم چندجزئی نشان داده شده با این تفاوت که دبی اجزاء کلیدی با هم و به عنوان یک جریان واحد در نظر گرفته شده است. جزء I سبک‌تر از اجزاء کلیدی بوده و همانطور که از قسمت B شکل ۹-۱ دیده می‌شود دارای دبی تقریباً ثابتی در بالای برج می‌باشد اما در قسمت پایین برج (کمی پایین‌تر از سینی خوراک) دبی آن به شدت کاهش می‌یابد و قابل صرف‌نظر خواهد بود. دبی این جزء در بالای برج به عنوان دبی محدود^۱ شناخته می‌شود. همچنین جزء IV سنگین‌تر از اجزاء کلیدی بوده و همانطور که از قسمت B شکل ۹-۱ دیده می‌شود دارای دبی تقریباً ثابتی در پایین برج است اما در قسمت بالای برج (کمی بالاتر از سینی خوراک) دبی آن به شدت کاهش می‌یابد و قابل صرف‌نظر خواهد بود که دبی این جزء در پایین برج به عنوان دبی محدود شناخته می‌شود. وضعیتی که در قسمت A و B شکل ۹-۱ نشان داده شد هم برای فاز بخار و هم برای فاز مایع صادق می‌باشد.



شکل ۹-۱: مقایسه مجموع دبی اجزاء کلیدی در حالت فرضی و در حالت واقعی

برای اینکه مجموع دبی اجزاء کلیدی را بدون در نظر گرفتن اجزاء غیر کلیدی در قسمت بالای برج محاسبه کنیم لازم است که دبی محدود اجزاء سبک‌تر از اجزاء کلیدی را در قسمت بالای برج بدست آورده و با هم جمع کنیم و با کم کردن این مقدار از دبی کل می‌توان مجموع دبی اجزاء کلیدی را بدست آورد. و به طریق مشابه برای اینکه مجموع دبی اجزاء کلیدی را در قسمت پایین برج محاسبه نماییم باید دبی محدود اجزاء سنگین‌تر از اجزاء کلیدی را در قسمت پایین برج بدست آورده و با هم جمع کنیم و با کم کردن این مقدار از دبی کل می‌توان مجموع دبی اجزاء کلیدی را بدست آورد. مجموع دبی اجزاء کلیدی به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$L_e = L - \sum l_i \quad 1-9$$

$$V_e = V - \sum v_i \quad 2-9$$

$$L'_e = L' - \sum l'_i \quad 3-9$$

$$V'_e = V' - \sum v'_i \quad 4-9$$

L_e : مجموع دبی اجزاء کلیدی در فاز مایع برای قسمت بالای برج

V_e : مجموع دبی اجزاء کلیدی در فاز بخار برای قسمت بالای برج

L'_e : مجموع دبی اجزاء کلیدی در فاز مایع برای قسمت پایین برج

V_e : مجموع دبی اجزاء کلیدی در فاز بخار برای قسمت پایین برج

l_i : دبی محدود برای اجزاء سبک‌تر از اجزاء کلیدی در فاز مایع بالای برج

v_i : دبی محدود برای اجزاء سبک‌تر از اجزاء کلیدی در فاز بخار بالای برج

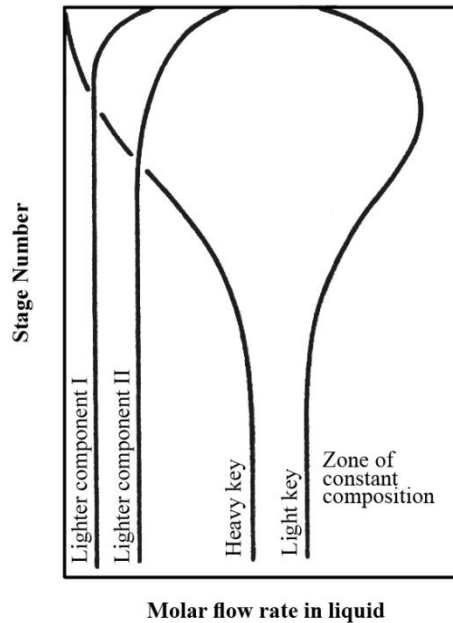
l'_i : دبی محدود برای اجزاء سبک‌تر از اجزاء کلیدی در فاز مایع پایین برج

v'_i : دبی محدود برای اجزاء سبک‌تر از اجزاء کلیدی در فاز بخار پایین برج

البته همانطور که از قسمت B شکل ۹-۱ مشهود است بدست آوردن مجموع دبی اجزاء در بالاترین نقطه برج ، پایین‌ترین نقطه برج و نقطه خوراک دقیق نیست اما استفاده از این مقادیر خطای زیادی در محاسبه تعداد سینی‌ها و جریان برگشتی ایجاد نمی‌کند. بنابراین برای اینکه بتوان دبی اجزاء کلیدی را بدست آورد و در روش ترسیمی هنگستیک استفاده کرد ابتدا لازم است دبی محدود اجزاء را در فاز مایع و بخار برای قسمت-های بالا و پایین برج بدست آورد.

دبی محدود

ایده بدست آوردن دبی‌های محدود ابتدا توسط جنی^۱ [۶] داده شد. وقتی که تعداد سینی‌های بالای برج زیاد باشد دبی همه اجزاء در قسمتی از برج از هر سینی به سینی دیگر ثابت خواهد بود که در شکل ۹-۲ نشان داده شده است. در تحقیقات جنی نشان داده شد که در این قسمت دما تقریباً ثابت است و نسبت $\frac{L}{V}$ برابر با k_{hk} می‌باشد. این برابری را به صورت زیر می‌توان اثبات کرد.



شکل ۹-۲ : قسمتی از بالای برج که در آن غلظت ثابت است.

موازنه جرم برای هر جزء در قسمت بالای برج به صورت زیر است.

$$\underline{v} = v_n = l_{n-1} + d_i \quad ۵-۹$$

از آنجا که در قسمت غلظت ثابت، دبی اجزاء از هر سینی به سینی دیگر ثابت است پس خواهیم داشت.

$$\underline{l} = l_n = l_{n-1} \quad ۶-۹$$

ضمناً رابطه تعادل نیز به صورت معادله ۸-۶ خواهد بود.

$$v_n = \frac{kV}{L} l_n$$

با ترکیب کردن معادلات ۵-۹ ، ۶-۹ و ۶-۸ خواهیم داشت.

$$\frac{kV}{L} l_n = l_n + d_i \quad 7-9$$

طرفین معادله اخیر را بر l_n تقسیم می کنیم.

$$\frac{kV}{L} = 1 + \frac{d_i}{l_n} \quad 8-9$$

رابطه ۸-۹ را بر حسب k مرتب کرده و با معادله ۶-۹ ترکیب می کنیم.

$$k = \frac{L}{V} \left(1 + \frac{d_i}{l} \right) \quad 9-9$$

از آنجا که نسبت $\frac{d_i}{l}$ برای جزء کلیدی سنگین در بالای برج بسیار ناچیز است پس $k_{hk} = \frac{L}{V}$ خواهد بود.

همچنین Jenny نشان داد که بای بخش پایین برج $k_{lk} = \frac{L'}{V'}$ است که اثبات آن به صورت زیر است.

موازنه جرم برای هر جزء در قسمت پایین برج به صورت زیر است.

$$l'_n = v'_{n-1} + b_i \quad 10-9$$

از آنجا که در قسمت غلظت ثابت ، دبی اجزاء از هر سینی به سینی دیگر ثابت است خواهیم داشت.

$$v'_{N-1} = v'_n = \underline{v} \quad 11-9$$

رابطه تعادلی نیز به صورت معادله ۶-۸ خواهد بود.

$$v'_N = k_N \frac{V'}{L'} l'_N$$

با ترکیب کردن معادلات ۱۰-۹ ، ۱۱-۹ و ۶-۸ خواهیم داشت.

$$l'_N = k_N \frac{V'}{L'} l'_N + b_i$$

معادله اخیر را بر حسب k_N مرتب می کنیم.

$$k = \frac{l'}{V'} \left(1 - \frac{b_i}{l'} \right)$$

از آنجا که نسبت $\frac{b_i}{l'}$ برای جزء کلیدی سبک بسیار ناچیز است پس $k_{lk} = \frac{L'}{V'}$ خواهد بود.

اگرچه قسمت غلظت ثابت در برج وجود ندارد که در آن دبی همه اجزاء از هر سینی به سینی دیگر ثابت باشد اما دبی اجزاء غیر کلیدی در این قسمت ثابت خواهد بود. بنابراین دبی محدود اجزاء سبک غیر کلیدی در بخش بالای برج به صورت زیر بدست می آیند.

با ترکیب کردن معادلات ۶-۹ و ۷-۹ و مرتب کردن معادله بر حسب دبی اجزاء سبک غیر کلیدی خواهیم داشت.

$$l_i = \frac{d_i}{k_i \frac{V}{L} - 1} \quad ۱۲-۹$$

از آنجا که نسبت $\frac{V}{L}$ برای بالای برج مساوی $\frac{1}{k_{hk}}$ است معادله ۱۲-۹ به صورت زیر درمی آید.

$$l_i = \frac{d_i}{\frac{k_i}{k_{hk}} - 1} \quad ۱۳-۹$$

از آنجا که $\frac{k_i}{k_{hk}}$ مساوی ضریب فراریت (α_i) است معادله ۱۳-۹ به صورت زیر نوشته می شود.

$$l_i = \frac{d_i}{\alpha_i - 1} \quad ۱۴-۹$$

با استفاده از موازنه جرم نیز می توان دبی محدود برای اجزاء سبک غیر کلیدی را در فاز بخار در قسمت بالای برج بدست آورد.

$$v_i = l_i + d_i \quad ۱۵-۹$$

دبی محدود اجزاء سنگین غیر کلیدی در قسمت پایین برج نیز به صورت زیر بدست می آید. با استفاده از رابطه ۸-۶ مقدار l'_N به صورت زیر است.

$$l'_N = v'_N \frac{L'}{V'} \frac{1}{k_N} \quad ۱۶-۹$$

با جایگذاری ۱۶-۹ در ۱۰-۹ خواهیم داشت.

$$v'_N \frac{L'}{V'} \frac{1}{k_N} = v'_N + b_i \quad \Rightarrow \quad v'_N = \frac{b_i}{\frac{1}{k_N} \frac{L'}{V'} - 1} \quad ۱۷-۹$$

صورت و مخرج سمت راست معادله اخیر را در k_N ضرب می کنیم و از آنجا که $\frac{L'}{V'} = k_{lk}$ است رابطه ۱۷-۹ به صورت زیر درمی آید.

$$v'_N = \frac{k_N b_i}{k_{lk} - k_N}$$

با تقسیم کردن صورت و مخرج رابطه اخیر بر k_{lk} ، رابطه زیر حاصل می شود.

$$v'_i = \frac{\alpha_i b_i}{\alpha_{lk} - \alpha_i} \quad ۱۸-۹$$

با استفاده از موازنه جرم نیز می توان دبی محدود اجزاء سنگین غیر کلیدی را در فاز مایع پایین برج بدست آورد.

$$l'_i = v'_i + b_i \quad ۱۹-۹$$

از روابط ۹-۱۴ ، ۹-۱۵ ، ۹-۱۸ و ۹-۱۹ مشهود است که دبی محدود این اجزاء مستقل از نسبت جریان برگشتی است و در آن فرض شده که اجزاء سبک غیر کلیدی کاملاً در بالای برج و اجزاء سنگین غیر کلیدی کاملاً پایین برج ظاهر شوند.

در عمل دبی اجزاء غیر کلیدی در طول برج از دبی محدود آنها کمتر نیست ضمناً دبی محدود اجزاء سنگین غیر کلیدی در بالای برج و همچنین دبی محدود اجزاء سبک غیر کلیدی در پایین برج قابل صرف نظر است. دبی اجزاء غیر کلیدی ممکن است نزدیک نقطه خوراک کمی تغییر کند [۵,۴] که این مورد اثر کمی بر محاسبات دارد و در محاسبات در نظر گرفته نمی شود.

منحنی تعادل

برای رسم منحنی تعادل ابتدا باید برای محصول بالای برج محاسبات نقطه شبنم و سپس برای محصول پایین برج محاسبات نقطه حباب انجام دهیم تا دمای بالا و پایین برج بدست آید سپس در دماهای بدست آمده، ضریب فراریت بین اجزاء کلیدی سبک و سنگین محاسبه می شود و از آنها متوسط گیری می شود.

$$\alpha_{Ave} = \sqrt{\alpha_T \alpha_B}$$

α_T : ضریب فراریت متوسط بین اجزاء کلیدی سبک و سنگین برای بالای برج

α_B : ضریب فراریت متوسط بین اجزاء کلیدی سبک و سنگین برای پایین برج

سپس با داشتن α و با استفاده از رابطه زیر می توان منحنی تعادل را رسم کرد.

$$y = \frac{\alpha x}{1 + (\alpha - 1)x}$$

مثال ۹-۱: خوراکی با ترکیب نشان داده شده در جدول زیر و به صورت مایع اشباع وارد برج تقطیر می شود. برج تقطیر مجهز به کندانسور کلی و جوش آور جزئی می باشد نسبت جریان برگشتی به برج $R = 1.4$ می باشد. ترکیب محصولات خروجی از برج نیز در جدول زیر نشان داده شده است. با استفاده از روش ترسیمی تعداد سینی ها لازم برای این جداسازی را بدست آورید.

Component	α	Flow Rates, Moles / hr		
		f	d	b
A	8.0	5	5	
B	4.0	15	15	
C	2.0	20	19	1
D	1.0	25	1	24
E	0.5	20		20
F	0.3	15		15
		100	40	60

حل : در قسمت A جدول ۱-۹ دبی اجزاء محدود توسط معادلات ۱۴-۹ ، ۱۵-۹ ، ۱۸-۹ و ۱۹-۹ محاسبه شده است سپس در قسمت B جدول ۱-۹ دبی اجزاء کلیدی در فاز مایع و بخار برای بالا و پایین برج توسط معادلات ۱-۹ تا ۴-۹ محاسبه شده‌اند. در قسمت C جدول ۱-۹ شیب خطوط عملیاتی بالا و پایین برج و غلظت محصول بالا و پایین برج بر مبنای اجزاء کلیدی بدست آمده است. رسم موارد اخیر روی دیاگرام مک-کیب-تیلی در شکل ۳-۹ نشان داده شده است.

جدول ۱-۹ : محاسبات مثال ۱-۹

A. Limiting (minimum) flow rates of non-key components.								
component	α_i	d_i	\underline{l}_i	\underline{v}_i	α_{lk}	b_i	\underline{v}'_i	\underline{l}'_i
A	8.0	5	0.7	5.7	-	-	-	-
B	4.0	15	5.0	20.0	-	-	-	-
E	0.5	-	-	-	2.0	20	6.7	26.7
F	0.3	-	-	-	2.0	15	2.7	17.7
			5.7	25.7			9.4	44.4

B. Limiting (maximum) flow rates of the combined keys.

$$L_e = L - \sum \underline{l}_i = 1.4 \times (40) - 5.7 = 50.3$$

$$V_e = V - \sum \underline{v}_i = 2.4 \times (40) - 25.7 = 70.3$$

$$V'_e = V' - \sum \underline{v}'_i = 2.4 \times (40) - 9.4 = 86.6$$

$$L'_e = L' - \sum \underline{l}'_i = [1.4 \times (40) + 100] - 44.4 = 111.6$$

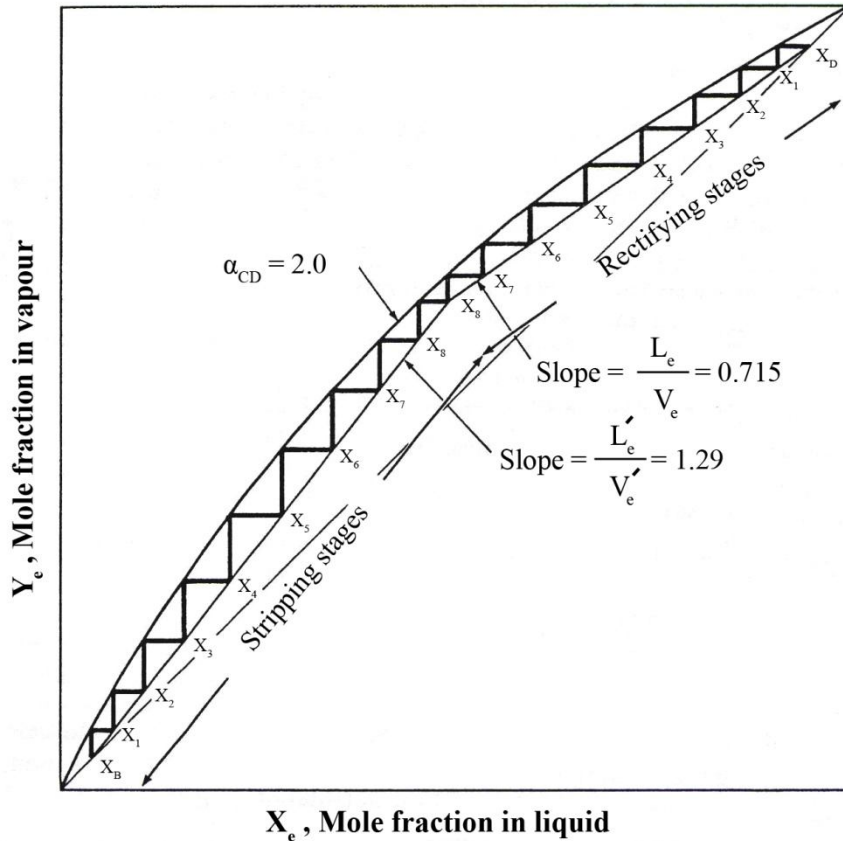
C. Slopes and end points of limiting operating lines.

$$L_e/V_e = 50.3/70.3 = 0.715$$

$$L'_e/V'_e = 111.6/86.6 = 1.29$$

$$(x_D)_e = \frac{19}{19+1} = 0.95$$

$$(x_B)_e = \frac{1}{24+1} = 0.04$$



شکل ۹-۳: حل مثال ۹-۱ با استفاده از روش ترسیمی مک کیب-تیلی

با توجه به شکل ۹-۳، هشت مرحله تعادلی برای بالای برج و نه مرحله تعادلی برای پایین برج لازم است. از آنجا که کندانسور بالای برج کلی است به عنوان مرحله تعادلی محسوب نمی‌شود و هشت سینی برای بالای برج لازم است و چون جوش آور پایین برج جزئی است به عنوان مرحله تعادلی محسوب می‌شود پس هشت سینی نیز برای پایین برج نیاز داریم.

for rectifying section	8 stages
for stripping section	8 stages
for total column	16 stages

حداقل جریان برگشتی به برج

یکی از پارامترهای مهم در تقطیر که بر اقتصاد مسئله نیز تاثیرگذار است نسبت جریان برگشتی به برج است. نسبت جریان برگشتی باید از حداقل جریان برگشتی بیشتر باشد. حداقل جریان برگشتی، نسبتی است که در آن جداسازی امکان‌پذیر بوده اما به بینهایت سینی نیاز است از آنجا که استفاده از بینهایت سینی امکان‌پذیر نیست باید جریان برگشتی بیشتر از حداقل جریان برگشتی باشد. در تحقیقات هنگستیک [۱] سعی

شد که از روش ترسیمی برای بدست آوردن حداقل نسبت جریان برگشتی استفاده شود تا با استفاده از یک روش ساده بتوان نتایج قابل قبولی بدست آورد. این روش شامل مراحل زیر می‌باشد.

۱- دبی محدود برای اجزاء سبک غیر کلیدی برای بالای برج (L_i) با استفاده از معادله ۹-۱۴ و همچنین دبی محدود برای اجزاء سنگین غیر کلیدی برای پایین برج (L_i) با استفاده از معادلات ۹-۱۸ و ۹-۱۹ محاسبه می‌شوند.

۲- منحنی تعادل با استفاده از ضریب فرارایت بین اجزاء کلیدی رسم می‌شود.

۳- خط خوراک^۱ با استفاده از روشی که ذکر خواهد شد رسم می‌شود.

۴- محل تقاطع خط خوراک و منحنی تعادل را به نقطه غلظت محصول بالا برج (x_D) که روی خط ۴۵ درجه قرار دارد متصل می‌کنیم. شیب این خط مساوی $\frac{L_e}{L_e + D}$ است که با برابر قرار دادن شیب خط با مقدار

اخیر می‌توان L_e را بدست آورد.

۵- با داشتن L_e و L_i می‌توان جریان مایع در بالای برج (L) را بدست آورد و با تقسیم کردن L بر دبی محصول بالای برج (D) می‌توان نسبت جریان برگشتی به برج $\left(R = \frac{L}{D}\right)$ را بدست آورد.

$$L = L_e + \sum L_i$$

در این روش از وجود اجزاء سنگین غیر کلیدی در محصول بالای برج و اجزاء سبک غیر کلیدی در محصول پایین برج صرف‌نظر شده است به همین دلیل حداقل جریان برگشتی که از این روش بدست می‌آید ممکن است کمتر از مقدار واقعی آن باشد.

خط خوراک

مقدار q برای یک مخلوط دوجزئی که آنتالپی تبخیر اجزاء در آن یکسان است به صورت زیر می‌باشد.

$$q = \frac{L' - L}{F}$$

معادله اخیر را می‌توان برای یک سیستم چندجزئی که به صورت سیستم دوجزئی تقلیل یافته است به صورت زیر مرتب نمود.

$$q = \frac{L' - L - \sum L'_i + \sum L_i}{F_e} \quad ۹-۲۰$$

همه فاکتورهایی که با اندیس e نشان داده شده‌اند بر حسب دبی اجزاء کلیدی و بدون در نظر گرفتن اجزاء غیر کلیدی می‌باشند. برای مثال F_e دبی اجزاء کلیدی در خوراک ورودی را نشان می‌دهد. در صورتی که آنتالپی تبخیر اجزاء یکسان باشد $L' - L = F_L$ خواهد بود که با این تعریف معادله ۹-۲۰ به صورت زیر بازنویسی می‌شود.

$$q = \frac{F_L - \sum L'_i + \sum L_i}{F_e} \quad ۲۱-۹$$

در معادله اخیر در صورتی که خوراک به صورت دوفازی باشد F_L مولهائی از خوراک ورودی است که به صورت مایع اشباع وارد برج می‌شود. در صورتی که خوراک مایع زیر نقطه اشباع^۱ باشد F_L به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$F_L = \left(1 + \frac{C_{P_L} (T_B - T)}{\Delta H_{vap}} \right) F_e$$

T_B : دمای نقطه حباب

C_{P_L} : ظرفیت گرمایی مایع

ΔH_{vap} : آنتالپی تبخیر

F_e : دبی خوراک بر حسب اجزاء کلیدی

و در صورتی که خوراک به صورت بخار فوق اشباع^۲ باشد F_L به صورت زیر خواهد بود.

$$F_L = - \left(\frac{C_{P_V} (T - T_D)}{\Delta H_{vap}} \right) F_e$$

T_D : دمای نقطه شبنم

C_{P_V} : ظرفیت گرمایی بخار

حال می‌توان خط خوراک را از نقطه خوراک که غلظت آن بر حسب اجزاء کلیدی تعریف شده و روی خط ۴۵ درجه قرار می‌گیرد با شیب $\frac{q}{q-1}$ رسم کرد.

منابع

- 1- Hengstebeck, R. J., "DISTILLATION principles and design procedure," pp. 112-130 , REINHOLD PUBLISHING CORPORATION, New York, 1961
- 2- Hengstebeck, R. J., *Trans. Am. Inst. Chem. Engrs.*, 42, 309 (1946).
- 3- Hengstebeck, R. J., *Chem. Eng. Prog. Symposium Series*, 55 (21), 9 (1959).
- 4- Hengstebeck, R. J., *Petrol. Engr.*, 29 (12), C-6 (1957).
- 5- Hengstebeck, R. J., and D. W. Schubert, *Chem. Eng. Prog.*, 53, 243 (1957).
- 6- Jenny, F. J., *Trans. Am. Inst. Chem. Engrs.*, 35, 635 (1939).

1- Subcooled Liquid
2- Super heated Steam

فصل دهم روش تیلی-گدس^۱

مقدمه

در این قسمت روش تیلی-گدس [۱۳] که توسط لیستر و همکاران^۲ [۱۱] مورد استفاده قرار گرفته است بررسی می‌شود. این روش با روش همگرایی لیستر و همکارانش ترکیب شد تا سرعت همگرایی مسائل بیشتر شود. روش تیلی-گدس توسط لیستر و همکارانش برای برج‌های دارای چند خوراک همراه با جریان جانبی و همچنین بدون جریان جانبی مورد استفاده قرار گرفته است که نتایج رضایت‌بخشی داشته است. در این روش نیازی نیست که غلظت‌های بالا و پایین برج حدس زده شود اما لازم است که توزیع دما، توزیع دبی مایع (L) و توزیع بخار (V) در طول برج حدس زده شوند.

محاسبات سینی به سینی

در روش تیلی-گدس، غلظت سینی‌ها توسط محاسبات سینی به سینی مشخص می‌شوند که این محاسبات یک بار از بالای برج به سمت سینی خوراک و بار دیگر از پایین برج به سمت سینی خوراک انجام می‌شود. در روش لویس-ماتسون نیز محاسبات سینی به سینی به همین ترتیب انجام می‌شود با این تفاوت که در روش تیلی-گدس ابتدا مقادیر $v_{i,n}/d_i$ و $v_{i,m}/b_i$ بدست می‌آیند اما در روش لویس-ماتسون ابتدا مقادیر v_i و l_i محاسبه می‌شوند.

معادله‌های اساسی در روش تیلی-گدس برای محاسبات سینی به سینی به صورت زیر بدست می‌آیند. در این روش، روابط تعادلی برای جزء i روی سینی‌های بالای برج (سینی n) بر حسب ضرایب جذب به صورت زیر تعریف می‌شوند.

1- Thiele-Geddes
2- Lyster et al

$$x_n = \frac{y_n}{k_n}$$

$$L_n x_n = \frac{L_n}{k_n} V_n y_n \quad 1-10$$

$$l_n = A_n v_n$$

$$\frac{l_n}{d} = \frac{v_n}{d} A_n$$

موازنه جرم برای جزء i حول بالای برج به صورت زیر می‌باشد.

$$v_n = l_{n+1} + d$$

با تقسیم کردن معادله فوق بر d خواهیم داشت.

$$\frac{v_n}{d} = \frac{l_{n+1}}{d} + 1 \quad 2-10$$

معادله 1-10 را برای سینی $n+1$ نوشته و مقدار l_{n+1}/d را از این معادله بدست آورده و در معادله 2-10 جایگزین می‌کنیم. با این کار در حقیقت موازنه جرم و معادله تعادل را با یکدیگر ترکیب کرده‌ایم که معادله حاصل شده به صورت زیر خواهد بود.

$$\frac{v_n}{d} = \frac{v_{n+1}}{d} A_{n+1} + 1 \quad 3-10$$

در صورتی که معادله 1-10 را برای سینی n نوشته و مقدار v_n/d را از این معادله بدست آورده و در معادله 2-10 جایگزین کنیم رابطه زیر بدست می‌آید.

$$\frac{l_n}{d} = A_n \left(\frac{l_{n+1}}{d} + 1 \right) \quad 4-10$$

ضریب جذب در هر سینی با استفاده از دما، دبی مایع و دبی بخار (که همگی حدس زده شده‌اند) بدست می‌آیند.

از معادله 4-10 می‌توان مقادیر l/d را روی هر سینی محاسبه نمود. این محاسبات از بالاترین سینی شروع می‌شود. پس محاسبات برای سینی N به صورت زیر خواهد بود.

$$\frac{l_N}{d} = A_N \left(\frac{l_{N+1}}{d} + 1 \right)$$

در صورتی که بالای برج از کندانسور کلی استفاده شود $x_{i,D} = x_{i,N+1}$ خواهد بود و نتیجه زیر حاصل می‌شود.

$$\frac{l_{N+1}}{L_{N+1}} = \frac{d}{D} \quad \Rightarrow \quad \frac{l_{N+1}}{d} = \frac{L_{N+1}}{D} = R$$

پس برای شروع محاسبات باید نسبت جریان برگشتی به برج (R) را داشته باشیم. با استفاده از معادله 4-10 می‌توان نسبت l/d را برای همه سینی‌های بالای برج بدست آورد این کار تا سینی بالای سینی خوراک (سینی $M+2$) انجام می‌شود و l_{M+2}/d بدست می‌آید سپس باید محاسبات سینی به سینی را برای پایین برج انجام دهیم.

رابطه تعادلی برای جزء i روی سینی‌های پایین برج (سینی m) بر حسب ضریب دفع^۱ به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$y_m = k_m x_m$$

$$V_m y_m = \frac{k_m V_m}{L_m} L_m x_m \quad 5-10$$

$$v_m = S_m l_m$$

$$\frac{v_m}{b} = \frac{l_m}{b} S_m$$

موازنه جرم برای جزء i حول پایین برج به صورت زیر می‌باشد.

$$\frac{l_{m+1}}{b} = \frac{v_m}{b} + 1 \quad 6-10$$

با ترکیب موازنه جرم و معادله تعادل، معادله زیر حاصل خواهد شد.

$$\frac{l_{m+1}}{b} = \frac{l_m}{b} S_m + 1 \quad 7-10$$

از سینی اول پایین برج به سمت سینی خوراک محاسبات را انجام می‌دهیم. از آنجا که جوش‌آور جزئی، اولین مرحله تعادلی پایین برج محسوب می‌شود سینی اول برج به عنوان دومین مرحله تعادلی محسوب می‌شود و معادله آن به صورت زیر خواهد بود.

$$\frac{l_2}{b} = S_1 + 1$$

به صورت زیر می‌توان ثابت کرد که $S_1 = \frac{V_1 K_1}{B}$ می‌باشد.

با استفاده از رابطه ۵-۱۰ برای مرحله تعادلی اول خواهیم داشت.

$$\frac{v_1}{b} = \frac{l_1}{b} S_1$$

از طرفی می‌دانیم که $l_1 = b$ می‌باشد پس با استفاده از رابطه اخیر خواهیم داشت.

$$\frac{v_1}{b} = S_1$$

و همچنین می‌دانیم در جوش‌آور جزئی جریان V_1 و B با هم در حال تعادل هستند پس رابطه تعادلی زیر را برای این دو جریان می‌توان نوشت.

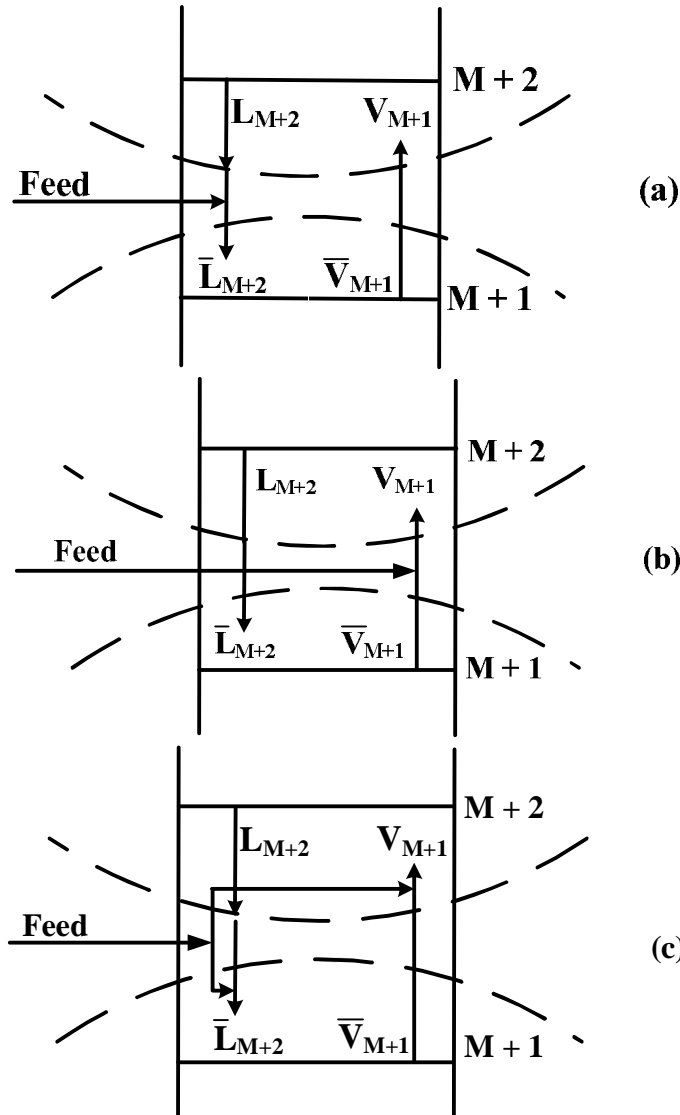
$$\frac{v_1}{V_1} = k_1 \frac{b}{B} \quad \Rightarrow \quad \frac{v_1}{b} = \frac{k_1 V_1}{B}$$

با استفاده از دو رابطه اخیر نتیجه زیر حاصل خواهد شد.

$$S_1 = \frac{V_1 K_1}{B}$$

ضریب دفع در هر مرحله تعادلی با استفاده از دما، دبی مایع و دبی بخار (که همگی حدس زده شده‌اند) بدست می‌آیند.

با استفاده از رابطه $10-7$ مقادیر l/b روی هر سینی بدست می‌آید این محاسبات تا سینی خوراک ادامه می‌یابد تا \bar{L}_{M+2}/b_i بدست آید. ادامه محاسبات به شرایط ترمودینامیکی خوراک ورودی بستگی دارد. در شکل 10-1 حالت‌های مختلف خوراک ورودی به برج تقطیر نشان داده شده است.



شکل 10-1: تاثیر خوراک ورودی بر دبی مایع و بخار قسمت بالا و پایین برج (a) خوراک مایع اشباع یا مایع زیر نقطه اشباع است. (b) خوراک بخار اشباع یا بخار فوق اشباع است. (c) خوراک به صورت دوفازی وارد برج می‌شود.

در صورتی که خوراک به صورت مایع اشباع وارد برج شود دبی اجزاء فاز بخار که از پایین برج وارد قسمت بالای برج می‌شود با هم برابر است پس خواهیم داشت.

$$v_{i,M+1} = \bar{v}_{i,M+1}$$

با ترکیب معادلات ۱۰-۲ و ۱۰-۶ خواهیم داشت.

$$\frac{b_i}{d_i} = \frac{v_{i,M+1}/d_i}{\bar{v}_{i,M+1}/b_i} = \frac{l_{i,M+2}/d_i + 1}{\bar{l}_{i,M+2}/b_i - 1} \quad ۱۰-۸$$

با نوشتن موازنه جرم برای جزء i حول کل برج می‌توان مقادیر b_i و d_i را به صورت زیر بدست آورد.

$$d_i + b_i = F x_{i,F}$$

$$d_i = \frac{F x_{i,F}}{1 + b_i/d_i} \quad ۱۰-۹$$

$$b_i = (b_i/d_i) d_i \quad ۱۰-۱۰$$

از آنجا که مقادیر b_i و d_i بدست آمده با استفاده از حدس توزیع دما، دبی مایع و دبی بخار بدست آمده‌اند ممکن است صحیح نباشند و مجموع مقادیر d_i ممکن است منجر به محاسبه دبی محصول بالای برج (D) نشود بنابراین در هر مرحله از سعی و خطا باید d'_i طوری بدست آورده شوند که مجموع آنها برابر با دبی محصول بالای برج شود.

$$\sum_{i=1}^{i=C} d'_i = D_{\text{specified}} \quad ۱۰-۱۱$$

برای این منظور یک روش توسط لیستر و همکارانش ارائه شد. در این روش معادله ۱۰-۹ اصلاح شده و به صورت زیر نوشته شد.

$$d'_i = \frac{F x_{i,F}}{1 + (b_i/d_i) \theta} \quad ۱۰-۱۲$$

باید مقدار θ طوری بدست آورده شود که شرط معادله ۱۰-۱۱ برقرار شود سپس مقادیر b'_i را نیز می‌توان توسط معادله زیر بدست آورد.

$$b'_i = \theta \frac{b_i}{d_i} d'_i \quad ۱۰-۱۳$$

معادله ۱۰-۱۱ را برای روش پیشنهادی لیستر و همکارانش می‌توان به صورت زیر نوشت.

$$D - \sum_{i=1}^{i=C} \frac{F x_{i,F}}{1 + \theta (b_i/d_i)} = 0 \quad ۱۰-۱۴$$

این معادله را می‌توان با استفاده از روش نیوتن رافسون حل کرد تا مقدار θ بدست آید. در صورتی که $\theta = 1$ بدست آید مشخص می‌شود که مقادیر حدس دما، دبی مایع و دبی بخار صحیح بوده است اما در صورتی که مخالف یک شود باید حدس جدیدی برای متغیرهای ذکر شده بدست آورد.

انتخاب حدس جدید برای دما، دبی مایع و دبی بخار

با استفاده از محاسبات سینی به سینی می‌توان مقادیر l_i/d_i را برای سینی‌های بالای برج و مقادیر l_i/b_i را برای سینی‌های پایین برج بدست آورد.

$$x_{i,n} = \frac{(l_{i,n}/d_i) d'_i}{\sum_{i=1}^{i=C} (l_{i,n}/d_i) d'_i} \quad ۱۵-۱۰$$

$$x_{i,m} = \frac{(l_{i,m}/b_i) b'_i}{\sum_{i=1}^{i=C} (l_{i,m}/b_i) b'_i} \quad ۱۶-۱۰$$

رابطه ۱۵-۱۰ برای غلظت اجزاء روی سینی‌های بالای برج و رابطه ۱۶-۱۰ برای غلظت اجزاء روی سینی‌های پایین برج است. با استفاده از غلظت اجزاء روی هر سینی و انجام محاسبات نقطه حباب می‌توان دمای جدید هر سینی را بدست آورد. برای اینکه در محاسبات نوسان ایجاد نشود بهتر است دمای هر سینی به اندازه ۱۰٪ مقدار دمای جدید منهای دمای قدیمی تغییر داده شود.

با نوشتن موازنه انرژی برای قسمت بالا و پایین برج (به صورت جداگانه) می‌توان مقدار L و V را برای هر قسمت بدست آورد. با استفاده از دما و غلظت هر سینی می‌توان آنتالپی مولی جریان‌های مایع و بخار را بدست آورد. در صورتی که فاز مایع و بخار را ایده‌آل در نظر بگیریم آنتالپی مولی جریان مایع و بخار به صورت زیر خواهد بود.

$$H_n = \sum_{i=1}^C y_{i,n} H_{i,n}$$

$$h_n = \sum_{i=1}^C x_{i,n} h_{i,n}$$

موازنه انرژی برای بخش بالای برج به صورت زیر خواهد بود.

$$V_n H_n = L_{n+1} h_{n+1} + D h_D + q_c$$

از آنجا که با استفاده از موازنه جرم $L_{n+1} = V_n + D$ می‌باشد می‌توان در رابطه اخیر L_{n+1} را حذف نمود.

$$V_n = \frac{D(h_D - h_{n+1}) + q_c}{H_n - h_{n+1}} \quad ۱۷-۱۰$$

موازنه انرژی برای بخش پایین برج به صورت زیر می‌باشد.

$$L_{m+1} h_{m+1} + q_r = V_m H_m + B h_B$$

با استفاده از موازنه جرم ($L_{m+1} = V_m + D$) می‌توان در رابطه اخیر L_{m+1} را حذف نمود.

$$V_m = \frac{B(h_{m+1} - h_B) + q_r}{H_m - h_{m+1}} \quad ۱۸-۱۰$$

با استفاده از روابط ۱۷-۱۰ و ۱۸-۱۰ می‌توان مقادیر دبی بخار در قسمت بالا و پایین برج را تصحیح نمود سپس با موازنه جرم، مقادیر دبی مایع نیز در هر قسمت تصحیح خواهد شد. در این قسمت نیز سعی می‌شود دبی مایع و بخار در هر قسمت از برج به اندازه ۱۰٪ مقدار دبی جدید منهای دبی قدیم تغییر داده شود تا از نوسان در حل مسائل جلوگیری شود.

شرط همگرایی

در صورتی که شرط زیر برقرار باشد مسئله همگرا شده است.

$$D_{\text{specified}} - D_{\text{calculated}} < 10^{-5}$$

معمولا برای برقراری شرط اخیر ، تعداد مراحل سعی و خطا کمتر از هشت مرحله است. پس از اتمام مراحل سعی و خطا با شرط اخیر ، خطای دمای بدست آمده کمتر از ۰.۱٪ خواهد بود.

مثال ۱۰-۱ : 100 kgmole/sec از خوراکی با ترکیب زیر به صورت مایع اشباع وارد یک برج تقطیر می‌شود. برج مجهز به کندانسور کلی و جوش‌آور جزئی و شامل ۱۰ سینی می‌باشد. چهار سینی مربوط به بالای برج و شش سینی مربوط به پایین برج است فشار کندانسور 120 Psia است و ماکزیمم مقدار بخار در بالای برج 1.75 برابر دبی خوراک ورودی است. نسبت محصول بالای برج به خوراک $D/F = 0.489$ می‌باشد. ترکیب محصولات خروجی را با استفاده از روش تیلی-گدس بدست آورید. سپس حدس‌های مختلف دما و دبی بخار را رسم نمایید.

Component	$F x_F$
C ₃	5
i-C ₄	15
n-C ₄	25
i-C ₅	20
n-C ₅	35

حل : برای نشان دادن روش حل مسئله ، یک مرحله از سعی و خطا توسط روش تیلی-گدس انجام داده می‌شود.

حدس اولیه دما ، دبی مایع ، دبی بخار و مقادیر k مربوط به اجزاء با توجه به دماهای حدس زده شده در جدول ۱۰-۱ نشان داده شده است.

جدول ۱۰-۱ : حدس‌های اولیه برای مثال ۱۰-۱

Stage	V	L	T (°F)	k				
				C ₂	C ₄	n-C ₄	i-C ₅	n-C ₅
10	175	126.1	163.5	2.77	1.38	1.04	0.500	0.420
9	↓	↓	178.5	3.10	1.60	1.22	0.590	0.495
8			191.3	3.40	1.78	1.37	0.685	0.585
7			202.0	3.63	1.94	1.49	0.770	0.660
6			210.0	3.84	2.06	1.60	0.825	0.702
5			216.4	4.00	2.21	1.73	0.895	0.765
4			221.7	4.15	2.28	1.80	0.925	0.800
3			226.3	4.28	2.36	1.88	0.965	0.835
2			230.3	4.36	2.43	1.94	1.000	0.870
1			234.0	4.42	2.50	1.99	1.030	0.890

محاسبات سینی به سینی برای بالای برج توسط روابط زیر انجام می‌شود.

$$\frac{l_N}{d} = A_N (R + 1)$$

$$\frac{l_n}{d} = A_n \left(\frac{l_{n+1}}{d} + 1 \right)$$

این محاسبات از بالای برج تا سینی خوراک ادامه می‌یابد تا $l_{i,M+2}/d_i$ بدست آید. این محاسبات در جدول ۱۰-۲ نشان داده شده است.

جدول ۱۰-۲: محاسبات سینی به سینی برای بالای برج

Component	R+1	A ₁₀	$\frac{l_{10}}{d}$	$\frac{l_{10}}{d} + 1$	A ₉	$\frac{l_9}{d}$
C ₃	3.58	0.260	0.931	1.931	0.232	0.448
i-C ₄	3.58	0.522	1.87	2.87	0.450	1.29
n-C ₄	3.58	0.693	2.48	3.48	0.590	2.05
i-C ₅	3.58	1.44	5.16	6.16	1.22	7.52
n-C ₅	3.58	1.72	6.16	7.17	1.46	10.5

Component	$\frac{l_9}{d} + 1$	A ₈	$\frac{l_8}{d}$	$\frac{l_8}{d} + 1$	A ₇	$\frac{l_7}{d}$
C ₃	1.448	0.212	0.307	1.307	0.198	0.259
i-C ₄	2.29	0.405	0.927	1.927	0.371	0.715
n-C ₄	3.05	0.526	1.60	2.60	0.484	1.26
i-C ₅	8.52	1.05	8.95	9.95	0.936	9.31
n-C ₅	11.5	1.23	14.1	15.1	1.09	16.5

همچنین محاسبات سینی به سینی برای پایین برج با استفاده از رابطه زیر انجام می‌شود.

$$\frac{l_{m+1}}{b} = \frac{l_m}{b} S_m + 1$$

این محاسبات از پایین برج تا سینی خوراک ادامه می‌یابد تا $l_{i,M+2}/b_i$ بدست آید. این محاسبات در جدول ۱۰-۳ نشان داده شده است.

جدول ۱۰-۳: محاسبات سینی به سینی برای پایین برج

Component	S ₁	$\frac{l_2}{b}$	S ₂	$\frac{l_2}{b} S_2$	$\frac{l_3}{b}$	S ₃
C ₃	15.1	16.1	3.37	54.3	55.3	3.13
i-C ₄	8.56	9.56	1.88	18.0	19.0	1.83
n-C ₄	6.81	7.81	1.50	11.7	12.7	1.45
i-C ₅	3.53	4.53	0.774	3.51	4.51	0.747
n-C ₅	3.05	4.05	0.673	2.73	3.73	0.646

Component	$\frac{l_3}{b} S_3$	$\frac{l_4}{b}$	S ₄	$\frac{l_4}{b} S_4$	$\frac{l_5}{b}$
C ₃	183.0	184.0	3.21	590.6	591.6
i-C ₄	34.8	35.8	1.76	63.0	64.0
n-C ₄	18.4	19.4	1.39	27.0	28.0
i-C ₅	3.37	4.37	0.716	3.13	4.13
n-C ₅	2.41	3.41	0.619	2.11	3.11

Component	S ₅	$\frac{l_5}{b} S_5$	$\frac{l_6}{b}$	S ₆	$\frac{l_6}{b} S_6$	$\frac{l_7}{b}$
C ₃	3.10	1834	1835	2.97	5450	5451
i-C ₄	1.71	109.4	110.4	1.59	175	176
n-C ₄	1.34	37.5	38.5	1.24	47.7	48.7
i-C ₅	0.693	2.86	3.86	0.638	2.46	3.46
n-C ₅	0.592	1.84	2.84	0.543	1.54	2.54

چون خوراک به صورت مایع اشباع وارد برج می‌شود نسبت d_i/b_i با استفاده از معادله ۱۰-۸ به صورت زیر بدست می‌آید.

$$\frac{b_i}{d_i} = \frac{l_{i,7}/d_i + 1}{\bar{l}_{i,7}/b_i - 1}$$

مقادیر d_i/b_i با استفاده از رابطه اخیر و مقادیر d_i با استفاده از رابطه ۱۰-۹ بدست می‌آیند. نتایج این محاسبات در جدول زیر نشان داده شده است.

Component	$\frac{l_7}{d} - 1$	$\frac{\bar{l}_7}{b} - 1$	$\frac{b}{d}$	$1 + \frac{b}{d}$	$F x_F$	d
C ₃	1.26	5450	0.000231	1.000	5	5.00
i-C ₄	1.71	175	0.00977	1.01	15	14.85
n-C ₄	2.26	47.7	0.0474	1.047	25	23.88
i-C ₅	10.3	2.46	4.19	5.19	20	3.85
n-C ₅	17.5	1.54	11.4	12.4	35	2.82
					100	50.4

مقدار محصول بالای برج در این حدس $D_{Calculated} = 50.4$ بدست آمده است از آنجا که در صورت مسئله $D_{Specified} = 48.9$ است باید با استفاده از معادله ۱۰-۱۴ مقدار θ طوری بدست آورده شود که معادله ۱۰-۱۱ صادق باشد. مقدار θ بدست آمده $\theta = 1.25$ خواهد بود که در این شرایط $\sum d'_i = 48.9$ است. با استفاده از مقادیر d'_i ، θ و قرار دادن آنها در معادله ۱۰-۱۳ می‌توان مقادیر تصحیح شده b'_i را بدست آورد. نتیجه این محاسبات در جدول زیر نشان داده شده است.

Component	$\frac{b}{d}$	d'	$d'\theta$	b'	x_D	x_1
C ₃	0.000231	5.00	6.25	0.00144	0.102	0
i-C ₄	0.00977	14.82	18.53	0.181	0.303	0.004
n-C ₄	0.0474	23.60	29.50	1.40	0.482	0.027
i-C ₅	4.19	3.21	4.01	16.79	0.066	0.329
n-C ₅	11.4	2.30	2.88	32.7	0.047	0.640
		48.9		51.1	1.000	1.000

از آنجا که D محاسبه شده ($D_{Calculated}$) و D تعیین شده در مسئله ($D_{Specified}$) با هم برابر نیستند باید مسئله را بار دیگر با حدس‌های دیگری دنبال کنیم. با جایگذاری اطلاعات بدست آمده در روابط ۱۰-۱۵ و ۱۰-۱۶ می‌توان غلظت اجزاء در فاز مایع روی سینی‌ها را بدست آورد. نتیجه این محاسبات در جدول ۱۰-۴ نشان داده شده است.

جدول ۱۰-۴ : غلظت اجزاء در فاز مایع روی سینی‌ها برای حدس اولیه مثال ۱۰-۱

Component	x_1	$\frac{l_2}{b}b'$	x_2	$\frac{l_3}{b}b'$	x_3	$\frac{l_4}{b}b'$	x_4
C ₃	0.000	0.0232	0.000	0.0796	0.000	0.279	0.001
i-C ₄	0.004	1.73	0.008	3.44	0.016	6.48	0.030
n-C ₄	0.027	10.9	0.049	17.8	0.081	27.2	0.124
i-C ₅	0.329	76.1	0.344	75.7	0.346	73.4	0.335
n-C ₅	0.640	132.4	0.599	122.0	0.557	111.5	0.510
	<u>1.000</u>	<u>221.1</u>	<u>1.000</u>	<u>219.0</u>	<u>1.000</u>	<u>218.9</u>	<u>1.000</u>

Component	$\frac{l_5}{b}b'$	x_5	$\frac{l_6}{b}b'$	x_6	$\frac{l_7}{b}b'$	x_7
C ₃	0.852	0.004	2.65	0.011	1.295	0.012
i-C ₄	11.6	0.052	20.0	0.085	10.6	0.097
n-C ₄	39.2	0.176	53.9	0.230	29.7	0.271
i-C ₅	69.3	0.311	64.8	0.277	29.9	0.273
n-C ₅	101.7	0.447	92.9	0.397	37.9	0.347
	<u>226.6</u>	<u>1.000</u>	<u>234.2</u>	<u>1.000</u>	<u>109.4</u>	<u>1.000</u>

Component	$\frac{l_8 b'}{b}$	x_8	$\frac{l_9 b'}{b}$	x_9	$\frac{l_{10} b'}{b}$	x_{10}
C ₃	1.535	0.013	2.240	0.019	4.66	0.038
i-C ₄	13.7	0.120	19.1	0.162	27.7	0.228
n-C ₄	37.8	0.331	48.4	0.410	58.5	0.481
i-C ₅	28.7	0.252	24.1	0.204	16.6	0.136
n-C ₅	32.4	0.284	24.1	0.204	14.2	0.117
	<u>114.1</u>	<u>1.000</u>	<u>118.0</u>	<u>1.000</u>	<u>121.7</u>	<u>1.000</u>

با انجام محاسبات نقطه حباب روی هر سینی می‌توان دمای هر سینی را بدست آورد که نتیجه این محاسبات در جدول ۱۰-۵ آورده شده است. همچنین با استفاده از محاسبات نقطه حباب می‌توان غلظت بخار خروجی از هر سینی را نیز بدست آورد. در صورتی که فاز بخار و مایع ایده‌آل در نظر گرفته شود با استفاده از غلظت مایع و بخار می‌توان آنتالپی مولی مایع و بخار را بدست آورد.

$$H_n = \sum_{i=1}^C y_{i,n} H_{i,n}$$

$$h_n = \sum_{i=1}^C x_{i,n} h_{i,n}$$

با نوشتن موازنه انرژی حول کندانسور می‌توان بار حرارتی کندانسور (q_c) را بدست آورد.

$$q_c = V_n (H_N - h_D) = 175 (18900 - 10720) = 1426250 \text{ Btu/100 mole of feed}$$

و با نوشتن موازنه انرژی حول کل برج می‌توان بار حرارتی جوش‌آور (q_r) را نیز بدست آورد.

$$\begin{aligned} q_r &= D h_D + B h_B + q_c - F h_F \\ &= (48.9)(10630) + (51.1)(17080) + 1426250 - (100)(13540) \\ &= 1464850 \text{ Btu/100 moles of feed} \end{aligned}$$

حال با استفاده از بار حرارتی کندانسور (q_c)، بار حرارتی جوش‌آور (q_r) و آنتالپی مولی جریان مایع و بخار می‌توان مقادیر مایع (L) و بخار (V) را با استفاده از معادله ۱۰-۱۷، ۱۰-۱۸ برای بالا و پایین برج تصحیح کرد. نتیجه این محاسبات در جدول ۱۰-۵ نشان داده شده است.

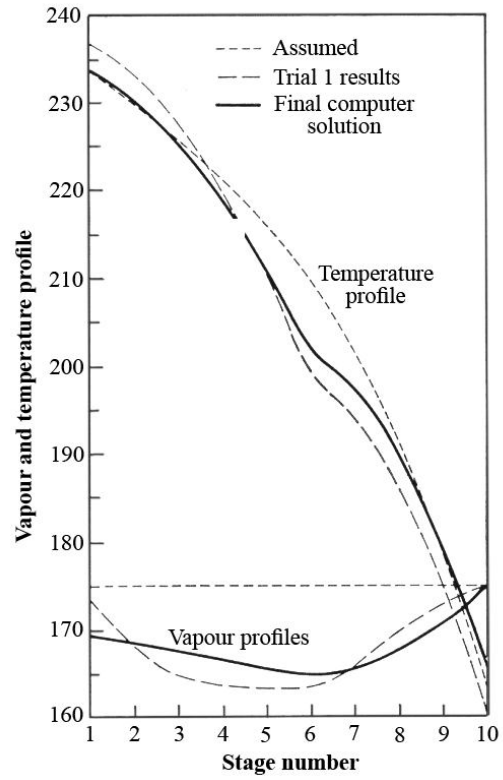
توزیع دما و دبی مایع و بخار در طول برج با توزیع این متغیرها برای حل نهایی مسئله در شکل ۱۰-۲ مقایسه شده است.

جدول ۱۰-۵: حدس جدید دمای سینی‌ها و دبی مایع و بخار

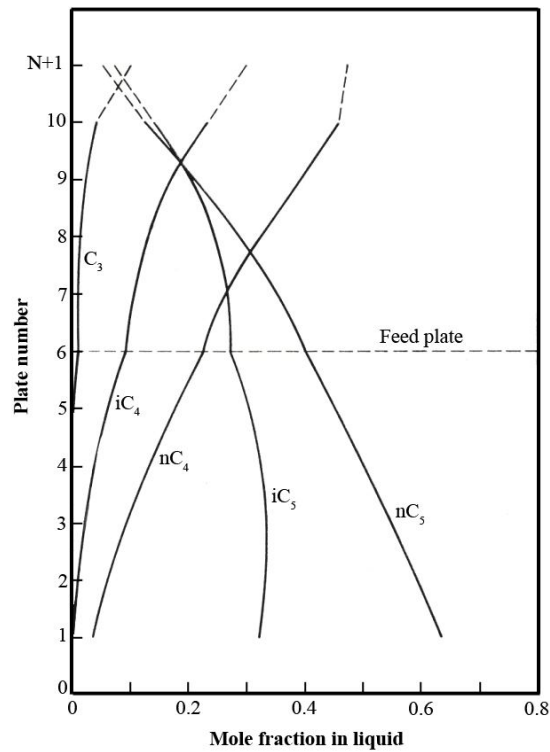
n	New t	$h_D - h_{n+1}$	$D(h_D - h_{n+1}) + q_c$	$H_n + h_{n+1}$	<i>V</i>	<i>L</i>
10	160.0	0	1,426,000	8150	175.0	124.0
9	175.0	-1220	1,367,000	7900	172.9	119.6
8	186.0	-2190	1,319,000	7830	168.5	117.6
7	194.0	-3010	1,279,000	7680	166.5	114.2
6	200.0	-3490	1,256,000	7700	163.1	214.3

m	New t	$h_{m+1} - h_B$	$B(h_{m+1} - h_B) + q_r$	$H_m - h_{m+1}$	<i>V</i>	<i>L</i>
5	211.0	-2480	1,338,000	8200	163.2	214.7
4	220.0	-1780	1,374,000	8400	163.6	215.5
3	228.0	-1130	1,407,000	8560	164.4	221.1
2	233.5	-560	1,438,000	8460	170.0	224.0
1	237.5	-210	1,454,000	8410	172.9	51.1

در شکل ۱۰-۳ توزیع غلظت برای جواب نهایی نشان داده شده است. همانطور که مشهود است جداسازی بسیار خوبی بین nC_4 و iC_5 انجام می‌شود. سینی‌ها از پایین به بالا شماره‌گذاری شده‌اند.



شکل ۱۰-۲: مقایسه توزیع دما و دبی بخار برای حدس اولیه، مرحله اول سعی و خطا و جواب نهایی مسئله



شکل ۱۰-۳: توزیع غلظت برای جواب نهایی

منابع

- 1- Amundson, N. R., and A. J. Pontinen , *Ind. Eng. Chem.*, 50, 730 (1958).
- 2- Amundson, N. R., A. J. Pontinen, and J. W. Tierney , *AIChE. J.*, 5, 295 (1959).
- 3- Bonner, J. S., *Proc. Am. Petrol. Inst.*, 36, sec. III, 238 (1956).
- 4- Brown, G. G., and M. Souder, Jr., *Ind. Eng. Chem.*, 24, 519 (1932).
- 5- Donnell, J. W., and K. Turbin , *Chem. Eng.*, 58, 112 (July, 1951).
- 6- Edmister, W. C., *AIChE. J.*, 3, 165 (1957).
- 7- Greenstadt, J., Y. Brad, and B. Morse , *Ind. Eng. Chem.*, 50, 1644 (1958).
- 8- Horton, G., and W. B. Franklin , *Ind. Eng. Chem.*, 32, 1384 (1940).
- 9- Kremser, A., *Natl. Petrol. News*, 22 (May 21, 1930).
- 10- Lewis, W. K., and G. L. Matheson , *Ind. Eng. Chem.*, 24, 494 (1932).
- 11- Lyster, W. N., S. L. Sullivan, Jr., D. S. Billingsley, and C. D. Holland , *Petrol. Refiner*, 38(6), 221 (1959) ; 38(7), 151 (1959); 38(10), 139 (1959).
- 12- Rose, A., R. F. Sweeny, and V. N. Schrodtt , *Ind. Eng. Chem.*, 50, 737 (1958).
- 13- Thiele, E. W., and R. L. Geddes , *Ind. Eng. Chem.*, 25, 289 (1933).

فصل یازدهم

بهینه‌سازی نسبت جریان برگشتی و تعداد سینی‌ها

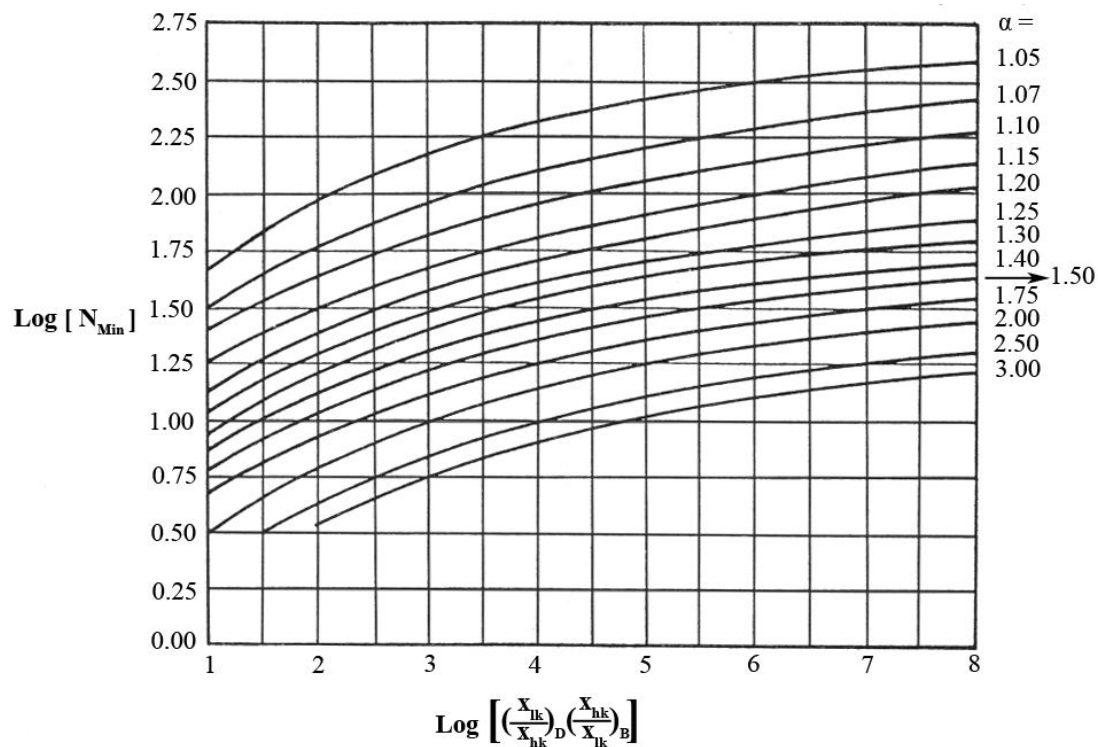
مقدمه

از نتایج تحقیقات وینکل و تاد^۱ از دانشگاه تگزاس یک روش گرافیکی میان بردست آمده است که می‌توان از آن برای بردست آوردن نسبت جریان برگشتی بهینه (R_{op}) و همچنین تعداد مراحل تعادلی بهینه (N_{op}) استفاده نمود. هزینه کل جداسازی یک مخلوط چندجزئی در حالت بهینه به حداقل خواهد رسید.

روش وینکل و تاد

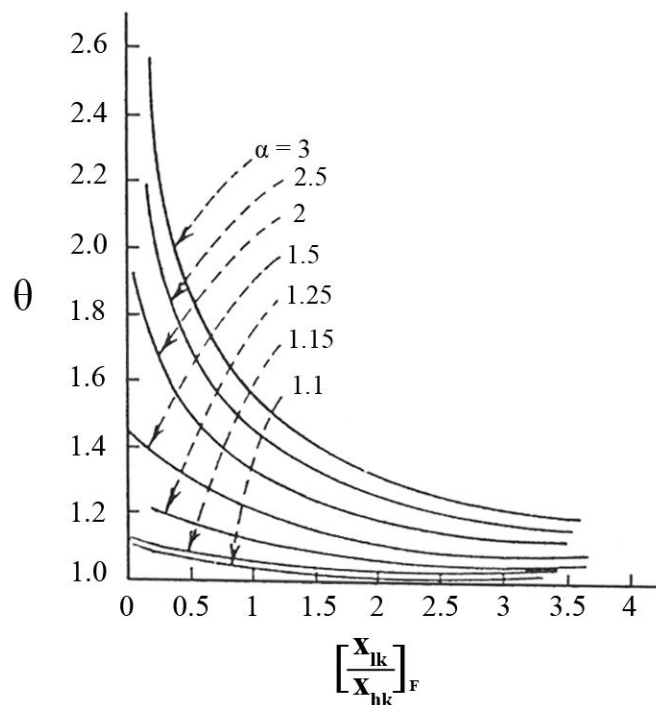
این روش بر پایه موارد زیر استوار است.

۱- استفاده از معادله فنسکی برای بردست آوردن حداقل تعداد سینی‌ها (شکل ۱-۱۱)



شکل ۱-۱: شمای گرافیکی معادله فنسکی برای بدست آوردن حداقل تعداد سینی‌ها

۲- استفاده از روش آندروود برای بدست آوردن حداقل نسبت جریان برگشتی (شکل ۱-۲)



شکل ۱-۲: پارامتر آندروود (θ) بر حسب نسبت اجزاء کلیدی در خوراک

۳- استفاده از تصحیح گیلیلاند برای ارتباط دادن نسبت جریان برگشتی و تعداد سینی‌ها در این روش که به روش وینکل و تاد موسوم است هشتصد مورد جداسازی چندجزئی مورد بررسی قرار گرفته است که نتایج زیر حاصل شده است.

- ۱- اثر فشار : فشار اثر محسوسی بر مقدار بهینه نسبت جریان برگشتی و تعداد بهینه سینی‌ها ندارد.
- ۲- اثر دبی خوراک : مقدار بهینه تعداد سینی‌ها و مقدار بهینه نسبت جریان برگشتی با تغییر دبی خوراک تغییر خواهند کرد. مقدار $(N/N_{Min})_{opt}$ با افزایش دبی خوراک افزایش یافته و مقدار $(R/R_{Min})_{opt}$ با افزایش دبی خوراک کاهش می‌یابد.
- ۳- نوع مواد بکار رفته در تجهیزات : معمولاً برج‌ها از فلزاتی همچون کربن استیل^۱، فولاد زنگ‌نزن^۲ و مونل^۳ ساخته می‌شوند که اثر مستقیمی بر $(N/N_{Min})_{opt}$ و $(R/R_{Min})_{opt}$ دارد. به طور کلی با افزایش هزینه مواد (M_C) ، مقدار $(N/N_{Min})_{opt}$ و $(R/R_{Min})_{opt}$ کاهش خواهد یافت.
- ۴- هزینه عملیاتی : هزینه‌های عملیاتی برج تقطیر شامل هزینه بخار، آب خنک کننده و برق مصرفی می‌باشد. هزینه‌های عملیاتی بخشی از هزینه‌های کل را تشکیل می‌دهند با حداقل نمودن هزینه‌های کل می‌توان بهینه‌سازی را انجام داد پس هزینه عملیاتی روی تعداد بهینه سینی‌ها و مقدار بهینه نسبت جریان برگشتی تاثیر خواهد گذاشت. به طور کلی وقتی هزینه‌های عملیاتی در نظر گرفته می‌شود مقدار بهینه $(N/N_{Min})_{opt}$ افزایش و مقدار $(R/R_{Min})_{opt}$ کاهش خواهد یافت.

فرمولاسیون

برای اینکه ارتباط $(N/N_{Min})_{opt}$ و $(R/R_{Min})_{opt}$ با سایر پارامترها بدست آید یک برج به عنوان برج مبنا در نظر گرفته می‌شود و ضرایب تصحیح برای برج‌های دیگر در آن ضرب خواهد شد این ضرایب تصحیح برای در نظر گرفتن اثر دبی خوراک، قیمت مواد سازنده برج و عمر دستگاه می‌باشد. یک برج با مشخصات زیر به عنوان برج مبنا در نظر گرفته می‌شود.

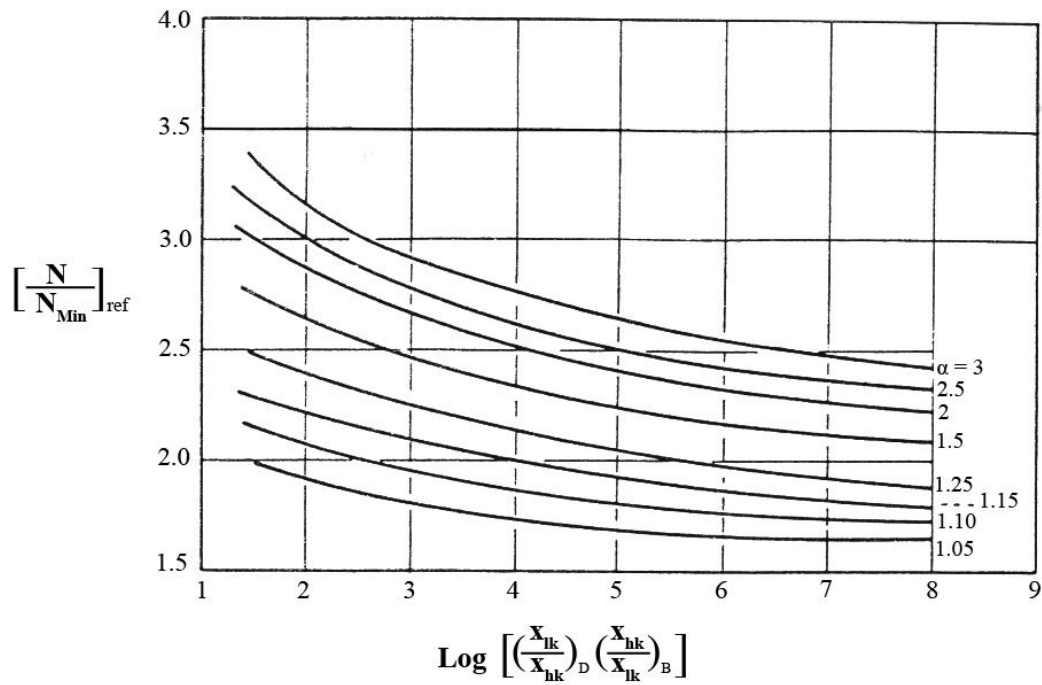
برجی از جنس کربن استیل دارای قطر 3 m و عمر مفید ۲ سال که در فشار 696 kpa کار می‌کند و راندمان سینی‌ها ۸۰٪ است به عنوان برج مبنا در نظر گرفته می‌شود.

مقدار $(N/N_{Min})_{opt}$ برای برج مبنا که به عنوان $(N/N_{Min})_{Ref}$ در نظر گرفته می‌شود بر حسب غلظت بالا و پایین برج برای ضرایب فراریت مختلف در شکل ۱۱-۳ نشان داده شده است. تابعیت این پارامترها از رابطه فنسکی برگرفته شده است. مقدار $(N/N_{Min})_{opt}$ برای هر برج توسط رابطه زیر به $(N/N_{Min})_{Ref}$ به برج مبنا ارتباط داده می‌شود.

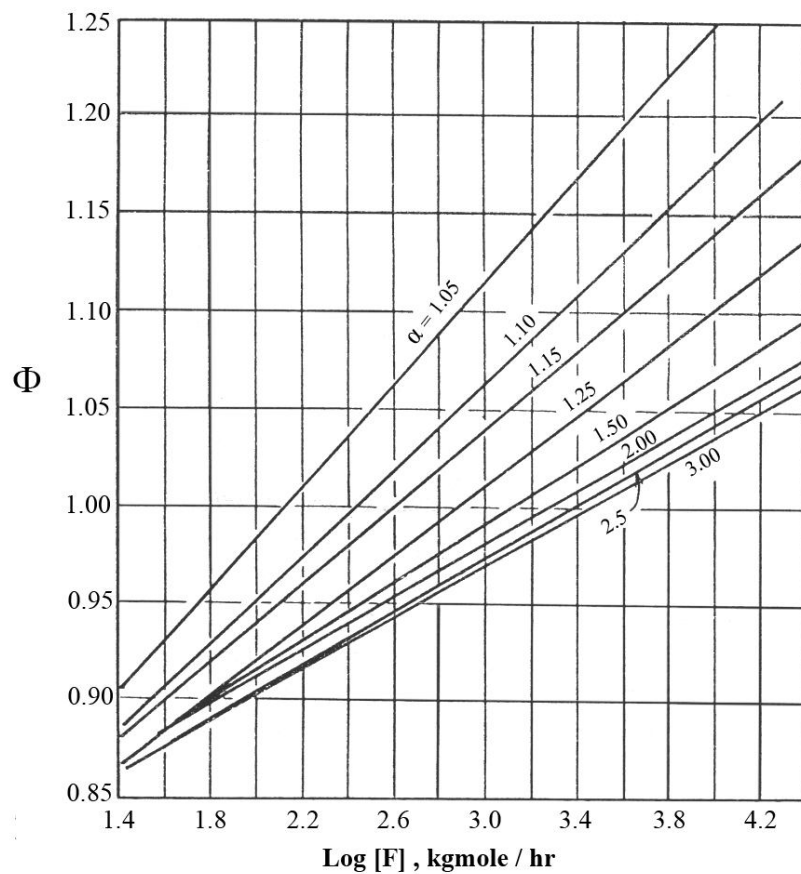
$$\left(\frac{N}{N_{min}} \right)_{opt} = \Phi \times \Gamma \times \left(\frac{N}{N_{min}} \right)_{Ref}$$

-
- 1- Carbon Steel
 - 2- Stainless Steel
 - 3- Monel

برای تصحیح اثر دبی خوراک از ضریب تصحیح Φ استفاده می‌شود این ضریب را می‌توان با داشتن دبی خوراک و ضریب فراریت از شکل ۱۱-۴ استخراج نمود.



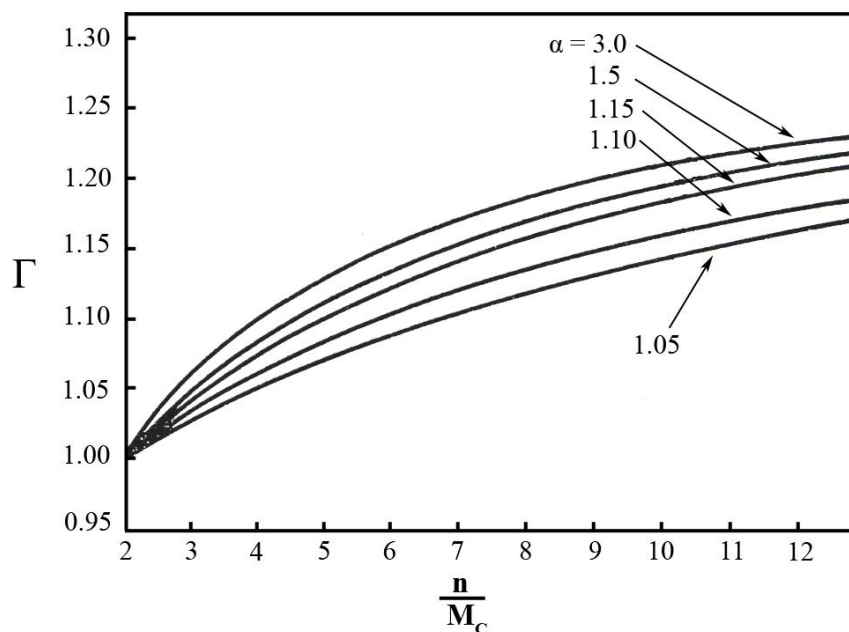
شکل ۱۱-۳: نسبت تعداد سینی‌های بهینه به سینی‌های مینیمم بر حسب ضریب جداسازی معادله Fenske



شکل ۱۱-۴: ضریب تصحیح اثر دبی خوراک (Φ) برای تعداد بهینه سینی‌های برج

ضریب تصحیح عمر مفید برج و نوع مواد بکار رفته در برج با Γ نشان داده می‌شود این ضریب تصحیح را با استفاده از شکل ۱۱-۵ با داشتن ضریب فراریت (α) و نسبت عمر مفید به ضریب قیمت مواد بکار رفته

$$\left(\frac{n}{M_c} \right) \text{ می‌توان بدست آورد.}$$

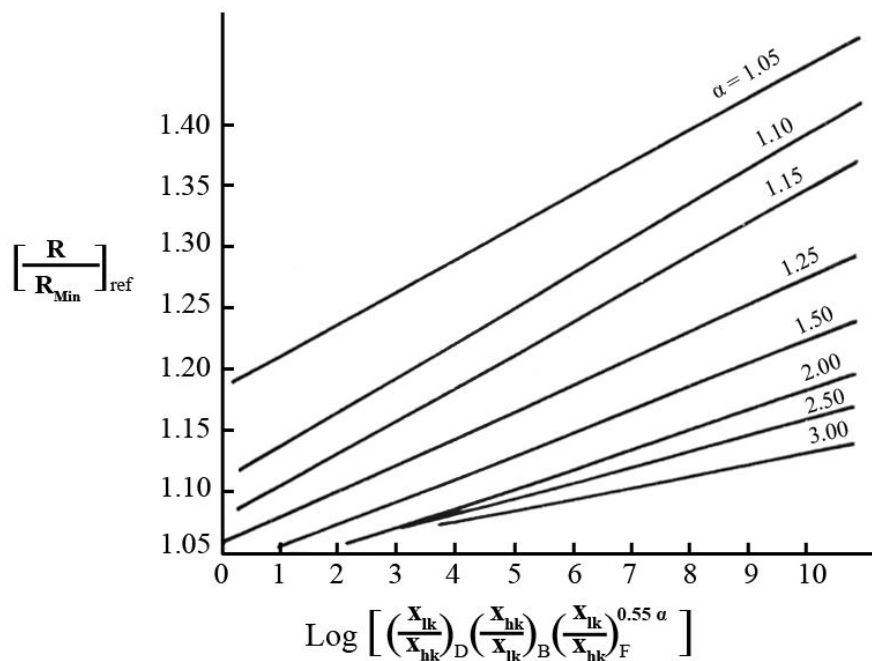


شکل ۱۱-۵: ضریب تصحیح عمر مفید برج و نوع مواد بکار رفته در برج Γ برای تعداد بهینه سینی‌های برج

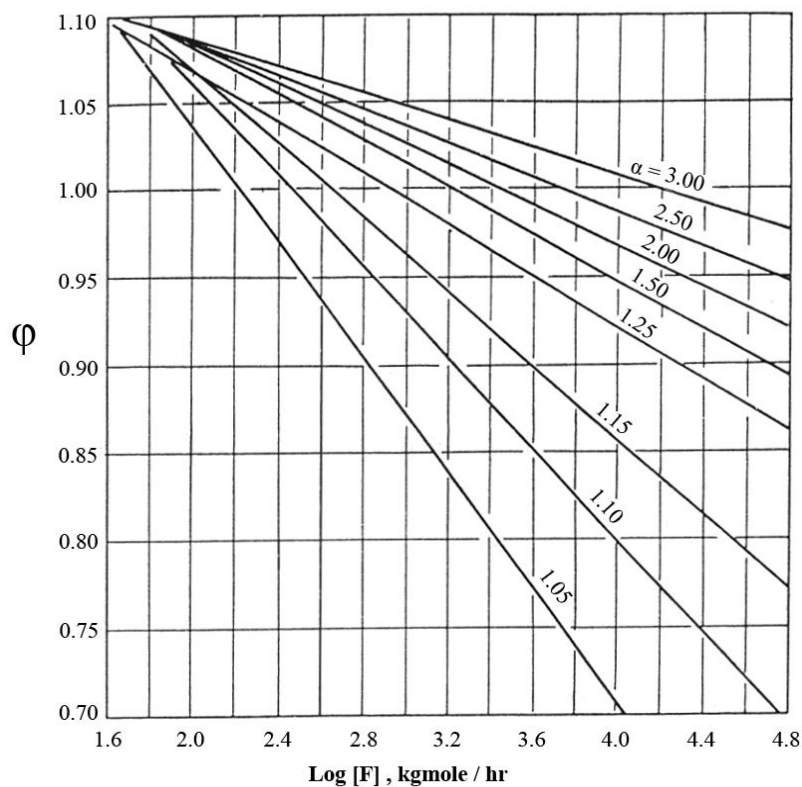
به طور مشابه نسبت جریان برگشتی بهینه را می‌توان از رابطه زیر بدست آورد.

$$\left(\frac{R}{R_{\min}}\right)_{opt} = \varphi \times \Delta \times \left(\frac{R}{R_{\min}}\right)_{Ref}$$

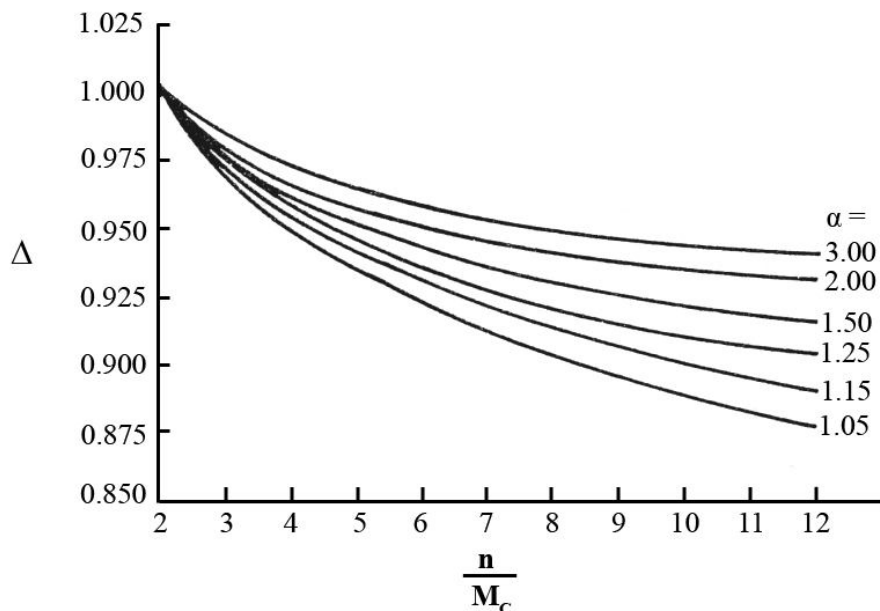
نسبت جریان برگشتی بهینه به حداقل جریان برگشتی برای برج مبنا با $(R/R_{Min})_{Ref}$ نشان داده می‌شود که با استفاده از شکل ۱۱-۶ بدست می‌آید و φ ضریب تصحیح اثر دبی خوراک است که با استفاده از شکل ۱۱-۷ با داشتن دبی خوراک و ضریب فراریت بدست می‌آید و Δ ضریب تصحیح مربوط به عمر مفید و نوع مواد بکار رفته در برج است که با استفاده از شکل ۱۱-۸ بدست می‌آید.



شکل ۱۱-۶: نسبت جریان برگشتی بهینه به مینیمم جریان برگشتی برای برج مینا بر حسب غلظت اجزاء کلیدی در جریان‌های ورودی و خروجی برج



شکل ۱۱-۷: ضریب تصحیح دبی اثر خوراک (ϕ) برای نسبت جریان برگشتی بهینه



شکل ۱۱-۸: ضریب تصحیح مربوط به عمر مفید و نوع مواد بکار رفته در برج (Δ) برای نسبت جریان برگشتی بهینه

جهت تخمین نسبت جریان برگشتی بهینه و تعداد سینی‌های بهینه برای اینکه هزینه کل سالیانه حداقل شود لازم است که پارامترهای زیر را داشته باشیم.

۱- دبی خوراک

۲- شرایط و خواص ترمودینامیکی خوراک

۳- فشار برج

۴- دمای عملیاتی

۵- ضریب فراریت نسبی بین اجزاء

۶- میزان جداسازی هر جزء بین بالا و پایین برج

۷- قیمت مواد

۸- عمر مفید

مراحل بدست آوردن نسبت جریان برگشتی بهینه و تعداد سینی‌های بهینه با داشتن اطلاعات اخیر به صورت زیر می‌باشد.

۱- محاسبه حداقل تعداد سینی‌ها (N_{Min}) با استفاده از معادله فنسکی

۲- محاسبه حداقل جریان برگشتی (R_{Min}) با استفاده از روش آندروود

۳- بدست آوردن تعداد سینی‌های بهینه به حداقل سینی‌ها برای برج مبنا $(N/N_{Min})_{Ref}$ با استفاده از

شکل ۱۱-۳

۴- بدست آوردن ضریب تصحیح اثر دبی خوراک (Φ) برای تعداد بهینه سینی‌های برج با استفاده از شکل ۱۱-۴

۵- بدست آوردن ضریب تصحیح عمر مفید برج و نوع مواد بکار رفته در برج برای تعداد بهینه سینی‌های برج با استفاده از شکل ۱۱-۵

۶- مقدار $(N/N_{Min})_{opt}$ برای برج مورد نظر با استفاده از معادله زیر بدست می‌آید.

$$\left(\frac{N}{N_{min}}\right)_{opt} = \Phi \times \Gamma \times \left(\frac{N}{N_{min}}\right)_{Ref}$$

۷- از آنجا که مقدار N_{Min} در مرحله اول و مقدار $(N/N_{Min})_{opt}$ در مرحله ششم محاسبه شده است مقدار N_{opt} را می‌توان به صورت زیر بدست آورد.

$$N_{opt} = (N/N_{Min})_{opt} \times N_{Min}$$

۸- مقدار $(R/R_{Min})_{Ref}$ برای برج مبنا با استفاده از شکل ۱۱-۶ بدست می‌آید.

۹- ضریب تصحیح اثر دبی خوراک (φ) برای نسبت جریان برگشتی بهینه با استفاده از شکل ۱۱-۷ بدست می‌آید.

۱۰- ضریب تصحیح عمر مفید برج و نوع مواد بکار رفته در برج برای نسبت جریان برگشتی بهینه با استفاده از شکل ۱۱-۸ بدست می‌آید.

۱۱- مقدار $(R/R_{Min})_{opt}$ با استفاده از رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$\left(\frac{R}{R_{min}}\right)_{opt} = \varphi \times \Delta \times \left(\frac{R}{R_{min}}\right)_{Ref}$$

۱۲- از آنجا که R_{Min} در مرحله دوم و $(R/R_{Min})_{opt}$ در مرحله یازدهم بدست آمده مقدار R_{opt} را می‌توان به صورت زیر بدست آورد.

$$R_{opt} = (R/R_{Min})_{opt} \times R_{Min}$$

مثال ۱۱-۱: خوراکی با ترکیب زیر در نقطه حباب وارد یک برج با فشار 103 kpa می‌شود

Component	Feed	Distillate	Bottom
Isoprene	16	34.85	0.00
3-Methylpent-1-en	30	64.65	0.55
2-Methylpent-1-en	24	0.50	43.95
2,3-Dimethylbut-2-ene	30	0.00	55.50
	100	100	100

دمای بالای برج 322 K و دمای پایین برج 340.5 K است. ضرایب فراریت در دمای متوسط برج به صورت زیر است.

Component	Relative Volatility
Isoprene	2.857
3-Methylpent-1-en	1.297
2-Methylpent-1-en	1.000
2,3-Dimethylbut-2-ene	0.728

} At the average temperature of the column

جنس برج و بقیه تجهیزات از کربن استیل، عمر مفید ۱۰ سال، دبی خوراک 455 kgmole/hr و راندمان سینی ها ۸۰٪ است. مقدار بهینه سینی های برج و مقدار بهینه نسبت جریان برگشتی به برج را بدست آورید. حل : برای حل مسئله باید N_{Min} ، N_{opt} ، R_{Min} و R_{opt} را محاسبه نماییم برای این منظور مراحل زیر را انجام می دهیم.

۱- با استفاده از معادله فنسکی مقدار N_{Min} به صورت زیر بدست می آید.

$$N_{min} = \frac{\log \left\{ \left(\frac{x_{lk}}{x_{hk}} \right)_D \times \left(\frac{x_{hk}}{x_{lk}} \right)_B \right\}}{\log \alpha_{lk}} = \frac{\log \left(\frac{0.6465}{0.0050} \times \frac{0.4395}{0.0055} \right)}{\log (1.297)} = 35.54$$

۲- با استفاده از معادله آندروود مقدار R_{Min} را بدست می آوریم که معادله آندروود به صورت زیر است.

$$\sum \frac{\alpha_j x_{jF}}{\alpha_j - \theta} = 1 - q$$

با جایگذاری اطلاعات مسئله در معادله اخیر خواهیم داشت.

$$\frac{(2.857)(0.16)}{2.857 - \theta} + \frac{(1.297)(0.30)}{1.297 - \theta} + \frac{(1)(0.24)}{1 - \theta} + \frac{(0.728)(0.30)}{0.728 - \theta} = 1 - 1$$

با حل این معادله در محدوده $\alpha_{hk} < \theta < \alpha_{lk}$ به عبارتی $1 < \theta < 1.297$ ، مقدار θ بدست می آید که با جایگذاری آن در رابطه زیر می توان R_{Min} را بدست آورد.

$$\sum \frac{\alpha_j x_{jD}}{\alpha_j - \theta} = R_{min} + 1$$

$$\frac{(2.857)(0.3485)}{2.857 - 1.123} + \frac{(1.297)(0.6465)}{1.297 - 1.123} + \frac{(1)(0.005)}{1 - 1.123} + \frac{(0.728)(0)}{0.728 - 1.123} = R_{Min} + 1 \Rightarrow R_{Min} = 4.352$$

۳- محاسبه مقدار $(N/N_{Min})_{Ref}$

از آنجا که ضریب فراریت $\alpha = 1.297$ و ضریب جداسازی معادله فنسکی به صورت زیر است.

$$\log \left\{ \left(\frac{x_{lk}}{x_{hk}} \right)_D \times \left(\frac{x_{hk}}{x_{lk}} \right)_B \right\} = \log \left(\frac{0.6465}{0.0050} \times \frac{0.4395}{0.0055} \right) = 4.014$$

با استفاده از شکل ۱۱-۳ خواهیم داشت.

$$\left(\frac{N}{N_{\min}} \right)_{\text{Ref}} = 2.15$$

۴- ضریب تصحیح اثر دبی خوراک برای تعداد بهینه سینی‌ها (Φ)

$$F = 455 \text{ kgmole/h}$$

$$\log F = 2.658$$

$$\alpha = 1.297$$

که با استفاده از شکل ۱۱-۴ خواهیم داشت.

$$\Phi = 0.98$$

۵- ضریب تصحیح عمر مفید و نوع مواد بکار رفته در تجهیزات برای تعداد بهینه سینی‌ها از آنجا که برج از جنس کربن استیل است و برج مینا نیز از جنس کربن استیل در نظر گرفته شده است پس $M_C = 1$ می‌باشد. (در صورتی که برج از فلزی ساخته می‌شد که قیمت آن دو برابر کربن استیل بود مقدار $M_C = 2$ در نظر گرفته می‌شد)

$$n = 10 \text{ years}$$

$$M_C = 1$$

$$n/M_C = 10$$

$$\alpha = 1.297$$

که با استفاده از شکل ۱۱-۵ ضریب تصحیح عمر و نوع مواد بکار رفته در تجهیزات به صورت زیر خواهد بود.

$$\Gamma = 1.168$$

۶- محاسبه مقدار $(N/N_{\min})_{\text{opt}}$

$$\left(\frac{N}{N_{\min}} \right)_{\text{opt}} = \Phi \times \Gamma \times \left(\frac{N}{N_{\min}} \right)_{\text{Ref}} = (0.98)(1.168)(2.15) = 2.460$$

۷- محاسبه مقدار بهینه سینی‌ها (N_{opt})

$$N_{\text{opt}} = N_{\min} \left(\frac{N}{N_{\min}} \right)_{\text{opt}} = (35.54)(2.46) = 87.42$$

۸- محاسبه مقدار $(R/R_{\min})_{\text{Ref}}$

$$\log \left\{ \left(\frac{x_{lk}}{x_{hk}} \right)_D \times \left(\frac{x_{hk}}{x_{lk}} \right)_B \times \left(\frac{x_{lk}}{x_{hk}} \right)_F^{0.55\alpha_{lk}} \right\} = \log \left\{ \left(\frac{0.6465}{0.005} \right) \times \left(\frac{0.4395}{0.0055} \right) \times \left(\frac{0.30}{0.24} \right)^{0.55(1.297)} \right\} = 4.083$$

که با استفاده از شکل ۱۱-۶ به صورت زیر بدست می‌آید.

$$\left(\frac{R}{R_{\min}}\right)_{\text{Ref}} = 1.14$$

۹- محاسبه ضریب تصحیح اثر دبی خوراک بر جریان برگشتی (φ)

$$F = 455 \text{ kgmole/hr}$$

$$\log F = 2.658$$

$$\alpha = 1.297$$

که با استفاده از شکل ۱۱-۷ به صورت زیر خواهد بود.

$$\varphi = 1.023$$

۱۰- محاسبه ضریب تصحیح عمر مفید و نوع مواد بکار رفته در برج برای جریان برگشتی بهینه

$$n = 10 \text{ years}$$

$$M_c = 1$$

$$n/M_c = 10$$

$$\alpha = 1.297$$

که با استفاده از شکل ۱۱-۸ به صورت زیر بدست می‌آید.

$$\Delta = 0.9125$$

۱۱- محاسبه مقدار $(R/R_{\min})_{\text{opt}}$

$$\left(\frac{R}{R_{\min}}\right)_{\text{opt}} = \varphi \times \Delta \times \left(\frac{R}{R_{\min}}\right)_{\text{Ref}} = 1.023 \times 0.9125 \times 1.14 = 1.0641$$

۱۲- محاسبه مقدار بهینه نسبت جریان برگشتی به برج (R_{opt})

$$R_{\text{opt}} = R_{\min} \left(\frac{R}{R_{\min}}\right)_{\text{opt}} = (4.352)(1.0641) = 4.631$$

مثال ۱۱-۲: در صورتی که در مثال ۱۱-۱ عمر مفید ۸ سال، دبی خوراک ورودی 1800 kgmole/hr و راندمان سینی‌ها ۵۰٪ باشد نسبت جریان برگشتی بهینه و تعداد بهینه سینی‌ها را بدست آورید.

حل: اطلاعات زیر از مثال ۱۱-۱ استخراج شده است.

$$N_{\min} = 35.54$$

$$\left(\frac{N}{N_{\min}}\right)_{\text{Ref}} = 2.15$$

$$\theta = 1.123$$

$$R_{\min} = 4.352$$

$$\left(\frac{R}{R_{\min}}\right)_{\text{Ref}} = 1.14$$

بقیه مراحل به صورت زیر می‌باشد.

۱- محاسبه ضریب تصحیح اثر دبی خوراک برای تعداد بهینه سینی‌ها (Φ)

$$F = 1800 \text{ kgmole/hr}$$

$$\log F = 3.255$$

$$\alpha = 1.297$$

که با استفاده از شکل ۱۱-۴ مقدار زیر بدست می‌آید.

$$\Phi = 1.032$$

۲- ضریب تصحیح عمر مفید و نوع مواد بکار رفته و راندمان سینی‌ها برای تعداد بهینه سینی‌ها از آنجا که راندمان سینی‌ها برای برج مینا ۸۰٪ است باید اثر راندمان سینی‌ها بر تعداد بهینه سینی‌ها نیز مورد بررسی قرار گیرد. نسبت راندمان برج به راندمان برج مینا به صورت زیر خواهد بود.

$$m_f = \frac{\text{Specified Efficiency}}{\text{Base Efficiency}} = \frac{50}{80} = \frac{5}{8}$$

که راندمان سینی‌ها و $\frac{n}{M_C}$ در یکدیگر ادغام شده و $\left(\frac{n}{M_C}\right)_{corr}$ تصحیح شده به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\left(\frac{n}{M_C}\right)_{corr} = m_f \times \left(\frac{n}{M_C}\right) = \frac{5}{8} \left(\frac{8}{1}\right) = 5$$

که با استفاده از شکل ۱۱-۵ خواهیم داشت.

$$\Gamma = 1.1$$

۳- محاسبه مقدار $(N/N_{Min})_{opt}$

$$\left(\frac{N}{N_{min}}\right)_{opt} = \Phi \times \Gamma \times \left(\frac{N}{N_{min}}\right)_{Ref} = (1.032)(1.1)(2.15) = 2.44$$

۴- محاسبه مقدار بهینه سینی‌ها (N_{opt})

$$N_{opt} = N_{min} \left(\frac{N}{N_{min}}\right)_{opt} = (35.54)(2.44) = 86.717$$

۵- محاسبه ضریب تصحیح اثر دبی خوراک برای نسبت جریان برگشتی بهینه

$$\log F = 3.255 \quad , \quad \alpha = 1.297$$

با استفاده از شکل ۱۱-۷ خواهیم داشت.

$$\varphi = 0.9775$$

۶- محاسبه ضریب تصحیح عمر مفید، نوع مواد بکار رفته در برج و راندمان سینی‌ها برای جریان برگشتی بهینه

$$\left(\frac{n}{M_C}\right)_{corr} = 5 \quad , \quad \alpha = 1.297$$

با استفاده از شکل ۱۱-۸ خواهیم داشت.

$$\Delta = 0.945$$

۷- محاسبه مقدار $(R/R_{Min})_{opt}$

$$\left(\frac{R}{R_{min}}\right)_{opt} = \varphi \times \Delta \times \left(\frac{R}{R_{min}}\right)_{Ref} = (0.9775)(0.945)(1.14) = 1.053$$

۸- محاسبه مقدار بهینه نسبت جریان برگشتی به برج (R_{opt})

$$R_{opt} = R_{min} \left(\frac{R}{R_{min}}\right)_{opt} = (4.352)(1.053) = 4.582$$

منابع

- 1- Tongberg ,C. O and F. Johnston , *INDUSTRIAL & ENGINEERING CHEMISTRY* (Vol. 25/p. 733), 1935.
- 2- Berg ,I, *CHEMICAL ENGINEERING PROGRESS* (Vol. 65/p. 52), 1969.
- 3- Gerster ,J. A., *CHEMICAL ENGINEERING PROGRESS* (Vol. 65/p. 43), 1969.
- 4- Qozati ,A. and M. Van Winkle , *JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING DATA* (Vol. 5/p. 269), 1960.
- 5- Prabhu ,P. S and M. Van Winkle , *JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING DATA* (Vol. 8/p. 210), 1963.
- 6- Deal,C. H and E. L. Derr , *IEC Proc. Des. & Dev.* (Vol. 3/p-394), 1964.
- 7- W.A. Spelyng & D. P. Tassios , *IEC Proc. Des. & Dev.* (Vol. 13/p. 394), 1974.
- 8- Wilson,G. M. , *JORNAL OF AMERICAN CHEMICAL SOCIETY* (Vol.86/P-127), 1964
- 9- Renon,H and J. M. Prausnits ,*AMERICAN INSTITUTE FOR CHEMICAL ENGINEERS JOURNAL* (Vol.14/P-135), 1968

مسائل

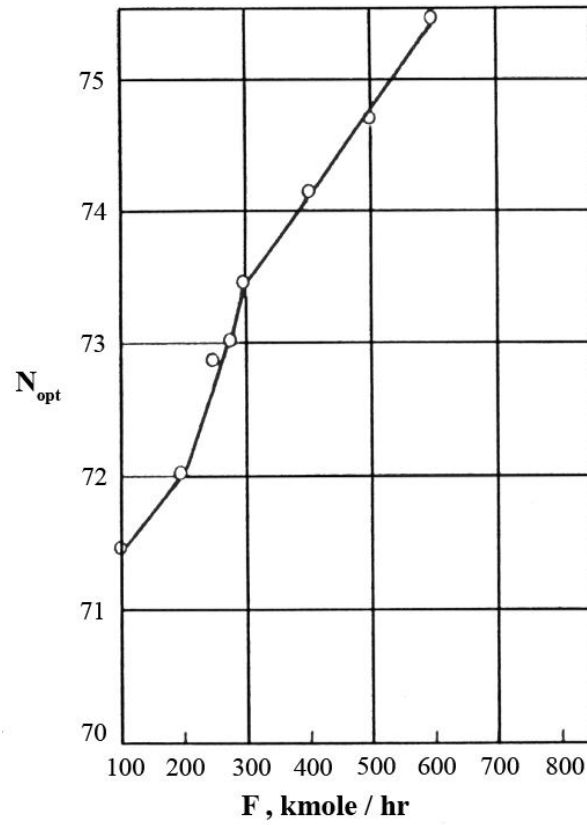
۱- در صورتی که در مثال ۱۱-۱ عمر مفید به ۱۲ سال و M_C به ۶ تغییر یابد نسبت جریان برگشتی بهینه و تعداد بهینه سینی‌ها را بدست آورید.

$$N_{opt} = 74.88 \quad , \quad R_{opt} = 5.074 \quad \text{جواب:}$$

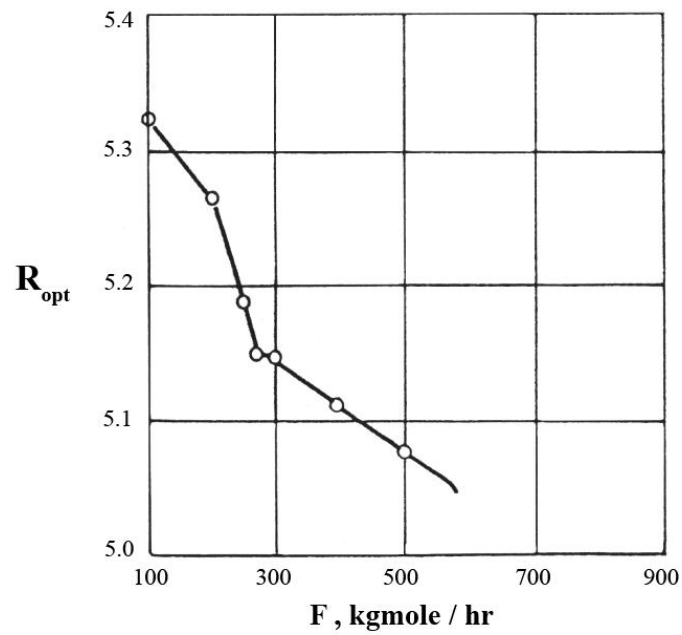
۲- در صورتی که در مثال ۱۱-۱ عمر مفید به ۱۲ سال و M_C به ۶ تغییر یابد نسبت جریان برگشتی بهینه و تعداد بهینه سینی‌ها را برای جریان‌های خوراک زیر رسم نمایید.

Kgmole/hr	Feed flow rate							
	100	200	250	275	300	400	500	600

جواب :



شکل ۹-۱۱ : تعداد بهینه سینی‌ها بر حسب دبی خوراک



شکل ۱۰-۱۱ : مقدار بهینه نسبت جریان برگشتی بر حسب دبی خوراک

بخش سوم

روشهای دقیق (Exact Solution)

فصل دوازدهم

درجه آزادی برای سیستم‌های جداسازی

مقدمه

مسائل تقطیر چند جزئی معمولاً شامل یک یا چند مرحله تعادلی است که در هر مرحله دو یا چند فاز با هم در حال تعادل می‌باشند و حل آنها منجر به ده‌ها و گاهی صدها معادله می‌شود. این معادلات باید به طور همزمان حل شوند. در حل این معادلات، تعداد داده‌های مسئله باید طوری باشد که تعداد مجهولات بیشتر از تعداد معادلات نشود. در صورتی که این موضوع رعایت شود مسئله یک جواب یکتا خواهد داشت و در صورتی که این مسئله رعایت نشود مسئله حل نخواهد شد یا به تناقض خواهد رسید. پس در مسائل جداسازی اولین مرحله بدست آوردن درجه آزادی^۱ است.

مشخص کردن متغیرهای طراحی

با انتخاب مناسب متغیرهای طراحی می‌توان حل ریاضی معادلات را به سهولت انجام داد. البته مهندس طراح نمی‌تواند هر متغییری را به عنوان متغیر طراحی انتخاب کند. متغیرهایی مانند دبی خوراک، غلظت خوراک، دبی و غلظت محصولات خروجی، تعداد مراحل تئوری و سایر پارامترها می‌توانند به عنوان متغیر طراحی انتخاب شوند.

بدست آوردن درجه آزادی (N_D) با استفاده از شمردن تعداد معادلات (N_E) و تعداد مجهولات (N_V) و قرار دادن آنها در معادله زیر بدست می‌آید.

$$N_D = N_V - N_E \quad 1-12$$

این روش توسط کواک^۲ [۱] بسط داده شده که این مطالعات مبنای این فصل می‌باشد.

1- Degrees of freedom
2- Kwauk

برخی از متغیرهای طراحی مانند غلظت، دما و فشار به جرم بستگی ندارند و برخی دیگر شامل دبی و میزان انتقال حرارت به جرم بستگی دارند و برخی پارامترها شامل تعداد مراحل تئوری از مشخصات دستگاه جداسازی هستند. مشخصات فیزیکی شامل آنتالپی و مقادیر k ، جزء متغیرهای طراحی محسوب نمی‌شوند. شمردن تعداد متغیرهای طراحی بسیار آسان است اما در بدست آوردن تعداد معادلات مستقل باید دقت شود. تعداد معادلات مستقل با استفاده از تعداد موازنه‌های جرم و انرژی و تعداد روابط تعادلی بین فازها بدست می‌آید.

یک سیستم جداسازی شامل مراحل تعادلی، کندانسور، جوش‌آور، تقسیم‌کننده جریان^۱ و مخلوط‌کننده جریان‌ها^۲ و ... می‌باشد. ابتدا درجه آزادی هر کدام از اجزاء به طور جداگانه مورد بررسی قرار می‌گیرد سپس درجه آزادی کل سیستم جداسازی بحث خواهد شد.

متغیرهای جریان

برای یک جریان تک فازی که شامل C جزء است متغیرهایی که به جرم بستگی ندارند^۳ شامل دما، فشار و $C-1$ جزء مولی می‌باشند بنابراین تعداد $C+1$ متغیر از یک جریان تک‌فازی به جرم بستگی ندارد که این موضوع را با استفاده از قانون فازها^۴ نیز می‌توان بدست آورد.

$$F = C - P + 2 = C - 1 + 2 = C + 1$$

برای اینکه جریان کاملاً مشخص شود باید دبی نیز معلوم باشد که این متغیر به جرم بستگی دارد^۵ پس باید $C+2$ متغیر از جریان معلوم باشد. در صورتی که به متغیرهای مستقل توجه کنیم درمی‌یابیم $C-1$ جزء مولی مجهول می‌باشند چون مجموع اجزاء مولی یک می‌باشد.

$$\sum_{i=1}^C (Mole\ Fraction)_i = 1$$

در حقیقت یک جریان شامل $C+3$ متغیر و یک معادله مستقل می‌باشد که متغیرها شامل موارد زیر می‌باشند.

Liquid mole fractions x_1, x_2, \dots, x_C

Total mole flow rate, L

Temperature, T

Pressure, P

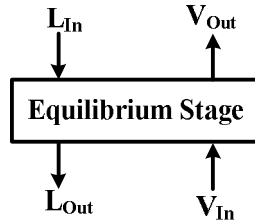
$$N_D = N_V - N_E = (C + 3) - 1 = C + 2$$

-
- 1- Stream divider
 - 2- Stream mixer
 - 3- Intensive Variable
 - 4- Phase rule
 - 5- Extensive variable

مرحله تعادلی آدیباتیک

برای یک مرحله تعادلی آدیباتیک با دو جریان ورودی و دو جریان خروجی که در شکل ۱-۱۲ نشان داده شده است تعداد مجهولات شامل متغیرهای همه جریان‌ها می‌باشد.

$$N_V = 4(C + 3) = 4C + 12$$



شکل ۱-۱۲: شمایی از یک مرحله تعادلی آدیباتیک

حال باید تعداد معادلات مستقل را بدست آورد از آنجا که جریان‌های V_{out} و L_{out} در حال تعادل هستند پس به تعداد اجزاء (C component) بین دو فاز معادله تعادل مستقل وجود دارد. ضمناً باید دما و فشار دو جریان نیز با هم برابر باشند. برای هر جریان نیز مجموع اجزاء مولی برابر یک می‌باشد $\left(\sum_{i=1}^C (Mole\ Fraction)_i = 1 \right)$. پس چهار معادله مستقل نیز برای چهار جریان وجود دارد. و از طرفی حول کل سیستم (مرحله تعادلی) می‌توان به تعداد اجزاء، موازنه جرم و همچنین یک موازنه انرژی نوشت پس تعداد معادلات مستقل (N_E) به صورت زیر خواهد بود.

Equations	Number of Equation
Pressure equality , $P_{V_{out}} = P_{L_{out}}$	1
Temperature equality , $T_{V_{out}} = T_{L_{out}}$	1
Phase equilibrium relationship , $(y_i)_{V_{out}} = k_i(x_i)_{L_{out}}$	C
Component material balance , $L_{In}(x_i)_{L_{In}} + V_{In}(y_i)_{V_{In}}$ $= L_{out}(x_i)_{L_{out}} + V_{out}(y_i)_{V_{out}}$	C-1
Total material balance , $L_{In} + V_{In} = L_{out} + V_{out}$	1
Adiabatic enthalpy balance , $H_{L_{In}}L_{In} + H_{V_{In}}V_{In}$ $= H_{L_{out}}L_{out} + H_{V_{out}}V_{out}$	1
Mole fraction constrains , e.g. $\sum_{i=1}^C (x_i)_S = 1.0$	4
<hr/>	
$N_E = 2C + 7$	

که در جدول اخیر به تعداد اجزاء می‌توان موازنه جرم نوشت که $C-1$ موازنه جرم برای اجزاء و یک موازنه جرم کلی می‌باشد. با استفاده از تعداد مجهولات و تعداد معادلات مستقل می‌توان درجه آزادی را بدست آورد.

$$N_D = (4C + 12) - (2C + 7) = 2C + 5$$

پس ابتدا باید $2C + 5$ مجهول مشخص شود تا بقیه مجهولات بدست آید. برای نمونه تعداد $2C + 5$ مجهول به صورت زیر می‌تواند در نظر گرفته شود.

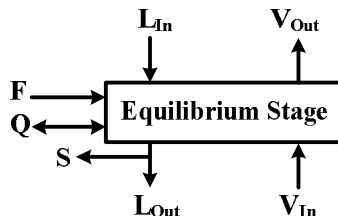
Variable Specification	Number of Variables
Component mole fractions, $(x_i)_{L_{in}}$	C-1
Total flow rate, L_{in}	1
Component mole fractions, $(y_i)_{V_{in}}$	C-1
Total flow rate, V_{in}	1
Temperature and pressure of L_{in}	2
Temperature and pressure of V_{in}	2
Stage pressure ($P_{V_{out}}$ or $P_{L_{out}}$)	1
<hr/>	
$N_D = 2C + 5$	

با مشخص کردن متغیرهای اخیر متغیرهای مجهول شامل $(x_i)_{L_{out}}$ ، $(y_C)_{V_{in}}$ ، $(x_C)_{L_{in}}$ ، V_{out} ، L_{out} و T_{out} را می‌توان بدست آورد.

یک مرحله تعادلی با انتقال حرارت شامل خوراک و جریان جانبی

یک مرحله تعادلی پیچیده در شکل ۱۲-۲ نشان داده شده است که جریان خوراک مستقل از بقیه جریان‌ها است اما غلظت، دما و فشار جریان جانبی برابر L_{out} می‌باشد فقط دبی جریان جانبی با جریان L_{out} متفاوت است. انتقال حرارت نیز با شار Q با محیط تبادل می‌شود (میزان مثبت، انتقال حرارت ورودی و مقدار منفی، انتقال حرارت خروجی از مرحله تعادلی را نشان می‌دهد) تعداد مجهولات سیستم شامل شش جریان مجهول و میزان انتقال حرارت می‌باشد.

$$N_V = 6(C + 3) + 1 = 6C + 19$$



شکل ۱۲-۲: شمایی از یک مرحله تعادلی با انتقال حرارت شامل خوراک و جریان جانبی

تعداد معادلات مستقل مانند مرحله تعادلی آدیباتیک است به علاوه غلظت، دما و فشار جریان جانبی که با جریان L_{out} برابر است. لیست معادلات مستقل به صورت زیر است.

Equations	Number of Equations
Pressure equalities , $P_{V_{out}} = P_{L_{out}} = P_S$, $P_{v_{out}} = P_{out} = P_S$	2
Temperature equalities , $T_{V_{out}} = T_{L_{out}} = T_S$	2
Phase equilibrium relationships. $(y_i)_{V_{out}} = k_i(x_i)_{L_{out}}$	C
Component material balances $\begin{aligned} L_{in}(x_i)_{L_{in}} + V_{in}(y_i)_{V_{in}} + F(x_i)_F \\ = L_{out}(x_i)_{L_{out}} + S(x_i)_s + V_{out}(y_i)_{V_{out}} \end{aligned}$	C - 1
Total material balance $F + L_{in} + V_{in} = L_{out} + S + V_{out}$	1
Enthalpy balance $\begin{aligned} H_F F + H_{L_{in}} L_{in} + H_{V_{in}} V_{in} + Q \\ = H_{L_{out}} L_{out} + H_S S + H_{V_{out}} V_{out} \end{aligned}$	1
Mole fraction constraints e.g. $\sum_{i=1}^C (x_i)_s = 1.0$	6
Mole fraction constraints $(x_i)_{L_{out}} = (x_i)_s$	C-1
<hr/>	
$N_E = 3C + 10$	

پس با توجه به تعداد مجهولات و تعداد معادلات مستقل می توان درجه آزادی را بدست آورد.

$$N_D = (6C + 19) - (3C + 10) = 3C + 9$$

با توجه به درجه آزادی باید $3C + 9$ متغییر مشخص شوند. یک نمونه از لیست متغییرهای طراحی در زیر ارائه شده است.

Variable Specification	Number of Variables
Component mole fractions , $(x_i)_{L_{In}}$	C-1
Total flow rate, L_{In}	1
Component mole fractions , $(y_i)_{V_{In}}$	C-1
Total flow rate , V_{In}	1
Component mole fractions , $(x_i)_F$	C-1
Total flow rate , F	1
T and P of L_{In} , V_{In} , F	6
Stage pressure $(P_{V_{out}} \text{ or } P_{L_{out}} \text{ or } P_S)$	1
Stage temperature $(T_{V_{out}} \text{ or } T_{L_{out}} \text{ or } T_S)$	1
Total side stream flow rate , S	1
	<hr style="width: 50%; margin: auto;"/> 3C + 9

این متغیرها با متغیرهای سیستم آدیباتیک متفاوت است میزان انتقال حرارت ، جزء متغیرهای طراحی نیست و پس از حل معادلات بدست می‌آید که به دما وابسته است. ترکیبی از مجهولات را نیز می‌توان به جای یک مجهول بکار برد برای مثال نسبت S/L_{out} را می‌توان به جای دبی جریان جانبی استفاده کرد.

کندانسور و جوش‌آور

در شکل ۱۲-۳ شمایی از یک جوش‌آور نشان داده شده است در صورتی که مسیر جرم و حرارت برعکس شود تبدیل به یک کندانسور خواهد شد. البته در این شکل جوش‌آور کلی^۱ نشان داده شده است. تعداد مجهولات شامل مشخصات دو جریان و میزان انتقال حرارت می‌باشد.

$$N_v = 2(C+3)+1 = 2C+7$$

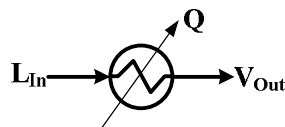
تعداد معادلات مستقل نیز به صورت زیر می‌باشد.

Equations	Number of Equations
Component material balances	C-1
Total material balance	1
Enthalpy balance	1
Mole fraction constraints	2
<hr/>	
$N_E = C+3$	

پس با توجه به تعداد مجهولات و تعداد معادلات مستقل می‌توان درجه آزادی را بدست آورد.

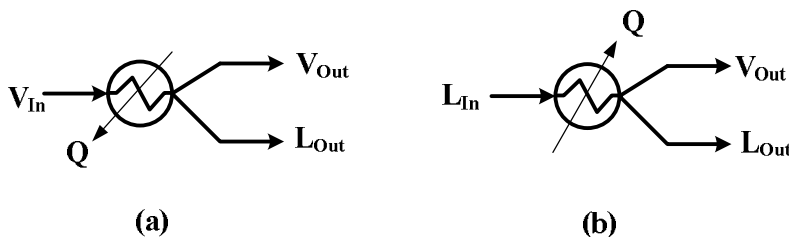
$$N_D = (2C + 7) - (C + 3) = C + 4$$

پس باید $C + 4$ متغیر مشخص شود تا بقیه مجهولات بدست آید که متغیرهای طراحی شامل $C - 1$ جزء مولی از جریان ورودی، دبی جریان ورودی، دما و فشار هر دو جریان می‌باشد با استفاده از متغیرهای طراحی می‌توان میزان انتقال حرارت را بدست آورد.



شکل ۱۲-۳: شمایی از یک جوش‌آور کلی

همچنین شمایی از یک کندانسور جزئی^۱ و یک جوش‌آور جزئی^۲ در شکل ۱۲-۴ نشان داده شده است. که تعداد مجهولات شامل مشخصات سه جریان و میزان انتقال حرارت می‌باشد.



شکل ۱۲-۴: شمایی از (a) کندانسور جزئی (b) جوش‌آور جزئی

$$N_V = 3(C + 3) + 1 = 3C + 10$$

و لیست معادلات مستقل به صورت زیر می‌باشد.

-
- 1- Partial Condenser
 - 2- Partial Reboiler

Equations	Number of Equations
Component material balances	C-1
Total material balance	1
Enthalpy balance	1
Pressure equality , $P_{V_{out}} = P_{L_{out}}$	1
Temperature equality , $T_{V_{out}} = T_{L_{out}}$	1
Phase equilibrium relationships, $(y_i)_{V_{out}} = k_i(x_i)_{L_{out}}$	C
Mole fraction constraints	3
<hr/>	
$N_E = 2C+6$	

با توجه به تعداد مجهولات و تعداد معادلات مستقل می‌توان درجه آزادی را بدست آورد.

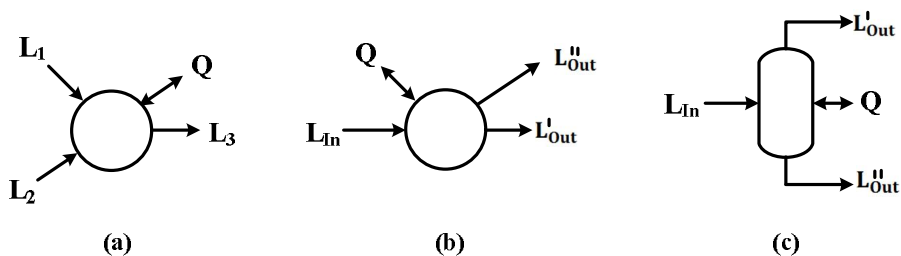
$$N_D = N_V - N_E = (3C + 10) - (2C + 6) = C + 4$$

که نتیجه مشابه با نتایج کندانسور و جوش آور کلی است.

مخلوط کننده^۱، تقسیم کننده جریان^۲ و جداکننده^۳

برای مخلوط کننده، تقسیم کننده جریان‌ها و جداکننده که در شکل ۱۲-۵ نشان داده شده متغیرها شامل مشخصات سه جریان و میزان انتقال حرارت می‌باشد.

$$N_V = 3(C + 3) + 1 = 3C + 10$$



شکل ۱۲-۵ : شمایی از (a) مخلوط کننده (b) تقسیم کننده جریان (c) جدا کننده

تعداد معادلات مستقل برای مخلوط کننده به صورت زیر می‌باشد.

- 1-Mixer
- 2- Divider
- 3- Splitter

Equations	Number of Equations
Component material balances	C-1
Total material balance	1
Enthalpy balance	1
Mole fraction constraints	3
	C + 4

با توجه به تعداد مجهولات و تعداد معادلات مستقل می‌توان درجه آزادی را برای مخلوط‌کننده بدست آورد.

$$N_D = 3(C + 3) + 1 - (C + 4) = 2C + 6$$

با توجه به درجه آزادی یک نمونه لیست متغیرهای طراحی به صورت زیر می‌باشد.

Variable Specification	Number of Variables
Component mole fraction of L_1	C - 1
Total flow rate of L_1	1
T and P of L_1	2
Component mole fraction of L_2	C - 1
Total flow rate of L_2	1
T and P of L_2	2
T and P of L_3	2
	2C+6

البته در لیست اخیر همه جریان‌ها در یک فاز (مایع یا بخار) در نظر گرفته شده‌اند. که با استفاده از این متغیرها می‌توان میزان انتقال حرارت (Q)، جزء مولی جریان L_3 و دبی جریان L_3 را بدست آورد. تعداد معادلات مستقل برای تقسیم‌کننده جریان به صورت زیر است.

Equations	Number of Equations
$(x_i)_{L_{in}} = (x_i)_{L_{out}^I}$	C - 1
$(x_i)_{L_{in}} = (x_i)_{L_{out}^{II}}$	C - 1
Pressure $P_{L_{out}^I} = P_{L_{out}^{II}}$	1
Temperature $T_{L_{out}^I} = T_{L_{out}^{II}}$	1
Material balances	1
Enthalpy balance	1
Mole fraction constraints	3
	2C+5

با توجه به تعداد مجهولات و تعداد معادلات مستقل می‌توان درجه آزادی را برای تقسیم کننده جریان بدست آورد.

$$N_D = (3C + 10) - (2C + 5) = C + 5$$

با توجه به درجه آزادی، یک نمونه لیست متغیرهای طراحی به صورت زیر می‌باشد.

Variable specification	Number of variable
Component mole fraction of L_{In}	C-1
T , P and flow rate of L_{In}	3
Outlet temperature (or heat transfer rate)	1
Outlet Pressure	1
Flow rate of L_{out}^{II} (or L_{out}^I / L_{out}^{II} or L_{out}^I / L_{In})	1
	C+5

جداکننده‌ای که در شکل ۱۲-۵ نشان داده شده شامل جداکننده با مراحل تعادلی نمی‌شود بلکه شامل جداکننده‌های غشایی ، الکتریکی و ... می‌باشد. همچنین این مدل می‌تواند برای جداکننده‌هایی با مراحل تعادلی استفاده شود به این شرط که اطلاعات مربوط به هر مرحله تعادلی مورد نیاز نباشد.

در جداکننده شکل ۱۲-۵ غلظت جریان‌های L_{out}^I ، L_{out}^{II} و L_{in} با هم برابر نیستند و هیچگونه تعادلی نیز بین آنها برقرار نیست و حتی دما و فشار این جریان‌ها نیز با هم برابر نیستند بنابراین تعداد معادلات مستقل به صورت زیر می‌باشند.

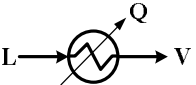
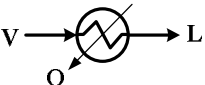
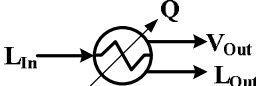
Equations	Number of Equations
Component material balances	$C - 1$
Total material balances	1
Enthalpy balance	1
Mole fraction constraints	3
	$C+4$

با توجه به تعداد مجهولات و تعداد معادلات مستقل می‌توان درجه آزادی را برای جداکننده بدست آورد.

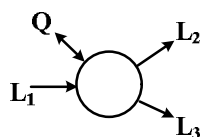
$$N_D = (3C + 10) - (C + 4) = 2C + 6$$

لیست یک سری از اجزائی که در سیستم‌های جداسازی مورد استفاده قرار می‌گیرند به همراه درجه آزادی آنها در جدول ۱-۱۲ آورده شده است.

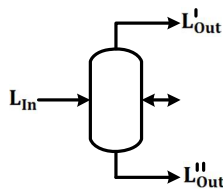
جدول ۱-۱۲ : درجه آزادی اجزاء مختلف واحدهای جداسازی

Schematic	Element or Unit Name	N_V , Total Variables	N_E , Independent Relationships	N_D , Degrees of Freedom
	Total boiler (Reboiler)	$(2C+7)$	$(C+3)$	$(C+4)$
	Total condenser	$(2C+7)$	$(C+3)$	$(C+4)$
	Partial boiler (equilibrium reboiler)	$(3C+10)$	$(2C+6)$	$(C+4)$

	Partial condenser (equilibrium condenser)	$(3C+10)$	$(2C+6)$	$(C+4)$
	Adiabatic equilibrium stage	$(4C+12)$	$(2C+7)$	$(2C+5)$
	Equilibrium stage with heat transfer	$(4C+13)$	$(2C+7)$	$(2C+6)$
	Equilibrium feed stage with heat transfer and feed	$(5C+16)$	$(2C+8)$	$(3C+8)$
	Equilibrium stage with heat transfer and side stream	$(5C+16)$	$(3C+9)$	$(2C+7)$
	N connected equilibrium stages with heat transfer	$(7N+2NC+2C+7)$	$(5N+2NC+2)$	$(2N+2C+5)$
	Stream mixer	$(3C+10)$	$(C+4)$	$(2C+6)$



Stream divider (3C+10) (2C+5) (C+5)



Splitter ,
composition of
 $L_{out}^{II} \neq L_{out}^I$ (3C+10) (C+4) (2C+6)

ترکیب اجزاء سیستم با استفاده از الگوریتم شمارش

در این قسمت از یک روش برای شمارش تعداد متغیرها ، معادلات مستقل و درجه آزادی برای ترکیبی از اجزاء که یک سیستم جداسازی را تشکیل می‌دهند استفاده می‌شود. تعداد متغیرهای یک سیستم جداسازی برابر با مجموع متغیرهای اجزاء تشکیل دهنده آن شامل مراحل تعادلی ، مبدل‌های حرارتی ، جداکننده‌های جریان و ... می‌باشد. وقتی متغیرهای اجزاء تشکیل دهنده یک سیستم شمرده می‌شوند تعدادی از جریانها دو بار جزء مجهولات شمرده می‌شوند که تعداد این جریان‌ها با N_R نشان داده می‌شود و به آنها جریان‌های مجهول اضافی^۱ اطلاق می‌شود. همچنین در صورتی که یکی از اجزاء بیش از یک بار در سیستم استفاده شود یک متغیر جدید (تعداد اجزاء تکرار شده) باید به متغیرها افزوده شود که آن را با N_A نشان می‌دهند و به آن متغیر افزوده شده^۲ گویند.

از آنجا که به تعداد N_R جریان مجهول اضافی وجود دارد و هر جریان شامل $C + 3$ مجهول است پس باید به اندازه $N_R(C + 3)$ از تعداد مجهولات کم شود. و از آنجا که با تکرار اجزاء در سیستم تعدادی متغیر جدید به سیستم افزوده می‌شود باید تعداد متغیرهای جدید (N_A) نیز به متغیرها افزوده شود.

$$(N_V)_{unit} = \sum_{\substack{\text{all} \\ \text{elements}, e}} (N_V)_e - N_R(C + 3) + N_A \quad 2-12$$

حال جریان‌های مجهول اضافی که تعدادشان با N_R نشان داده شده شامل N_R معادله مستقل $\left(\sum_{i=1}^C (Mole\ Fraction)_i = 1 \right)$ هستند که باید از تعداد معادله‌های مستقل سیستم کم شود.

$$(N_E)_{unit} = \sum_{\substack{\text{all} \\ \text{elements}, e}} (N_E)_e - N_R \quad 3-12$$

بدین ترتیب با توجه به تعداد معادله‌های مستقل (معادله ۳-۱۲) و تعداد مجهولات (معادله ۲-۱۲) می‌توان درجه آزادی را بدست آورد.

$$(N_D)_{unit} = (N_V)_{unit} - (N_E)_{unit} \quad 4-12$$

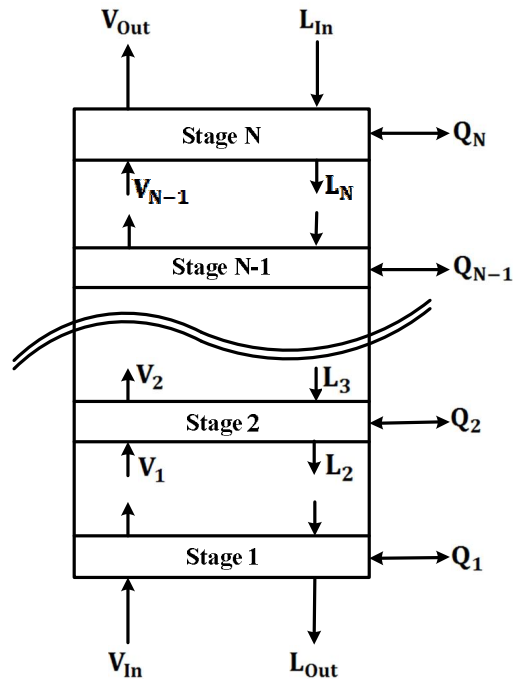
1- Redundant interconnecting stream
2- Additional Variable

$$(N_D)_{unit} = \sum_{\substack{\text{all} \\ \text{elements, } e}} (N_D)_e - N_R(C+2) + N_A \quad 5-12$$

مثال ۱-۱۲: برای N مرحله تئوری نشان داده شده در شکل ۱۲-۶ موارد زیر را بدست آورید.
الف: درجه آزادی سیستم.

ب: لیست متغیرهای طراحی که باید مشخص شوند تا مسئله حل شود.

ج: متغیرهایی که باید محاسبه شوند.



شکل ۱۲-۶: جداکننده غیرهمسو شامل N مرحله تعادلی

حل: الف: (روش اول) با استفاده از جدول ۱-۱۲ برای یک مرحله تعادلی همراه با انتقال حرارت تعداد متغیرها، $4C+13$ خواهد بود. بین مراحل تعادلی نیز $2(N-1)$ جریان مجهول اضافی شمرده می‌شود $[N_R = 2(N-1)]$ و از آنجا که N مرحله تعادلی پشت سرهم قرار گرفته‌اند تعداد مراحل تعادلی نیز به مجهولات افزوده می‌شود. $(N_A = 1)$ پس تعداد متغیرهای سیستم با استفاده از رابطه ۱۲-۲ به صورت زیر خواهد بود.

$$(N_V)_{unit} = N(4C+13) - [2(N-1)](C+3) + 1 = 7N + 2NC + 2C + 7$$

به همین ترتیب با استفاده از جدول ۱-۱۲، تعداد معادلات مستقل نیز برای یک مرحله تعادلی همراه با انتقال حرارت $2C+7$ خواهد بود که تعداد معادلات مستقل برای N مرحله تعادلی با استفاده از رابطه ۱۲-۳ به صورت زیر خواهد بود.

$$(N_E)_{unit} = N(2C+7) - 2(N-1) = 5N + 2NC + 2$$

حال با توجه به تعداد معادلات مستقل و تعداد مجهولات می‌توان درجه آزادی را بدست آورد.

$$(N_D)_{unit} = N_V - N_E = 2N + 2C + 5$$

روش دوم : با استفاده از رابطه ۵-۱۲ مستقیماً می‌توان درجه آزادی کل سیستم را بدست آورد. با توجه به جدول ۱-۱۲ درجه آزادی برای یک مرحله تعادلی همراه با انتقال حرارت $2C + 6$ می‌باشد و همچنین با استفاده از استدلال موجود در روش اول $N_A = 1$ و $N_R = 2(N - 1)$ خواهد بود که با جایگذاری آنها در رابطه ۵-۱۲ درجه آزادی سیستم به صورت زیر بدست می‌آید.

$$(N_D)_{unit} = N(2C + 6) - [2(N - 1)](C + 2) + 1 = 2N + 2C + 5$$

ب : یک لیست از متغیرهای طراحی با توجه به درجه آزادی در زیر ارائه شده است.

Variable Specification	Number of Variables
Heat transfer rate for each stage (or adiabatic)	N
Stage pressures	N
Stream V_{IN} variables	C+2
Steam L_{IN} variables	C+2
Number of stages	1
	2N+2C+5

ج : با توجه به لیست ارائه شده در قسمت (ب) متغیرهای زیر باید محاسبه شوند.

Variable	Number of Variable
$(x_C)_{V_{in}}$	1
$(x_C)_{L_{in}}$	1
All specification of V_{out}	(C+3)
All specification of L_{out}	(C+3)
Inter stage Stream	(N - 1)(C+3)

روش هانسون^۱ برای بدست آوردن درجه آزادی

یک روش بسیار جالب توسط هانسون و همکاران [۲] ارائه شده که با استفاده از آن می‌توان به سادگی درجه آزادی را بدست آورد. این روش به شرح زیر است.

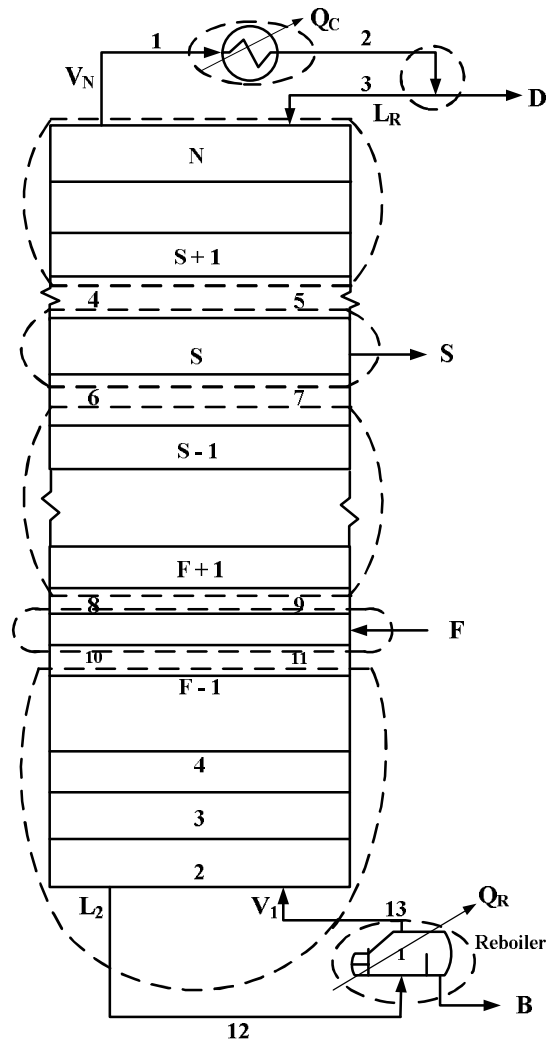
« درجه آزادی برابر است با تعداد متغیرهایی که در یک فرآیند باید ثابت نگه داشته شوند تا بقیه پارامترها ثابت بماند. این پارامترها ممکن است مربوط به جریان‌ها یا مربوط به دستگاه جداسازی باشد. »
 برای شکل ۱۲-۶ در صورتی که پارامترهای زیر ثابت نگه داشته شوند بقیه پارامترها ثابت خواهند شد.

Variable	Number of Variables
Stage pressure	N
Stage temperature (or Q)	N
Feed stream $V_{i,n}$ variables	C+2
Feed stream $L_{i,n}$ variables	C+2
Number of stages	1
$N_D = 2N + 2C + 5$	

که این نتیجه با نتیجه الگوریتم شمارش دقیقاً مشابه است.

درجه آزادی برای یک واحد پیچیده

برای واحدهای پیچیده استفاده از روش الگوریتم شمارش بسیار مطمئن‌تر از روش Hanson می‌باشد. که با ذکر چند مثال سعی می‌شود که از هر دو روش استفاده شود.



شکل ۱۲-۷: یک واحد جداسازی پیچیده

مثال ۱۲-۲: یک برج تقطیر در شکل ۱۲-۷ نشان داده شده است. این برج شامل یک خوراک، یک محصول جانبی، کندانسور کلی، جوش‌آور جزئی و چندین مرحله تعادلی است که انتقال حرارت نیز از آنها صورت می‌گیرد تشکیل شده است.

الف: درجه آزادی را برای این سیستم بدست آورید.

ب: لیست متغیرهای طراحی که باید مشخص شوند تا مسئله قابل حل باشد را ارائه نمایید.

حل: الف - برای حل مسئله ابتدا تعداد مجهولات و تعداد معادلات مستقل را برای اجزاء سیستم از جدول ۱-۱۲ استخراج می‌کنیم البته جوش‌آور جزئی به عنوان اولین مرحله تعادلی در نظر گرفته می‌شود.

Element or Unit	$(N_V)_e$	$(N_E)_e$
Total condenser	$(2C+7)$	$(C+3)$
Reflux divider	$(3C+10)$	$(2C+5)$
(N-S) stages	$[7(N-S) + 2(N-S)C + 2C + 7]$	$[5(N-S) + 2(N-S)C + 2]$
Side-stream stage	$(5C+16)$	$(3C+9)$
(S-1)-(F) stages	$[7(S-1-F) + 2(S-1-F)C + 2C + 7]$	$[5(S-1-F) + 2(S-1-F)C + 2]$
Feed stage	$(5C+16)$	$(2C+8)$
(F-1) – 1 stages	$[7(F-2) + 2(F-2)C + 2C + 7]$	$[5(F-2) + 2(F-2)C + 2]$
Partial reboiler	$(3C + 10)$	$(2C+6)$

$$\sum (N_V)_e = 7N + 2NC + 18C + 59$$

$$\sum (N_E)_e = 5N + 2NC + 4C + 22$$

که ۱۳ جریان مجهول مشترک ($N_R = 13$) بین سیستم‌های در نظر گرفته شده در شکل ۷-۱۲ وجود دارد و هر کدام از جریان‌ها $C+3$ متغیر مجهول دارند و هیچگونه متغیر اضافی در سیستم وجود ندارد ($N_A = 0$) پس تعداد متغیرهای سیستم به صورت زیر بدست می‌آید.

$$(N_V)_{unit} = \sum (N_V)_e - 13(C+3) = 7N + 2NC + 5C + 20$$

و تعداد معادلات مستقل برای سیستم نیز به صورت زیر بدست می‌آید.

$$(N_E)_{unit} = \sum (N_E)_e - 13 = 5N + 2NC + 4C + 9$$

و در نهایت درجه آزادی سیستم به صورت زیر خواهد بود.

$$N_D = (7N + 2NC + 5C + 20) - (5N + 2NC + 4C + 9) = 2N + C + 11$$

ب: لیست متغیرهای طراحی لازم به صورت زیر می‌باشد.

Variable Specification	Number of Variables
1- Pressure at each stage (including partial reboiler)	N
2- Pressure at reflux divider outlet	1
3- Pressure at total condenser outlet	1
4- Heat transfer rate for each stage (excluding partial reboiler)	(N-1)
5- Heat transfer rate for divider	1
6- Feed mole fractions and total feed rate	C
7- Fed temperature	1
8- Feed pressure	1
9- Condensate temperature (e . g . saturated liquid)	1
10- Total number of stages N	1
11- Feed stage location	1
12- Side-stream stage location	1
13- side-stream total flow rate S	1
14- Total distillate flow rate , D or D/F	1
15- Reflux flow rate L_R or reflux ratio L_R/D	1

$$N_D = 2N + C + 11$$

در اغلب جداسازی‌ها متغیرهایی مانند شرایط خوراک ، میزان انتقال حرارت هر مرحله و فشار هر مرحله معلوم است یا مقداری برای آن در نظر گرفته می‌شود. برخی دیگر از متغیرها ، مستقل از یکدیگر نیستند و می‌توانند جایگزین یکدیگر شوند. به طور مثال در لیست اخیر مشخصات ۱ تا ۹ در اکثر جداسازی‌ها باید مشخص باشد و مستقل از بقیه مشخصات هستند اما مشخصات ۱۰ تا ۱۵ می‌توانند توسط موارد زیر جایگزین شوند.

16- Condenser heat duty, Q_C

17- Reboiler heat duty, Q_R

18- Recovery or mole fraction of one component in bottoms

19- Recovery or mole fraction of one component in distillate

20- Maximum vapor rate in column

معمولاً مسائلی با مشخصات ۱ تا ۹، ۱۰، ۱۱، ۱۲، ۱۴، ۱۶ و ۲۰ معمول می‌باشند در این حالت پس از اینکه مقدار بار حرارتی کندانسور (Q_C) و ترکیب بخار مشخص شد می‌توان ماکزیمم مقدار بخار را محاسبه نمود.

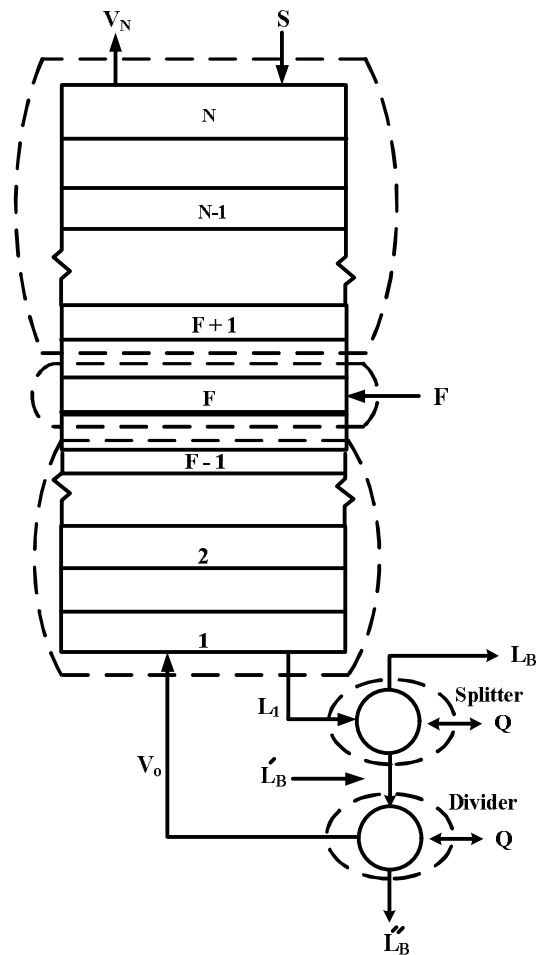
معمولاً مقدار بار حرارتی کندانسور (Q_C) و بار حرارتی جوش‌آور (Q_r) متغیرهای مناسبی برای ثابت نگه‌داشتن نیستند چون مشخص کردن مقدار آنها از ابتدا مشکل است. بار حرارتی کندانسور باید در انتها طوری انتخاب شود که مایع خروجی در حالت اشباع باشد و از سرد کردن بیش از حد یا احتمالاً یخ‌زدن مایع جلوگیری شود. مقدار بار حرارتی کندانسور و ماکزیمم مقدار بخار دو متغیر معادل هستند و یکی از آنها باید به عنوان متغیر طراحی انتخاب شود همین مطلب در مورد بار حرارتی جوش‌آور و ماکزیمم مقدار بخار نیز صادق است.

باید به پارامترهای وابسته توجه خاص شود تا دو یا چند پارامتر معادل به عنوان متغیر طراحی انتخاب نشوند. مثلاً میزان محصول بالای برج، میزان بار کندانسور و نسبت جریان برگشتی (L_R/D) متغیرهای وابسته هستند و یا به عنوان مثال دیگر نباید بازیافت بیش از یک جزء در یک جریان مشخص شود (قسمت ۱۸ و ۱۹) بدین معنا که بازیافت فقط یک جزء (یا کسر مولی یک جزء) در یک جریان باید مدنظر باشد.

مثال ۱۲-۳: یک سیستم استخراج مایع-مایع که خوارک آن در میانه برج وارد می‌شود و شامل جریان برگشتی است در شکل ۱۲-۸ نشان داده شده است. برای این سیستم موارد زیر را بدست آورید.

الف: درجه آزادی

ب: مشخصات لازم برای طراحی



شکل ۱۲-۸ : شمایی از یک واحد استخراج مایع-مایع

حل : الف - این سیستم شامل پنج جزء می باشد که دور این اجزاء با علامت خط چین نشان داده شده است. ابتدا درجه آزادی را برای هر کدام از اجزاء از جدول ۱۲-۱ استخراج می کنیم.

Element	$(N_D)_e$
(N-F) stages	$[2(N-F)+2C+5]$
Feed stage	$(3C+8)$
(F-1) stages	$2(F-1)+2C+5$
Splitter	$(2C+6)$
Divider	$(C+5)$
$\sum (N_D) = (2N + 10C + 27)$	

بین اجزاء سیستم هفت جریان مشترک وجود دارد ($N_R = 7$) و هیچگونه متغییر جدیدی به سیستم افزوده نشده است ($N_A = 0$) پس با استفاده از رابطه ۱۲-۵ خواهیم داشت.

$$(N_D)_{unit} = (2N + 10C + 27) - 7(C + 2) = 2N + 3C + 13$$

ب : مشخصات لازم برای طراحی به صورت زیر خواهد بود.

Variable Specification	Number of Variables
Pressure at each stage	N
Temperature or heat transfer Rate for each stage	N
Solvent feed flow rate , composition, and pressure temperature	(C+2)
Feed stream flow rate , composition , temperature and pressure	(C+2)
Total number of stages, N	1
Feed stage location	1
Splitter :	
Component recovery	C
T , P of L_B and L'_B	4
Divider:	
P,Q	2
Reflux ratio V_0/L''_B	1

$$\sum(N_D) = (2N + 3C + 13)$$

مثال ۱۲-۴ : از ماده انیدرید فتالیک محصولی شامل ۱۰٪ مولی اسید و ۹۰٪ مولی متالیک انیدرید تولید می - شود که در یک برج با فشار $13.2 \text{ kpa} [100 \text{ torr}]$ مجهز به کندانسور کلی و جوش آور جزئی مورد جداسازی قرار می گیرد. محصول بالای برج شامل ۹۹/۵٪ متالیک انیدرید و محصول پایین برج شامل ۰/۵٪ متالیک انیدرید است می خواهیم وقتی جریان برگشتی ۱/۶ برابر حداقل جریان برگشتی است تعداد مراحل ثنوری را بدست آوریم. برای این مسئله موارد زیر را بدست آورید.

الف : درجه آزادی

ب : مشخصات لازم برای طراحی

حل : الف- جوش آور جزئی به عنوان اولین مرحله تعادلی در نظر گرفته می شود. درجه آزادی هر کدام از اجزاء را از جدول ۱-۱۲ استخراج می کنیم.

Element of Unit	$(N_D)_e$
Reflux divider	(C+5)
Total condenser	(C+4)
Stages above feed stage	$[2(N-F) + 2C + 5]$
Stages below feed stage	$[2(F-2) + 2C + 5]$
Feed stage	(3C+8)
Partial reboiler	(C+4)

$$\sum (N_D) = (2N + 10C + 27)$$

نه جریان مشترک بین این پنج قسمت وجود دارد $(N_R = 9)$ و هیچگونه متغییر جدیدی به سیستم افزوده نمی شود $(N_A = 0)$ پس با استفاده از معادله ۱۲-۵ درجه آزادی سیستم جداسازی را می توان بدست آورد.

$$N_D = 2N + 10C + 27 - 9(C + 2) = 2N + C + 9$$

ب : متغییرهایی که در مسئله تعریف شده به صورت زیر است.

Variable Specification	Number of Variables
Stage pressures (including reboiler)	N
Condenser pressure	1
Reflux divider pressure	1
L_R/D	1
Feed composition	C-1
Mole fraction of maleic anhydride in distillate	1
Mole fraction of maleic anhydride in bottoms	1

$$C + N + 4$$

برای حل این مسئله $N + 5$ متغییر دیگر باید تعریف شود که لیست این متغییرها به صورت زیر می باشد.

Additional Variable Specification	Number of Variables
T and P of feed	2
Total condenser giving saturated reflux	1
Heat transfer rate (loss) in divider	1
Adiabatic stages (excluding boiler, which is assumed to be a partial reboiler)	N-1
Feed stage location (assumed to be optimum)	1
Feed rate	1
	N+5

مشخص کردن متغیرهای طراحی

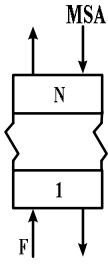
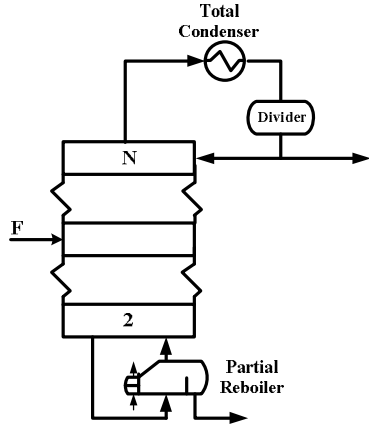
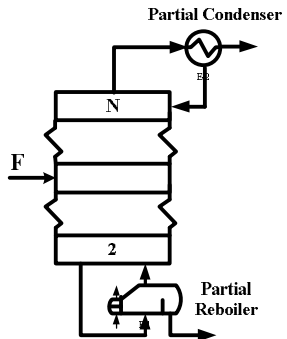
برای حل یک سیستم جداسازی چند جزئی ابتدا باید درجه آزادی را بدست آورد سپس متغیرهای طراحی باید با توجه به درجه آزادی مشخص شوند این متغیرها باید طوری انتخاب شوند که حل مسئله راحت باشد سپس باید معادلات مستقل ایجاد شده حل شوند تا مشخصات سیستم بدست آید.

متغیرهای طراحی را به دو روش می‌توان تعریف کرد.

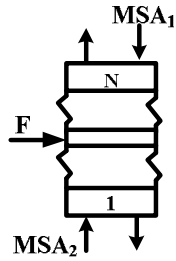
۱- میزان بازیافت یک یا دو ماده مشخص می‌شود سپس تعداد مراحل تئوری را باید بدست آورد.

۲- تعداد مراحل تئوری مشخص می‌شود و باید میزان بازیافت مواد در جریان‌ها بدست آید.

در سیستم‌ها جداسازی چند جزئی استفاده از روش دوم معمول‌تر است چون حل اینگونه مسائل بسیار آسانتر خواهد بود. در جدول ۱۲-۲ درجه آزادی سیستم‌های مختلف و همچنین لیست متغیرهای طراحی ارائه شده است. البته در این لیست فرض شده که مشخصات خوراک (شامل $C-1$ جزء مولی، دبی، دما و فشار)، فشار هر جزء از سیستم و میزان انتقال حرارت اجزاء (بجز کندانسور و جوش‌آور) معلوم است.

Unit Operation	Variable Specification		
	N_D	Case I , Component Recoveries Specified	Case II , Number of Equilibrium stages specified
<p>A) Absorption (two inlet streams)</p> 	$2N + 2C + 5$	1- Recovery of one key component	1- Number of stages.
<p>B) Distillation (one inlet stream total condenser , partial reboiler)</p> 	$2N + C + 9$	<ol style="list-style-type: none"> 1- Condensate at saturation temperature. 2- Recovery of light key component. 3- Recovery of heavy key component. 4- Reflux ratio ($>$ minimum). 5- Optimum feed stage. 	<ol style="list-style-type: none"> 1- Condensate at saturation temperature . 2- Number of stages above feed stage. 3- Number of stages below feed stage. 4- Reflux ratio. 5- Distillate flow rate.
<p>C) Distillation (one inlet stream partial condenser , partial reboiler. Vapor distillate only)</p> 	$2N + C + 6$	<ol style="list-style-type: none"> 1- Recovery of light key component 2- Recovery of heavy key component 3- Reflux ratio ($>$ minimum). 4- Optimum feed stage. 	<ol style="list-style-type: none"> 1- Number of stages above feed stage. 2- Number of stages below feed stage. 3- Reflux ratio. 4- Distillate flow rate

D) Liquid liquid extraction with two solvents (three inlet stream)

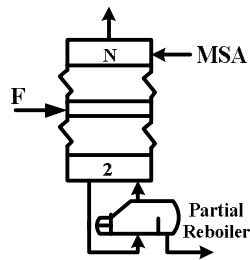


$$2N + 3C + 8$$

- 1- Recovery of key component one.
- 2- Recovery of key component two.

- 1- Number of stages above feed stage.
- 2- Number of stages below feed stage.

E) Reboiled absorption (Two inlet stream)

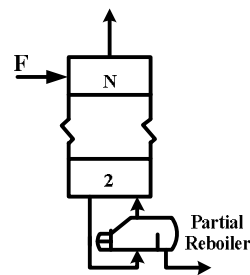


$$2N + 2C + 6$$

- 1- Recovery of light key component.
- 2- Recovery of heavy key component.
- 3- Optimum feed stage.

- 1- Number of stages above feed stage.
- 2- Number of stages below feed stage.
- 3- Bottoms flow rate.

F) Reboiled stripping (one inlet stream)

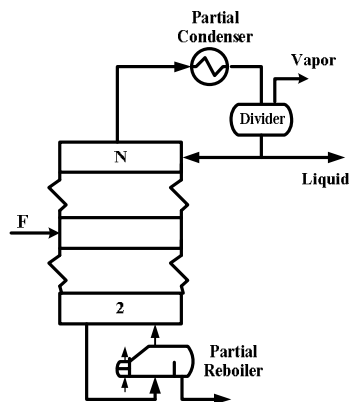


$$2N + C + 3$$

- 1- Recovery of one key component.
- 2- Reboiler heat duty.

- 1- Number of stages.
- 2- Bottoms flow rate.

G) Distillation (one inlet stream, partial condenser, partial reboiler. Both liquid and vapor distillate)

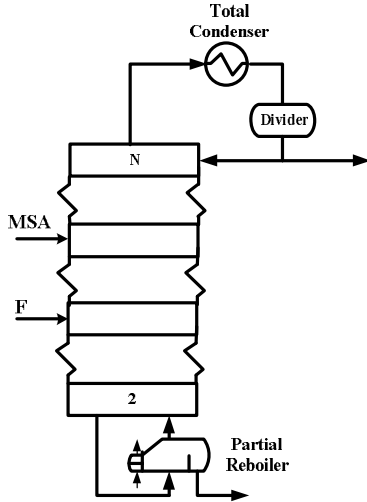


$$2N + C + 9$$

- 1- Ratio of vapor distillate to liquid distillate.
- 2- Recovery of light key component
- 3- Recovery of heavy key component
- 4- Reflux ratio (> minimum).
- 5- Optimum feed stage.

- 1- Ratio of vapor distillate to liquid distillate
- 2- Number of stages above feed stage.
- 3- Number of stages below feed stage.
- 4- Reflux ratio.
- 5- Liquid distillate flow rate.

H) Extractive distillation (two inlet streams, total condenser, partial reboiler, single phase condensate)

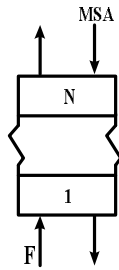


$$2N + 2C + 12$$

- 1- Condensate at saturation temperature.
- 2- Recovery of light key component
- 3- Recovery of heavy key component
- 4- Reflux ratio (> minimum).
- 5- Optimum feed stage.
- 6- Optimum MSA stage

- 1- Condensate at saturation temperature.
- 2- Number of stages above MSA stage.
- 3- Number of stages between MSA stage and feed stage.
- 4- Number of stages below feed stage.
- 5- Reflux ratio.
- 6- Distillate flow rate.

I) Liquid liquid extraction (two inlet streams)

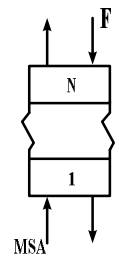


$$2N + 2C + 5$$

- 1- Recovery of one key component.

- 1- Number of stages

J) Stripping (two inlet streams)



$$2N + 2C + 5$$

- 1- Recovery of one key component.

- 1- Number of stages

منابع

- 1- Kwauk, M., *AIChE j.*, 2, 240-248(1956).
- 2- Hanson, D. N., J. H. Duffin, and G.F. Somerville, *Computation of Multistage Separation Processes*, Reinhold Publishing Corporation, New York, 1962, Chapter 1.
- 3- Gilliland, E. R., and C. E. Reed, *Ind. Eng. Chem.*, 34, 551-557 (1942).
- 4- Smith, B., *Design of Equilibrium Stage Processes*, McGraw-Hill Book Co., New York, 1963, Chapter 3.
- 5- Henley, E. J., and H. K. Staffin, *Stagewise Process Design*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1963, 198.

مسائل

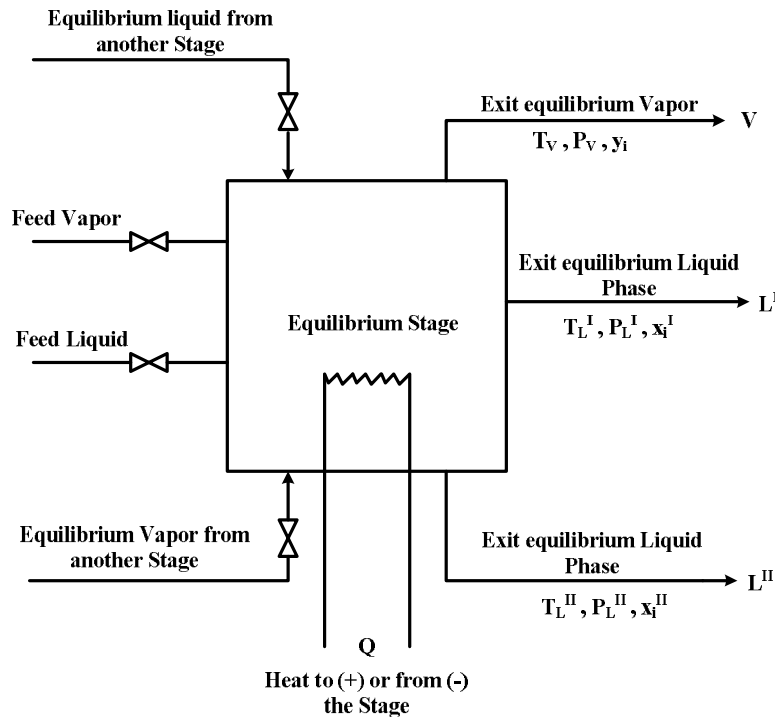
۱- برای سیستم نشان داده شده موارد زیر را محاسبه نمایید.

الف : متغیرهای موجود در سیستم

ب : معادلات مستقل موجود در سیستم

ج : درجه آزادی سیستم

د : مشخصات لازم برای طراحی



۲- آیا می‌توان مسائل زیر را به صورت یکتا حل کرد.

الف : خوراکی وارد یک مرحله تعادلی آدیاباتیک می‌شود. غلظت ، دبی ، دما و فشار خوراک و همچنین دما و فشار خروجی از مرحله تعادلی معلوم است. دبی و غلظت مایع و بخار خروجی از مرحله تعادلی را بدست آورید.

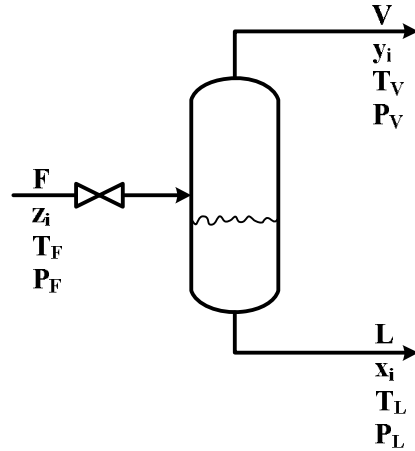
ب : فرض کنید مرحله تعادلی حالت (الف) آدیاباتیک نباشد.

ج : فرض کنید مرحله تعادلی حالت (الف) شامل جریان جانبی باشد.

د : یک بخار چند جزئی که غلظت ، دما و فشارش معلوم است در یک کندانسور به طور جزئی میعان می‌شود. فشار کندانسور و دمای آب ورودی به کندانسور ثابت نگه داشته می‌شود دبی آب را بدست آورید.

ه : مخلوطی شامل U^{235} و U^{238} وارد یک جداکننده غشایی می‌شود تا این دو ایزوتوپ به طور نسبی از یکدیگر جدا شوند. میزان جداسازی و همچنین غلظت و دمای خوراک معلوم است در صورتی که فرآیند آدیاباتیک باشد چه توانی برای پمپ کردن لازم است؟

۳- یک مخزن تبخیر ناگهانی و همه متغیرهای آن در شکل زیر نشان داده شده است.



الف : تعداد متغیرهای سیستم (N_V) را بدست آورید.

ب : یک لیست از معادله‌های مستقل ارائه نمایید.

ج : تعداد معادله‌های مستقل را بدست آورید.

د : درجه آزادی سیستم را بدست آورید.

ه : لیست متغیرهای طراحی که باید مشخص شوند تا مسئله قابل حل باشد را ارائه نمایید.

۴- خوراک مایعی وارد یک سیستم تبخیر ناگهانی می‌شود محصولات خروجی شامل یک بخار و دو مایع امتزاج‌ناپذیر می‌باشد. درجه آزادی را برای سیستم بدست آورید.

۵- متغیرهای زیر در جدول ۱۲-۲ به عنوان متغیرهای طراحی آورده نشده است.

الف : بار حرارتی کندانسور

ب : دمای مرحله تئوری

ج : دبی بخار بین مراحل تئوری

د : بار حرارتی جوش‌آور

تحت چه شرایطی می‌توان این متغیرها را جزء متغیرهای طراحی محسوب کرد و آنها را با کدامیک از

متغیرهای طراحی ارائه شده در جدول ۱۲-۲ می‌توان جایگزین نمود؟

۶- نشان دهید در صورتی که کندانسور جزئی جایگزین یک کندانسور کلی شود و محصول بالای برج به

صورت بخار خارج شود درجه آزادی سه تا کمتر خواهد شد.

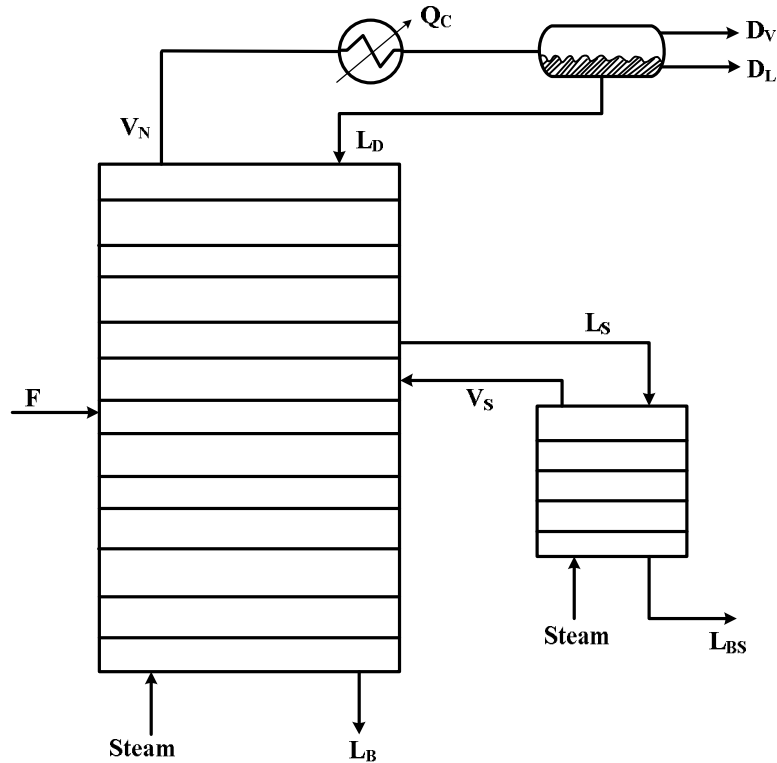
۷- تعداد متغیرهای مستقل را برای موارد زیر بدست آورید.

الف : برج دفعی که کنار برج اصلی قرار گرفته است.

ب : برج اصلی

ج : برج اصلی همراه با برج دفع جانبی

فرض کنید آب در سیستم میعان نمی‌شود.



۸- برای یک سیستم استخراج مایع- مایع با دو خوراک همراه با جریان برگشتی در قسمت مایع استخراج شده نشان دهید درجه آزادی $3C + 2N + 13$ می باشد.

۹- برای یک برج تقطیر آزنوتروپی که در آن آزنوتروپ دمای مینیمم رخ می دهد.
الف : درجه آزادی را بدست آورید.

ب : لیست متغیرهای طراحی را ارائه نمایید.

۱۰- از یک برج شامل چهار مرحله تعادلی ، جوش آور کلی و کندانسور جزئی همراه با تقسیم کننده جریان، برای جداسازی یک مخلوط پنج جزئی استفاده می شود. خوراکی که همه شرایط آن معلوم است وارد سینی دوم برج می شود. فشار همه سینی ها ثابت نگه داشته می شود ضمناً سینی ها و تقسیم کننده جریان آدیاباتیک می باشند.

یک مهندس کنترل سه حلقه کنترلی تعریف کرده که فکر می کند مستقل از همدیگر هستند حلقه ها موارد زیر را کنترل می کنند.

حلقه اول : نسبت جریان برگشتی به برج و محصول بالای برج را کنترل می کند.

حلقه دوم : نسبت محصول بالای برج به خوراک را کنترل می کند.

حلقه سوم : دمای محصول بالای برج را کنترل می کند.

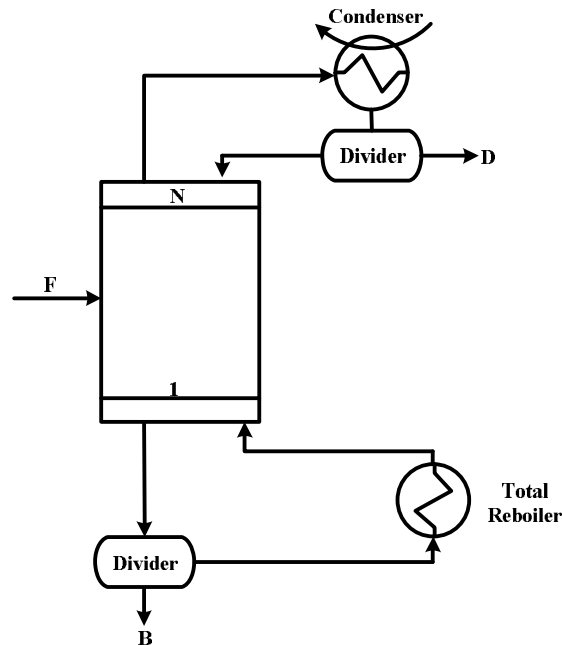
نظر شما در مورد حلقه های کنترل چیست؟

۱۱- خوراکی شامل A ۳۰٪ ، B ۲۰٪ و C ۵۰٪ در دمای $37.8^\circ C$ و فشار $689 kpa$ وارد یک برج تقطیر می شود. این برج تقطیر شامل ۱۵ سینی و قطر آن $3m$ می باشد سرعت بخار در برج $0.3 m/sec$ و نسبت

$\frac{L}{V} = 1.2$ در نظر گرفته شده است در این شرایط افت فشار به ازای هر سینی 373 pa می باشد کندانسور توسط آب با دمای 15.6°C خنک می شود. غلظت A در محصول بالای برج و غلظت C در محصول پایین برج ثابت نگه داشته می شود. برای این مسئله موارد زیر را بدست آورید.

الف : برای این سیستم درجه آزادی را بدست آورید.

ب : مهندسین واحد از شما در مورد دبی خوراک سوال می کنند. توضیح دهید چرا شما دبی را مشخص نکرده اید. ضمناً توضیحات خود را توسط روابط ارائه نمایید.



۱۲- در یک برج تقطیر از تزریق سیستم بخار آب^۱ به پایین برج به جای جوش آور استفاده شده است این برج اتمسفریک که به صورت آدیابادیک عمل می کند برای جداسازی آب و اتانول مورد استفاده قرار می گیرد. غلظت اتانول بالای برج در یک غلظت ثابت مشخص مورد نیاز می باشد.

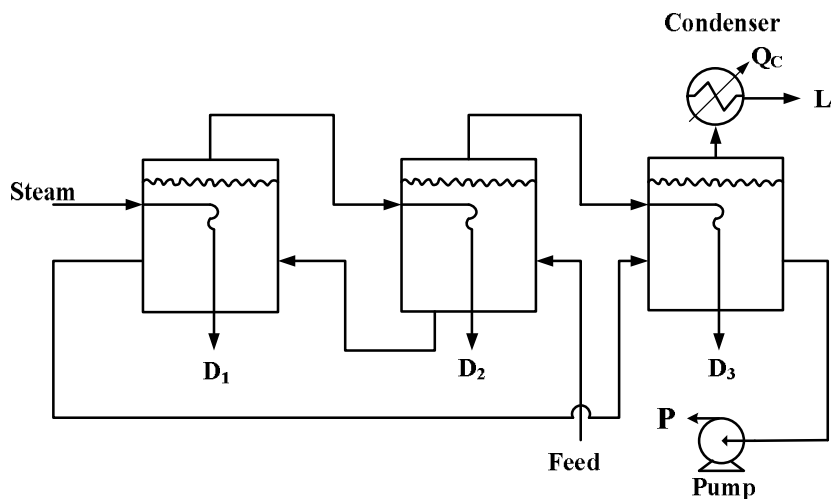
الف : چه تعداد متغیرهای طراحی برای این سیستم لازم است؟

ب : چند متغیر طراحی علاوه بر اطلاعاتی که در مسئله داده شده برای طراحی لازم است؟ شما چه متغیرهایی را پیشنهاد می کنید؟

۱۳- یک مجموعه تبخیر کننده در زیر نشان داده شده است. خوراک این واحد شامل آب و یک نمک معدنی است و همه محصولات بالای تبخیر کننده ها آب اشباع بدون هیچگونه نمک همراه می باشند. بخار آب ورودی و همه خروجی های آب در حالت اشباع در نظر گرفته می شوند.

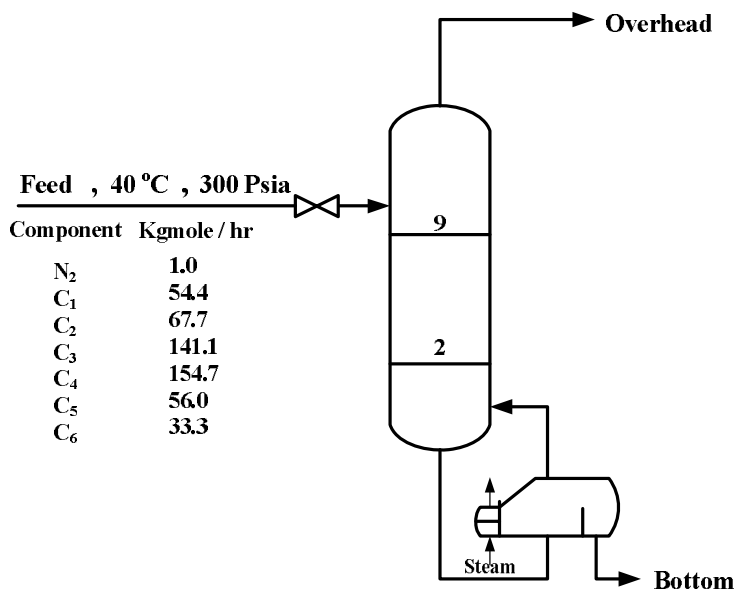
از این مجموعه برای تغلیظ یک محلول با 2% نمک به محصول نهایی با 25% نمک استفاده می شود بخار آب مورد استفاده در فشار 689 kpa و اشباع می باشد. در صورتی که همه تبخیر کننده ها در حالت اشباع باشند.

الف : درجه آزادی سیستم را بدست آورید.
 ب : چه تعداد متغییر دیگر برای طراحی لازم است؟



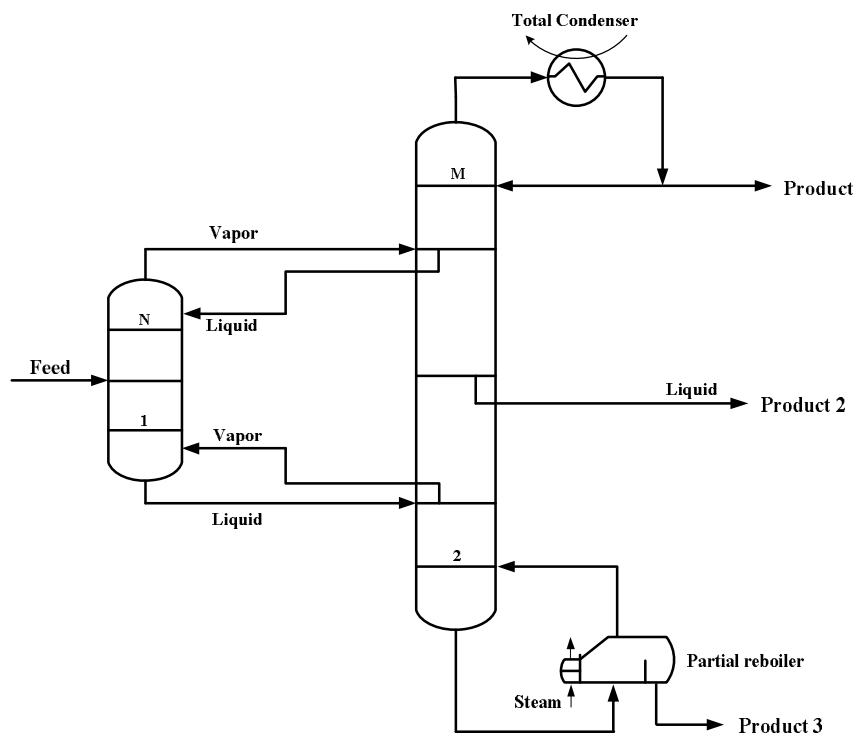
۱۴- یک برج دفع مجهز به جوش آور برای جداسازی بکار گرفته شده است.

الف : تعداد متغییرهای سیستم را بدست آورید.
 ب : تعداد معادلات مستقل سیستم را بدست آورید.
 ج : درجه آزادی سیستم را بدست آورید.
 د : چه متغییرهای دیگری برای طراحی لازم است.



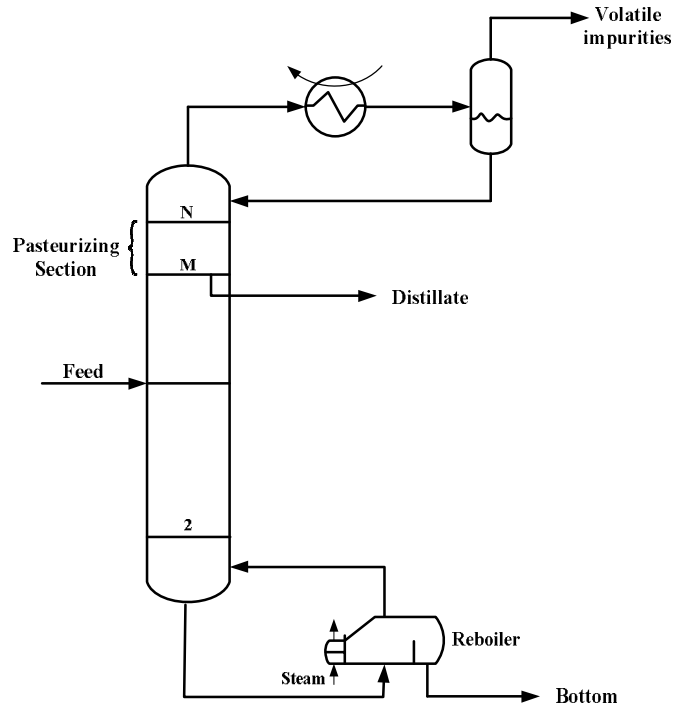
۱۵- سیستم زیر برای جداسازی یک مخلوط سه جزئی مورد استفاده قرار می گیرد.
 الف : تعداد متغییرهای سیستم را بدست آورید.
 ب : تعداد معادلات مستقل سیستم را بدست آورید.

ج : درجه آزادی سیستم را بدست آورید.
 د : یک لیست از متغیرهای طراحی ارائه نمایید.



۱۶- وقتی خوراک شامل یک ماده خیلی سبک باشد به طوری که ضریب فرار آن نسبت به بقیه اجزاء خیلی بیشتر باشد باید محصول بالای برج به صورت مایع به عنوان جریان جانبی از برج خارج شود و ماده خیلی سبک از بالای برج خارج می شود در این حالت به بخشی از برج، که بالاتر از محصول بالای برج قرار می گیرد اصطلاحاً Pasteurizing section گویند. برای این سیستم موارد زیر را بدست آورید.

الف : درجه آزادی سیستم را بدست آورید.
 ب : یک لیست از متغیرهای طراحی ارائه نمایید.



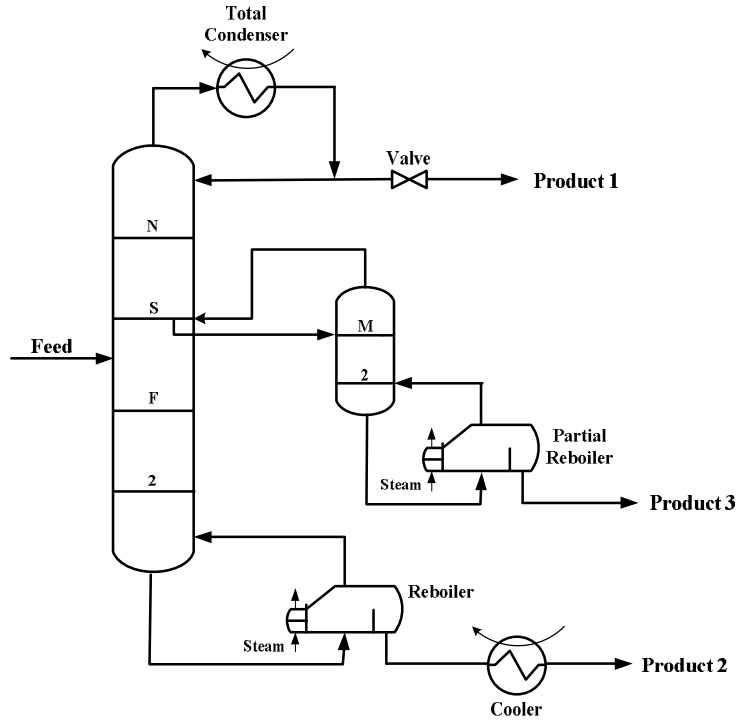
۱۷- از سیستم زیر برای جداسازی یک مخلوط سه جزئی استفاده می‌شود. برای این سیستم موارد زیر را محاسبه کنید.

الف : تعداد متغیرهای سیستم

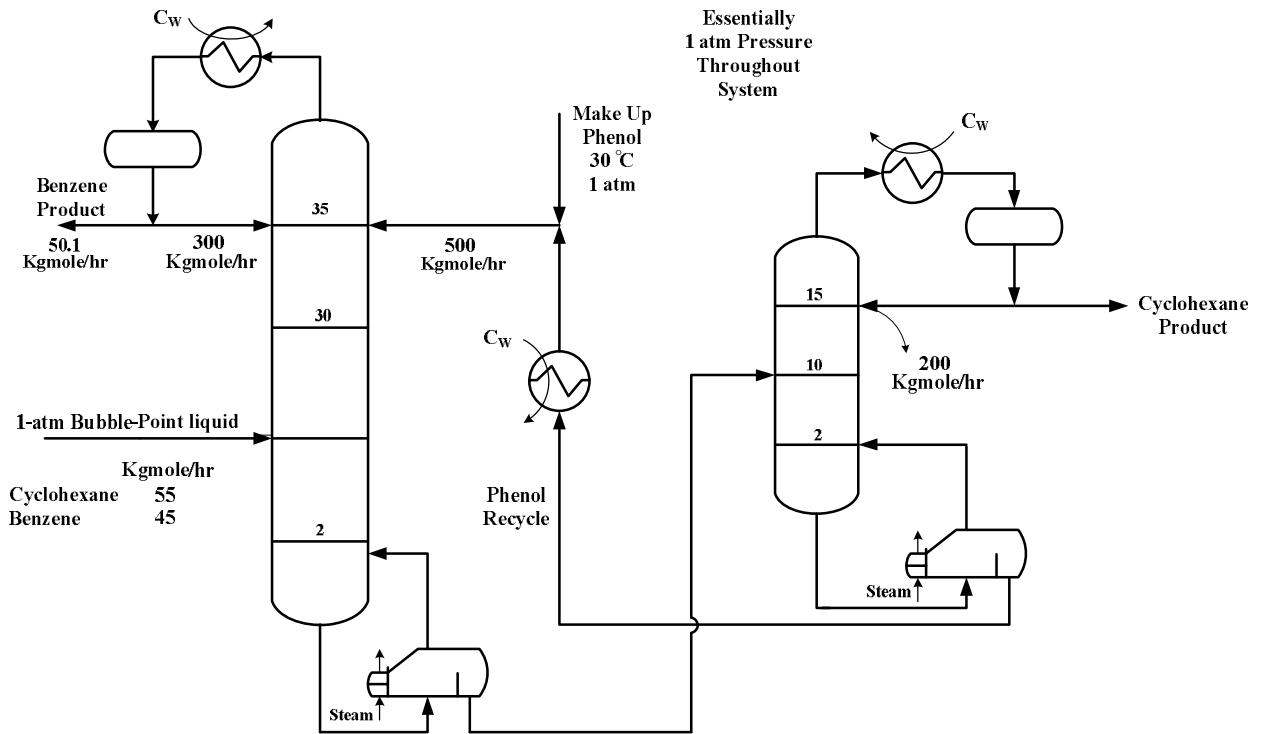
ب : تعداد معادلات مستقل سیستم

ج : درجه آزادی سیستم

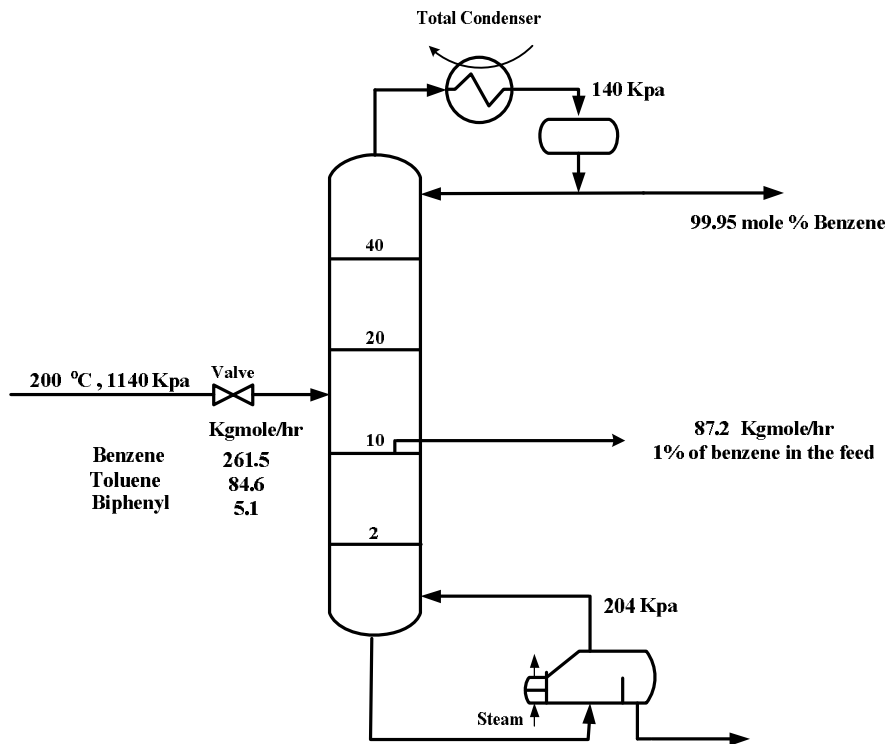
د : یک لیست از متغیرهای طراحی



۱۸- همانطور که در شکل زیر نشان داده شده از تقطیر استخراجی برای جداسازی یک مخلوط دوجزئی استفاده شده است. هر دو برج ، برج تقطیر معمولی هستند و برج دوم برای بازیابی حلال طراحی شده است. آیا داده‌های نشان داده شده برای حل سیستم کافی است؟ در صورتی که داده‌ها کافی نیست چه متغیرهای دیگری لازم است تعریف شوند.



از برج زیر برای جداسازی یک مخلوط سه جزئی استفاده می‌شود آیا اطلاعات داده شده برای حل مسئله کافی است؟ در صورتی که اطلاعات کافی نیست چه متغیرهای دیگری لازم است تعریف شود.



فصل سیزدهم

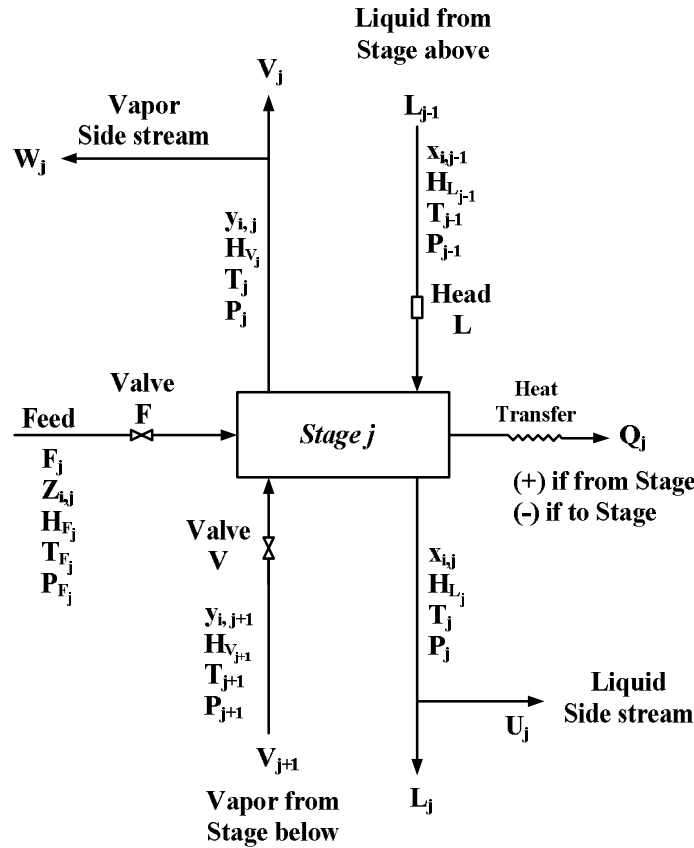
روش MESH

مقدمه

در فصل‌های قبل روش‌های گرافیکی، تجربی و روش تخمینی گروهی^۱ برای حل مسائل تقطیر چند جزئی مورد استفاده قرار گرفت. بجز مسائل دوجزئی، این روش‌ها برای طراحی اولیه سیستم‌های جداسازی مورد استفاده قرار می‌گیرند. در روش‌های اخیر از انتقال حرارت دستگاه به محیط و بالعکس صرف‌نظر می‌شود و به توزیع دما و غلظت در طول دستگاه نیازی نیست اما با استفاده از روش سینی به سینی می‌توان انتقال حرارت بین دستگاه و محیط را نیز در نظر گرفت و همچنین توزیع دما و غلظت را در طول برج برای سینی‌های مختلف بدست آورد. در روش سینی به سینی برای بدست آوردن مشخصات سینی‌های مختلف و جریان‌های خروجی باید موازنه جرم، موازنه انرژی و تعادل را برای همه سینی‌ها به صورت همزمان حل کنیم که این معادلات به صورت غیرخطی هستند. برای حل این معادلات لازم است که این معادلات ابتدا به معادلات خطی تبدیل گردند سپس توسط برنامه‌نویسی کامپیوتری حل شوند.

مدل یک مرحله تعادلی تئوری

یک حالت کلی شامل جریان پیوسته و تماس پایا مایع و بخار یا مایع و مایع در یک جداکننده غیرهمسو که شامل تعدادی مراحل تعادلی می‌باشند در نظر گرفته می‌شود. فرض می‌شود که در هر مرحله جریان‌های خروجی در حال تعادل هستند و هیچگونه واکنش شیمیایی رخ نمی‌دهد. شمای واحد تعادلی Z در شکل ۱۳-۱ نشان داده شده است که واحدهای تعادلی از بالا به پایین شماره‌گذاری شده‌اند. نتایج همین روش برای استخراج مایع-مایع نیز استفاده می‌شود که مایع با دانسیته کمتر نقش بخار را دارد و مایع با دانسیته بیشتر نقش مایع را در عملیات تقطیر دارد.



شکل ۱۳-۱ : شمایی از یک واحد تعادلی

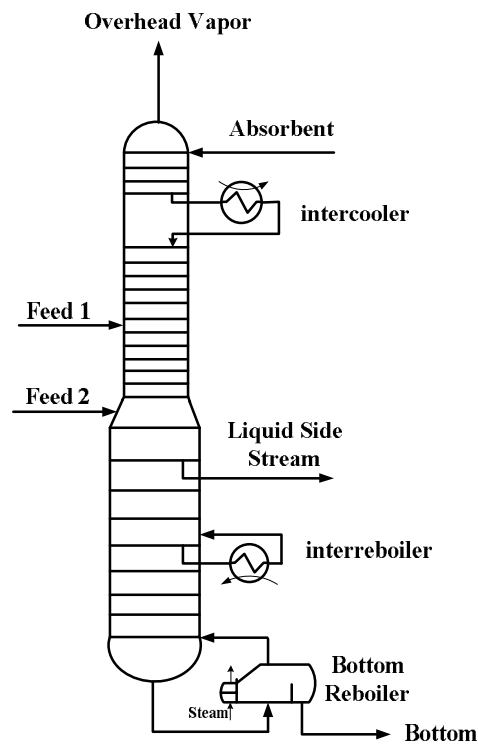
ورودی هر سینی شامل یک جریان یک فازی یا دوفازی با دبی F_j ، غلظت $z_{i,j}$ ، دمای T_{F_j} ، فشار P_{F_j} و آنتالپی H_{F_j} می‌باشد. فشار خوراک (P_{F_j}) بزرگتر یا مساوی فشار سینی (P_j) می‌باشد و اختلاف فشار خوراک و سینی خوراک توسط شیر فشار شکن F به صفر تقلیل داده می‌شود.

ورودی دیگر سینی j ، مایعی است که از سینی بالای آن (سینی $j-1$) با دبی L_{j-1} ، غلظت $x_{i,j-1}$ ، دمای T_{j-1} ، فشار P_{j-1} و آنتالپی $H_{L_{j-1}}$ به سینی j می‌ریزد که فشار سینی بالاتر (P_{j-1}) کمتر از فشار سینی j می‌باشد اما انرژی پتانسیل مایع سینی $j-1$ به طور آدیاباتیک به ترم فشار تبدیل شده و مایع سینی بالایی به فشار P_j خواهد رسید.

به طور مشابه سینی j دارای ورودی دیگری از سمت سینی پایین است. جریان بخار با دبی V_{j+1} ، غلظت $y_{i,j+1}$ ، دمای T_{j+1} ، فشار P_{j+1} و آنتالپی $H_{V_{j+1}}$ وارد سینی j می‌شود که فشار اضافی ($P_{j+1} - P_j$) توسط شیر فشار شکن V به صفر تقلیل داده می‌شود.

جریان‌های خروجی از سینی j شامل یک جریان بخار و یک جریان مایع است. جریان بخار با شرایط P_j ، T_j ، $y_{i,j}$ و H_{V_j} از سینی j خارج می‌شود که به جریان جانبی با دبی W_j و جریان بخار دیگری با دبی V_j تقسیم می‌شود. جریان V_j به سینی $j-1$ فرستاده می‌شود و در صورتی که محاسبات را برای سینی اول انجام دهیم V_j به عنوان محصول از بالای برج خارج می‌شود. همچنین یک جریان مایع با شرایط P_j ، T_j ،

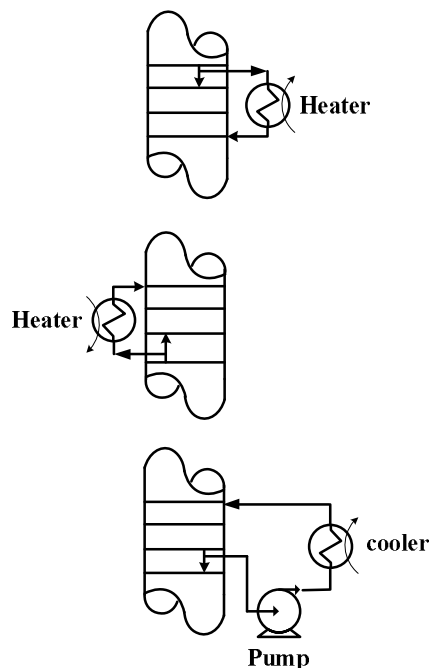
از سینی j خارج می‌شود که این جریان مایع در تعادل با بخار $V_j + W_j$ می‌باشد. جریان مایع خروجی از سینی به جریان جانبی با دبی U_j و جریان مایع دیگری با دبی L_j تقسیم می‌شود که مایع L_j به سینی $j+1$ فرستاده می‌شود و در صورتی که محاسبات را برای سینی N انجام می‌دهیم مایع L_j به عنوان محصول پایین برج از برج خارج می‌شود. انتقال حرارت از هر سینی با Q_j نشان داده می‌شود انتقال حرارت از هر سینی به محیط با علامت مثبت و انتقال حرارت از محیط به سینی با علامت منفی نشان داده می‌شود تا بتوان سرد کردن داخلی^۱، گرم کردن داخلی^۲، جوش‌آور و کندانسور را مانند شکل ۱۳-۲ در برج در نظر گرفت.



شکل ۱۳-۲: شمایی از یک برج پیچیده جذب مجهز به جوش‌آور

مدل نشان داده شده در شکل ۱۳-۱ برای حالت‌های نشان داده شده در شکل ۱۳-۳ بکار نمی‌روند. حالت‌های نشان داده شده در شکل ۱۳-۳ به پمپ‌های خارجی^۳ معروف هستند که در برج‌های دارای جریان جانبی برای حفظ انرژی و برای حفظ نسبت مایع به بخار مورد استفاده قرار می‌گیرند.

-
- 1- Intercoolers
 - 2- Interreboiler
 - 3- Pumparounds



شکل ۱۳-۳: شمایی از پمپ‌های خارجی

برای اینکه مشخصات جریان‌های همه سینی‌ها بدست آید باید معادلات همه سینی‌ها نوشته شود سپس به صورت همزمان حل شوند این معادلات که به معادلات MESH معروف هستند به صورت زیر می‌باشند.

۱- معادله M (Material balance): موازنه جرم را برای C جزء روی هر سینی نوشته می‌شود.

$$M_{i,j} = L_{j-1}x_{i,j-1} + V_{j+1}y_{i,j+1} + F_j z_{i,j} - (L_j + U_j)x_{i,j} - (V_j - W_j)y_{i,j} = 0 \quad 1-13$$

۲- معادله E (Equilibrium): تعادل برای C جزء بین فازها روی هر سینی نوشته می‌شود.

$$E_{i,j} = y_{i,j} - k_{i,j}x_{i,j} = 0 \quad 2-13$$

که $k_{i,j}$ ثابت تعادل برای جزء i در سینی j می‌باشد.

۳- معادله S (Summation of mole fraction): جمع اجزاء مولی برابر یک است و برای هر سینی یک معادله محسوب می‌شود.

$$(S_y)_j = \sum_{i=1}^c y_{i,j} - 1.0 = 0 \quad 3-13$$

$$(S_x)_j = \sum_{i=1}^c x_{i,j} - 1.0 = 0 \quad 4-13$$

۴- معادله H (Heat balance): برای هر سینی می‌توان یک موازنه انرژی نوشت.

$$H_j = L_{j-1}H_{L_{j-1}} + V_{j+1}H_{V_{j+1}} + F_j H_{F_j} - (L_j + U_j)H_{L_j} - (V_j + W_j)H_{V_j} - Q_j = 0 \quad 5-13$$

که از تغییرات انرژی پتانسیل و جنبشی صرف نظر شده است.

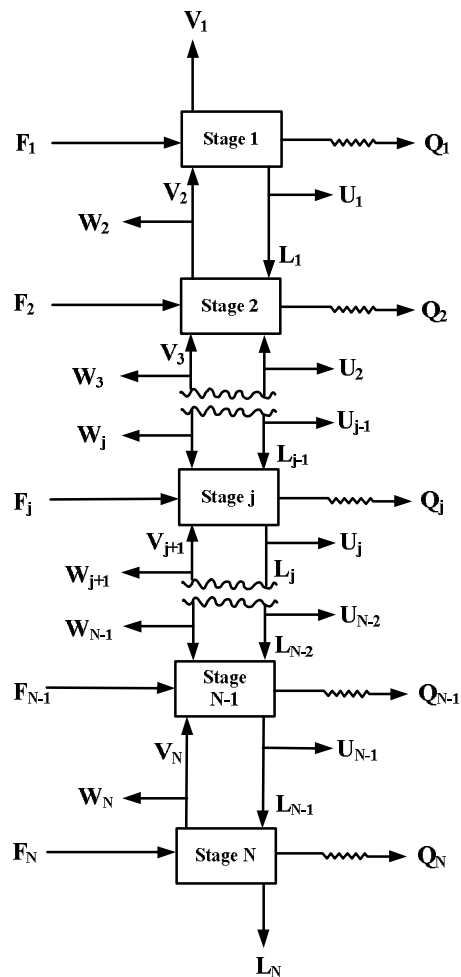
به جای معادلات ۱۳-۳ یا ۱۳-۴ می‌توان یک موازنه جرم کلی نوشت. موازنه جرم کلی مطابق شکل ۱۳-۴ برای سینی اول تا سینی j به صورت زیر است.

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 \quad ۶-۱۳$$

تابعیت $k_{i,j}$ ، H_{V_j} و H_{L_j} به صورت زیر می‌باشد.

$$k_{i,j} = k_{i,j}\{T_j, P_j, x_j, y_j\} \quad , \quad H_{V_j} = H_{V_j}\{T_j, P_j, y_j\} \quad , \quad H_{L_j} = H_{L_j}\{T_j, P_j, x_j\}$$

این سه معادله جزء معادلات مستقل محسوب نمی‌شوند. و $k_{i,j}$ ، H_{V_j} و H_{L_j} نیز جزء مجهولات مستقل محسوب نمی‌شوند. پس برای هر سینی می‌توان توسط معادلات MESH به تعداد $(2C+3)$ معادله مستقل نوشت. یک سیستم غیرهمسو شامل N مرحله که در شکل ۴-۱۳ نشان داده شده دارای $[N(3C+10)+1]$ مجهول می‌باشد که $N(2C+3)$ معادله مستقل می‌توان برای آن نوشت در صورتی که فاکتورهایی مانند N ، F_j ، T_{F_j} ، P_j ، U_j ، W_j ، Q_j معلوم باشد تعداد مجهولات به $N(2C+3)$ تقلیل خواهد یافت و سیستم قابل حل خواهد بود و می‌توان مجهولات $x_{i,j}$ ، $y_{i,j}$ ، L_j و V_j را بدست آورد. از آنجا که معادلات E، M و H غیرخطی هستند ابتدا باید به فرم خطی دربیابند و سپس حل شوند که این کار نیازمند یک روش سعی و خطا خواهد بود.



شکل ۴-۱۳: یک سیستم غیرهمسو شامل N مرحله تعادلی

استراتژی کلی برای حل ریاضی معادلات MESH

روش‌های مختلفی که عمدتاً معادلات غیر خطی را به صورت سعی و خطا حل می‌کنند در مقالات مختلف وجود دارد در این روش‌ها معمولاً ابتدا توسط روش نیوتن رافسون معادلات مورد نظر خطی می‌شوند سپس معادلات خطی حل خواهند شد.

برای حل معادلات ۱-۱۳ تا ۵-۱۳ یک روش حل توسط لویس-ماتسون [۳] در سال ۱۹۳۲ و تیلی-گدس در سال ۱۹۳۳ ارائه شد این روش به روش سینی به سینی یا معادله به معادله معروف است. این روش برای یک برج با یک خوراک و دو محصول مورد استفاده قرار می‌گیرد که در آن مقادیر k مستقل از غلظت در نظر گرفته می‌شود و برای آنتالپی مخلوط، مجموع آنتالپی اجزاء خالص در نظر گرفته شده است. روش تیلی-گدس برای حالت II مربوط به جدول ۱۲-۲ ارائه شده است که در آن تعداد سینی‌های بالا و پایین خوراک، نسبت جریان برگشتی و دبی محصول بالای برج معلوم است و دمای سینی‌ها و دبی جریان مایع و بخار بین سینی‌ها توسط روش سعی و خطا بدست می‌آیند. گرچه این روش برای محاسبات دستی مناسب است اما به علت ناپایدار بودن این روش از نظر ریاضی، برنامه‌نویسی کامپیوتری آن امکان‌پذیر نیست. روش تیلی-گدس توسط هالند^۱ [۵] و همکارانش بسط داده شد که به روش θ معروف است و نتایج قابل قبولی دارد.

یک روش دیگر توسط لویس-ماتسون ارائه شده که این روش برای حالت I از جدول ۱۲-۲ کاربرد دارد. در این روش با توجه به اینکه جداسازی بین اجزاء، نسبت جریان برگشتی و محل سینی خوراک معلوم است هدف بدست آوردن تعداد سینی‌های بالا و پایین برج است. در برنامه‌نویسی این روش دو حلقه سعی و خطا وجود دارد در یکی از حلقه‌ها (حلقه خارجی) باید غلظت و دبی اجزاء غیر کلیدی در محصولات خروجی حدس زده شود و در حلقه دیگر (حلقه داخلی) باید دبی مایع و بخار تبادل شده بین سینی‌ها حدس زده شوند که این دو حلقه باعث می‌شوند این روش فقط برای محاسبات دستی استفاده شود زیرا محاسبات به مقادیر حدس وابسته است و از نظر ریاضی پایدار نیست.

غیر از روش‌های اخیر که به روش معادله به معادله معروف هستند یک روش توسط آماندسون و پونتینن^۲ [۶] ارائه شده است. در این روش پیشنهاد شد که معادلات ۱-۱۳ تا ۵-۱۳ برای حالت II از جدول ۱۲-۲ برای اجزاء مختلف به صورت جداگانه حل شود که به روش جزء به جزء معروف است این روش برای محاسبات دستی بسیار خسته کننده است اما با استفاده از برنامه‌نویسی کامپیوتری حل این مسئله امکان‌پذیر است. حل معادلات MESH توسط فراییدی و اسمیت^۳ [۷] مورد بررسی قرار گرفته است. آنها نشان دادند هیچکدام از روش‌های اخیر قادر به حل همه مسائل نیستند. وقتی فرارایت اجزاء به هم نزدیک باشد (دمای جوش اجزاء به هم نزدیک باشد) استفاده از روش آماندسون و پونتینن که بر مبنای محاسبات نقطه شبیم می‌باشد و به روش BP معروف است توصیه می‌شود. زمانی که فرارایت اجزاء به یکدیگر نزدیک نباشند (گستره دمای جوش

1- Holland

2 - Amundson and Pontinen

3- Friday and Smith

زیاد باشد) روش BP دچار خطا خواهد شد و استفاده از روش مجموع جریان‌ها^۱ که به روش SR معروف است توصیه می‌شود و در صورتی که برای خوراک حالتی بین دو حالت اخیر حکم‌فرما باشد استفاده از روش نیوتن رافسون توصیه می‌شود. در این فصل روش‌های BP ، SR و نیوتن رافسون مورد بحث قرار خواهد گرفت البته روش نیوتن رافسون بسیار انعطاف‌پذیر است و می‌توان از آن جهت حل همه مسائل استفاده کرد.

روش حل معادلات

به طور کلی معادلات باید طوری حل شوند که از نظر ریاضی پایدار باشند و برای برنامه‌نویسی ، حجم کمی از حافظه را اشغال کنند. گرچه روشی که ذکر خواهد شد قادر به حل مسائل مختلفی علاوه بر روش کلاسیک تیلی-گدس می‌باشد اما در همه این مسائل دمای سینی‌ها ، جریان بین سینی‌ها و میزان خلوص محصول در بالا و پایین برج نامعلوم است.

الگوریتم ماتریس سه قطری

معادلات موازنه جرم (M) باعث ایجاد یک ماتریس سه قطری می‌شود برای استفاده از روش BP یا روش SR ، ابتدا باید این ماتریس حل شود. در این ماتریس T_j و V_j حدس زده می‌شوند و جزء مجهولات محسوب نمی‌شوند و با این کار معادلات به فرم خطی درمی‌آیند و می‌توان این معادلات را توسط الگوریتم ارائه شده توسط توماس^۲ [۸] حل کرد این الگوریتم توسط ونگ و هنک^۳ [۱] در حل مسائل بکار گرفته شده است. با جایگزین کردن رابطه ۱۳-۲ در رابطه ۱۳-۱ می‌توان γ را حذف کرد همچنین با جایگزین کردن رابطه ۱۳-۶ در رابطه ۱۳-۱ می‌توان L را نیز حذف کرد که نتیجه برای هر سینی و برای هر جزء به صورت زیر است.

$$A_j x_{i,j-1} + B_j x_{i,j} + C_j x_{i,j+1} = D_j \quad 7-13$$

که A_j ، B_j ، C_j و D_j به صورت زیر می‌باشد.

$$A_j = V_j + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - W_m - U_m) - V_1 \quad 2 \leq j \leq N \quad 8-13$$

۹-۱۳

$$B_j = - \left[V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - W_m - U_m) - V_1 + U_j + (V_j + W_j) k_{i,j} \right] \quad 1 \leq j \leq N$$

$$C_j = V_{j+1} k_{i,j+1} \quad 1 \leq j \leq N-1 \quad 10-13$$

$$D_j = -F_j z_{i,j} \quad 1 \leq j \leq N \quad 11-13$$

همانطور که در شکل ۱۳-۴ نشان داده شده $x_{i,0} = 0$ ، $V_{N+1} = 0$ ، $W_1 = 0$ و $U_N = 0$ می‌باشد. با مرتب کردن معادلات در قالب یک ماتریس می‌توان ماتریس زیر را بدست آورد.

-
- 1- Sum Rate
 - 2- Thomas
 - 3- Wang and Henke

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & C_3 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & A_{N-2} & B_{N-2} & C_{N-2} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & A_{N-1} & B_{N-1} & C_{N-1} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & A_N & B_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{i,1} \\ x_{i,2} \\ x_{i,3} \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ x_{i,N-2} \\ x_{i,N-1} \\ x_{i,N} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ D_{N-2} \\ D_{N-1} \\ D_N \end{bmatrix}$$

که مقادیر B_j و C_j به حدس‌های T_j و V_j وابسته هستند و مقادیر k مستقل از غلظت در نظر گرفته می‌شود و در صورتی که k تابعی از غلظت باشد با استفاده از حدس‌های قبلی غلظت بدست می‌آید.

$$\begin{matrix} \begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & 0 & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & C_3 & 0 \\ 0 & 0 & A_4 & B_4 & C_4 \\ 0 & 0 & 0 & A_5 & B_5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ D_4 \\ D_5 \end{bmatrix} \\ (a) \end{matrix} \quad \begin{matrix} \begin{bmatrix} 1 & p_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & p_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & p_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & p_4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \\ q_5 \end{bmatrix} \\ (b) \end{matrix} \quad \begin{matrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ r_4 \\ r_5 \end{bmatrix} \\ (c) \end{matrix}$$

شکل ۱۳-۵: ضرایب ماتریس معادله M مربوط به یک برج با پنج سینی و استفاده از الگوریتم توماس (a) ماتریس اولیه (b) ماتریس پس از اعمال روش حذفی گوس (c) ماتریس پس از عملیات جایگزینی پسرو در الگوریتم توماس برای ماتریس خطی ۱۲-۱۳ ابتدا روش حذفی گوس از سینی اول تا سینی N اعمال می‌شود تا $x_{i,N}$ ایزوله شود سپس مقادیر مجهول از $x_{i,N}$ تا x_1 به صورت پسرو محاسبه می‌شوند. نتیجه انجام عملیات روی یک برج با پنج سینی در شکل ۱۳-۵ نشان داده شده است. برای اعمال روش حذفی گوس به صورت زیر عمل می‌کنیم. برای سینی اول معادله ۱۳-۷ به صورت زیر می‌باشد.

$$B_1 x_{i,1} + C_1 x_{i,2} = D_1$$

که با حل معادله اخیر برای $x_{i,1}$ خواهیم داشت.

$$x_{i,1} = \frac{D_1 - C_1 x_{i,2}}{B_1}$$

و با تعریف کردن متغیرهای جدید خواهیم داشت.

$$p_1 = \frac{C_1}{B_1} \quad \text{and} \quad q_1 = \frac{D_1}{B_1} \quad 13-13$$

$$x_{i,1} = q_1 - p_1 x_{i,2}$$

برای سینی دوم با ترکیب کردن معادلات ۱۳-۷ و ۱۳-۱۳ خواهیم داشت.

$$x_{i,2} = \frac{D_2 - A_2 q_1}{B_2 - A_2 p_1} - \left(\frac{C_2}{B_2 - A_2 p_1} \right) x_{i,3}$$

که با تعریف کردن متغیرهای جدید خواهیم داشت.

$$q_2 = \frac{D_2 - A_2 q_1}{B_2 - A_2 p_1} \quad \text{and} \quad p_2 = \frac{C_2}{B_2 - A_2 p_1}$$

$$x_{i,2} = q_2 - p_2 x_{i,3}$$

و در حالت کلی خواهیم داشت.

$$p_j = \frac{C_j}{B_j - A_j p_{j-1}} \quad 14-13$$

$$q_j = \frac{D_j - A_j q_{j-1}}{B_j - A_j p_{j-1}} \quad 15-13$$

$$x_{i,j} = q_j - p_j x_{i,j+1} \quad 16-13$$

و در نهایت برای سینی N خواهیم داشت.

$$x_{i,N} = q_N \quad 17-13$$

برای بدست آوردن مقادیر $x_{i,j}$ ابتدا از $x_{i,N}$ شروع می‌کنیم تا مقادیر $x_{i,N-1}$ ، $x_{i,N-2}$ و در نهایت $x_{i,1}$ بدست آیند برای مقادیر x_i روی سینی‌های مختلف از رابطه ۱۳-۱۶ که به صورت زیر مرتب شده است استفاده می‌کنیم.

$$x_{i,j-1} = q_{j-1} - p_{j-1} x_{i,j} = r_{j-1} \quad 18-13$$

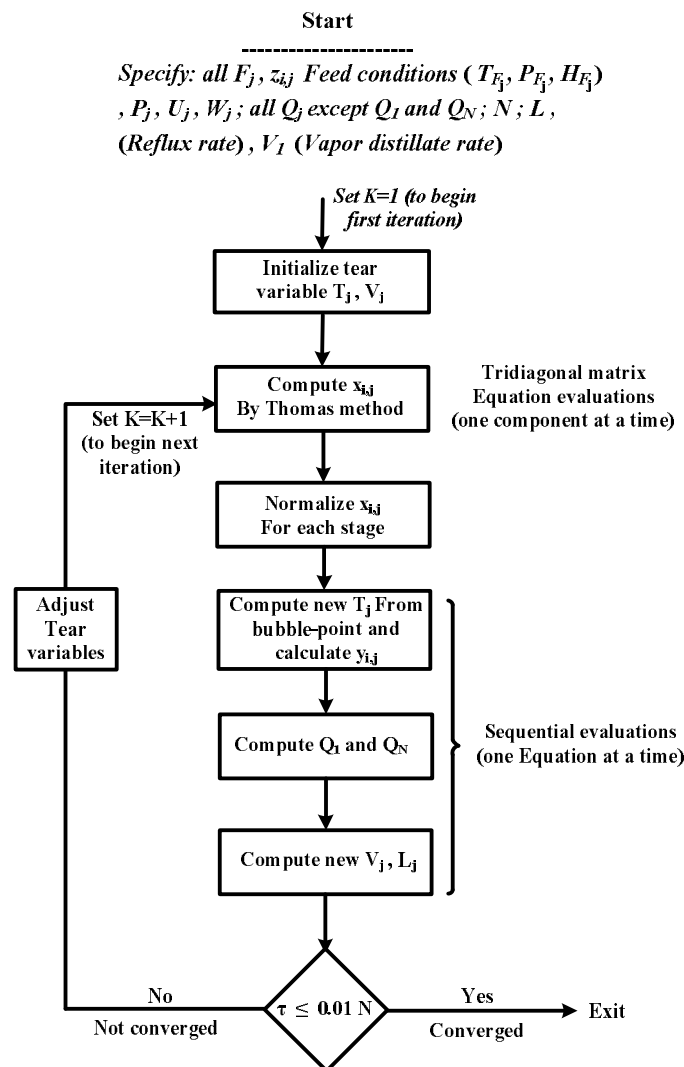
از آنجا که در این الگوریتم ، اعداد نزدیک به هم درمی‌آیند مشکل گرد کردن بوجود نمی‌آید ضمناً این الگوریتم حجم کمی از حافظه را اشغال می‌کند و بسیار سریع است. روش توماس تصحیح شده نیز توسط بوستون و سولیوان^۱ [۹] ارائه شده است که از این الگوریتم جهت حل مسائل پیچیده که در آن ضریب جذب از بالا به پایین برج خیلی تغییر می‌کند استفاده می‌شود.

روش BP برای تقطیر

معمولاً در تقطیر، با مخلوط‌هایی سر و کار داریم که مقادیر k آنها به هم نزدیک است یا به عبارت دیگر نقطه جوش اجزاء به هم نزدیک می‌باشند. یک روش حل موثر توسط فرایندی و اسمیت [۷] ارائه شده که توسط

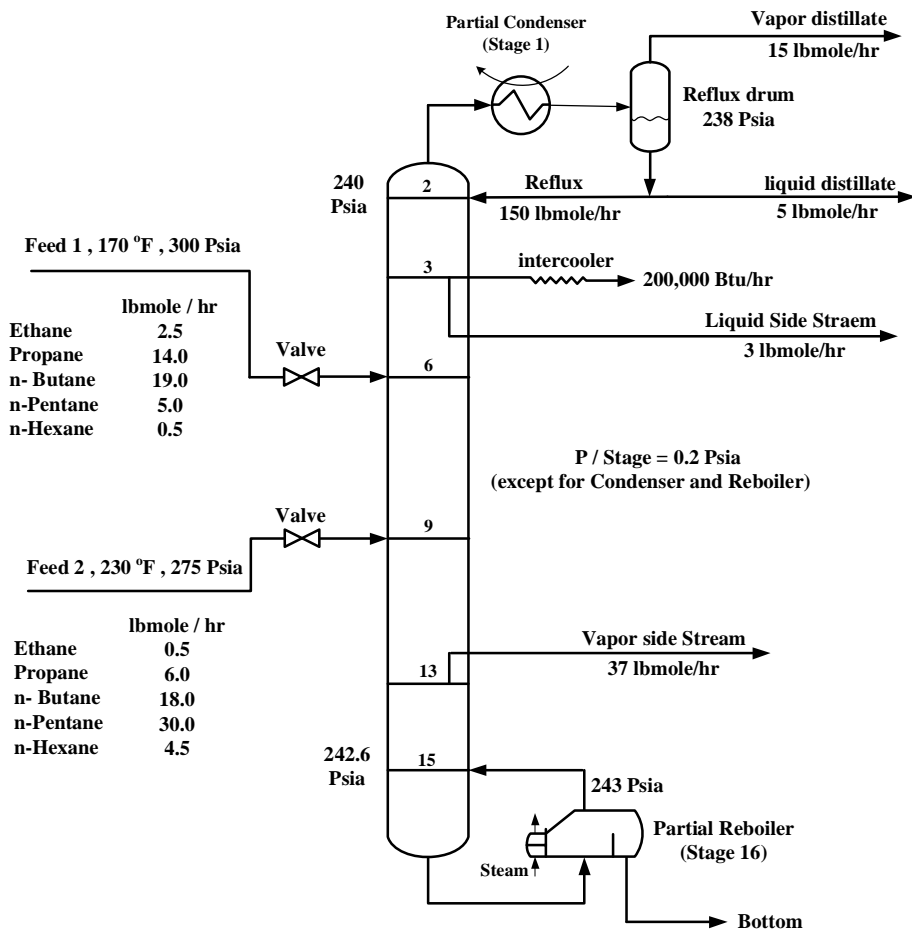
ونگ و هنک [۱] تکمیل گردید. این روش به روش نقطه حباب (BP) معروف است زیرا حدس جدید دما با استفاده از محاسبات نقطه حباب برای سینی‌ها مختلف بدست می‌آید. در این روش همه معادلات، پشت سر هم حل می‌شوند به جزء معادلات M که برای هر جزء به صورت جداگانه توسط حل ماتریس سه قطری بدست می‌آید.

الگوریتم روش Wang and Henke در شکل ۶-۱۳ نشان داده شده است. مشخصات مسئله شامل محل سینی همه خوراک‌ها، فشار هر مرحله تعادلی، دبی هر جریان جانبی (در صورتی که محصول بالای برج به صورت مایع خارج شود با جریان U_1 تعریف می‌شود)، میزان انتقال حرارت از همه سینی‌ها بجز مرحله تعادلی اول (کندانسور) و مرحله تعادلی آخر (جوش‌آور)، تعداد کل سینی‌ها، نقطه جوش جریان برگشتی و دبی محصول بخار خروجی از بالای برج باید مشخص باشند. یک نمونه از مشخصات مسئله در شکل ۷-۱۳ نشان داده شده است.



شکل ۶-۱۳: الگوریتم روش BP برای تقطیر که توسط ونگ و هنک ارائه شده است.

برای شروع محاسبات ابتدا باید مقادیر V_j و T_j حدس زده شوند. مقادیر V_j را می‌توان با فرض اینکه دبی مایع و بخار هر قسمت از برج ثابت است با داشتن جریان برگشتی، دبی جریان‌های جانبی و جریان خوراک‌ها بدست آورد. برای حدس زدن دما ابتدا باید دمای بالا و پایین برج را بدست آوریم. برای این منظور غلظت محصولات بالا و پایین برج حدس زده می‌شوند. دمای پایین برج با استفاده از محاسبات نقطه حباب محصول پایین برج بدست می‌آید و برای بالای برج در صورتی که محصول به صورت بخار باشد دما با استفاده از محاسبات نقطه شبنم محصول بالای برج بدست می‌آید و در صورتی که محصول بالای برج به صورت مایع باشد دمای بالای برج با استفاده از محاسبات نقطه حباب محصول بالای برج بدست می‌آید و زمانی که محصول بالای برج ترکیبی از مایع و بخار باشد محاسبه نقطه حباب برای محصول مایع و محاسبه نقطه شبنم برای محصول بخار بالای برج تفاوتی نخواهد داشت. پس از اینکه دمای بالا و پایین برج بدست آمد دمای بقیه سینی‌ها را به صورت خطی فرض می‌کنیم.



شکل ۷-۱۳: نمونه‌ای از مشخصات لازم برج تقطیر برای روش BP که توسط ونگ و هنک ارائه شده است.

برای اینکه با استفاده از ماتریس ۱۲-۱۳ مقادیر $x_{i,j}$ را بدست آوریم لازم است که مقادیر $k_{i,j}$ را داشته باشیم. گاهی اوقات مقادیر $k_{i,j}$ به غلظت وابسته است برای اینکه مقادیر $k_{i,j}$ را بدست آوریم لازم است

مقادیر $x_{i,j}$ و $y_{i,j}$ را حدس بزنیم یا اینکه حدس اولیه $k_{i,j}$ را مستقل از غلظت فرض کنیم. ممکن است با حل ماتریس ۱۲-۱۳ مقادیر $x_{i,j}$ بدست آمده با معادله ۱۳-۴ در تضاد باشد اگرچه این موضوع توسط ونگ و هنک بیان نشده است اما بهتر است که مقادیر $x_{i,j}$ بدست آمده به صورت زیر نرمال شوند.

$$(x_{i,j})_{normalized} = \frac{x_{i,j}}{\sum_{j=1}^C x_{i,j}} \quad 19-13$$

سپس مقادیر نرمال شده برای محاسبات بعدی استفاده شوند.

محاسبه مقادیر حدس جدید T_j با اعمال محاسبات نقطه حباب روی همه سینی‌ها با استفاده از مقادیر $x_{i,j}$ نرمال شده امکان‌پذیر است تحقیقات فرایندی و اسمیت [۷] نشان داد که محاسبات نقطه حباب جهت بدست آوردن دما برای محلول‌هایی مفید است که مقادیر k اجزاء به هم نزدیک باشد یا به عبارت دیگر نقطه جوش اجزاء به هم نزدیک باشد و همچنین T_j شدیداً به غلظت وابسته نباشد. برای مثال وقتی که دمای جوش اجزاء به هم نزدیک باشد T_j به شرایطی که $k_{i,j} = 1$ باشد بستگی دارد. در برخی حالت‌ها T_j شدیداً به غلظت اجزاء وابسته است برای مثال یک مخلوط دو جزئی را در نظر بگیرید که یکی از اجزاء دارای مقدار k زیادی است و با دما خیلی تغییر نمی‌کند و از طرفی مقدار k جزء دیگر بسیار پایین است و به شدت با دما تغییر می‌کند. یک نمونه برای این حالت مخلوط متان و نرمال بوتان در فشار 400 Psia است که مقادیر k آنها در مثال ۵-۱ آورده شده است. تغییر غلظت متان به مقدار جزئی در فاز مایع در محاسبات نقطه حباب تاثیر زیادی خواهد داشت که به صورت جدول زیر است.

Liquid Mole Fraction of Methane	Bubble - point Temperature ,°F
0.000	275
0.018	250
0.054	200
0.093	150

پس روش BP زمانی مفید است که دمای جوش اجزاء به هم نزدیک باشند. با ترکیب کردن معادلات ۱۳-۲ و ۱۳-۳ و حذف $y_{i,j}$ معادله زیر حاصل می‌شود که با استفاده از این معادله می‌توان دمای حباب را برای سینی‌های مختلف محاسبه نمود.

$$\sum_{i=1}^C k_{i,j} x_{i,j} - 1.0 = 0 \quad 20-13$$

معادله اخیر نسبت به T_j غیر خطی است به همین دلیل باید معادله اخیر به صورت سعی و خطا حل شود. می‌توان از روش مولر^۱ [۱۱] که توسط ونگ و هنک پیشنهاد شده است استفاده کنیم زیرا این روش قابل اطمینان است و نیازی نیست که از مشتق عبارات استفاده کنیم. در روش مولر سه حدس برای T_j در نظر گرفته می‌شود و مقادیر S_j توسط رابطه زیر محاسبه می‌شوند.

$$S_j = \sum_{i=1}^c k_{i,j} x_{i,j} - 1.0 \quad 21-13$$

سه مقدار (T_j, S_j) توسط یک معادله درجه دوم روی یک منحنی قرار داده می‌شوند با استفاده از این معادله درجه دوم مقدار T_j را در $S_j = 0$ بدست می‌آوریم و صحت T_j بدست آمده را با استفاده از معادله ۲۱-۱۳ بررسی می‌کنیم. در صورتی که در معادله ۲۱-۱۳ صدق نکند یکی از حدس‌ها که دارای بدترین نتیجه باشد حذف می‌شود و با در نظر گرفتن یک دمای جدید بین دو دمای باقیمانده، محاسبات را با سه حدس اخیر ادامه داده می‌شود. خطای دمای بدست آمده باید در محدوده زیر باشد.

$$\frac{|T_j^{(n)} - T_j^{(n-1)}|}{T_j^{(n)}} \leq 0.0001$$

در رابطه بالا دماهای مطلق مورد استفاده قرار می‌گیرد.

با توجه به اینکه در مراحل قبل مقادیر $x_{i,j}$ و T_j بدست آمده است با استفاده از رابطه ۲-۱۳ می‌توان مقادیر $y_{i,j}$ را بدست آورد. حال با استفاده از مقادیر $x_{i,j}$ ، T_j و $y_{i,j}$ می‌توان آنتالپی جریان‌های خروجی از هر سینی را بدست آورد. با توجه به اینکه مقادیر F_1 ، V_1 ، U_1 ، W_1 و L_1 معلوم است می‌توان مقدار V_2 را با استفاده از معادله ۶-۱۳ بدست آورد. حال با استفاده از معادله ۵-۱۳ بار حرارتی کندانسور که مقداری مثبت است بدست می‌آید. مقدار بار حرارتی جوش‌آور که مقداری منفی است با جمع معادله ۵-۱۳ برای همه سینی‌ها به صورت زیر بدست می‌آید.

$$Q_N = \sum_{j=1}^N (F_j H_{F_j} - U_j H_{L_j} - W_j H_{V_j}) - \sum_{j=1}^{N-1} Q_j - V_1 H_{V_1} - L_N H_{L_N} \quad 22-13$$

با جایگذاری رابطه ۶-۱۳ در رابطه ۵-۱۳ می‌توان مقادیر L_j و L_{j-1} را حذف کرد و معادله بر حسب V_j و V_{j+1} خواهد شد. با حل همزمان این معادله برای همه سینی‌ها می‌توان مقادیر V_j را بدست آورد.

$$\alpha_j V_j + \beta_j V_{j+1} = \gamma_j \quad 23-13$$

که مقادیر α_j ، β_j و γ_j به صورت زیر می‌باشند.

$$\alpha_j = H_{L_{j-1}} - H_{V_j} \quad 24-13$$

$$\beta_j = H_{V_{j+1}} - H_{L_j} \quad 25-13$$

$$\gamma_j = \left[\sum_{m=1}^{j-1} (F_m - W_m - U_m) - V_1 \right] (H_{L_j} - H_{L_{j-1}}) + F_j (H_{L_j} - H_{F_j}) + W_j (H_{V_j} - H_{L_j}) + Q_j \quad 26-13$$

مقادیر آنتالپی با استفاده از دمای بدست آمده توسط محاسبات نقطه حباب بدست می‌آیند. در صورتی که معادلات اخیر برای سینی دوم تا $N-1$ نوشته شود ماتریس زیر حاصل خواهد شد.

$$\begin{bmatrix} \beta_2 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \alpha_3 & \beta_3 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \alpha_4 & \beta_4 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & \alpha_{N-3} & \beta_{N-3} & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \alpha_{N-2} & \beta_{N-2} & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \alpha_{N-1} & \beta_{N-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_3 \\ V_4 \\ V_5 \\ \dots \\ \dots \\ V_{N-2} \\ V_{N-1} \\ V_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_2 - \alpha_2 V_2 \\ \gamma_3 \\ \gamma_4 \\ \dots \\ \dots \\ \gamma_{N-3} \\ \gamma_{N-2} \\ \gamma_{N-1} \end{bmatrix} \quad 27-13$$

از آنجا که مقدار V_2 معلوم است این ماتریس را می‌توان معادله به معادله از بالا به پایین حل کرد که نتایج به صورت زیر خواهد بود.

$$V_3 = \frac{\gamma_2 - \alpha_2 V_2}{\beta_2} \quad 28-13$$

$$V_4 = \frac{\gamma_3 - \alpha_3 V_3}{\beta_3} \quad 29-13$$

که در حالت کلی خواهیم داشت.

$$V_j = \frac{\gamma_{j-1} - \alpha_{j-1} V_{j-1}}{\beta_{j-1}} \quad 30-13$$

دبی جریان‌های مایع با استفاده از رابطه ۱۳-۶ بدست می‌آیند. محاسبات وقتی پایان می‌یابد که شرط زیر برقرار شود.

$$\sum_{j=1}^N \left[\frac{T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)}}{T_j^{(k)}} \right]^2 + \sum_{j=1}^N \left[\frac{V_j^{(k)} - V_j^{(k-1)}}{V_j^{(k)}} \right]^2 \leq \varepsilon \quad 31-13$$

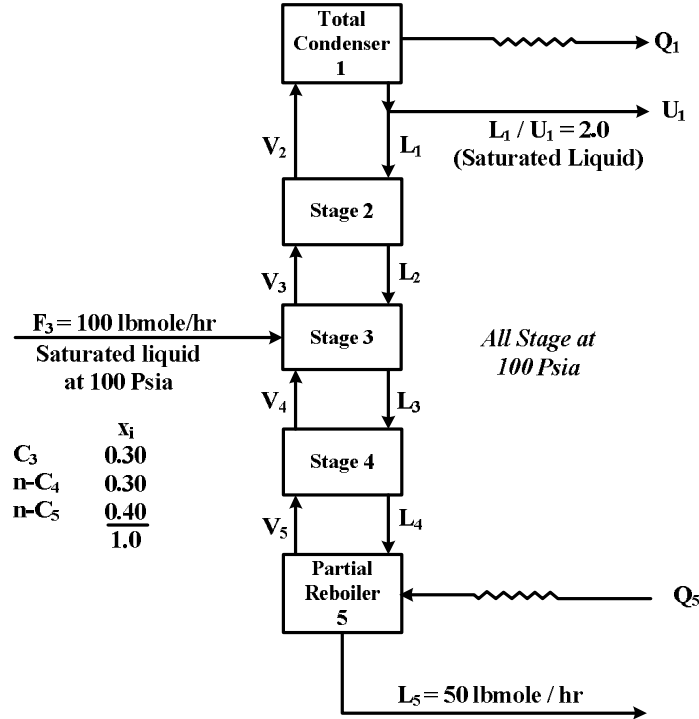
که در رابطه بالا دما بر حسب دمای مطلق نوشته می‌شود و ε میزان خطا است که توسط برنامه‌نویس تعیین می‌گردد. رابطه زیر نیز توسط ونگ و هنک برای پایان برنامه پیشنهاد شده است.

$$\tau = \sum_{j=1}^N [T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)}]^2 \leq 0.01N \quad 32-13$$

در محاسبات گاهی اوقات ممکن است برخی مقادیر V_j منفی دربیاید، برای رفع این مشکل عددی نزدیک به صفر برای آن در نظر گرفته می‌شود و محاسبات را ادامه می‌دهیم. برای اینکه اصلاً چنین مشکلی پیش نیاید بهتر است میزان تغییرات T_j و V_j از یک مرحله به مرحله دیگر محاسبه شود و مقادیر T_j و V_j فقط به اندازه ۱۰٪ این تغییرات اصلاح شوند. مثلاً در صورتی که حدس اولیه دما برای سینی اول $30^\circ C$ و در مرحله بعد دمای سینی اول $50^\circ C$ بدست آید بهتر است دما به صورت زیر انتخاب شود.

$$T_1 = 30 + \frac{10}{100}(50 - 30)$$

مثال ۱۳-۱: برای برج تقطیر نشان داده شده در شکل ۱۳-۸ روش BP را یک بار اعمال نموده و دمای سینی-ها را برای حدس بعدی بدست آورید.



شکل ۱۳-۸: مشخصات برج تقطیر در مثال ۱۳-۱

حل: با موازنه جرم کلی حول برج خواهیم داشت.

$$\text{Liquid distillate} = U_1 = F_3 - L_5 = 100 - 50 = 50 \text{ lbmole/hr}$$

با استفاده از نسبت جریان برگشتی می‌توان دبی مایع برگشتی را بدست آورد.

$$L_1 = (L_1/U_1)U_1 = (2)(50) = 100 \text{ lbmole/hr}$$

با موازنه جرم کلی حول کندانسور می‌توان دبی جریان V_2 را بدست آورد.

$$V_2 = L_1 + U_1 = 100 + 50 = 150 \text{ lbmole/hr}$$

حدس اولیه V_j با استفاده از شرط ثابت بودن دبی مایع و بخار در هر قسمت از برج و حدس اولیه T_j به صورت زیر خواهند بود.

Stage j	V_j , lbmole / hr	T_j , °F
1	(Fixed at 0 by specifications)	65
2	(Fixed at 150 by specifications)	90
3	150	115
4	150	140
5	150	165

مقادیر k برای اجزاء روی سینی‌های مختلف در فشار 100 Psia به صورت زیر می‌باشد.

Stage	k_{ij}				
	1	2	3	4	5
C_3 (1)	1.23	1.63	2.17	2.70	3.33
nC_4 (2)	0.33	0.50	0.71	0.95	1.25
nC_5 (3)	0.103	0.166	0.255	0.36	0.49

برای حل مسئله لازم است که غلظت اجزاء را روی سینی‌های مختلف بدست آوریم برای این منظور ابتدا باید محاسبات را برای پروپان (C_3) انجام دهیم که به صورت زیر می‌باشد.
با توجه به اینکه $V_1 = 0$ و $W_j = 0$ است رابطه ۱۳-۸ به صورت زیر درمی‌آید.

$$A_j = V_j + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - U_m)$$

با استفاده از رابطه اخیر، A_5 به صورت زیر خواهد شد.

$$A_5 = V_5 + F_3 - U_1 = 150 + 100 - 50 = 200 \text{ lbmole/hr}$$

به طریق مشابه A_4 تا A_2 به صورت زیر بدست می‌آیند.

$$A_4 = 200 \text{ lbmole/hr} \quad A_3 = 100 \text{ lbmole/hr} \quad A_2 = 100 \text{ lbmole/hr}$$

با توجه به اینکه $V_1 = 0$ و $W_j = 0$ است رابطه ۱۳-۹ نیز به صورت زیر درمی‌آید.

$$B_j = - \left[V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m) + U_j + V_j k_{i,j} \right]$$

با استفاده از رابطه اخیر B_5 به صورت زیر می‌باشد.

$$B_5 = - [F_3 - U_1 + V_5 k_{1,5}] = - [100 - 50 + (150) 3.33] = -549.5 \text{ lbmole/hr}$$

به طریق مشابه B_4 تا B_1 به صورت زیر خواهند بود.

$$B_4 = -605 \text{ lbmole/hr} \quad B_3 = -525.5 \text{ lbmole/hr} \quad B_2 = -334.5 \text{ lbmole/hr} \quad B_1 = -150 \text{ lbmole/hr}$$

با استفاده از رابطه ۱۳-۱۰ مقادیر C_j را می‌توان بدست آورد.

$$C_j = V_{j+1} k_{i,j+1} \Rightarrow C_1 = V_2 k_{1,2} = 150(1.63) = 244.5 \text{ lbmole/hr}$$

به طریق مشابه C_2 تا C_4 به صورت زیر خواهند بود.

$$C_2 = 325.5 \text{ lbmole/hr} \quad C_3 = 405 \text{ lbmole/hr} \quad C_4 = 499.5 \text{ lbmole/hr}$$

با استفاده از رابطه ۱۳-۱۱ مقادیر D_j را می‌توان بدست آورد.

$$D_j = -F_j z_{i,j} \Rightarrow D_3 = -100(0.3) = -30 \text{ lbmole/hr}$$

به طریق مشابه مقادیر D_1 ، D_2 ، D_4 و D_5 بدست آمده که همگی برابر صفر می‌باشند.

$$D_1 = D_2 = D_4 = D_5 = 0$$

با جایگذاری مقادیر اخیر در رابطه ۱۳-۱۲ ماتریس زیر حاصل می‌شود.

$$\begin{bmatrix} -150 & 244.5 & 0 & 0 & 0 \\ 100 & -344.5 & 325.5 & 0 & 0 \\ 0 & 100 & -525.5 & 405 & 0 \\ 0 & 0 & 200 & -605 & 499.5 \\ 0 & 0 & 0 & 200 & -549.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1,1} \\ x_{1,2} \\ x_{1,3} \\ x_{1,4} \\ x_{1,5} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -30 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

با استفاده از روابط ۱۳-۱۴ و ۱۳-۱۵ قسمت پیشرو الگوریتم توماس را به صورت زیر اعمال می‌کنیم.

$$p_1 = \frac{C_1}{B_1} = \frac{244.5}{-150} = -1.630$$

$$q_1 = \frac{D_1}{B_1} = \frac{0}{-150} = 0$$

$$p_2 = \frac{C_2}{B_2 - A_2 p_1} = \frac{325.5}{-344.5 - 100(-1.630)} = -1.793$$

با جایگذاری مقادیر بدست آمده در ماتریس قسمت B شکل ۱۳-۵ خواهیم داشت.

$$\begin{bmatrix} 1 & -1.630 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1.793 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1.170 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1.346 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1,1} \\ x_{1,2} \\ x_{1,3} \\ x_{1,4} \\ x_{1,5} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0.0867 \\ 0.0467 \\ 0.0333 \end{bmatrix}$$

با اعمال قسمت پسرو الگوریتم توماس با استفاده از روابط ۱۳-۱۷ و ۱۳-۱۸ خواهیم داشت.

$$x_{1,5} = q_5 = 0.0333$$

$$x_{1,4} = q_4 - p_4 x_{1,5} = 0.0467 - (-1.346)(0.0333) = 0.0915$$

به طریق مشابه خواهیم داشت.

$$x_{1,3} = 0.1938$$

$$x_{1,2} = 0.3475$$

$$x_{1,1} = 0.5664$$

می توان به روش مشابه ماتریس را برای nC_4 و nC_5 بدست آورد که با حل این ماتریس ها نتایج زیر حاصل می شود.

Stage	x_{ij}				
	1	2	3	4	5
C_3	0.5664	0.3475	0.1938	0.0915	0.0333
nC_4	0.1910	0.3820	0.4483	0.4857	0.4090
nC_5	0.0191	0.1149	0.3253	0.4820	0.7806
$\sum_i x_{ij}$	0.7765	0.8444	0.9674	1.0592	1.2229

ابتدا مقادیر $x_{i,j}$ را با استفاده از رابطه ۱۳-۱۹ نرمال می کنیم و با اعمال محاسبات نقطه حساب در فشار 100 Psia با استفاده از رابطه ۱۳-۲۰ حدس های بعدی دمای سینی ها بدست می آیند.

Stage	$T^{(2)}, ^\circ F$	$T^{(1)}, ^\circ F$
1	66	65
2	94	90
3	131	115
4	154	140
5	184	165

سرعت همگرایی روش BP قابل پیش بینی نیست و همانطور که در مثال ۱۳-۲ نشان داده خواهد شد به حدس های اولیه T_j بستگی دارد به علاوه در برج هایی که نسبت جریان برگشتی بالا است سرعت همگرایی پایین تر از حالتی است که نسبت جریان برگشتی کم است. یک روش برون یابی توسط ارباچ و کرو^۱ [۱۲] ارائه شده که سرعت همگرایی را افزایش می دهد.

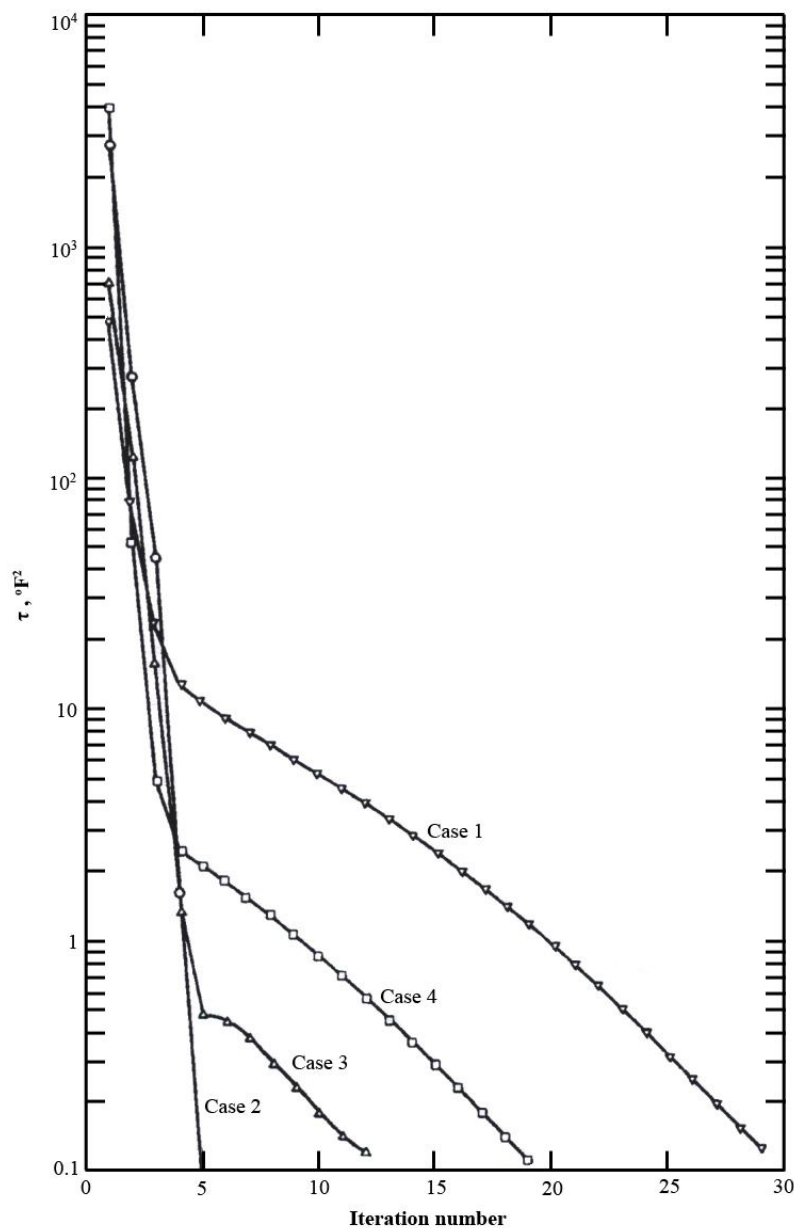
مثال ۱۳-۲: برای برج تقطیر مثال ۵-۴ مقادیر دمای سینی‌ها، دبی مایع و بخار بین سینی‌ها، غلظت روی سینی‌ها، بار حرارتی کندانسور و جوش‌آور را با استفاده از روش BP بدست آورید.

حل: برای حل این مسئله از برنامه کامپیوتری ارائه شده توسط جوهانسون و سیدر^[۱۰] که بر مبنای روش ونگ و هنک نوشته شده استفاده می‌شود و فقط نتایج ارائه شده است. برای شرط همگرایی از معادله ۱۳-۳۲ استفاده می‌گردد مقادیر k و آنتالپی از داده‌های مثال ۵-۱ استفاده شده است. مقادیر V_j با استفاده از شرط ثابت بودن دبی مایع و بخار در هر قسمت حدس زده می‌شود و از آنجا که حدس اولیه T_j با استفاده از دمای بالا و پایین برج و توزیع خطی بدست می‌آید فقط به حدس دمای بالا و پایین برج نیاز داریم.

تاثیر حدس‌های دمای بالا و پایین برج جهت برقراری شرط ۱۳-۳۲ بر تعداد تکرارها در جدول زیر نشان داده شده است.

Case	Assumed Temperatures, °F		Number of Iterations for Convergence	Execution Time on UNIVAC 1108, sec
	Distillate	Bottoms		
1	11.5	164.9	29	6.0
2	0.0	200.0	5	2.1
3	20.0	180.0	12	3.1
4	50.0	150.0	19	3.7

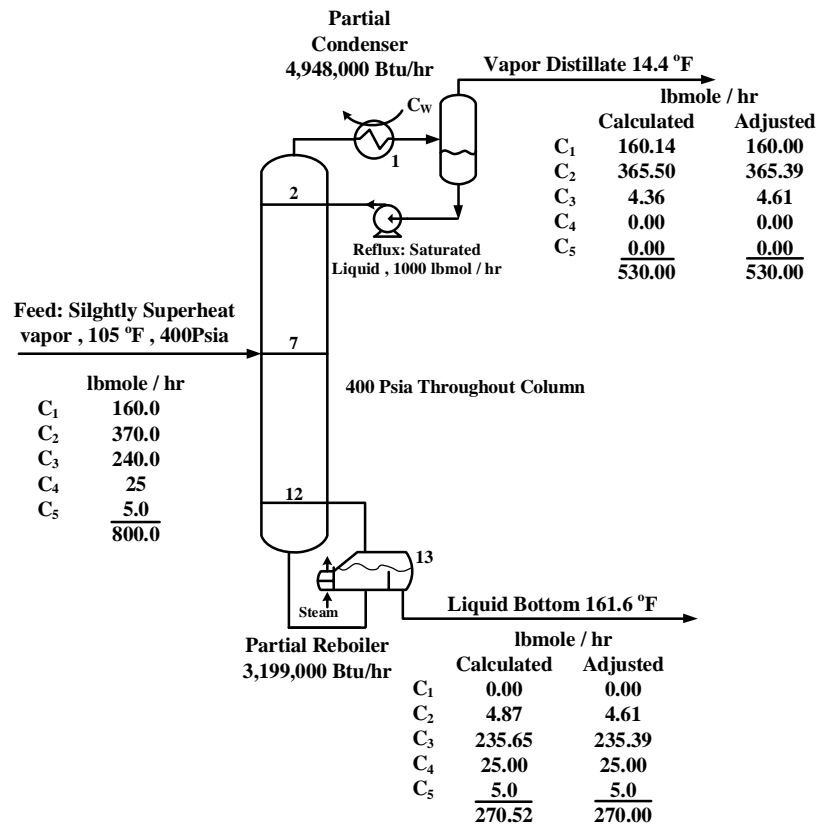
برای حالت اول (Case 1) دماهای در نظر گرفته شده در روش گروهی در مثال ۵-۴ به عنوان حدس اولیه در نظر گرفته شده است با وجود اینکه این دماها نزدیک به دماهای در نظر گرفته شده در حالت‌های بعدی است اما نیاز به تکرار بیشتری دارد. در شکل ۱۳-۹ مقادیر τ بر حسب تکرارهای مختلف برای حالت ۱ تا ۴ رسم شده است. حالت دوم (Case 2) به سرعت به $\tau < 0.13$ همگرا می‌شود. سرعت همگرایی حالت اول، سوم و چهارم زیاد است اما در تکرارهای بعدی سرعت همگرایی به شدت کاهش می‌یابد مخصوصاً این مورد برای حالت اول بسیار مشهود است این موضوع بدین دلیل است که در برنامه حدس‌های اولیه به اندازه ۱۰٪ تغییرات در مراحل بعدی تغییر داده می‌شوند که این کار سرعت همگرایی را کاهش می‌دهد اما باعث می‌شود که در طول رسیدن به جواب نوسان ایجاد نشود همانطور که در شکل ۱۳-۹ مشاهده می‌گردد هیچگونه نوسانی دیده نمی‌شود.



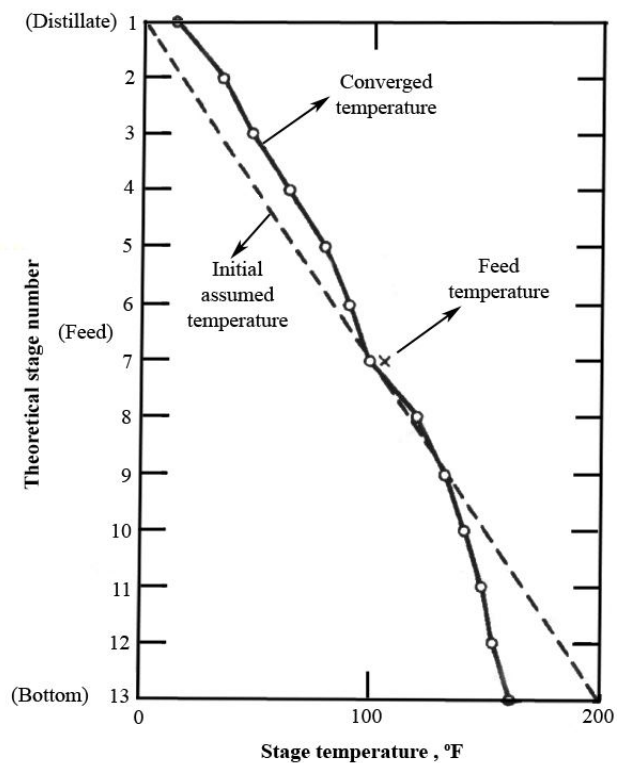
شکل ۱۳-۹: سرعت همگرایی برای حالت‌های مختلف مثال ۱۳-۲

نتایج نهایی مقادیر همگرا شده برای حالت دوم در شکل ۱۳-۱۰ نشان داده شده است. همانطور که در این شکل دیده می‌شود محصولات خروجی با خوراک ورودی موازنه جرم نیستند بنابراین مقادیر متوسطی که موازنه جرم را نقض نکنند در شکل ۱۳-۱۰ نشان داده شده است. برای رفع این مشکل باید مقدار τ را کوچکتر در نظر گرفت هر چقدر مقدار τ کوچکتر در نظر گرفته شود خطای موازنه جرم کمتر خواهد شد. مقادیر همگرا شده دما، دبی جریان‌های تبادل شده بین سینی‌ها و غلظت فازها روی سینی‌های مختلف به ترتیب در شکل‌های ۱۳-۱۱، ۱۳-۱۲، ۱۳-۱۳ و ۱۳-۱۴ برای حالت دوم نشان داده شده است. نتایج بقیه حالت‌ها نیز شبیه به حالت دوم است فقط حدس‌های اولیه متفاوت هستند. همانطور که در شکل ۱۳-۱۱

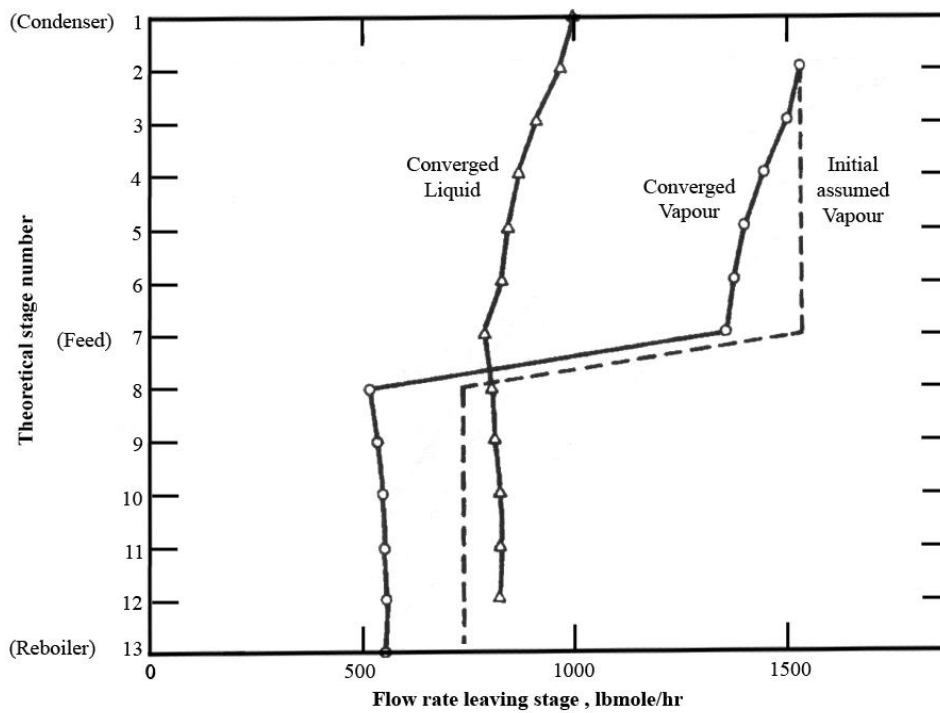
نشان داده شده حدس اولیه دما بین بالا و پایین برج به صورت خطی در نظر گرفته شده و غیر از پایین برج تقریباً دمای سینی‌ها انحراف کمی نسبت به حدس اولیه دارد. معمولاً دمای نقطه خوراک به حدس نزدیک است.



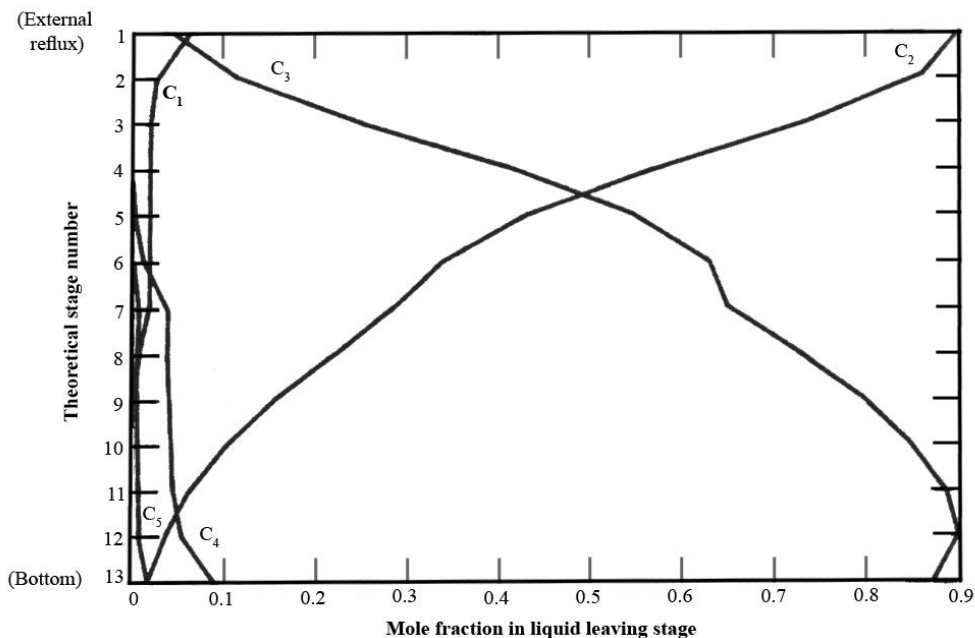
شکل ۱۳-۱۰: نتایج نهایی محصولات خروجی برای مثال ۱۳-۲



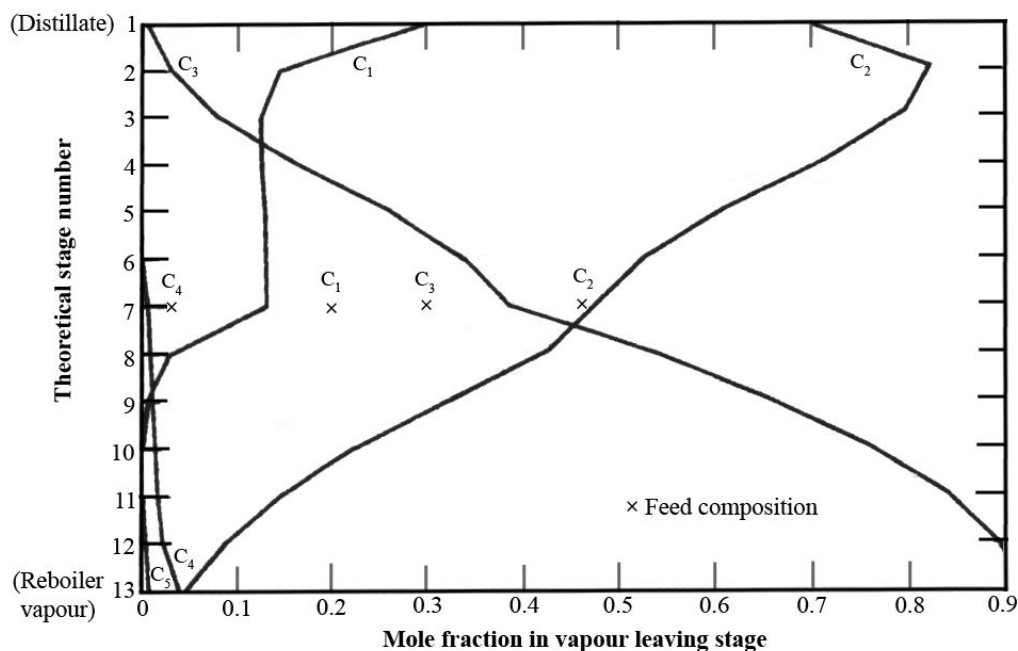
شکل ۱۳-۱۱: توزیع دمای همگرا شده برای مثال ۱۳-۲



شکل ۱۳-۱۲: دبی جریان‌های تبادل شده در حالتی که مسئله ۱۳-۲ همگرا شده است.



شکل ۱۳-۱۳: غلظت اجزاء در فاز مایع سینی‌های مختلف در حالتی که مسئله ۱۳-۲ همگرا شده است.



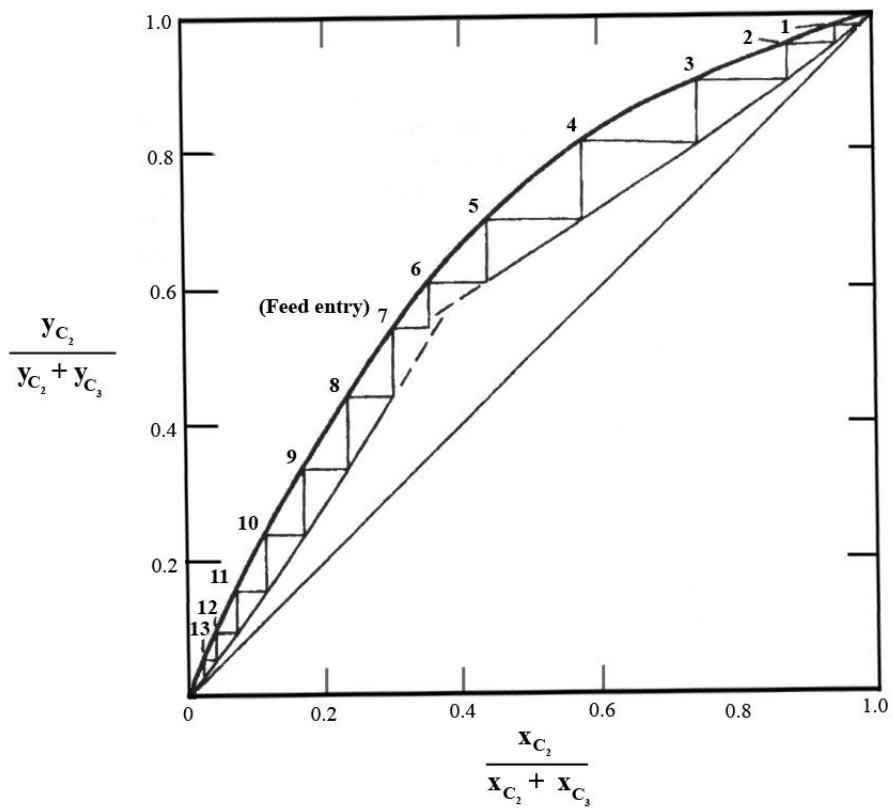
شکل ۱۳-۱۴: غلظت اجزاء در فاز بخار سینی‌های مختلف در حالتی که مثال ۱۳-۲ همگرا شده است.

همانطور که در شکل ۱۳-۱۲ نشان داده شده شرط ثابت بودن دبی مایع و بخار برای بالای برج صادق نیست و دبی مایع و بخار از بالا به پایین کاهش می‌یابد دبی مایع نزدیک نقطه خوراک تغییر چندانی ندارد چون خوراک تقریباً به صورت بخار اشباع وارد برج می‌شود و به همین دلیل است که دبی بخار در نقطه خوراک

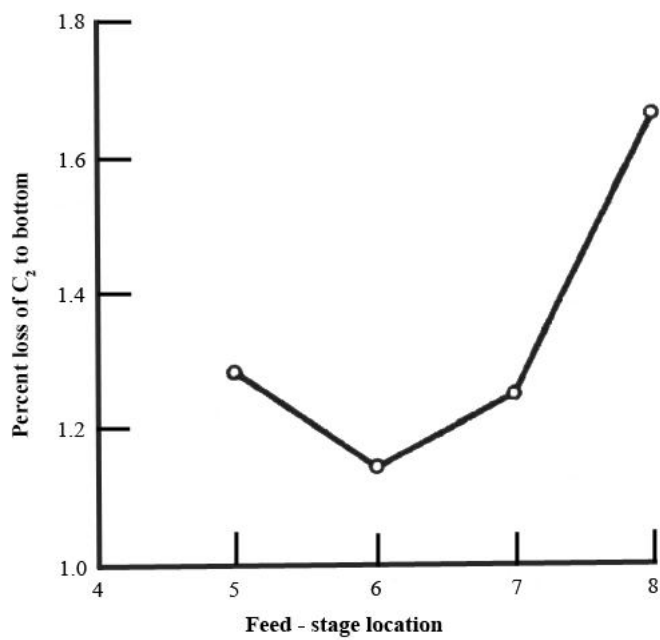
تقریباً به اندازه دبی خوراک تغییر می‌کند. برای این مثال شرط ثابت بودن دبی مایع و بخار برای پایین برج صادق است.

برای این مثال جداسازی بین C_2 و C_3 انجام می‌شود که به ترتیب جزء کلیدی سبک (LK) و جزء کلیدی سنگین (HK) محسوب می‌شوند. جزء C_1 به عنوان جزء سبک‌تر از جزء کلیدی سبک (LLK) و اجزاء C_4 و C_5 به عنوان اجزاء سنگین‌تر از جزء کلیدی سنگین (HHK) محسوب می‌شوند. بجز در قسمت خوراک، نقطه بالا و نقطه پایین برج مشهود است که غلظت C_2 از بالا به پایین کاهش می‌یابد و غلظت C_3 از بالا به پایین افزایش می‌یابد. در قسمت خوراک، نقطه بالا و نقطه پایین برج به علت اینکه یک جریان وارد برج می‌شود ممکن است در منحنی‌های غلظت شکستگی ایجاد شود. غلظت C_1 تقریباً در طول برج ثابت است و نزدیک به بالای برج تغییر ناگهانی دارد و همچنین نزدیک به پایین برج به طور ناگهانی غلظت C_1 بسیار کاهش می‌یابد. عکس همین مطلب برای اجزاء C_4 و C_5 نیز صادق است. همانطور که در شکل ۱۳-۱۴ دیده می‌شود غلظت خوراک ورودی دقیقاً با غلظت سینی خوراک برابر نیست.

زمانی که تعداد سینی‌ها و جریان برگشتی معلوم است بدست آوردن محل سینی خوراک جهت جداسازی بهتر، بسیار مشکل است برای این منظور از روش مک‌کیب-تیلی اصلاح شده استفاده می‌شود. در این روش فقط دبی‌های جزء کلیدی سبک و جزء کلیدی سنگین در نظر گرفته می‌شود و غلظت‌های جزء سبک و سنگین نیز بر مبنای عاری از بقیه اجزاء محاسبه می‌شوند. با استفاده از این روش می‌توان محل سینی خوراک را بدست آورد. نتیجه این روش برای مثال ۱۳-۲ در شکل ۱۳-۱۵ نشان داده شده است. با اعمال این روش سینی هفتم به عنوان سینی خوراک بدست می‌آید اما باید یک سینی بالاتر و یک سینی پایین‌تر را نیز در محاسبات امتحان کنیم. نتیجه این محاسبات در شکل ۱۳-۱۶ نشان داده شده است. در این شکل دیده می‌شود وقتی که سینی خوراک، سینی ششم باشد غلظت اتان در پایین برج کمترین مقدار را خواهد داشت و جداسازی بیشتری ایجاد می‌شود.



شکل ۱۳- ۱۵: اعمال روش مک کیب- تیلی تصحیح شده برای مثال ۲-۱۳

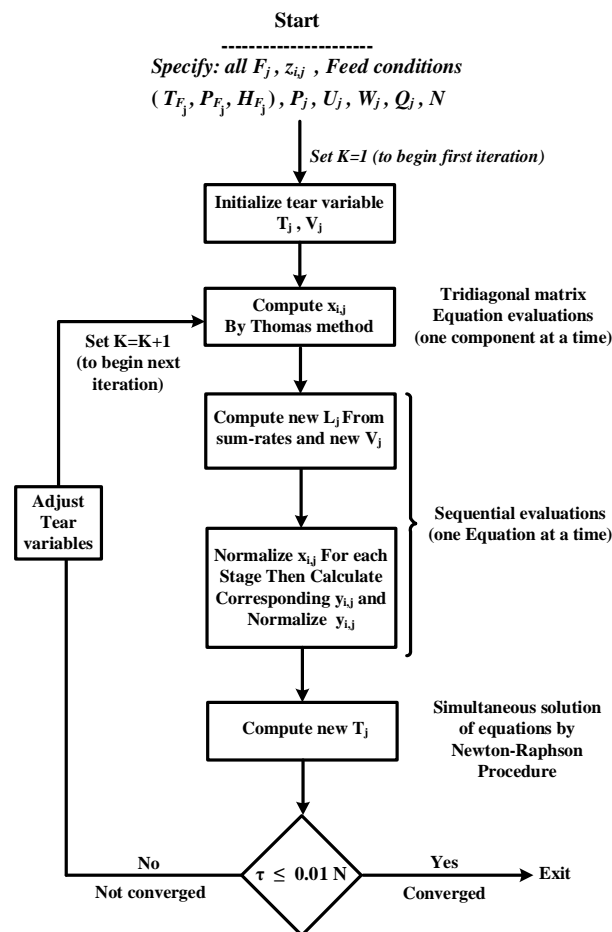


شکل ۱۳- ۱۶: تاثیر محل سینی خوراک بر جداسازی برای مثال ۲-۱۳

روش SR برای برج جذب و برج دفع

اجزائی که در یک برج جذب یا برج دفع در مجاورت هم قرار می‌گیرند اختلاف دمایی جوش زیادی دارند و در نتیجه روش BP خطای زیادی خواهد داشت زیرا در این حالت با استفاده از معادله ۱۳-۲۰ محاسبات نقطه حباب نسبت به غلظت اجزاء فاز مایع بسیار حساس است. تحقیقات فرایندی و اسمیت [۷] نشان داد روشی که توسط سوجاتا^۱ [۱۴] پیشنهاد شده بسیار کاربردی است. این روش به عنوان روش مجموع جریان‌ها (Sum Rate) یا به اختصار SR شناخته می‌شود این روش توسط برنینگهام و اتو^۲ [۱۵] به صورت ماتریس سه‌قطری درآمده است تا حل آن راحت‌تر باشد.

شکل ۱۳-۱۷ الگوریتم روش برنینگهام و اتو را نشان می‌دهد. مشخصات برج شامل محل همه سینی‌های خوراک، فشار هر مرحله تعادلی، دبی همه جریان‌های جانبی، انتقال حرارت هر سینی و تعداد کل سینی‌ها برای حل مسئله باید مشخص باشد.



شکل ۱۳-۱۷: الگوریتم روش برنینگهام و اتو برای برج جذب و برج دفع

- 1- Sujata
- 2- Burningham and Otto

مقدار حدس‌های T_j و V_j برای شروع حل مسئله لازم است. برای اغلب مسائل بهتر است مقادیر V_j با استفاده از شرط ثابت بودن دبی مایع و بخار در هر قسمت بدست آورده شود که برای این منظور لازم است دبی‌های ورودی و خروجی به برج مشخص باشند. حدس T_j نیز با فرض خطی بودن توزیع دمایی در طول برج بدست می‌آید از آنجا که دمای مایع و بخار ورودی به برج معلوم است با در نظر گرفتن توزیع خطی دمایی در طول برج می‌توان مقادیر T_j را حدس زد.

مقادیر $x_{i,j}$ با استفاده از رابطه ۱۳-۱۲ و توسط الگوریتم توماس بدست آورده می‌شود. در این مرحله مقادیر $x_{i,j}$ نرمال نمی‌شوند و به طور مستقیم با استفاده از معادله ۱۳-۴ برای بدست آوردن حدس بعدی دبی مایع مورد استفاده قرار می‌گیرند. از آنجا که در محاسبات سعی و خطا لازم است مقادیر حدس و مقادیر بدست آورده شده با هم برابر باشند پس باید $L_j^{(k+1)} = L_j^{(k)}$ شود. که می‌توان این موضوع را به صورت $L_j^{(k+1)}/L_j^{(k)} = 1$ نیز نشان داد پس در معادله ۱۳-۴ به جای مقدار یک می‌توان $L_j^{(k+1)}/L_j^{(k)}$ را قرار داد که نهایتاً رابطه زیر حاصل خواهد شد.

$$L_j^{(k+1)} = L_j^{(k)} \sum_{i=1}^C x_{i,j} \quad ۳۳-۱۳$$

با قرار دادن مقدار حدس $V_j^{(k)}$ در معادله ۱۳-۶ می‌توان $L_j^{(k)}$ را بدست آورد. برای بدست آوردن $V_j^{(k+1)}$ ، از جمع کردن موازنه جرم (معادله ۱۳-۱) برای همه اجزاء و ترکیب کردن با معادله‌های ۱۳-۳ و ۱۳-۴ برای همه سینی‌های j تا N بدست می‌آید که این رابطه به صورت زیر خواهد بود.

$$V_j = L_{j-1} - L_N + \sum_{m=j}^N (F_m - W_m - U_m) \quad ۳۴-۱۳$$

مقادیر نرمال $x_{i,j}$ با استفاده از رابطه ۱۳-۱۹ و مقادیر $y_{i,j}$ با استفاده از رابطه ۱۳-۲ محاسبه می‌شوند. مقادیر حدس بعدی T_j با استفاده از حل همزمان موازنه انرژی (معادله ۱۳-۵) برای همه مراحل تعادلی بدست می‌آید. از آنجا که آنتالپی تابعی غیر خطی از T_j است موازنه انرژی باید با استفاده از روش نیوتن رافسون و به صورت حدس و خطا حل شود.

همانطور که از معادله ۱۳-۵ مشهود است مقادیر H_j تابعی از T_{j-1} ، T_j و T_{j+1} می‌باشند که بسط تیلور تابع H_j به صورت زیر می‌باشد.

$$\left(\frac{\partial H_j}{\partial T_{j-1}} \right)^{(r)} \Delta T_{j-1}^{(r)} + \left(\frac{\partial H_j}{\partial T_j} \right)^{(r)} \Delta T_j^{(r)} + \left(\frac{\partial H_j}{\partial T_{j+1}} \right)^{(r)} \Delta T_{j+1}^{(r)} = -H_j^{(r)} \quad ۳۵-۱۳$$

که متغیرها به صورت زیر تعریف می‌شوند.

$$\Delta T_j^{(r)} = T_j^{(r+1)} - T_j^{(r)} \quad ۳۶-۱۳$$

$$\frac{\partial H_j}{\partial T_{j-1}} = L_{j-1} \frac{\partial H_{L_{j-1}}}{\partial T_{j-1}} \quad ۳۷-۱۳$$

$$\frac{\partial H_j}{\partial T_j} = -(L_j + U_j) \frac{\partial H_{L_j}}{\partial T_j} - (V_j + W_j) \frac{\partial H_{V_j}}{\partial T_j} \quad ۳۸-۱۳$$

$$\frac{\partial H_j}{\partial T_{j+1}} = V_{j+1} \frac{\partial H_{V_{j+1}}}{\partial T_{j+1}} \quad ۳۹-۱۳$$

حال باید مشتق‌های اخیر را بدست آوریم. در صورتی که آنتالپی مایع و بخار به صورت زیر تعریف شوند.

$$H_{V_j} = \sum_{i=1}^C y_{i,j} (A_i + B_i T + C_i T^2) \quad ۴۰-۱۳$$

$$H_{L_j} = \sum_{i=1}^C x_{i,j} (a_i + b_i T + c_i T^2) \quad ۴۱-۱۳$$

مقادیر مشتق به صورت زیر خواهند بود.

$$\frac{\partial H_{V_j}}{\partial T_j} = \sum_{i=1}^C y_{i,j} (B_i + 2C_i T) \quad ۴۲-۱۳$$

$$\frac{\partial H_{L_j}}{\partial T_j} = \sum_{i=1}^C x_{i,j} (b_i + 2c_i T) \quad ۴۳-۱۳$$

با اعمال معادله ۱۳-۳۵ برای همه سینی‌ها می‌توان N معادله بدست آورد که بر حسب $\Delta T_j^{(r)}$ خطی می‌باشد. شکل کلی ماتریس به صورت ماتریس ۱۳-۱۲ خواهد شد که مقادیر A_j ، B_j ، C_j و D_j به صورت زیر تعریف می‌شوند.

$$A_j = \left(\frac{\partial H_j}{\partial T_{j-1}} \right)^{(r)}, \quad B_j = \left(\frac{\partial H_j}{\partial T_j} \right)^{(r)}, \quad C_j = \left(\frac{\partial H_j}{\partial T_{j+1}} \right)^{(r)}, \quad D_j = -H_j^{(r)}$$

و در ماتریس ۱۳-۱۲ به جای $x_{i,j}$ مقادیر $\Delta T_j^{(r)}$ قرار می‌گیرند و از الگوریتم توماس می‌توان برای حل مقادیر $\Delta T_j^{(r)}$ کمک گرفت. حدس‌های بعدی دمای سینی‌ها به صورت زیر بدست می‌آیند.

$$T_j^{(r+1)} = T_j^{(r)} + t \Delta T_j^{(r)} \quad ۴۴-۱۳$$

مقدار t یک کمیت اسکالر است که در محدوده $0 < t < 1$ در نظر گرفته می‌شود. زمانی که t نزدیک به یک باشد سرعت همگرایی بالا خواهد بود اما در حل مسئله ممکن است نوسان ایجاد شود و زمانی که t نزدیک به صفر باشد سرعت همگرایی پایین می‌آید اما در حل مسئله نوسان نخواهیم داشت. زمانی که حدس‌های دمایی با دقت کمتری انتخاب شوند باید مقدار t کمتری انتخاب شود که باعث نوسان در حل مسئله نشود.

اعمال روش نیوتن رافسون

در روش نیوتن رافسون معادلات غیر خطی به فرم زیر نوشته می‌شوند.

$$f_i \{x_1, x_2, \dots, x_n\} = 0 \quad i=1, 2, \dots, n \quad ۴۵-۱۳$$

ابتدا باید مقداری برای مجهولات در نظر گرفته شود که این مقادیر با علامت ستاره نشان داده شده‌اند. سپس باید معادله ۱۳-۴۵ حول این مقادیر بسط داده شود که به صورت زیر خواهد بود.

$$0 = f_i \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \quad ۴۶-۱۳$$

$$\approx f_i \{x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*\} + \left. \frac{\partial f_i}{\partial x_1} \right|_* \Delta x_1 + \left. \frac{\partial f_i}{\partial x_2} \right|_* \Delta x_2 + \dots + \left. \frac{\partial f_i}{\partial x_n} \right|_* \Delta x_n \quad ۴۷-۱۳$$

که $\Delta x_j = x_j - x_j^*$ می باشد.

معادله ۴۷-۱۳ که فرم خطی معادله ۴۶-۱۳ است برای مقادیر Δx_j خطی است و می توان این مقادیر را با حل معادله ۴۷-۱۳ بدست آورد. با Δx_j بدست آمده و معادله ۴۹-۱۳ می توان حدس بعدی را بدست آورد. در صورتی که مقادیر حدس و مقادیر بدست آورده شده اختلاف کمی داشته باشند جواب مسئله بدست آمده است. بازنویسی معادله ۴۷-۱۳ به فرم کلی به صورت زیر است.

$$\sum_{j=1}^n \left[\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)^{(r)} \Delta x_j^{(r)} \right] = -f_i^{(r)} \quad i=1,2,\dots,n \quad 48-13$$

$$x_j^{(r+1)} = x_j^{(r)} + \Delta x_j^{(r)} \quad i=1,2,\dots,n \quad 49-13$$

مثال ۳-۱۳: معادلات غیرخطی زیر را با دقت ± 0.001 برای مقادیر x_1 و x_2 با استفاده از روش نیوتن رافسون حل کنید.

$$x_1 \ln x_2 + x_2 \exp(x_1) = \exp(1)$$

$$x_2 \ln x_1 + 2x_1 \exp(x_2) = 2\exp(1)$$

حل: ابتدا دو معادله اخیر را به فرم معادله ۴۵-۱۳ درمی آوریم.

$$f_1\{x_1, x_2\} = x_1 \ln x_2 + x_2 \exp(x_1) - \exp(1) = 0$$

$$f_2\{x_1, x_2\} = x_2 \ln x_1 + 2x_1 \exp(x_2) - 2\exp(1) = 0$$

با استفاده از معادله ۴۸-۱۳ فرم خطی دو معادله اخیر به صورت زیر می باشد.

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right)^{(r)} \Delta x_1^{(r)} + \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_2} \right)^{(r)} \Delta x_2^{(r)} = -f_1^{(r)}$$

$$\left(\frac{\partial f_2}{\partial x_1} \right)^{(r)} \Delta x_1^{(r)} + \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_2} \right)^{(r)} \Delta x_2^{(r)} = -f_2^{(r)}$$

حل دو معادله اخیر جهت بدست آوردن $\Delta x_1^{(r)}$ و $\Delta x_2^{(r)}$ به صورت زیر می باشد.

$$\Delta x_1^{(r)} = \frac{\left[f_2^{(r)} \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_2} \right)^{(r)} - f_1^{(r)} \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_2} \right)^{(r)} \right]}{D}$$

$$\Delta x_2^{(r)} = \frac{\left[f_1^{(r)} \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_1} \right)^{(r)} - f_2^{(r)} \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right)^{(r)} \right]}{D}$$

که D به صورت زیر تعریف می شود.

$$D = \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right)^{(r)} \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_2} \right)^{(r)} - \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_2} \right)^{(r)} \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_1} \right)^{(r)}$$

که مقادیر مشتقها به صورت زیر می باشد.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_1}\right)^{(r)} &= \ln(x_2^{(r)}) + x_2^{(r)} \exp(x_1^{(r)}) & \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_1}\right)^{(r)} &= \frac{x_2^{(r)}}{x_1^{(r)}} + 2 \exp(x_2^{(r)}) \\ \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_2}\right)^{(r)} &= \frac{x_1^{(r)}}{x_2^{(r)}} + \exp(x_1^{(r)}) & \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_2}\right)^{(r)} &= \ln(x_1^{(r)}) + 2x_1^{(r)} \exp(x_2^{(r)}) \end{aligned}$$

حدس اولیه برای دو متغیر به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود.

$$x_1^{(1)} = 2 \quad , \quad x_2^{(1)} = 2$$

با اعمال روش نیوتن رافسون طی شش مرحله سعی و خطا مقادیر متغیرها به صورت زیر بدست می‌آید.

$$x_1^{(6)} = 1.0000 \quad , \quad x_2^{(6)} = 1.0000$$

که ریز محاسبات در جدول ذیل ارائه شده است.

r	$x_1^{(r)}$	$x_2^{(r)}$	$f_1^{(r)}$	$f_2^{(r)}$	$(\partial f_1 / \partial x_1)^{(r)}$	$(\partial f_1 / \partial x_2)^{(r)}$	$(\partial f_2 / \partial x_1)^{(r)}$	$(\partial f_2 / \partial x_2)^{(r)}$	$\Delta x_1^{(r)}$	$\Delta x_2^{(r)}$
1	2.0000	2.0000	13.4461	25.5060	15.4731	8.3891	15.7781	30.2494	-0.5743	-0.5436
2	1.4257	1.4564	3.8772	7.3133	6.4354	5.1395	9.6024	12.5880	-0.3544	-0.3106
3	1.0713	1.1457	0.7720	1.3802	3.4806	3.8541	7.3591	6.8067	-0.0138	-0.1878
4	1.0575	0.9579	-0.0059	0.1290	2.7149	3.9830	6.1183	5.5679	-0.0591	0.0417
5	0.9984	0.9996	-0.0057	-0.0122	2.7126	3.7127	6.4358	5.4244	0.00159	0.000368
6	1.0000	1.0000	5.51×10^{-6}	2.86×10^{-6}	2.7183	3.7183	6.4366	5.4366	12.1×10^{-6}	-3×10^{-6}
7	1.0000	1.0000	0.0	-2×10^{-9}	2.7183	3.7183	6.4366	5.4366	---	---

همانطور که از نتایج مشهود است در $x_1^{(6)} = 1.0000$ و $x_2^{(6)} = 1.0000$ مقدار تابع به صفر بسیار نزدیک است.

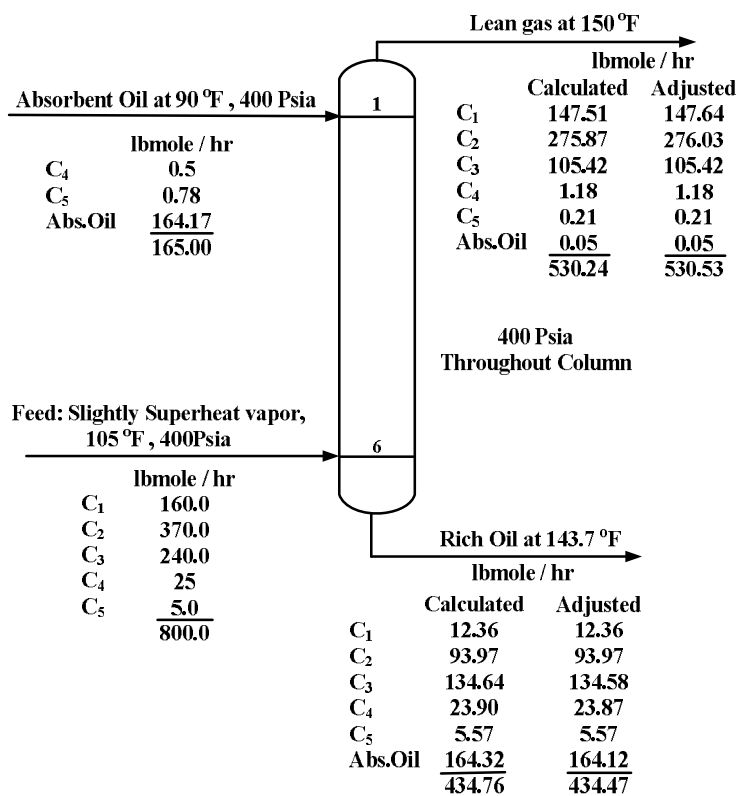
مثال ۱۳-۴: با استفاده از روش SR مقدار دما، دبی جریان مایع و بخار بین سینی‌ها و غلظت سینی‌ها را برای مثال ۵-۱ بدست آورید.

حل: برای حل این مسئله از برنامه کامپیوتری شینوهارا و همکاران^۱ [۱۶] که بر مبنای روش برنینگهام و اتو است استفاده شده است. مقادیر k و آنتالپی مایع و بخار از مثال ۵-۱ استخراج شده است. حدس دمای بالای برج $90^\circ F (32.2^\circ C)$ (دمای مایع ورودی به برج) و حدس دمای پایین برج $105^\circ F (40.6^\circ C)$ (دمای گاز ورودی به برج) در نظر گرفته می‌شود. برای حل مسئله و برقراری رابطه ۱۳-۳۲ هفت مرحله لازم است که مقادیر τ برای مراحل به صورت زیر است.

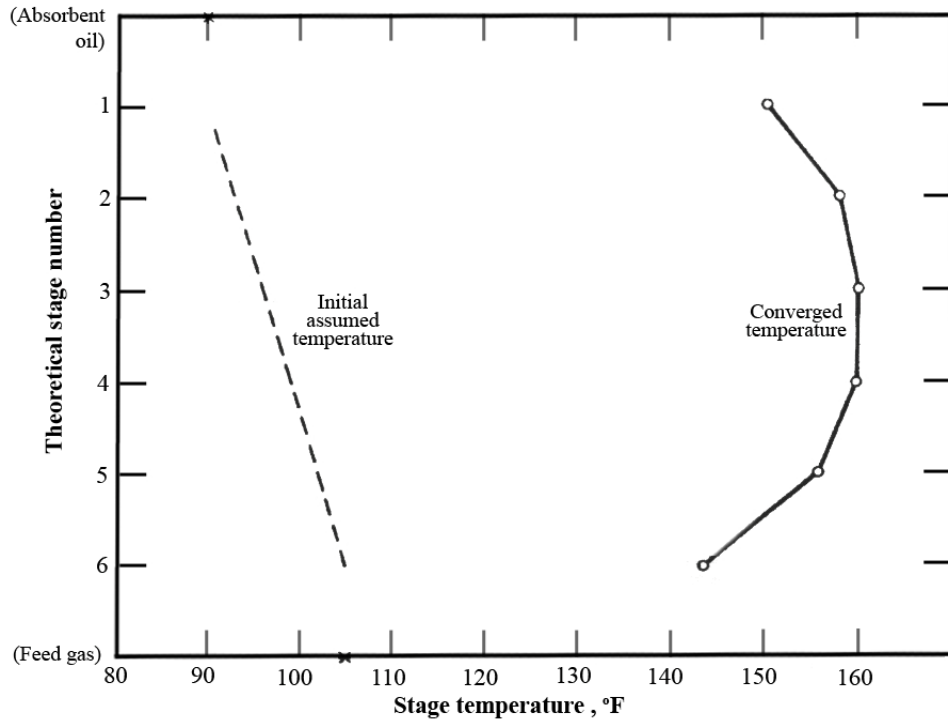
Iteration Number	$\tau, (^\circ F)^2$
1	9948
2	2556
3	46.0
4	8.65
5	0.856
6	0.124
7	0.0217

نتایج همگرا شده در شکل ۱۳-۱۸ آورده شده، همچنین مقادیر پیشنهادی که موازنه جرم را برقرار می‌سازد نیز نشان داده شده است. مقادیر همگرا شده دمای سینی‌ها، دبی جریان‌های تبادل شده بین سینی‌ها و دبی جریان‌های اجزاء تبادل شده بین سینی‌ها به ترتیب در شکل‌های ۱۳-۱۹، ۱۳-۲۰ و ۱۳-۲۱ نشان داده شده است. شکل ۱۳-۱۹ نشان می‌دهد که حدس اولیه دما که به صورت خطی در نظر گرفته شده کاملاً اشتباه می‌باشد. که این موضوع به خاطر میزان جذب متفاوت در سینی‌های مختلف و متفاوت بودن آنتالپی تبخیر اجزاء می‌باشد. در این مسئله ماکزیمم دما در میانه برج رخ می‌دهد. شکل ۱۳-۲۰ نشان می‌دهد که قسمت عمده جذب در سینی اول و آخر رخ می‌دهد. شکل ۱۳-۲۱ نشان می‌دهد که جذب C_1 و C_2 در سینی ابتدایی و انتهایی انجام می‌شود و جذب C_3 در طول برج خصوصاً در سینی ابتدایی و انتهایی انجام می‌شود و

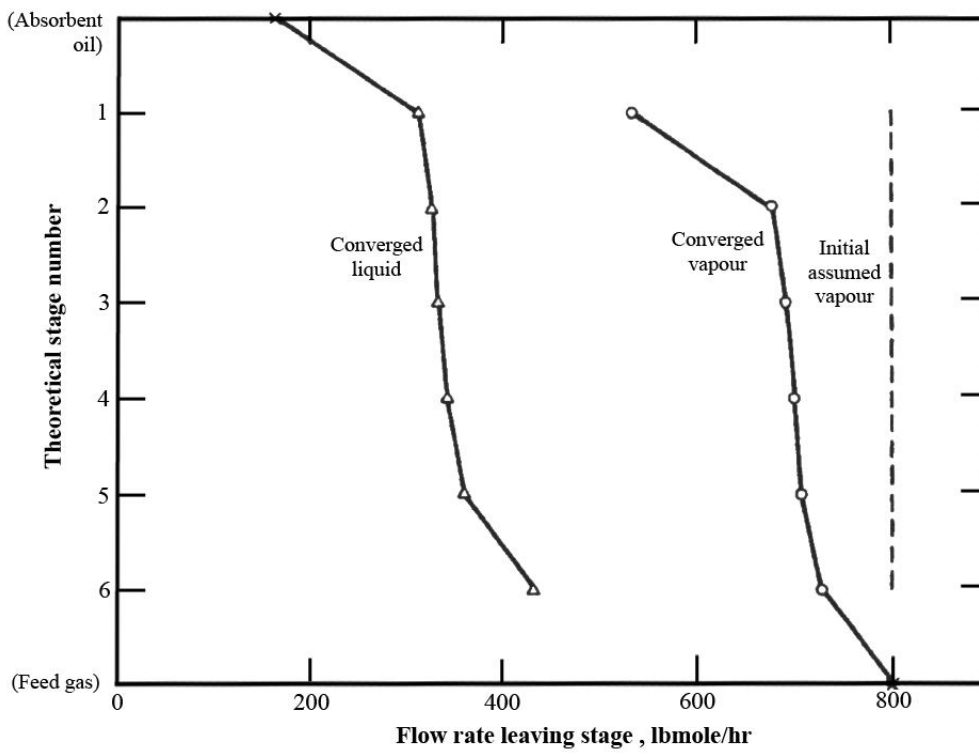
جذب C_4 و C_5 نیز در طول برج خصوصاً پایین برج که جریان گاز برای اولین بار با مایع جاذب تماس حاصل می‌نماید رخ می‌دهد.



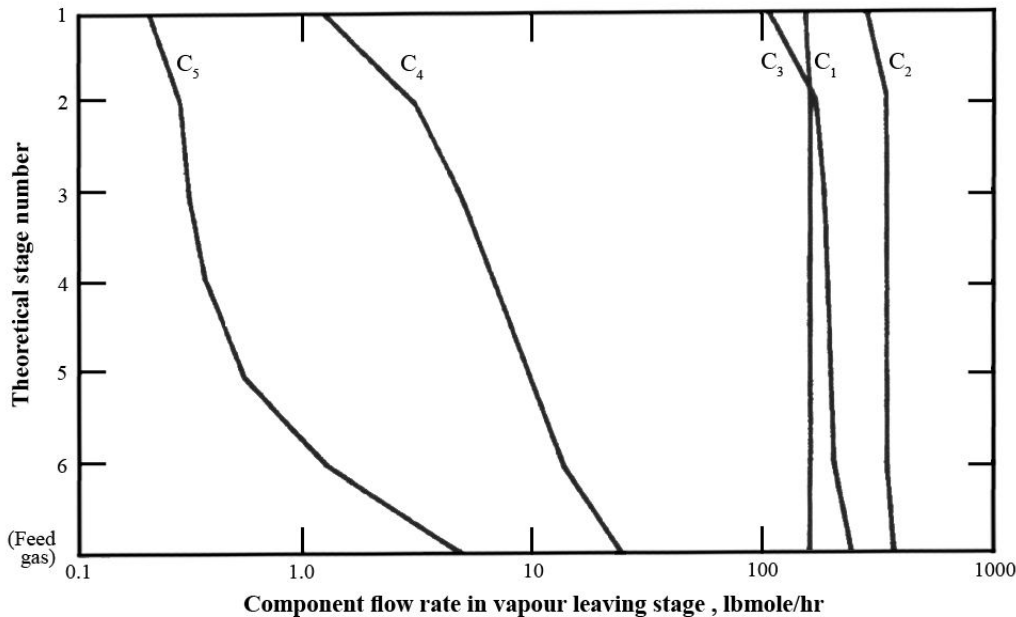
شکل ۱۳-۱۸: نتایج همگرا شده برای جریان‌های خروجی مثال ۱۳-۴



شکل ۱۳-۱۹: توزیع دما در طول برج برای مثال ۱۳-۴



شکل ۱۳-۲۰: دبی جریان مایع و بخار تبادل شده بین سینی‌های برای مثال ۱۳-۴



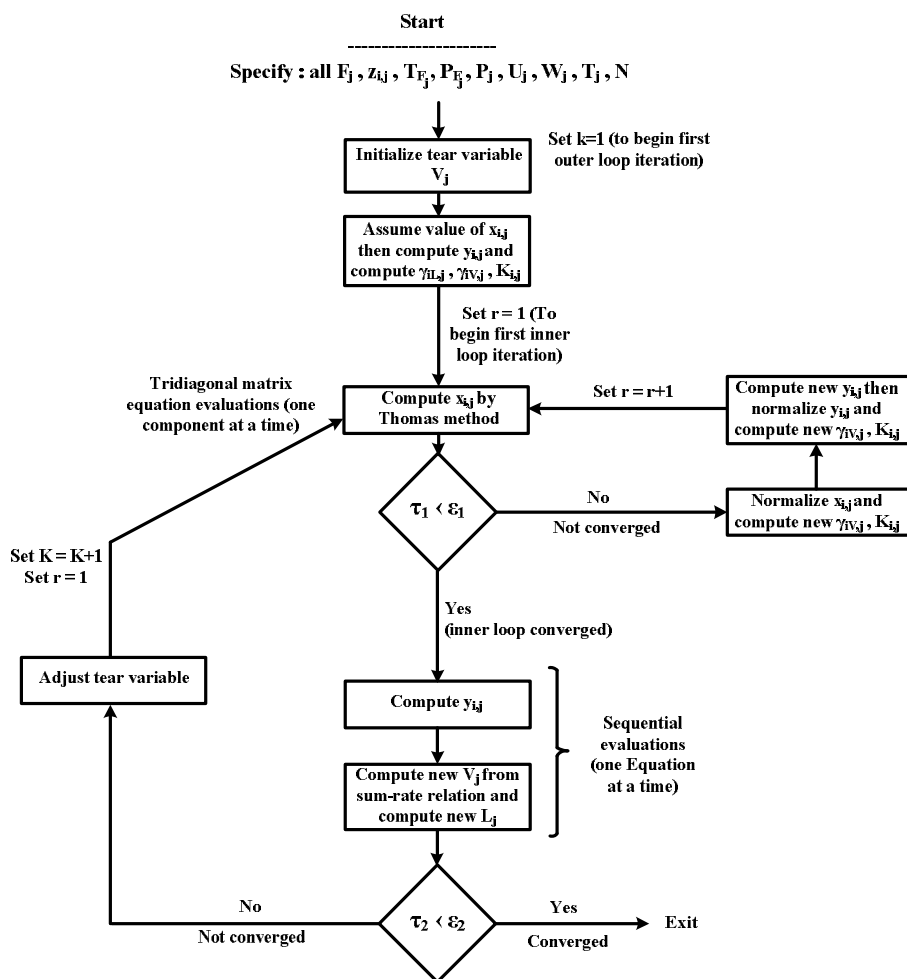
شکل ۱۳- ۲۱: دبی جریان اجزاء در فاز بخار برای مثال ۱۳-۴ که بین سینی‌ها تبادل شده است.

روش مجموع جریان‌های همدم (ISR) برای استخراج مایع-مایع

اغلب دستگاه‌های استخراج مایع-مایع به صورت آدیباتیک عمل می‌کنند. در صورتی که جریان‌های ورودی به دستگاه استخراج همدم باشند و بتوان از گرمای انحلال صرف‌نظر کرد عملیات در این دستگاه‌ها همدم خواهد بود. برای این شرایط وقتی که دما معلوم باشد تحقیقات فرایندی و اسمیت [۷] و تحقیقات دقیق‌تر سوبوکا و کاتایاما^۱ [۱۷] نشان داد که می‌توان از روش مجموع جریان‌های همدم^۲ استفاده کرد این روش به اختصار ISR نامیده می‌شود که مدل تعادلی آن دقیقاً مانند مدل ارائه شده در قسمت ۱-۱۵ می‌باشد از آنجا که دمای همه مراحل تعادلی برابر می‌باشند در صورتی که آنتالپی مخلوط شدن وجود داشته باشد مقادیر Q_i را می‌توان با استفاده از موازنه انرژی برای هر سینی بدست آورد. در استخراج مایع-مایع مقادیر K_{ij} به غلظت فازها وابسته است.

الگوریتم روش ISR که توسط سوبوکا و کاتایاما ارائه شده در شکل ۱۳-۲۲ نشان داده شده است. اندیس L مربوط به فاز پسماند^۳ و اندیس V مربوط به فاز استخراج شده^۴ می‌باشد. مشخصات مسئله شامل دبی جریان‌ها، غلظت و محل سینی خوراک‌ها، دمای سینی‌ها (که با هم برابر هستند)، دبی جریان‌های جانبی، تعداد سینی‌ها و فشار سینی‌ها می‌باشد. البته فشار سینی‌ها برای حل مسئله لازم نیست فقط باید بیشتر از فشار نقطه حباب باشد تا تبخیر رخ ندهد.

-
- 1- Tsuboka and Katayama
 - 2- Isothermal Sum-rate Method
 - 3- Raffinate
 - 4- Extract



شکل ۱۳- ۲۲ : الگوریتم حل مسائل استخراج مایع - مایع به روش ISR

از آنجا که دما معلوم است باید V_j را حدس بزنیم و دیگر نیازی به حدس زدن دما نیست برای این منظور ابتدا فرض می‌کنیم جداسازی کاملی رخ دهد و هیچگونه حلالی در فاز پسماند نفوذ نکند با این فرض می‌توان دبی جریان فاز استخراج شده خروجی و فاز پسماند خروجی را بدست آورد سپس با میان‌یابی خطی می‌توان مقادیر V_j را بدست آورد.

اثر غلظت بر مقادیر ضریب توزیع (K) برای استخراج مایع- مایع قابل ملاحظه است بنابراین شایسته است که مقادیر $x_{i,j}$ و $y_{i,j}$ در ابتدا حدس زده می‌شوند تا با استفاده از آنها بتوان مقادیر $K_{i,j}$ را بدست آورد. مقادیر $x_{i,j}$ با استفاده از توزیع خطی اجزاء در طول برج بدست می‌آید و مقادیر $y_{i,j}$ را می‌توان توسط موازنه جرم (رابطه ۱۳-۱) محاسبه نمود. مقادیر $\gamma_{iL,j}$ و $\gamma_{iV,j}$ با استفاده از معادله مناسب بدست می‌آیند و معمولاً معادلات ون‌لار ، NRTL یا UNIQUAC مورد استفاده قرار می‌گیرند. مقادیر $K_{i,j}$ را می‌توان با استفاده از رابطه زیر بدست آورد.

$$K_{i,j} = \frac{\gamma_{iL,j}}{\gamma_{iV,j}} \quad 50-13$$

مقادیر جدید $x_{i,j}$ را می‌توان با استفاده از رابطه ۱۳-۲۱ و استفاده از الگوریتم توماس بدست آورد. مقادیر جدید بدست آمده با مقادیر حدس زده شده توسط رابطه زیر مقایسه می‌شوند.

$$\tau_1 = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^C [x_{i,j}^{(r-1)} - x_{i,j}^{(r)}]^2 \quad 51-13$$

r نشان دهنده شمارنده حلقه داخلی الگوریتم شکل ۱۳-۲۲ می‌باشد. در صورتی که $\tau_1 < \varepsilon_1$ شود حلقه داخلی الگوریتم همگرا شده است. میزان ε_1 معمولاً ۰/۰۱ در نظر گرفته می‌شود.

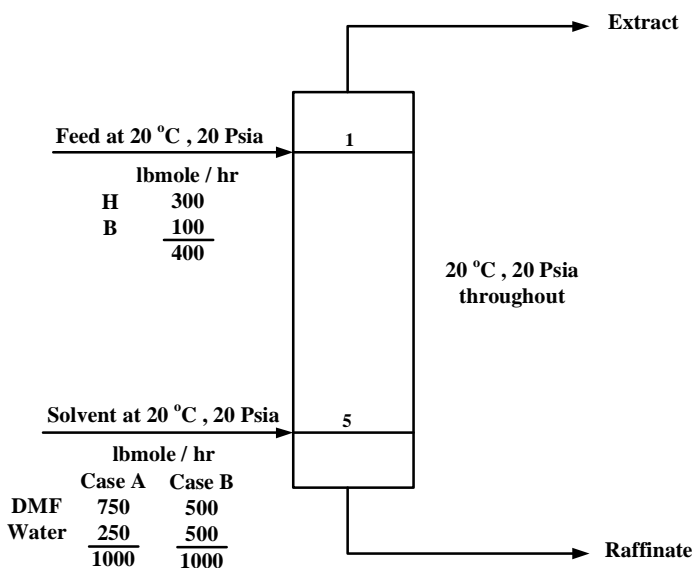
حلقه داخلی جهت بهبود بخشیدن مقدار K_{ij} می‌باشد. وقتی که حلقه داخلی همگرا شود با استفاده از مقادیر $x_{i,j}$ و معادله ۱۳-۲ می‌توان مقادیر $y_{i,j}$ را بدست آورد حال با استفاده از مقادیر $y_{i,j}$ می‌توان حدس جدید V_j را بدست آورد که به صورت زیر محاسبه می‌شوند.

$$V_j^{(k+1)} = V_j^{(k)} \sum_{i=1}^C y_{i,j} \quad 52-13$$

k نشان دهنده شمارنده حلقه خارجی الگوریتم شکل ۱۳-۲۲ می‌باشد. حلقه خارجی در صورتی که شرط زیر برقرار باشد همگرا شده است.

$$\tau_2 = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^C \left[\frac{V_j^{(k)} - V_j^{(k-1)}}{V_j^{(k)}} \right]^2 \leq \varepsilon_2 \quad 53-13$$

معمولاً مقدار $\varepsilon_2 = 0.01$ در نظر گرفته می‌شود. برای اینکه حل مسئله دچار نوسان نشود بهتر است یک ضریب همگرایی که معمولاً ۱۰٪ در نظر گرفته می‌شود انتخاب کنیم.



شکل ۱۳-۲۳: مشخصات برج استخراج مایع-مایع برای مثال ۱۳-۵

مثال ۱۳-۵ : جداسازی بنزن (B) از نرمال هپتان (H) با استفاده از تقطیر معمولی مشکل است در فشار اتمسفری اختلاف نقطه جوش دو جزء برابر $18.3^{\circ}C$ می باشد اما به علت غیر ایده آل بودن فاز مایع وقتی که غلظت بنزن در فاز مایع افزایش می یابد ضریب فراریت تا $1/15$ کاهش می یابد. یک روش برای این جداسازی استفاده از استخراج مایع- مایع با حلالی شامل دی متیل فرمامید (DMF) و آب می باشد. حلال نسبت به بنزن بیشتر از نرمال هپتان انتخاب پذیر است. سیستم استخراج مایع- مایع شامل پنج مرحله تعادلی و جریان ها به صورت غیرهمسو می باشند که در شکل ۱۳-۲۳ نشان داده شده است برای حالت های زیر دبی جریان های تبادل شده بین سینی ها و همچنین غلظت فازها را روی سینی ها بدست آورید.

الف : جریان حلال شامل 750 lbmole/hr دی متیل فرمامید و 250 lbmole/hr آب است.

ب : جریان حلال شامل 500 lbmole/hr دی متیل فرمامید و 500 lbmole/hr آب است.

حل : تحقیقات کوهن و رنون^۱ نشان داد که تعادل این سیستم را می توان توسط معادله NRTL بیان کرد که ضرایب دوجزئی برای این معادله به صورت زیر می باشد.

Binary Pair, ij	τ_{ij}	τ_{ji}	α_{ji}
DMF, H	2.036	1.910	0.25
Water, H	7.038	4.806	0.15
B, H	1.196	-0.355	0.30
Water, DMF	2.506	-2.128	0.253
B, DMF	-0.240	0.676	0.425
B, Water	3.639	5.750	0.203

الف : حدس اولیه دبی اجزاء در طول برج به صورت زیر می باشد.

Stage	V_j	Extract v_i				L_j	Raffinate l_i			
		H	B	DMF	W		H	B	DMF	W
Feed						400	300	100	0	0
1	1100	0	100	750	250	380	300	80	0	0
2	1080	0	80	750	250	360	300	60	0	0
3	1060	0	60	750	250	340	300	40	0	0
4	1040	0	40	750	250	320	300	20	0	0
5	1020	0	20	750	250	300	300	0	0	0
Solvent	1000	0	0	750	250					

با استفاده از مقادیر اخیر می توان حدس اولیه $x_{i,j}$ و $y_{i,j}$ را نیز بدست آورد.

Stage	V_j	y_{ij}				x_{ij}			
		H	B	DMF	Water	H	B	DMF	Water
1	1100	0.0	0.0909	0.6818	0.2273	0.7895	0.2105	0.0	0.0
2	1080	0.0	0.0741	0.6944	0.2315	0.8333	0.1667	0.0	0.0
3	1060	0.0	0.0566	0.7076	0.2359	0.8824	0.1176	0.0	0.0
4	1040	0.0	0.0385	0.7211	0.2404	0.9375	0.0625	0.0	0.0
5	1020	0.0	0.0196	0.7353	0.2451	1.0000	0.0	0.0	0.0

نتایج همگرا شده توسط روش ISR به صورت ذیل می باشند.

Stage		y_{ij}				x_{ij}			
j	V_j	H	B	DMF	Water	H	B	DMF	Water
1	1113.1	0.0263	0.0866	0.6626	0.2245	0.7586	0.1628	0.0777	0.0009
2	1104.7	0.0238	0.0545	0.6952	0.2265	0.8326	0.1035	0.0633	0.0006
3	1065.6	0.0213	0.0309	0.7131	0.2347	0.8858	0.0606	0.0532	0.0004
4	1042.1	0.0198	0.0157	0.7246	0.2399	0.9211	0.0315	0.0471	0.0003
5	1028.2	0.0190	0.0062	0.7316	0.2432	0.9438	0.0125	0.0434	0.0003

تغییرات ضریب توزیع روی سینی‌های مختلف به صورت شکل ۱۳-۲۴ می‌باشد.
 ب: مراحل اخیر را می‌توان برای حالت ب تکرار نمود که نتایج محصولات خروجی به صورت زیر می‌باشد.

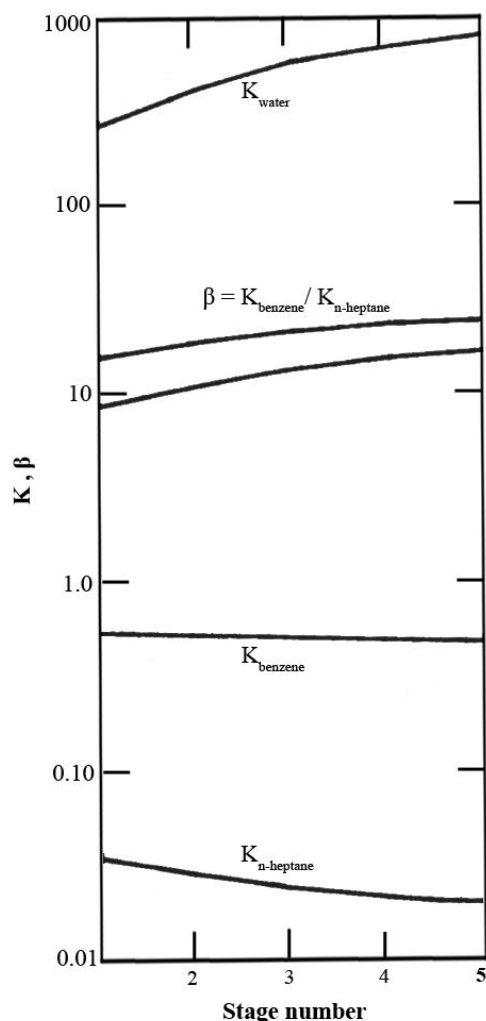
Species	Extract, lbmole / hr		Raffinate lbmole / hr	
	Case A	Case B	Case A	Case B
H	29.3	5.6	270.7	294.4
B	96.4	43.0	3.6	57.0
DMF	737.5	485.8	12.5	14.2
Water	249.9	499.7	0.1	0.3
	1113.1	1034.1	286.9	365.9

درصد استخراج شده اجزاء به صورت زیر می‌باشد.

	Case A	Case B
Percent of benzene feed extracted	96.4	43.0
Percent of n-heptane feed extracted	9.8	1.87
Percent of solvent transferred to raffinate	1.26	1.45

همانطور که از نتایج معلوم است حلال حالت الف که شامل ۷۵٪ دی‌متیل فرمامید است ظرفیت بیشتری برای جذب بنزن دارد اما حلال حالت ب که شامل ۵۰٪ دی‌متیل فرمامید است انتخاب‌پذیری بیشتری بین

بنزن و نرمال هپتان دارد. در شکل ۱۳-۲۴ میزان انتخاب‌پذیری نسبی ($\beta_{B-H} = K_B/K_H$) برای حالت الف نیز نشان داده شده است.



شکل ۱۳-۲۴: تغییرات ضریب توزیع روی سینی‌های مختلف برای حالت الف مثال ۱۳-۵

روش اصلاح همزمان^۱

در حالتی که فاز مایع غیر ایده‌آل باشد (که معمولاً در تقطیر استخراجی رخ می‌دهد) و برای حالت‌هایی که برج جذب یا دفع مجهز به جوش‌آور یا کندانسور باشد روش BP و SR همگرایی خوبی نخواهند داشت. ضمناً روش‌های BP و SR قادر به حل مسائل محدودی هستند. روش اصلاح همزمان (SC) یک روش کلی برای حل مسائل چند جزئی در سیستم‌هایی شامل مراحل تعادلی است که بر مبنای معادلات MESH بوده و قادر به حل انواع مختلفی از مسائل می‌باشد.

1- Simultaneous Correction (SC) Procedures

روش نیوتن رافسون

روش اصلاح همزمان (SC) بر استفاده از روش نیوتن رافسون استوار است. برای حل مسئله از روش اصلاح همزمان ابتدا باید متغیرها و معادلات شامل این متغیرها (معادلات MESH) را مرتب کنیم. تحقیقات گلدستین و استانفیلد^۱ [۲۱] نشان داد برای حالتی که تعداد اجزاء زیاد و تعداد واحدهای تعادلی کم است می‌توان گروه‌های بدون بعد تعریف کرد و با استفاده از آنها مسئله را حل نمود. اما بهتر است که نسبت به محل مراحل تعادلی، گروه‌های بدون بعد تعریف شوند این حالت برای زمانی که تعداد اجزاء کم و تعداد مراحل زیاد باشد موثر است. این روش توسط نفتالی^۲ [۲۲] ارائه شده که توسط نفتالی و سندهلم^۳ [۲۳] تکمیل گردید.

حال روش اصلاح همزمان (SC) که توسط نفتالی و سندهلم ارائه شده مورد بررسی قرار می‌گیرد زیرا بسیاری از تکنیک‌های ریاضی این روش در قسمت ۳-۱۵ آورده شده است. برنامه کامپیوتری این روش توسط فردنسلاند، گمه‌لینگ و راسموسن^۴ [۲۴] ارائه شده است.

در این حالت مدل مراحل تعادلی شکل ۱۳-۱ و شکل ۱۳-۴ مورد استفاده قرار می‌گیرد، بنابراین باید تعداد $N(2C+3)$ متغیر را با استفاده از معادلات MESH به طور همزمان بدست آوریم برای این منظور با استفاده از رابطه ۱۳-۳ و ۱۳-۴ می‌توان $2N$ مجهول را از معادلات MESH حذف نمود سپس $N(2C+1)$ مجهول را با حل معادلات بدست آمده محاسبه نمود. جهت حذف $2N$ مجهول از معادلات MESH باید معادله ۳-۱۵ را در V_j و معادله ۱۳-۴ را در L_j ضرب کنیم که نتیجه به صورت زیر خواهد بود.

$$V_j = \sum_{i=1}^C v_{i,j} \quad ۵۴-۱۳$$

$$L_j = \sum_{i=1}^C l_{i,j} \quad ۵۵-۱۳$$

که جزء مولی در فاز مایع و بخار به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$y_{i,j} = \frac{v_{i,j}}{V_j} \quad ۵۶-۱۳$$

$$x_{i,j} = \frac{l_{i,j}}{L_j} \quad ۵۷-۱۳$$

با جایگذاری روابط ۱۳-۵۴، ۱۳-۵۵، ۱۳-۵۶ و ۱۳-۵۷ در معادلات ۱۳-۱، ۱۳-۲ و ۱۳-۵ می‌توان متغیرهای V_j ، L_j ، x_{ij} و y_{ij} را حذف نمود و معادلات بر حسب l_{ij} و v_{ij} بدست می‌آیند. در نهایت تعداد $N(2C+1)$ معادله زیر حاصل می‌شود که $s_j = U_j/L_j$ و $S_j = W_j/V_j$ اعداد بدون بعد جریان‌های جانبی می‌باشند.

1- Goldstein and Stanfield

2- Naphtali

3- Naphtali and Sandholm

4- Fredenslund, Gmehling and Rasmussen

معادله موازنه جرم (معادله M)

$$M_{i,j} = l_{i,j}(1+s_j) + v_{i,j}(1+S_j) - l_{i,j-1} - v_{i,j+1} - f_{i,j} = 0 \quad 58-13$$

معادله تعادل (معادله E)

$$E_{i,j} = k_{i,j} l_{i,j} \frac{\sum_{k=1}^C v_{k,j}}{C} - v_{i,j} = 0 \quad 59-13$$

معادله موازنه انرژی (معادله H)

60-13

$$H_j = H_{L_j}(1+s_j) \sum_{i=1}^C l_{i,j} + H_{V_j}(1+S_j) \sum_{i=1}^C v_{i,j} - H_{L_{j-1}} \sum_{i=1}^C l_{i,j-1} - H_{V_{j+1}} \sum_{i=1}^C v_{i,j+1} - H_{F_j} \sum_{i=1}^C f_{i,j} - Q_j = 0$$

که $f_{ij} = F_j z_{ij}$ می باشد.

در صورتی که $N(2C+1)$ مجهول به صورت همزمان حل نمود. مجهولات شامل l_{ij} ، v_{ij} و T_j می باشند. مسئله ممکن است شامل موارد معلوم و مجهول متفاوتی باشد. ابتدا موارد معلوم و مجهول ذکر شده مورد بررسی قرار می گیرد.

معادلات 13-58، 13-60 با استفاده از روش نیوتن رافسون حل می شوند به طوری که برابر با صفر شوند. در صورتی که در طول مراحل این مقادیر ممکن است صفر نباشد که به آن خطا می گویند، این مراحل را باید آنقدر تکرار کنیم تا خطا صفر شود. ابتدا متغیرهای خروجی را برای مراحل تعادلی به صورت یک گروه درمی آوریم با این کار می توان ماتریس سه قطری ایجاد کرد و آن را توسط الگوریتم توماس حل نمود. یک نمونه از متغیرهای خروجی مراحل تعادلی که از بالا به پایین به صورت یک گروه درآمدانند در زیر نشان داده شده است.

$$X = [X_1, X_2, \dots, X_j, \dots, X_N]^T \quad 61-13$$

توابع M، E و H نیز برای هر مرحله تعادلی به صورت یک گروه در زیر نشان داده شده است.

$$F = [F_1, F_2, \dots, F_j, \dots, F_N]^T \quad 62-13$$

که X_j شامل همه متغیرهای مرحله تعادلی j است که به صورت زیر می باشد.

$$X_j = [v_{1,j}, v_{2,j}, \dots, v_{i,j}, \dots, v_{C,j}, T_j, l_{1,j}, l_{2,j}, \dots, l_{i,j}, \dots, l_{C,j}]^T \quad 63-13$$

F_j نیز شامل همه معادلات (معادلات M، E و H) برای مرحله تعادلی j است که به صورت زیر نشان داده شده است.

$$F_j = [H_j, M_{1,j}, M_{2,j}, \dots, M_{i,j}, \dots, M_{C,j}, E_{1,j}, E_{2,j}, \dots, E_{i,j}, \dots, E_{C,j}]^T \quad 64-13$$

حل توابع F_j جهت بدست آوردن مقادیر X_j با استفاده از روش نیوتن-رافسون به صورت زیر می باشد.

$$\Delta X^{(k)} = - \left[\left(\frac{\partial F}{\partial X} \right)^{-1} \right]^{(k)} F^{(k)} \quad 65-13$$

برای اینکه در محاسبات کامپیوتری نوسان ایجاد نشود بهتر است که مقادیر X به صورت زیر تصحیح شوند.

$$X^{(k+1)} = X^{(k)} + t \Delta X^{(k)} \quad 66-13$$

در این رابطه $0 < t < 1$ است. همانطور که قبلاً ذکر شد در صورتی که t به عدد یک نزدیک باشد سرعت همگرایی بیشتر و امکان ایجاد نوسان در محاسبات نیز بیشتر است و در صورتی که t به عدد صفر نزدیک باشد سرعت همگرایی کمتر و امکان ایجاد نوسان در محاسبات نیز کمتر خواهد بود.

مقادیر $\left(\frac{\partial F}{\partial X} \right)$ که به صورت ماتریس $(N \times N)$ است به صورت زیر می‌باشد.

$$\left(\frac{dF}{dX} \right) = \begin{bmatrix} \bar{B}_1 & \bar{C}_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \bar{A}_2 & \bar{B}_2 & \bar{C}_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \bar{A}_3 & \bar{B}_3 & \bar{C}_3 & \dots & 0 \\ \dots & & & & & \dots \\ \dots & & & & & \dots \\ 0 & \dots & & & & 0 \\ 0 & \dots & & 0 & \bar{A}_{N-1} & \bar{B}_{N-1} & \bar{C}_{N-1} \\ 0 & \dots & & 0 & 0 & \bar{A}_N & \bar{B}_N \end{bmatrix} \quad 67-13$$

از آنجا که مقادیر F تابع تغییرات در مراحل تعادلی $j+1$ ، j و $j-1$ می‌باشند ماتریس به صورت سه-قطری خواهد بود هر کدام از مقادیر \bar{A} ، \bar{B} و \bar{C} در ماتریس ۶۷-۱۵ به صورت یک ماتریس $(2C+1) \times (2C+1)$ بیان می‌شود که با استفاده از ۶۳-۱۵ و ۶۴-۱۵ به صورت ۶۸-۱۵ تا ۷۰-۱۵ می‌باشند مواردی که با علامت + نشان داده شده باید توسط مقادیر مشتقات جایگزین شوند که ممکن است عددی مثبت یا منفی باشد و ردیف‌های غیر صفر ماتریس با علامت +.....+ نشان داده شده همچنین محدوده-ای از ماتریس که غیر صفر است با علامت زیر نشان داده شده است.

+.....+
.
.
+.....+

$$\bar{C}_j = \left(\frac{\partial F_i}{\partial X_{i+1}} \right) =$$

Functions	Output Variables		
	$v_{1j+1} \dots v_{Cj+1}$	T_{j-1}	$L_{1j+1} \dots L_{Cj+1}$
H_i	+ +	+	
$M_{1,i}$	-1		
.			
.			
$M_{C,i}$			-1
$E_{1,i}$			
.			
.			
$E_{C,i}$			

۷۰-۱۳

با انجام این عملیات معادله ۶۵-۱۵ خطی خواهد شد و به راحتی قابل حل است. برای نمونه بسط تیلور تابع H_2 (معادله ۶۰-۱۵ برای مرحله تعادلی دوم) به صورت زیر خواهد بود.

۷۱-۱۳

$$\begin{aligned}
& 0 (\Delta v_{1,1} + \dots + \Delta v_{C,1}) - \frac{\partial H_{L_1}}{\partial T_1} \sum_{i=1}^c l_{i,j} (\Delta T_1) - \left(\frac{\partial H_{L_1}}{\partial l_{1,1}} \sum_{i=1}^c l_{i,1} + H_{L_1} \right) \Delta l_{1,1} - \dots - \left(\frac{\partial H_{L_1}}{\partial l_{C,1}} \sum_{i=1}^c l_{i,1} + H_{L_1} \right) \Delta l_{C,1} \\
& + \left[\left(\frac{\partial H_{V_2}}{\partial v_{1,2}} \right) (1 + S_2) \sum_{i=1}^c v_{i,2} + H_{V_2} (1 + S_2) \right] \Delta v_{1,2} + \dots + \left[\left(\frac{\partial H_{V_2}}{\partial v_{C,2}} \right) (1 + S_2) \sum_{i=1}^c v_{i,2} + H_{V_2} (1 + S_2) \right] \Delta v_{C,2} \\
& + \left[\left(\frac{\partial H_{L_2}}{\partial T_2} \right) (1 + s_2) \sum_{i=1}^c l_{i,2} + \left(\frac{\partial H_{V_2}}{\partial T_2} \right) (1 + S_2) \sum_{i=1}^c v_{i,2} \right] \Delta T_2 \\
& + \left[\left(\frac{\partial H_{L_2}}{\partial l_{1,2}} \right) (1 + s_2) \sum_{i=1}^c l_{i,2} + H_{L_2} (1 + s_2) \right] \Delta l_{1,2} + \dots + \left[\left(\frac{\partial H_{L_2}}{\partial l_{C,2}} \right) (1 + s_2) \sum_{i=1}^c l_{i,2} + H_{L_2} (1 + s_2) \right] \Delta l_{C,2} \\
& - \left(\frac{\partial H_{V_3}}{\partial v_{1,3}} \sum_{i=1}^c v_{i,3} + H_{V_3} \right) \Delta v_{1,3} - \dots - \left(\frac{\partial H_{V_3}}{\partial v_{C,3}} \sum_{i=1}^c v_{i,3} + H_{V_3} \right) \Delta v_{C,3} - \frac{\partial H_{V_3}}{\partial T_3} \sum_{i=1}^c v_{i,3} \Delta T_3 + 0 (\Delta l_{1,3} + \dots + \Delta l_{C,N}) = -H_2
\end{aligned}$$

برای مثال یکی از مشتق‌های این تابع به صورت زیر است.

$$\frac{\partial H_2}{\partial l_{2,1}} = - \frac{\partial H_{L_1}}{\partial l_{2,1}} \sum_{i=1}^c l_{i,1} + H_{L_1} \quad ۷۲-۱۳$$

همه مقادیر مشتق توسط نفتالی و سند هولم [۲۳] ارائه شده است.

مشتق‌های مقادیر k و آنتالپی با استفاده از روابطی که برای آنها ارائه شده است محاسبه می‌شوند. برای مثال در رابطه ارائه شده توسط چائو و سیدر^۱ برای مقادیر k تابعیت به صورت زیر می‌باشد.

$$k_{i,j} = k_{i,j} \left\{ P_j, T_j, \frac{l_{i,j}}{\sum_{k=1}^C l_{k,j}}, \frac{v_{i,j}}{\sum_{k=1}^C v_{k,j}} \right\}$$

مقادیر مشتق $\partial k_{ij} / \partial T_j$ ، $\partial k_{ij} / \partial l_{ij}$ و $\partial k_{ij} / \partial v_{ij}$ باید به صورت تحلیلی یا عددی محاسبه می‌شوند. در اغلب حالت‌ها میزان دو مشتق اول محاسبه می‌شوند و معمولاً سومین مشتق صفر است. برای حل مسئله لازم است که تعدادی از اطلاعات بالا و پایین برج را داشته باشیم. توصیه می‌شود که بار حرارتی کندانسور و جوش‌آور به عنوان اطلاعات مسئله استفاده نشود زیرا این دو مقدار تابعی از بقیه موارد هستند. با استفاده از نوع کندانسور و جوش‌آور سعی می‌شود که H_1 و H_N (معادله H برای سینی اول و آخر) حذف شده و موارد ساده‌تری جایگزین شوند برخی موارد پیشنهاد شده به جای H_1 و H_N در جدول ۱-۱۳ آورده شده است.

جدول ۱-۱۳: برخی موارد پیشنهاد شده به جای H_1 و H_N

Specification	Replacement for H_1	Replacement for H_N
Reflux or reboil (boilup) ratio. (L/D) or (V/B)	$\sum l_{i,1} - (L/D) \sum v_{i,1} = 0$	$\sum v_{i,N} - (V/B) \sum l_{i,N} = 0$
Stage temperature, T_D or T_B	$T_1 - T_D = 0$	$T_N - T_B = 0$
Product flow rate, D or B	$\sum v_{i,1} - D = 0$	$\sum l_{i,N} - B = 0$
Component flow rate in product, d_i or b_i	$v_{i,1} - d_i = 0$	$l_{i,N} - b_i = 0$
Component mole Fraction in Product, y_{iD} or x_{iB}	$v_{i,1} - \left(\sum v_{i,1} \right) y_{i,D} = 0$	$l_{i,N} - \left(\sum l_{i,N} \right) x_{i,B} = 0$

تا اینجا همه روش‌هایی که ذکر شدند برای مراحل تعادلی تئوری (مراح تعادلی دارای راندمان ۱۰۰٪) قابل حل بودند اما در روش اصلاح همزمان (SC) می‌توان با استفاده از معادله ۱۳-۵۴ و راندمان مورفری، مراحل تعادلی واقعی را نیز در نظر گرفت. راندمان مورفری بر حسب غلظت فازها به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\eta_j = \frac{y_{i,j} - y_{i,j+1}}{k_{i,j} x_{i,j} - y_{i,j+1}} \quad ۷۳-۱۳$$

معادله ۱۳-۷۳ بر حسب دبی اجزاء به صورت زیر نوشته می‌شود که می‌تواند جایگزین معادله ۱۳-۵۹ شود.

$$E_{i,j} = \frac{\eta_j k_{i,j} l_{i,j} \sum_{k=1}^C v_{k,j}}{\sum_{k=1}^C l_{k,j}} - v_{i,j} + \frac{(1-\eta_j) v_{i,j+1} \sum_{k=1}^C v_{k,j}}{\sum_{k=1}^C v_{k,j+1}} = 0 \quad 74-13$$

راندمان مورفری برای فاز بخار (η_j) را می‌توان توسط رابطه زیر محاسبه نمود [32].

$$\eta = 7.0 (N_{DG})^{0.14} (N_{SC})^{0.25} (N_{Re})^{0.08} \quad 75-13$$

یا

$$\eta = 6.8 (N_{Re} N_{SC})^{0.1} (N_{DG} N_{SC})^{0.115} \quad 76-13$$

این رابطه بر اساس ۸۰۶ داده تقطیر دوجزئی ارائه شده که رابطه ۷۵-۱۳ خطایی حدود ۱۳/۲٪ و رابطه ۷۶-۱۳ خطایی در حدود ۱۰/۶٪ دارد. گروههای بدون بعد موجود در این رابطه به صورت زیر می‌باشند.

$$N_{Re} = h_w G / \mu_L (FA)$$

h_w : ارتفاع بند سینی

G : دبی جرمی بخار بر مبنای سطح مقطع کل برج

μ_L : ویسکوزیته فاز مایع روی سینی

FA : درصدی از سینی که توسط ناودانی اشغال شده است.

$$N_{SC} = \mu_L / \rho_L D_{lk}$$

μ_L : ویسکوزیته فاز مایع روی سینی

ρ_L : دانسیته فاز مایع روی سینی

D_{lk} : ضریب نفوذ جزء کلیدی سبک در فاز مایع

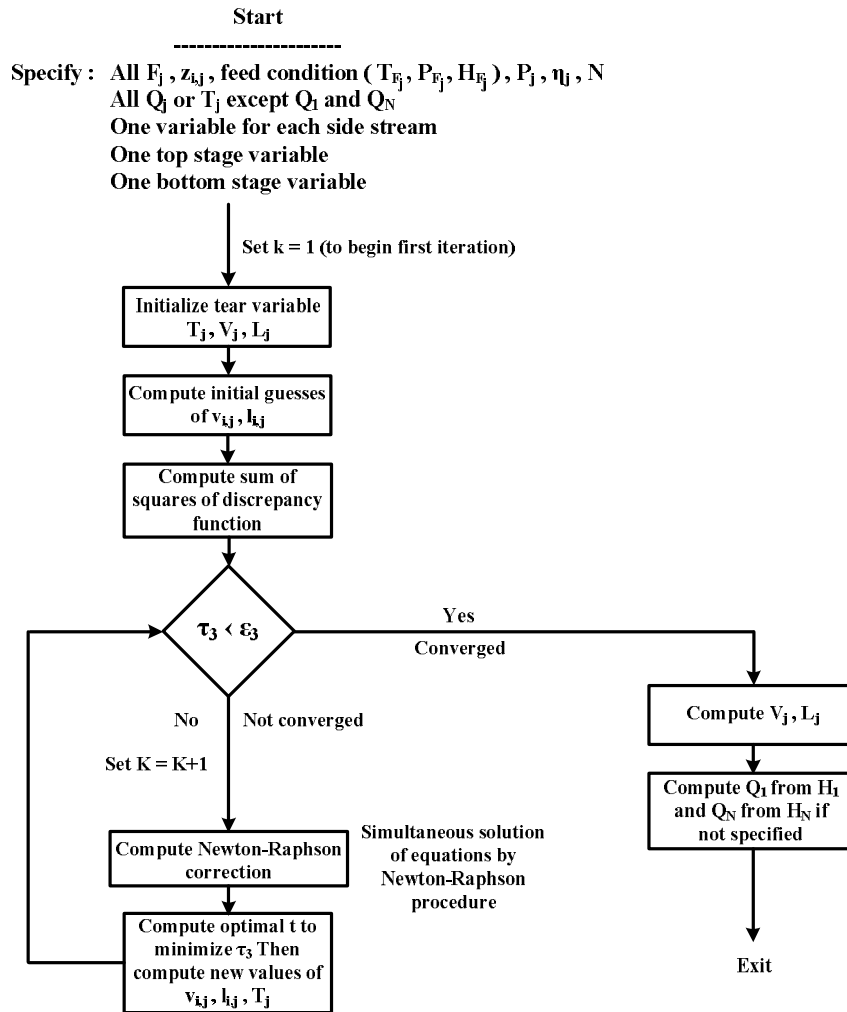
$$N_{DG} = \sigma_L / \mu_L U_V$$

σ_L : کشش سطحی مایع

μ_L : ویسکوزیته فاز مایع روی سینی

U_V : سرعت فاز بخار بر مبنای سطح مقطع برج

الگوریتم روش SC که توسط نفتالی و سندهلوم ارائه شده در شکل ۱۳-۲۵ نشان داده شده است. مشخصات مسئله بسیار انعطاف‌پذیر است. فشار، غلظت، دبی و محل همه خوراک‌ها جهت حل مسئله لازم است. همچنین حالت ترمودینامیکی خوراک‌ها بر حسب آنتالپی، دما یا کسر مولی تبخیر شده ضروری است. معمولاً فشار و راندمان برای سینی اول و آخر محاسبه می‌شود و برای بقیه سینی‌ها به صورت میان‌یابی خطی محاسبه می‌گردند. هر مرحله تعادلی به طور پیش فرض آدیاباتیک در نظر گرفته می‌شود همچنین اطلاعات جریان‌های جانبی باید مشخص باشد. معمولاً این اطلاعات به صورت دبی کل جریان، دبی یکی از اجزاء یا نسبت دبی جریان جانبی به جریان بالای برج داده می‌شود.



شکل ۱۳- ۲۵ : الگوریتم روش SC که توسط نفتالی و سندهلوم ارائه شده است.

برای همگرایی روش نیوتن رافسون لازم است که برای متغیرهای مجهول حدس‌های معقولی در نظر گرفته شود. برای این منظور مقادیر L_j و V_j با استفاده از شرط ثابت بودن دبی مایع و بخار در هر قسمت از برج و مقادیر T_j با استفاده از میان‌یابی خطی بین بالا و پایین برج بدست می‌آید سپس مقادیر l_{ij} و v_{ij} را به دو روش زیر می‌توان بدست آورد.

۱- در صورتی که مقادیر k مستقل از غلظت باشد یا اینکه بتوان آنها را بدست آورد ابتدا توسط معادله ۱۳-۱۲ می‌توان مقادیر x_{ij} را بدست آورده سپس توسط معادله ۱۳-۲ مقادیر y_{ij} محاسبه می‌شوند که همین مقادیر در حدس اولیه روش BP و SR نیز بکار برده می‌شوند.

۲- مجموعه خوراک‌ها را در دما و فشار هر سینی تبخیر ناگهانی می‌کنیم و مقادیر x_{ij} و y_{ij} را بدست می‌آوریم.

با داشتن مقادیر L_j, V_j, x_{ij} و y_{ij} و با استفاده از معادلات ۱۳-۵۶ و ۱۳-۵۷ می‌توان مقادیر l_{ij} و v_{ij} را بدست آورد. روش دوم نتایج بسیار خوبی دارد اما برای مسائل پیچیده، روش اول توصیه می‌شود.

برای اینکه بدانیم چه موقع مسئله همگرا شده است یک پارامتر همگرایی لازم است این پارامتر با جمع مقادیر خطای توابع M ، E و H بدست می‌آید.

$$\tau_3 = \sum_{j=1}^N \left\{ (H_j)^2 + \sum_{i=1}^C [(M_{i,j})^2 + (E_{i,j})^2] \right\} \leq \varepsilon_3 \quad 77-13$$

برای اینکه مقادیر خطای توابع نزدیک به هم باشند بهتر است مقادیر H_i بر آنتالپی تبخیر که معمولاً 1000 Btu/lbmole در نظر گرفته می‌شود تقسیم شود و ε_3 به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\varepsilon_3 = N(2C+1) \left(\sum_{j=1}^N F_j^2 \right) 10^{-10} \quad 78-13$$

نتایج همگرا شده با استفاده از این پارامتر همگرایی، دقیق خواهند بود وقتی که ε_3 از معادله ۷۸-۱۳ محاسبه شود مسئله در کمتر از ده سعی و خطا همگرا خواهد شد.

حدس‌های بعدی با استفاده از معادله ۱۳-۶۶ تصحیح می‌شود که لازم است t برای همه متغیرها یکسان در نظر گرفته شود. در ابتدای کار که حدس‌ها از جواب مسئله دور است باید مقدار t نزدیک به صفر در نظر گرفته شود سپس که به جواب نزدیک شدیم مقدار t را تا یک نیز می‌توان افزایش داد. این عمل باعث سرعت در همگرایی مسئله خواهد شد. یک روش بهینه‌سازی جهت بدست آوردن مقادیر t توسط فیبوناچی^۱ [۲۵] ارائه شده است.

در صورتی که اعمال معادله ۱۳-۶۶ منجر به محاسبه منفی دبی اجزاء شود باید دبی این اجزاء عددی مثبت نزدیک به صفر در نظر گرفته شود. همچنین لازم است که یک حد بالا برای تصحیح دما به صورت زیر در نظر گرفته شود.

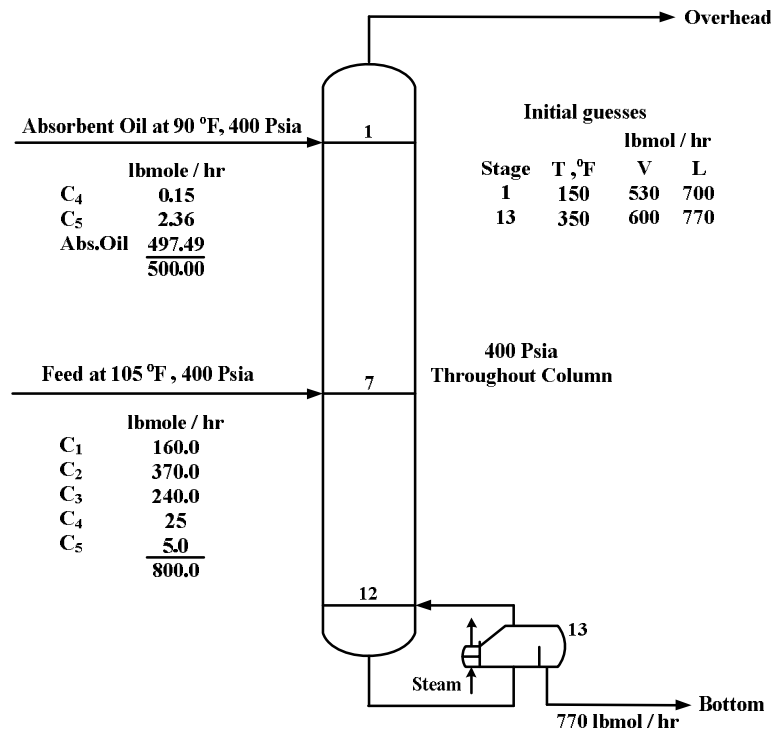
$$X^{(k+1)} = X^{(k)} \exp \left[\frac{t \Delta X^{(k)}}{X^{(k)}} \right] \quad 79-13$$

روش SC جهت حل مسائل استخراج مایع-مایع نیز بکار می‌رود. تحقیقات بلاک و هنگر^۲ [۲۶] نشان داد که می‌توان از این روش جهت حل مسائل چندفازی نیز استفاده نمود و در تحقیقات هافلینگ و سیدر این روش جهت حل برج‌های متصل نیز استفاده شده است.

مثال ۱۳-۶: از یک برج جذب مجهز به جوش‌آور جهت جداسازی خوراک بخار که در مثالهای ۱۳-۲ و ۱۳-۴ ذکر شده استفاده می‌شود. جهت جداسازی از یک جاذب روغنی شکل با همان غلظتی که در مثال ۱۳-۴ بکار رفته استفاده می‌شود. دبی محصول پایین برج (349 kgmole/hr) (770 lbmole/hr) است. فشار برج 400 Psia می‌باشد و برج به عنوان برج جداکننده اتان بکار می‌رود. راندمان همه سینی‌ها ۱۰۰٪ در نظر گرفته می‌شود. با استفاده از روش اصلاح همزمان (SC) مشخصات جریان‌های خروجی، دمای سینی‌ها، دبی

1- Fibonacci
2- Block and Hegner

و غلظت مایع و بخار تبادل شده بین سینی‌ها و همچنین بار حرارتی جوش‌آور را محاسبه نمایید. این جداسازی را با جداسازی مثال ۱۳-۲ که دارای خوراک مشابهی است مقایسه نمایید.



شکل ۱۳-۲۶: مشخصات برج جذب مجهز به جوش‌آور برای مثال ۱۳-۶

حل: جهت حل مسئله از یک برنامه کامپیوتری که بر اساس روش نفتالی و سندهلوم نوشته شده استفاده می‌شود. مقادیر آنتالپی مایع و بخار و مقادیر k مستقل از غلظت در نظر گرفته می‌شود و این مقادیر به صورت خطی در محدوده $100^\circ F$ تا $400^\circ F$ بر حسب دما تغییر می‌کنند. مقادیر این پارامترها در $400^\circ F$ به صورت زیر می‌باشند.

$400^\circ F, 400\text{Psia}$			
Species	k	$H_V, \frac{Btu}{lbmol}$	$H_L, \frac{Btu}{lbmol}$
C ₁	11.0	5631	5388
C ₂	5.40	11410	7156
C ₃	3.25	15650	9890
C ₄	2.00	19790	13790
C ₅	1.200	23520	17170
Abs.oil	0.0019	43590	33410

ابتدا مقدار ε_3 را با استفاده از رابطه ۱۳-۷۸ محاسبه می‌کنیم.

$$\varepsilon_3 = 13 [2(6) + 1] (500 + 800)^2 10^{-10} = 2.856 \times 10^{-2}$$

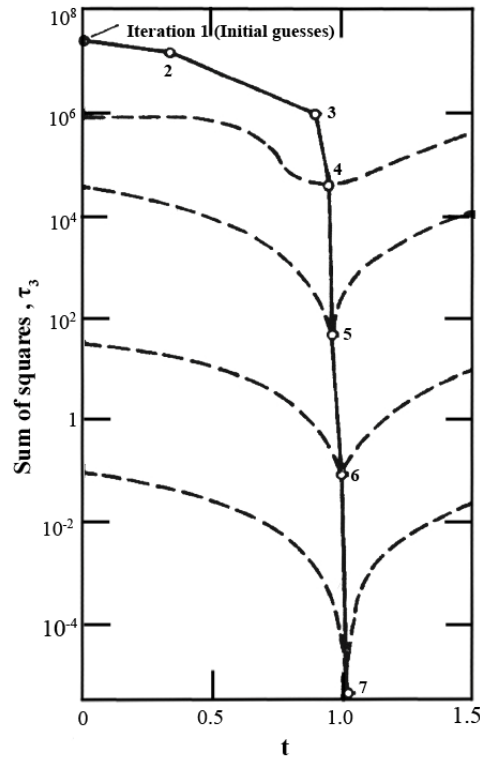
در شکل ۱۳-۲۷ روند کاهش پارامتر همگرایی (τ_3) برای حدس‌های مختلف بر حسب t نشان داده شده است (همانطور که ذکر شد t در معادله ۱۳-۶۶ در محدوده $0 < t \leq 1$ می‌تواند تغییر داده شود) برای حل این مسئله باید محاسبات را هفت بار به صورت سعی و خطا انجام دهیم تا مسئله همگرا شود حدس‌های اولیه این مسئله نیز در شکل ۱۳-۲۶ نشان داده شده است. با استفاده از محاسبات تبخیر ناگهانی در فشار 400 Psia و استفاده از مقدار $V/L = 530/770 = 0.688$ می‌توان حدس اولیه را برای مقادیر x_i و y_i برای سینی‌ها بدست آورد که نتایج آن به صورت زیر می‌باشد.

Species	y_i	x_i
C_1	0.2603	0.0286
C_2	0.4858	0.1462
C_3	0.2358	0.1494
C_4	0.0153	0.0221
C_5	0.0025	0.0078
Abs.oil	0.0003	0.6459
	1.0000	1.0000

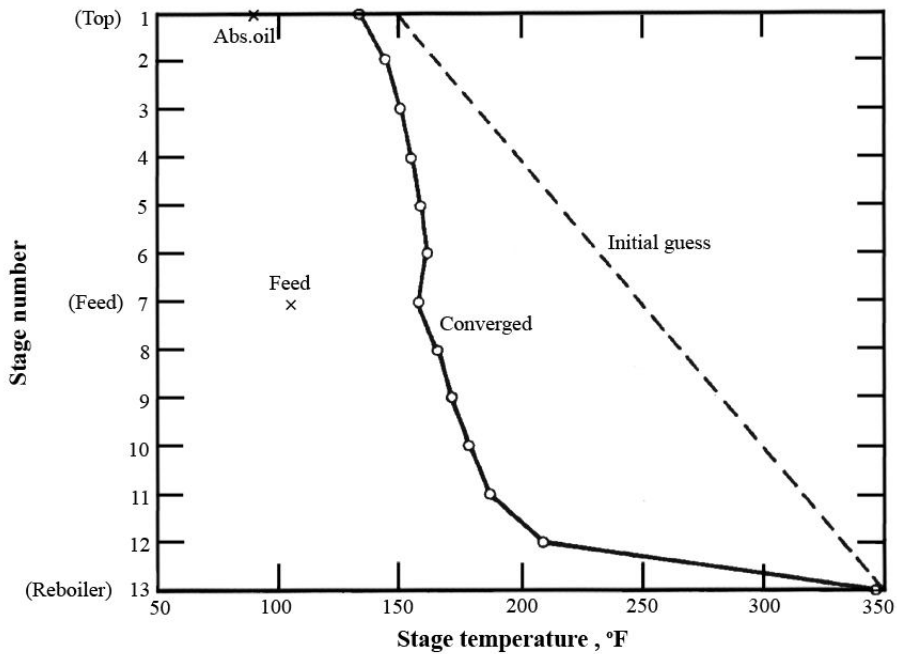
با استفاده از حدس اولیه مقدار پارامتر همگرایی $\tau_3 = 2.865 \times 10^7$ خواهد بود که این مقدار بسیار زیاد است. این مقدار توسط روش نیوتن-رافسون بار دیگر تصحیح خواهد شد. مقدار t برای حدس ثانویه برابر با $t = 0.34$ خواهد بود اما این تکرار نیز تغییرات کمی در مقدار τ_3 ایجاد می‌کند و باید مراحل را همچنان ادامه دهیم. مقدار t برای حدس بعدی $t = 0.904$ در نظر گرفته می‌شود که با اعمال این تغییر مقدار τ_3 کاهش می‌یابد. تغییرات t برای حدس‌های بعدی در شکل ۱۳-۲۷ نشان داده شده است.

در شکل‌های ۱۳-۲۸ و ۱۳-۲۹ به ترتیب مقادیر دما و V/L برای سینی‌های مختلف نشان داده شده است. همانطور که از شکل ۱۳-۲۸ مشاهده می‌گردد توزیع دمای همگرا شده اختلاف خیلی زیادی با حدس اولیه دارد. برای سینی‌های بالای خوراک ابتدا دما افزایش یافته سپس سیر نزولی خود را طی می‌کند این پدیده بدین دلیل است که دمای خوراک ورودی کمتر از دمای سینی خوراک است. برای پایین برج نیز دمای سینی‌ها افزایش می‌یابد. بیشترین تغییر دما بین سینی آخر و جوش‌آور دیده می‌شود که به علت حرارت اضافه شده به سیستم است. از شکل ۱۳-۲۹ نیز می‌توان دریافت که مقدار V/L اختلاف خیلی زیادی با

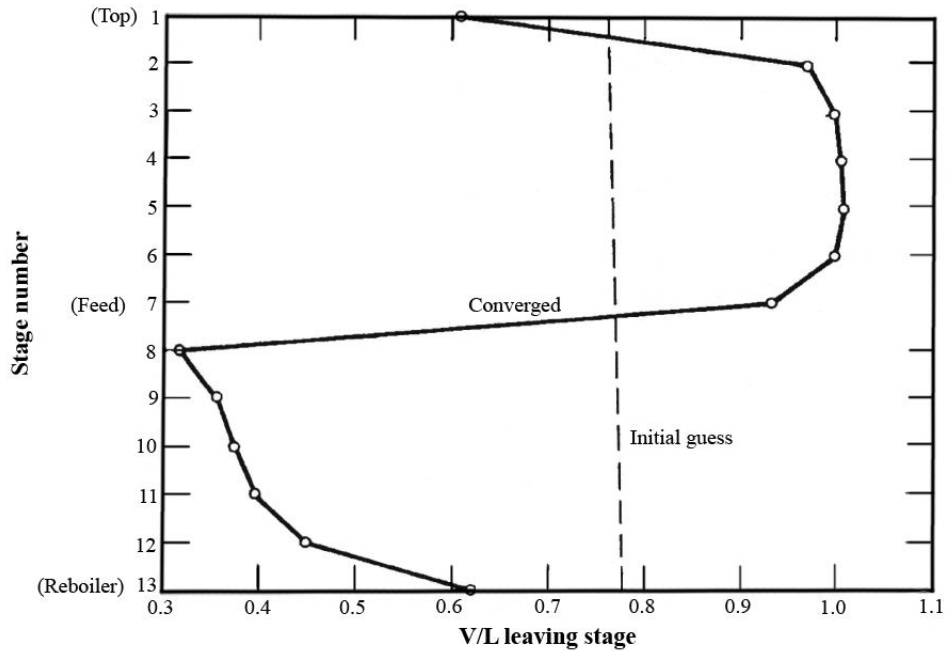
حدس اولیه دارد. بیشترین تغییرات V/L در بالا، میانه برج و پایین برج دیده می‌شود که به ترتیب به علت ورود جاذب، ورود خوراک و وجود جوش آور می‌باشد.



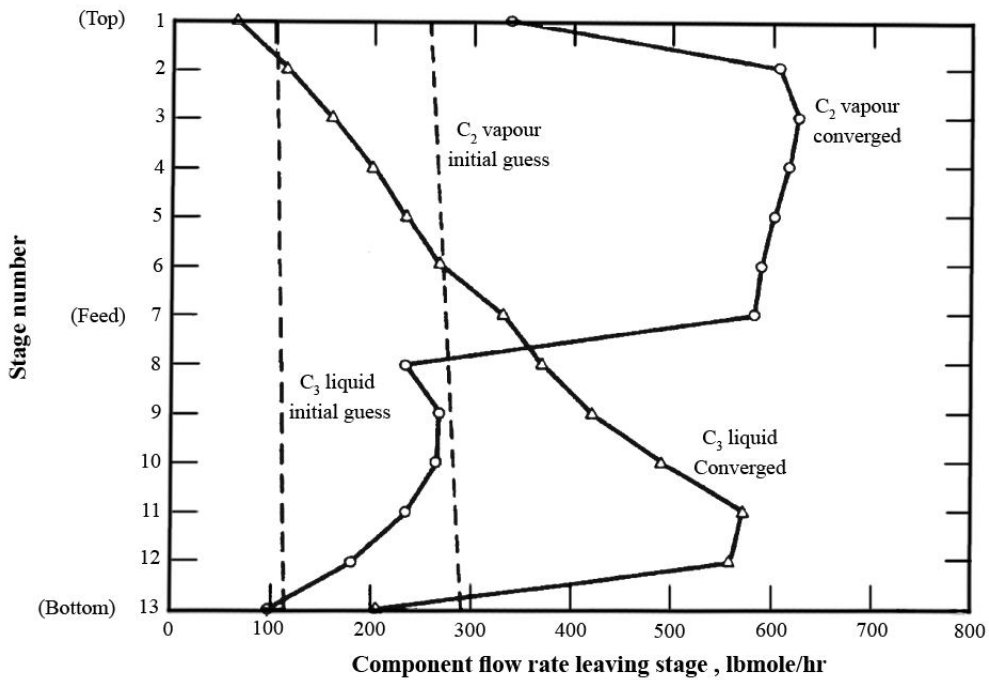
شکل ۱۳-۲۷: تغییرات پارامتر همگرایی برای حدس‌های مختلف مسئله ۱۳-۶



شکل ۱۳-۲۸: مقادیر دمای همگرا شده برای مسئله ۱۳-۶



شکل ۱۳-۲۹: مقادیر V/L همگرا شده برای مسئله ۱۳-۶



شکل ۱۳-۳۰: مقادیر همگرا شده دبی اجزاء کلیدی برای مسئله ۱۳-۶

مقادیر همگرا شده بار حرارتی جوش آور ، غلظت و دمای محصول بالا و پایین برج در جدول ۱۳-۲ ارائه شده است همین پارامترها یک بار برای حالتی که مقادیر k و آنتالپی با استفاده از معادله چائو- سیدر محاسبه شوند و بار دیگر برای حالتی که مقادیر k و آنتالپی با استفاده از معادله ساوه- ردلیش- کوانگ محاسبه شوند

نیز محاسبه شده و در جدول ۱۳-۲ ارائه شده است. در صورتی که از معادله ساوه-ردلیش-کوانگ استفاده شود جداسازی بیشتری بین اجزاء پیش‌بینی می‌شود. ضمناً دمای پایین برج و بار حرارتی جوش‌آور نیز بیشتر بدست می‌آید.

جدول ۱۳-۲: بار حرارتی جوش‌آور، غلظت و دبی محصولات خروجی از برج برای مثال ۱۳-۶

	Composition independent Tabular Properties	Chao – Seader Correlation	Soave-Relch-Kwong Correlation
Overhead component Flow rates, lbmole / hr			
C ₁	159.99	159.98	159.99
C ₂	337.96	333.52	341.57
C ₃	31.79	36.08	28.12
C ₄	0.04	0.06	0.04
C ₅	0.17	0.21	0.18
Abs.oil	0.05	0.15	0.10
	530.00	530.00	530.00
Bottoms component flow rates, lbmole/hr			
C ₁	0.01	0.02	0.01
C ₂	32.04	36.4	28.43
C ₃	208.21	203.92	211.88
C ₄	25.11	25.09	25.11
C ₅	7.19	7.15	7.18
Abs.oil	497.41	497.34	497.39
	770.00	770.00	770.00
Reboiler duty , Btu/hr	11350000	10980000	15640000
Bottoms temperature, °F	346.4	338.5	380.8

خوراک ذکر شده در مسئله توسط یک برج جذب مجهز به جوش‌آور مورد جداسازی قرار گرفته است. همین خوراک نیز در مثال ۱۳-۲ توسط یک برج تقطیر ساده (مجهز به کندانسور و جوش‌آور) مورد جداسازی قرار گرفته است که در شکل ۱۳-۱۰ نشان داده شده است. مقایسه این دو حالت بسیار جالب خواهد بود. هر دو برج شامل ۱۳ سینی می‌باشند اما با استفاده از برج تقطیر جداسازی بیشتری حاصل خواهد شد ضمناً دمای همه مراحل و بار حرارتی جوش‌آور نیز پایین‌تر خواهد بود اما ضعف این روش این است که برای خارج کردن بار حرارتی کندانسور باید از یک سیکل سردساز استفاده شود که مستلزم هزینه زیاد خواهد بود. در برج تقطیر نسبت جریان برگشتی تقریباً دو در نظر گرفته شده است، در صورتی که نسبت جریان برگشتی یک در نظر گرفته شود مایع برگشتی به برج تقریباً برابر با دبی جاذب روغن در مثال ۱۳-۶ خواهد شد که برای این حالت دمای محصول پایین برج $(315.6^{\circ}C)$ $600^{\circ}F$ و بار حرارتی جوش‌آور $(63.3Gj/hr)$ $6 \times 10^7 Btu/hr$ خواهد بود.

منابع

- 1- Wang, J. C., and G. E. Henke, *Hydrocarbon Processing*, 45 (8), 155-163 (1966).
- 2- Myers, A. L., and W. D. Seider, *Introduction to Chemical Engineering and Computer Calculations*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1976, 484-507.
- 3- Lewis, W. K., and G. L. Matheson, *Ind. Eng. Chem.*, 24, 496-498 (1932).
- 4- Thiele, E. W., and R. L. Geddes, *Ind. Eng. Chem.*, 25, 290 (1933).
- 5- Holland, C. D., *Multicomponent Distillation*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1963.
- 6- Amundson, N. R., and A. J. Pontinen, *Ind. Eng. Chem.*, 50, 730-736 (1958).
- 7- Friday, J. R., and B. D. Smith, *AIChE J.*, 10, 698-707 (1964).
- 8- Lapidus, L., *Digital Computation for Chemical Engineers*, McGraw-Hill book Co., New York, 1962, 254.
- 9- Boston, J. F., and S. L. Sullivan, Jr., *Can. J. Chem. Eng.*, 50, 663-699 (1972).
- 10- Johanson, P. J., and J. D. Seader, *Stagewise Computations – Computer Programs for Chemical Engineering Education*, ed. by J. Christensen, Aztec Publishing Co., Austin, Texas, 1972, 349-389, A-16.
- 11- Lapidus, L., *Digital Computation for Chemical Engineers*, McGraw-Hill book Co., New York, 1962, 308-309.
- 12- Orbach, O., and C. M. Crowe, *Can. J. Chem. Eng.*, 49, 509-513 (1971).
- 13- Scheibel, E. G., *Ind. Eng. Chem.*, 38, 397-399 (1946).
- 14- Sujata, A. D., *Hydrocarbon Processing*, 40(12), 137-140 (1961).
- 15- Burningham, D. W., and F. D. Otto, *Hydrocarbon Processing*, 46 (10), 163-170 (1967).
- 16- Shinohara, T., P. J. Johansen, and J. D. Seader, *Stagewise Computation - Computations – Computer Programs for Chemical Engineering Education*, ed. by J. Christensen, Aztec Publishing Co., Austin, Texas, 1972, 390-428 A-17.
- 17- Tsuboka, T., and T. Katayama, *J. Chem. Eng. Japan*, 9, 40-45 (1976).
- 18- Hála, E., I. Wichterle, J. Polak, and T. Boublik, *Vapor-Liquid Equilibrium Data at Normal Pressures*, Pergamon Press, Oxford, 1968, 308.
- 19- Steib, V. H., *J. Parkt. Chem.*, 4, Reihe, 1965, Bd. 28, 252-280.
- 20- Cohen, G., and H. Renon, *Can. J. Chem. Eng.*, 48, 291-296 (1970).
- 21- Goldstein, R. P., and R.B. Stanfield, *Ind. Eng. Chem., Process Des. Develop.*, 9, 78-84 (1970).
- 22- Naphtali, L. M., "The Distillation Column as a Large System," paper Presented at the AIChE 56th National Meeting, San Francisco, May 16-19, 1965.

- 23- Naphtali, L. M. and D. P. Sandholm, *AIChE J.*, 17, 148-153 (1971).
- 24- Ferdenslund, A., J. Gmehilng. And P. Rasmussen, *Vapor-Liquid Equilibria Using UNIFAC, A Group Contribution Method*, Elsevier, Amsterdam, 1977.
- 25- Beveridge, G. S. G., and R. S. Schechter, *Optimization: Theory and Practice*, McGraw-Hill Book Co., New York, 1970, 180-189.
- 26- Block, U., and B. Hegner, *AIChE J.*, 22, 582-589 (1976).
- 27- Hofeling, B., and J. D. Seader, *AIChE J.*, 24, 1131- 1134 (1978).
- 28- Rose, A., R. F. Sweemy, and V. N. Schrodtt, *Ind. Eng. Chem.* 50, 737-740 (1958).
- 29- Ball, W. E., "Computer Programs For Distillation," paper presented at the 44th National Meeting of AIChE, New Orleans, February 27, 1961.
- 30- Jelinek, J., V. Hlavacek, and M. Kubicek, *Chem. Eng. Sci.*, 28, 1825-1823 (1973).
- 31- Ketchum, R. G., *Chem. Eng. Sci.*, 34, 387-395 (1979).
- 32- MacFarland, S.A , P.M , Sigmand and M.van Winkle , "Predict distillation Efficiency" *Hydro.Proc.*, V.51 , No.7 (1972) , p111

مسائل

۱- معادلات MESH (معادلات ۱-۱۵ تا ۶-۱۵) را طوری مرتب کنید که برای حالت‌های نشان داده شده در شکل ۱۳-۳ قابل استفاده باشد. سپس معادله M را به صورت معادله ۷-۱۵ مرتب کنید. آیا می‌توان آن را به صورت ماتریس سه‌قطری درآورد؟

۲- با استفاده از الگوریتم توماس ماتریس زیر را برای بدست آوردن مقادیر x_1 ، x_2 و x_3 حل نمایید.

$$\begin{bmatrix} -160 & 200 & 0 \\ 50 & -350 & 180 \\ 0 & 150 & -230 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -50 \\ 0 \end{bmatrix}$$

۳- با استفاده از الگوریتم توماس ماتریس زیر را برای بدست آوردن مقادیر x_j حل نمایید.

$$\begin{bmatrix} -6 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & -4.5 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1.5 & -7.5 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 4.5 & -7.5 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 4.5 & -4.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 100 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

۴- 1000 kgmole/hr از مخلوطی شامل ۶۰٪ مولی متانول ، ۲۰٪ مولی اتانول و ۲۰٪ مولی نرمال پروپانول به صورت مایع وارد میانه برج تقطیر می‌شوند. برج تقطیر دارای سه مرحله تعادلی ، کندانسور کلی و جوش‌آور جزئی می‌باشد که در فشار 1 atm کار می‌کند. دبی محصول بالای برج 600 kgmole/hr و دبی جریان برگشتی 2000 kgmole/hr مایع اشباع می‌باشد. فرض می‌شود که محلول ایده‌آل باشد به طوری که بتوان مقادیر k را با استفاده از معادله آنتوان بدست آورد. ضرایب معادله آنتوان در ضمیمه A موجود می‌باشد. فرض کنید شرط ثابت بودن دبی مایع و بخار صادق است و همچنین دمای بالای برج برابر دمای جوش نرمال ماده خالص متانول و دمای پایین برج متوسط حسابی دمای جوش الکل‌ها باشد و توزیع دما در طول برج خطی در نظر گرفته شود. با استفاده از روش BP حدس‌های بعدی دما را بدست آورید.

۵- معادله ۷-۱۵ را بر حسب $v_{ij} = y_{ij} V_j$ مرتب کنید آیا این ماتریس سه قطری است؟
 ۶- در صورتی که ماتریس سه قطری زیر برای یک مخلوط چهار جزئی در یک برج حاوی ۱۰۰ مرحله تعادلی توسط روش Wang and Henke توسط برنامه کامپیوتری حل شود ۱۰۱۰۰ واحد حافظه اشغال می‌شود.

حداقل تعداد واحد حافظه که در یک روش بهینه اشغال می‌شود چقدر است؟

$$A_j x_{i,j-1} + B_j x_{i,j} + C_j x_{i,j+1} - D_j = 0$$

۷- خوراکی با ترکیب زیر در نقطه حباب ($213.9^\circ F$, $250 Psia$) وارد میانه برج تقطیر می‌شود. برج دارای ۱۵ مرحله تعادلی و مجهز به کندانسور جزئی و جوش‌آور جزئی می‌باشد و برج در فشار $250 Psia$ کار می‌کند. دبی محصول بالای برج $23 lbmole/hr$ و دبی جریان برگشتی به برج $150 lbmole/hr$ می‌باشد. برای این سیستم مقادیر k و آنتالپی مایع و بخار در فشار $250 Psia$ و در محدوده $50^\circ F < T < 350^\circ F$ از روابط زیر بدست می‌آیند.

Component	lbmole/hr
Ethane	3.0
Propane	20.0
n-Butane	37.0
n-Pentane	35.0
n-Hexane	5.0

$$k_i = \alpha_i + \beta_i T + \gamma_i T^2 + \delta_i T^3$$

$$H_{V_i} = A_i + B_i T + C_i T^2$$

$$H_{L_i} = a_i + b_i T + c_i T^2$$

که ثابت‌های این معادلات توسط آماندسون و پونتینن به صورت زیر گزارش شده است.

Species	K-value Constants				Vapor Enthalpy Constants			Liquid Enthalpy Constants		
	α_i	$\beta_i \times 10^4$	$\gamma_i \times 10^6$	$\delta_i \times 10^8$	A_i	B_i	$C_i \times 10^2$	a_i	b_i	$c_i \times 10^2$
C ₂	1.665	-1.50	73.5	-3.00	8310	13.2	0.602	6120	9.35	1.5
C ₃	0.840	-46.6	49.4	-3.033	11950	12.35	2.21	3620	40.5	-1.32
nC ₄	-0.177	49.5	-4.15	2.22	16550	9.01	3.78	6280	25.0	4.65
nC ₅	-0.0879	17.7	0.2031	1.310	19200	29.5	0.72	6840	38.5	2.52
nC ₆	0.0930	-15.39	10.37	-0.5190	22000	37.0	0	7920	43.5	3.02

با استفاده از روش BP که توسط ونگ و هنک ارائه شده، غلظت محصول بالای برج، دمای مراحل تعادلی، دبی و غلظت مایع و بخار تبادل شده بین مراحل تعادلی و همچنین بار حرارتی کندانسور و جوش‌آور را بدست آورید.

۸- محل بهینه سینی خوراک را برای مسئله ۷ بدست آورید.

۹- مسئله ۷ را برای حالتی که جریان جانبی با دبی 37 lbmole/hr به صورت بخار از سینی چهارم و از پایین برج خارج شود حل نمایید.

۱۰- مسئله ۷ را برای حالتی که یک مبدل داخلی با بار حرارتی 200000 Btu/hr روی سینی چهارم از بالای برج و یک جوش‌آور داخلی با بار حرارتی 300000 Btu/hr روی سینی چهارم از پایین برج نصب شده باشد حل نمایید.

۱۱- یک برج دارای ۳۰ مرحله تعادلی و مجهز به کندانسور جزئی و جوش‌آور جزئی در فشار 250 Psia کار می‌کند. برای خوراک زیر و با استفاده از داده‌های ترمودینامیکی ارائه شده در مسئله ۷ میزان غلظت محصول، دمای مراحل تعادلی، دبی و غلظت مایع و بخار تبادل شده بین مراحل تعادلی و همچنین بار حرارتی کندانسور و جوش‌آور را با استفاده از روش BP که توسط ونگ و هنک ارائه شده بدست آورید.

Component	Pound-moles per hour	
	Feed 1 to stage 15 from the bottom	Feed 2 to stage 6 from the bottom
Ethane	1.5	0.5
Propane	24.0	10.0
n-Butane	16.5	22.0
n-Pentane	7.5	14.5
n-Hexane	0.5	3.0
Distillate Rate = 36.0 lbmole / hr		
Reflux rate = 150.0 lbmole / hr		

محل بهینه سینی خوراک را برای هر دو حالت بدست آورید.

۱۲- معادلات غیر خطی زیر را با استفاده از روش نیوتن رافسون به صورت همزمان حل نمایید.

$$x_1^2 + x_2^2 = 17$$

$$(8x_1)^{1/3} + x_2^{1/2} = 4$$

مقادیر x_1 و x_2 را با خطای ± 0.001 با حدس‌های اولیه زیر بدست آورید.

الف: $x_1 = 2$ و $x_2 = 5$

ب : $x_2 = 5$ و $x_1 = 4$

ج : $x_2 = 1$ و $x_1 = 1$

د : $x_2 = 1$ و $x_1 = 8$

۱۳- معادلات غیر خطی زیر را با استفاده از روش نیوتن رافسون به صورت همزمان حل نمایید.

$$\sin(\pi x_1 x_2) - \frac{x_2}{2} - x_1 = 0$$

$$\exp(2x_1) \left[1 - \frac{1}{4\pi} \right] + \exp(1) \left[\frac{1}{4\pi} - 1 - 2x_1 + x_2 \right] = 0$$

مقادیر x_1 و x_2 را با خطای ± 0.001 با حدس‌های اولیه زیر بدست آورید.

الف : $x_2 = 0.9$ و $x_1 = 0.4$

ب : $x_2 = 0.9$ و $x_1 = 0.6$

ج : $x_2 = 1$ و $x_1 = 1$

۱۴- یک برج دفع برای فشار 75Psia و جریان خوراک 2000lbmole/hr در دمای 60°F و غلظت زیر طراحی شده است.

Component	Mole Fraction
Methane	0.830
Ethane	0.084
Propane	0.048
n-Butane	0.026
n-Pentane	0.012

یک روغن با جرم ملکولی ۱۶ به عنوان ماده جذب کننده مورد استفاده قرار می‌گیرد. این روغن پس از استفاده در برج دفع، به صورت خالص احیاء می‌شود. با استفاده از روش SR که توسط برنینگهام و اتو ارائه شده میزان غلظت و دبی محصولات، دمای مراحل تعادلی، دبی و غلظت مایع و بخار تبادل شده بین مراحل را برای حالت‌های زیر بدست آورید.

	Number of Equilibrium Stages	Entering Absorbent Flow Rate lbmole/hr	Entering Absorbent Temperature, °F
(a)	6	500	90
(b)	12	500	90
(c)	6	1000	90
(d)	6	500	60

در فشار 75Psia مقادیر k با استفاده از رابطه زیر بدست می‌آید

$$k_i = \alpha_i + \beta_i T + \gamma_i T^2 + \delta_i T^3$$

که ضرایب این معادله برای اجزاء به صورت زیر است.

Species	α_i	$\beta_i \times 10^4$	$\gamma_i \times 10^6$	$\delta_i \times 10^8$
C ₁	12.25	2500	-625	0
C ₂	4.75	-4.27	208	-8.55
C ₃	2.35	-131	138	-8.47
nC ₄	-0.434	121	-10.2	5.44
nC ₅	-0.207	41.6	0.477	3.08
Oil	-0.00009	0.02	0	0

مقادیر آنتالپی مایع و بخار از روابط زیر محاسبه می‌شوند.

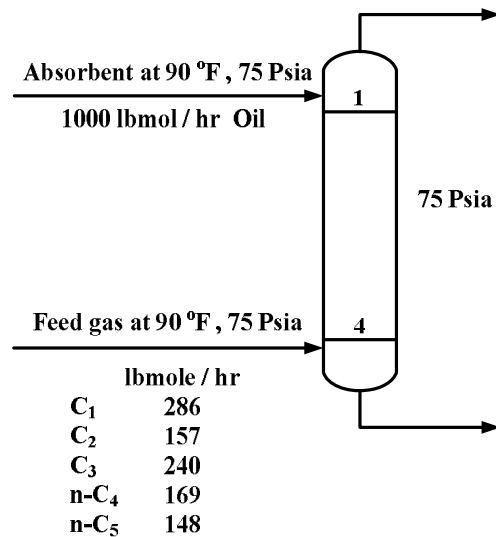
$$H_{V_i} = A_i + B_i T + C_i T^2$$

$$H_{L_i} = a_i + b_i T + c_i T^2$$

ثابت‌های این معادله‌ها برای C₂ ، C₃ ، nC₄ و nC₄ در مسئله ۸-۱۵ داده شده است و برای C₁ و روغن به صورت زیر می‌باشد.

Species	Vapor Enthalpy Constants			Liquid Enthalpy Constants		
	A _i	B _i	C _i × 10 ²	a _i	b _i	c _i × 10 ²
C ₁	4800	9	0	3300	11	0
Oil	37400	44	0	12800	73	0

۱۵- یک برج شامل چهار مرحله تعادلی و مشخصات زیر موجود است با استفاده از روش SR که توسط برنینگهام و اتو ارائه شده است میزان غلظت و دبی محصولات خروجی ، دمای مراحل تعادلی ، دبی و غلظت مایع و بخار تبادل شده بین مراحل تعادلی را بدست آورید.



داده‌های ترمودینامیکی در مسئله ۱۴ داده شده است.

۱۶- در مثال ۱۳-۴ دمای گاز و روغن ورودی در طول برج افزایش می‌یابد که باعث محدود کردن جذب در سیستم می‌شود. می‌خواهیم از یک مبدل داخلی با بار حرارتی 500000 Btu/hr در مراحل تعادلی زیر استفاده کنیم.

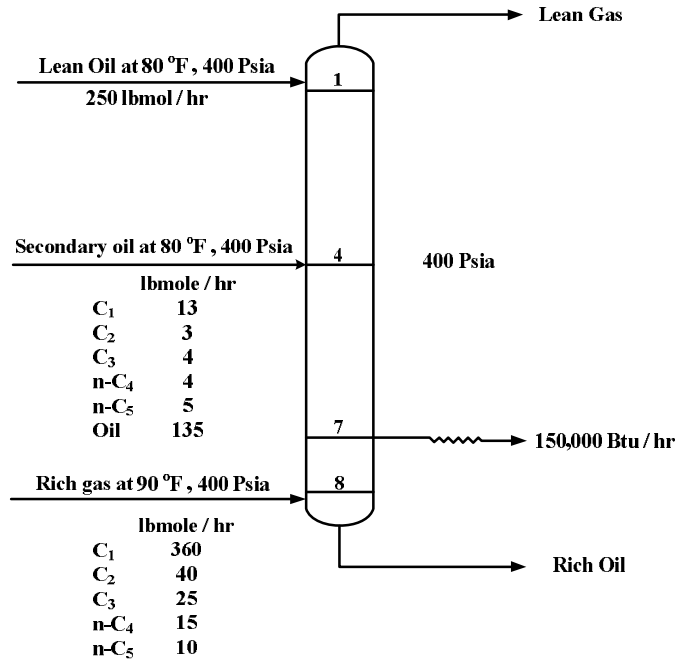
الف : مرحله تعادلی دوم

ب : مرحله تعادلی سوم

ج : مرحله تعادلی چهارم

د : مرحله تعادلی پنجم

۱۷- آیا مبدل داخلی مفید بوده است؟ مبدل داخلی در کدامیک از حالت‌های فوق مفیدتر است؟ در صورتی که حداقل دمای مراحل تعادلی 100°F باشد آیا لازم است بار حرارتی مبدل داخلی را افزایش یا کاهش دهیم؟
برای برج جذب با مشخصات زیر با استفاده از روش SR که توسط برنینگهام و اتو ارائه شده است میزان دبی و غلظت محصولات خروجی ، دمای مراحل تعادلی ، دبی و غلظت مایع و بخار تبادل شده بین مراحل تعادلی را بدست آورید. داده‌های ترمودینامیکی این سیستم در مثال ۱۳-۶ موجود است.



۱۸- مخلوطی شامل سیکلوپنتان و سیکلوهگزان در 25°C توسط فرآیند استخراج مایع-مایع توسط حلال متانول از یکدیگر جدا می‌شوند. تعادل فازی را می‌توان با استفاده از معادله ون لار بیان کرد ثابت‌های این معادله به صورت زیر است.

$$A_{12} = 2.61 \quad A_{13} = 2.147 \quad A_{23} = 0$$

$$A_{21} = 2.34 \quad A_{31} = 1.730 \quad A_{32} = 0$$

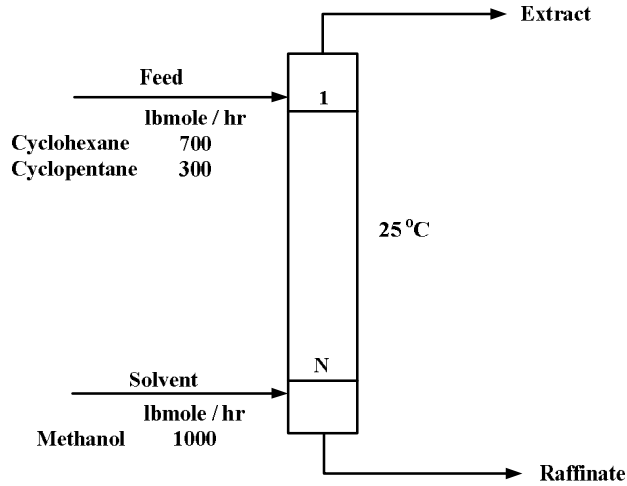
میزان دبی و غلظت محصولات و همچنین دبی و غلظت جریان‌های تبادل شده بین مراحل تعادلی را برای شرایط زیر بدست آورید.

الف: برج شامل یک مرحله تعادلی ($N = 1$) باشد.

ب: برج شامل دو مرحله تعادلی ($N = 2$) باشد.

ج: برج شامل پنج مرحله تعادلی ($N = 5$) باشد.

د: برج شامل ده مرحله تعادلی ($N = 10$) باشد.



۱۹- نه معادله زیر با استفاده از الگوریتم توماس حل نمایید.

$$x_2 + 2x_3 + 2x_4 + x_6 = 7$$

$$x_1 + x_3 + x_4 + 3x_5 = 6$$

$$x_1 + x_2 + x_3 + x_5 + x_6 = 6$$

$$x_4 + 2x_5 + x_6 + 2x_7 + 2x_8 + x_9 = 11$$

$$x_4 + x_5 + 2x_6 + 3x_7 + x_9 = 8$$

$$x_5 + x_6 + x_7 + 2x_8 + x_9 = 8$$

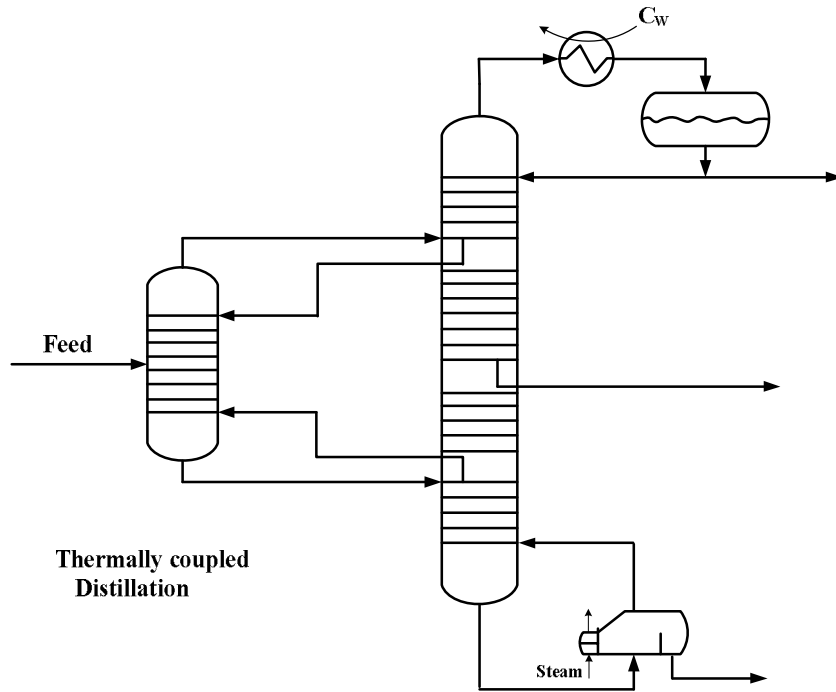
$$x_1 + 2x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + 2x_6 + 3x_7 + x_8 = 13$$

$$x_2 + 2x_3 + 2x_4 + x_5 + x_6 + x_7 + x_8 + 3x_9 = 14$$

$$x_3 + x_4 + 2x_5 + x_6 + 2x_7 + x_8 + x_9 = 10$$

۲۰- معادله ۵۸-۱۵ تا ۶۰-۱۵ را طوری مرتب کنید که برج‌های متصل زیر را بتوان با استفاده از روش SC

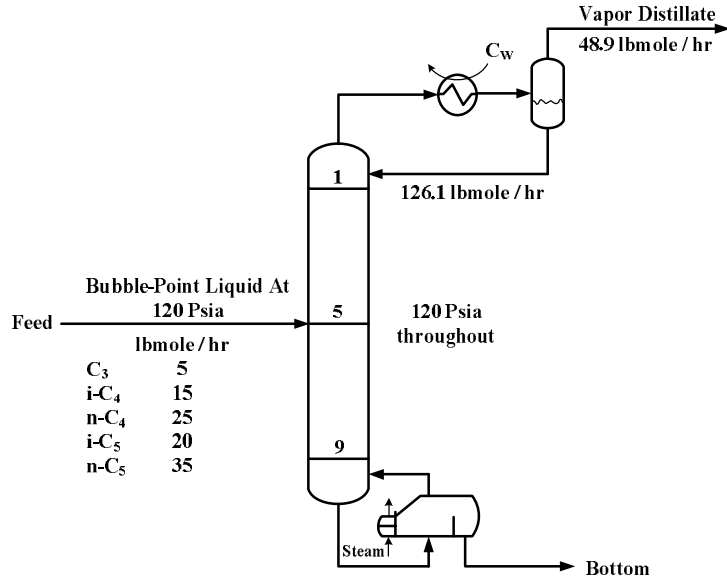
حل نمود. آیا ماتریس ایجاد شده سه‌قطری است؟



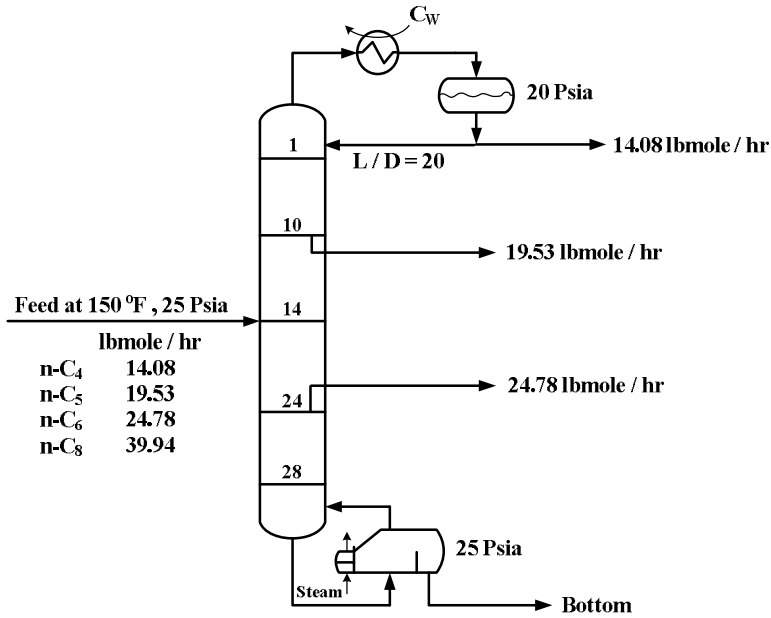
۲۱- چرا در معادله ۱۵-۶۳ متغیرها به صورت v, T, l چیده شده است؟ آیا می‌توان متغیرها را به صورت l, T, v مرتب نمود؟

۲۲- چرا در معادله ۱۵-۶۴ معادلات به صورت H, M, E چیده شده است؟ آیا می‌توان معادلات را به صورت E, M, H مرتب نمود؟

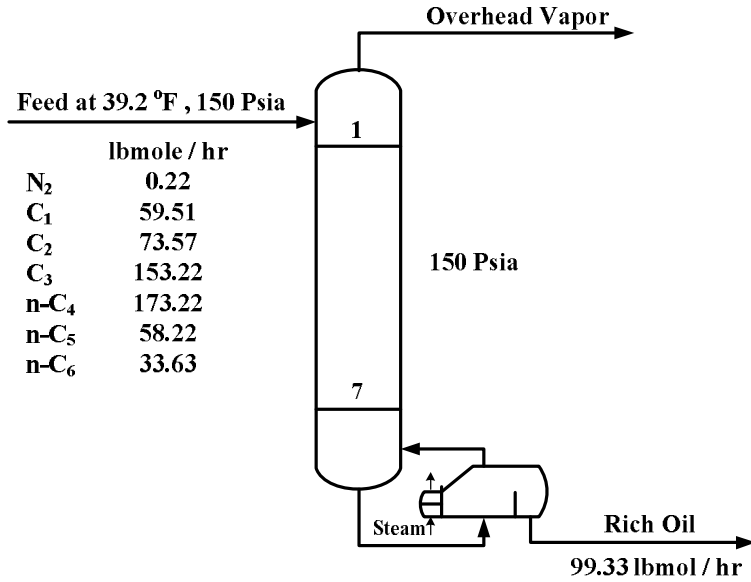
۲۳- با استفاده از روش SC که توسط نفتالی و سندهلوم ارائه شده میزان غلظت محصولات، دمای مراحل تعادلی، دبی و غلظت مایع و بخار تبادل شده بین مراحل تعادلی، بار حرارتی جوش‌آور و بار حرارتی کندانسور را برای برج زیر بدست آورید. خواص ترمودینامیکی از رابطه Chao and Seader محاسبه می‌شوند. نتیجه حل خود را با حل ارائه شده در Chemical Engineers Handbook, Fifth Edition, pp13-32 مقایسه کنید. چرا این دو حل متفاوت هستند؟



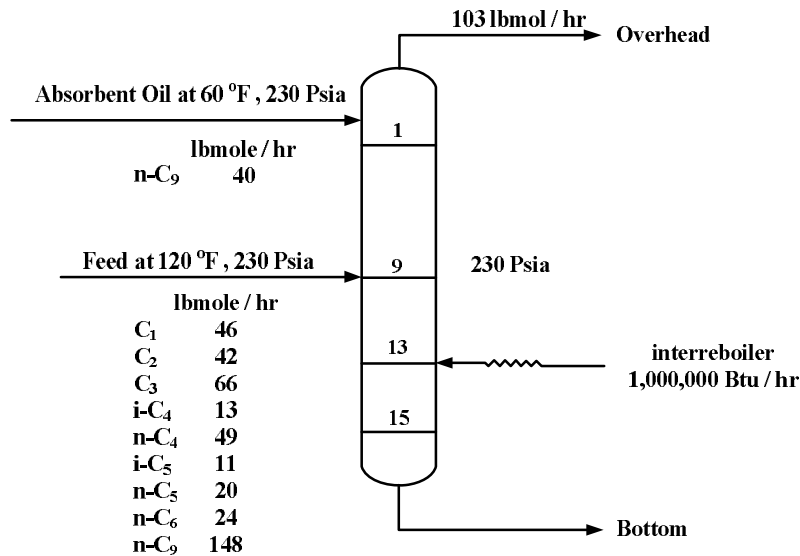
۲۴- با استفاده از روش SC که توسط نفتالی و سندهلوم ارائه شده میزان غلظت محصولات ، دمای مراحل تعادلی ، دبی و غلظت مایع و بخار تبادل شده بین مراحل تعادلی ، بار حرارتی جوش آور و بار حرارتی کندانسور را برای برج زیر بدست آورید. خواص ترمودینامیکی از رابطه چائو و سیدر محاسبه می شوند.



۲۵- با استفاده از روش SC که توسط نفتالی و سندهلوم ارائه شده میزان غلظت محصولات ، دمای مراحل تعادلی ، دبی و غلظت مایع و بخار تبادل شده بین مراحل تعادلی ، بار حرارتی جوش آور و بار حرارتی کندانسور را برای برج زیر بدست آورید. خواص ترمودینامیکی از رابطه چائو و سیدر محاسبه می شوند.



۲۶- با استفاده از روش SC که توسط نفتالی و سندهلوم ارائه شده میزان غلظت محصولات، دمای مراحل تعادلی، دبی و غلظت مایع و بخار تبادل شده بین مراحل تعادلی، بار حرارتی جوش‌آور و بار حرارتی کندانسور را برای برج جذب مجهز به جوش‌آور زیر محاسبه نمایید. بار دیگر محاسبات را برای حالتی که مبدل داخلی وجود نداشته باشد حل نمایید. نتیجه هر دو حالت را به هم مقایسه نمایید. آیا مبدل داخلی^۱ مفید بوده است؟ آیا مبدل داخلی^۲ برای بالای برج لازم است؟



۲۷- 200 lbmole/hr خوراکی شامل 5% مولی iC_4 ، 20% مولی nC_4 ، 35% مولی iC_5 و 40% مولی nC_5 به صورت مایع وارد برج می‌شود. 95% از nC_4 از بالای برج و 95% از iC_5 از پایین برج خارج می‌شود.

- 1- Interboiler
- 2- Intercooler

برای حدس اولیه مقدار سینی‌های برج دو برابر حداقل تعداد سینی‌ها در نظر گرفته می‌شود. برج مجهز به کندانسور کلی و جوش‌آور جزئی می‌باشد. با استفاده از روش SC که توسط نفتالی و سند هولم ارائه شده برج را طراحی نمایید.

فصل چهاردهم

روش همگرایی θ

مقدمه

یکی از روش‌های حل مسائل تقطیر چندجزئی استفاده از روش همگرایی θ می‌باشد. این روش برای انواع مختلف برج تقطیر توصیه می‌شود و معمولاً برای مخلوط‌هایی که ایده‌آل هستند یا انحراف کمی از حالت ایده‌آل دارند بکار می‌رود. برای چنین شرایطی روش همگرایی θ یک روش سریع محسوب می‌شود. برای برج‌هایی که کندانسور و جوش‌آور ندارند مانند برج‌های جذب گاز، استفاده از روش نیوتن رافسون $2N$ توصیه می‌شود. این روش نیز برای مخلوط‌هایی کاربرد دارد که انحراف چندانی از حالت ایده‌آل نداشته باشند. برای تحلیل انواع برج‌ها با محلول‌های غیر ایده‌آل از روشی موسوم به Almost Band Algorithm استفاده می‌شود که روش نیوتن رافسون $2N$ و روش موسوم به Almost Band Algorithm در این مجموعه مورد بحث قرار نخواهد گرفت.

بسط و کاربرد روش همگرایی θ برای برج‌های تقطیر معمولی

در این فصل روش همگرایی θ بسط داده شده و برای برج‌های معمولی بکار گرفته می‌شود. در ابتدا معادلات لازم برای توصیف یک برج تقطیر معمولی بیان می‌شود و سپس فرمولاسیون و کاربرد روش همگرایی θ همراه با روش ثابت تعادل (k_b) برای محاسبه دما و روش غلظت ثابت برای نوشتن موازنه انرژی ترکیب می‌شوند تا بتوان همه جریان‌های داخلی و خارجی برج را همراه با شرایط ترمودینامیکی آن بدست آورد.

معادلات لازم برای توصیف برج تقطیر معمولی

یک برج تقطیر با یک خوراک (F) و یک محصول بالای برج (D) و یک محصول پایین برج (B) را برج تقطیر معمولی گوئیم. نمونه‌ای از این برج در شکل ۱-۱۴ نشان داده شده است. برج در حالت پایا^۱ می‌باشد بدین معنا که هیچ پارامتری با زمان تغییر نمی‌کند که برای بدست آوردن پارامترهای این برج باید مشخصات زیر معلوم باشد.

۱- تعداد سینی‌ها در هر قسمت از برج معلوم باشد.

۲- دبی، دما، فشار و غلظت خوراک

۳- نوع کندانسور بالای برج [کندانسور کلی یا کندانسور جزئی]

۴- فشار برج (برای حالتی که افت فشار سینی‌ها در مقابل فشار کل کم باشد) یا توزیع فشار (برای حالتی که افت فشار مراحل در مقابل فشار کل قابل صرف‌نظر نباشد)

۵- نسبت جریان برگشتی L_1/D یا دبی جریان L_1 یا V_2

۶- دمای جریان بالای برج یا دبی جریان بالای برج

سه شرط اول مربوط به شرایط برج و خوراک است و سه شرط بعدی متغیرهای عملیاتی برج می‌باشند. برای شرایط اخیر هدف این است که غلظت جریان‌های بالا و پایین برج را بدست آوریم. معادلات زیر موازنه جرم، موازنه انرژی و همچنین تعادل اجزاء را در برج نشان می‌دهد.

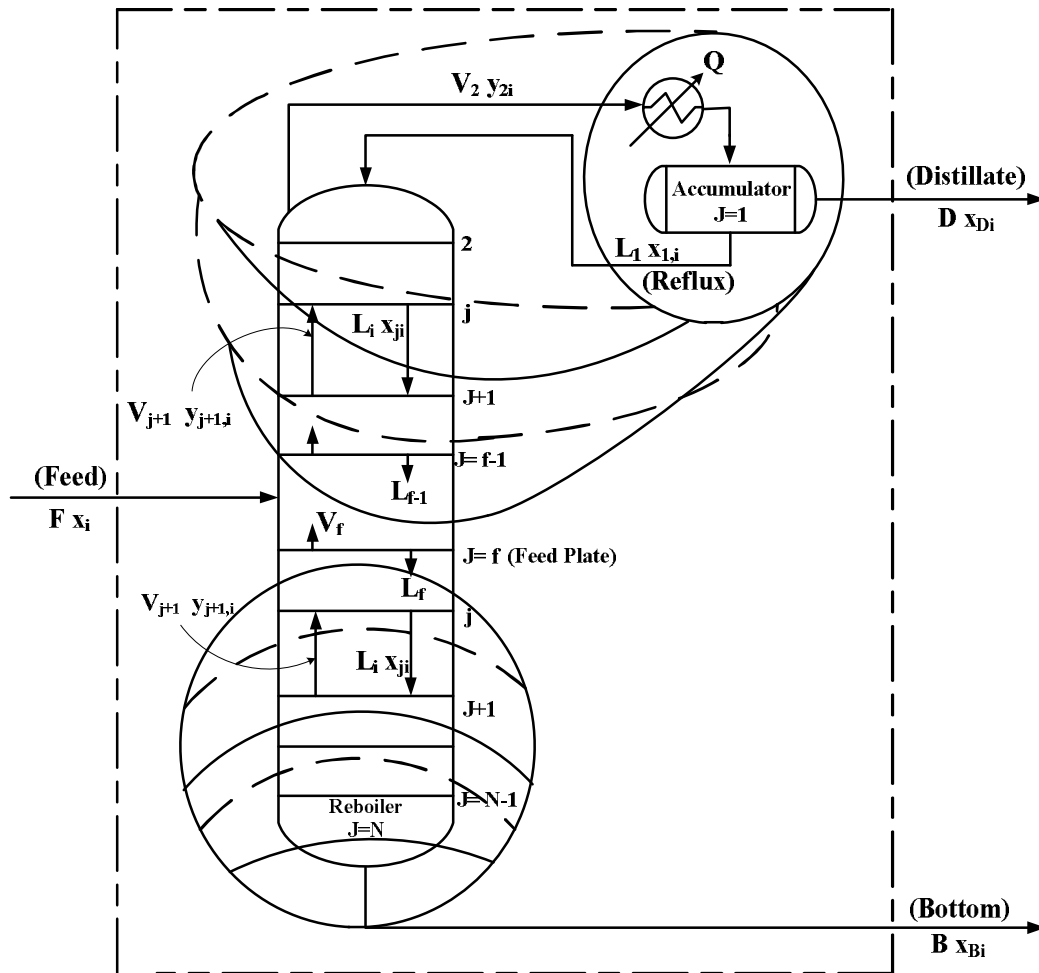
۱-۱۴

$$\text{Equilibrium relationships} \left\{ \begin{array}{l} y_{ji} = k_{ji} x_{ji} \quad (j=1, 2, \dots, N) \\ \sum_{i=1}^C y_{ji} = 1 \quad (j=1, 2, \dots, N) \\ \sum_{i=1}^C x_{ji} = 1 \quad (j=1, 2, \dots, N) \end{array} \right.$$

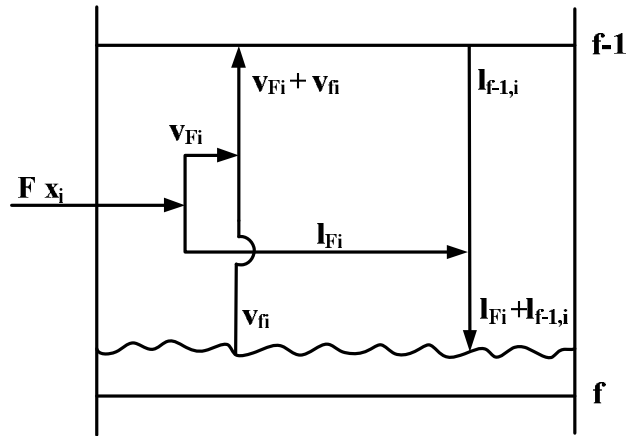
$$\text{Material balance} \left\{ \begin{array}{l} V_{j+1} y_{j+1,i} = L_j x_{ji} + D X_{Di} \quad (j=1, 2, \dots, f-2) \\ V_f y_{fi} + V_F y_{Fi} = L_{f-1} x_{f-1,i} + D X_{Di} \quad (j=1, 2, \dots, N-1) \\ V_{j+1} y_{j+1,i} = L_j x_{ji} - B x_{Bi} \\ F X_i = D X_{Di} + B x_{Bi} \end{array} \right.$$

$$\text{Enthalpy balances} \left\{ \begin{array}{l} V_{j+1} H_{j+1} = L_j h_j + D H_D + Q_C \quad (j=1, 2, \dots, f-2) \\ V_f H_f + V_F H_F = L_{f-1} h_{f-1} + D H_D + Q_C \\ V_{j+1} H_{j+1} = L_j h_j - B h_B + Q_R \quad (f, f+1, \dots, N-1) \\ F H_F = B h_B + D H_D + Q_C - Q_R \end{array} \right.$$

سیستم‌های مختلف برای نوشتن موازنه حول سینی‌های مختلف در شکل ۱-۱۴ نشان داده شده است. در این حالت فرض می‌شود که اگر خوراک به صورت دوفازی وارد برج شود مایع آن به مایعی که از سینی بالایی می‌ریزد افزوده می‌شود و بخار آن به مقدار بخاری که از سینی پایینی بالا می‌آید افزوده می‌شود که این مورد در شکل ۱۴-۲ نشان داده شده است.



شکل ۱-۱۴ : سیستم‌ها مختلف برای نوشتن موازنه جرم (معادله ۱-۱۴)



شکل ۱۴-۲: مدل اضافه شدن خوراک به جریان‌های داخلی برج

تعداد متغیرهای مستقل برای موازنه جرم و انرژی $N(2C+3)+3$ می‌باشد.

N : تعداد سینی‌ها C : تعداد اجزاء

برای یک برج تقطیر که مشخصات آن (تعداد سینی‌ها، سینی خوراک و نوع کندانسور) و شرایط خوراک معلوم باشد شرح متغیرهای مستقل در جدول زیر آمده است.

Variable	Number
Vapor and liquid mole fractions	$2CN$
Total-flow rates	$2N$
Temperatures	N
Reboiler and condenser duties	2
Column pressure	1
	$N(2C+3)+3$

ضمناً تعداد معادلات مستقلی که می‌تواند برای هر سینی نوشته شود به شرح زیر است.

Equations	Number of Equations
Equilibrium	C
Mass balance	C
Energy balance	1

Mole fraction constrains, $\sum_{i=1}^C (x_i)_S = 1.0$	2	
Total	2C+3	

پس می‌توان $N(2C+3)$ معادله مستقل نوشت و درجه آزادی به صورت زیر خواهد بود.

$$N_D = N_V - N_E$$

$$N_D = [N(2C+3)+3] - [N(2C+3)] = 3$$

پس باید سه پارامتر را در برج مشخص کنیم تا بتوان بقیه مشخصات را بدست آورد. برای مثال می‌توان سه پارامتر دبی محصولات بالای برج (D)، جریان برگشتی به برج (L_1) و فشار برج را در نظر گرفت تا بقیه مشخصات برج بدست آید.

در صورتی که محلول ایده‌آل باشد آنتالپی بخار به ازای واحد مول و آنتالپی مایع به ازای واحد مول به صورت زیر بدست می‌آید.

$$H_j = \sum_{i=1}^C H_{ji} y_{ji} \quad 2-14$$

$$h_j = \sum_{i=1}^C h_{ji} x_{ji}$$

H_{ji} : آنتالپی بخار جزء خالص i روی سینی زام

h_{ji} : آنتالپی مایع جزء خالص i روی سینی زام

میزان H_D (آنتالپی خروجی از کندانسور) به نوع کندانسور بستگی دارد. برای کندانسور کلی، جریان خروجی از بالای برج مایع اشباع در دمای T_1 و فشار برج می‌باشد. در این حالت $y_{2i} = x_{1i} = X_{Di}$ خواهد بود.

$$H_D = \sum_{i=1}^C h_{ji} X_{Di} = \sum_{i=1}^C h_{1i} x_{1i} = h_1 \quad 3-14$$

برای کندانسور جزئی جریان خروجی از بالای برج بخار اشباع در دمای T_1 و فشار برج می‌باشد در این حالت $y_{1i} = X_{Di}$ است.

$$H_D = \sum_{i=1}^C H_{1i} X_{Di} = \sum_{i=1}^C H_{1i} y_{1i} = H_1 \quad 4-14$$

آنتالپی محصول پایین برج از رابطه زیر بدست می‌آید.

$$h_B = \sum_{i=1}^C h_{Bi} X_{Bi} = \sum_{i=1}^C h_{Ni} x_{Ni} = h_N \quad 5-14$$

روش‌های عددی متعددی برای حل معادلات ۱-۱۴ وجود دارد. دو راه اصلی برای حل این معادلات پیشنهاد می‌شود که مبتنی بر تکرار می‌باشند یکی از این روش‌ها، روش لوئیس و ماتسون^۱ [۷] است که در آن X_{Di} و X_{Bi} به عنوان یک متغییر مستقل محسوب می‌شود روش دیگر، روش تیلی و گدس است که در آن دمای سینی‌ها به عنوان یک متغییر مستقل محسوب می‌شود.

در روش تیلی و گدس [۱۰] انتخاب متغییرهای مستقل برای تعریف روش حل کافی نیست در حل معادلات غیر خطی به روش تکرار، نه تنها انتخاب اولیه متغییرهای مستقل بلکه چیدن معادلات نیز در همگرایی معادلات نقش خواهد داشت برای این منظور روش θ که در ادامه توضیح داده خواهد شد برای اکثر مسائل همگرا خواهد شد.

فرمولاسیون و کاربرد روش همگرایی θ ، روش ثابت تعادل (k_b) و روش غلظت ثابت

برای حل مسائل به روش همگرایی θ باید سه روش همگرایی θ ، روش ثابت تعادل (k_b) و روش غلظت ثابت به طور همزمان مورد استفاده قرار گیرند. در ابتدا موازنه جرم، معادله ۱-۱۴، بر حسب دبی اجزاء بیان می‌شود و دبی اجزاء در فاز مایع توسط معادلات تعادل بین مایع و بخار حذف می‌شود. سپس روش θ برای همگرایی این دبی‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد و دمای هر سینی توسط روش ثابت تعادل (k_b) تصحیح می‌شود. غلظت‌ها و دماهای بدست آمده جایگزین حدس‌های قبلی می‌شوند و روش غلظت ثابت برای حل ساده-تر موازنه انرژی (موازنه آنتالپی) بکار گرفته می‌شود.

موازنه جرم و روابط تعادلی

در ابتدا موازنه جرم ذکر شده، معادله ۱-۱۴، را باید بر حسب دبی‌ها بیان کنیم پس باید دبی اجزاء را در فاز مایع و بخار تعریف نماییم.

$$v_{ji} = V_j y_{ji} \quad \text{and} \quad l_{ji} = L_j x_{ji} \quad 6-14$$

دبی جزء i در محصول بالا و پایین برج به صورت زیر است.

$$d_i = D X_{Di} \quad \text{and} \quad b_i = B X_{Bi} \quad 7-14$$

دبی جزء i در فاز مایع و بخار خوراک به صورت زیر نشان داده می‌شود.

$$v_{Fi} = V_F Y_{Fi} \quad \text{and} \quad l_{Fi} = L_F X_{Fi} \quad 8-14$$

رابطه تعادلی بین دو فاز $y_{ji} = k_{ji} x_{ji}$ را می‌توان بر حسب دبی اجزاء l_{ji} و v_{ji} بیان کرد. با استفاده از معادله ۶-۱۴ رابطه تعادلی به صورت زیر خواهد شد.

$$\frac{v_{ji}}{V_j} = k_{ji} \frac{l_{ji}}{L_j} \quad 9-14$$

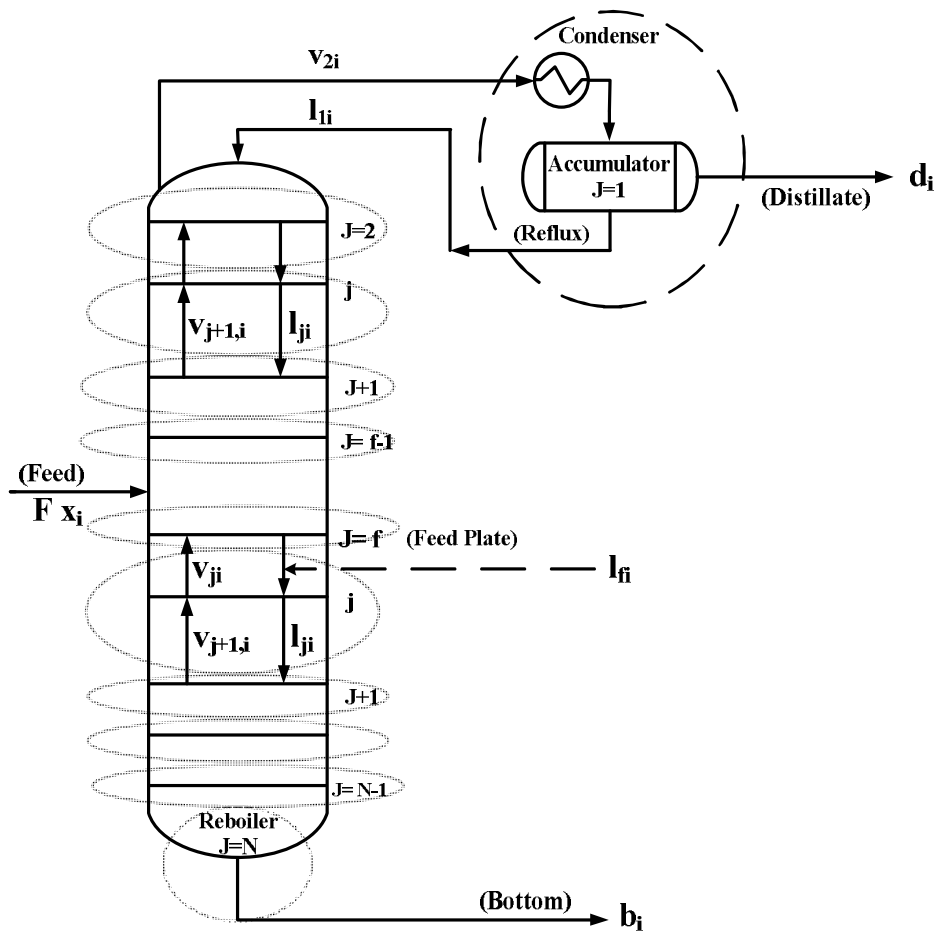
$$v_{ji} = S_{ji} l_{ji} \quad \text{and} \quad l_{ji} = A_{ji} v_{ji} \quad 10-14$$

A_{ji} : ضریب جذب جزء i روی سینی زام

S_{ji} : ضریب دفع جزء i روی سینی j ام

۱۱-۱۴

$$A_{ji} = 1/S_{ji} = L_j / (k_{ji} V_j)$$



شکل ۱۴-۳: سیستم‌های مختلف برای نوشتن موازنه جرم (معادله ۱۴-۱۲)

در معادله ۱-۱۴ برای سینی‌های بالای خوراک (بالای برج) ، کل سیستم بالای هر سینی به عنوان یک سیستم در نظر گرفته می‌شد در حالی که در فرمولاسیون جدید هر سینی به عنوان یک سیستم محسوب می‌شود. این سیستم‌ها در شکل ۱۴-۳ نشان داده شده‌اند. موازنه جرم برای سیستم‌های مختلف به صورت زیر خواهد بود.

$$\text{Matreial balance} \left\{ \begin{array}{l} -l_{1i} - d_i + v_{2i} = 0 \\ l_{1i} - v_{2i} - l_{2i} + v_{3i} = 0 \\ l_{j-1,i} - v_{ji} - l_{ji} + v_{j+1,i} = 0 \quad (j = 3, 4, \dots, f-2) \\ l_{f-2,i} - v_{f-1,i} - l_{f-1,i} + v_{fi} = -v_{Fi} \quad 12-14 \\ l_{f-1,i} - v_{fi} - l_{fi} + v_{f+1,i} = -l_{Fi} \\ l_{j-1,i} - v_{ji} - l_{ji} + v_{j+1,i} = 0 \quad (j = f+1, f+2, \dots, N-1) \\ l_{N-1,i} - v_{Ni} - b_i = 0 \end{array} \right.$$

که l_{ji} ها بجز l_{1i} با استفاده از معادله تعادل (معادله ۱۴-۱۰) حذف می‌شوند. برای یک کندانسور کلی غلظت d_i و l_{1i} با هم برابرند.

$$l_{1i} = \left(\frac{L_1}{D} \right) d_i \quad 13-14$$

برای یک کندانسور جزئی $y_{li} = X_{Di}$ و معادله تعادل $y_{li} = k_{li} x_{li}$ نیز برقرار است.

$$D X_{Di} = \left(\frac{D k_{li}}{L_1} \right) L_1 x_{li} \quad 14-14$$

یا

$$l_{1i} = A_{1i} d_i \quad 15-14$$

که $A_i = L_1 / (k_{li} D)$ می‌باشد.

معادله ۱۴-۱۵ را هم برای کندانسور جزئی و هم برای کندانسور کلی می‌توان بکار برد با این تفاوت که برای کندانسور کلی $A_{li} = L_1 / D$ خواهد بود همچنین A_{Ni} کمی متفاوت از A_{ji} است. با استفاده از رابطه تعادلی $y_{Ni} = k_{Ni} x_{Ni}$ خواهیم داشت.

$$V_N y_{Ni} = \left(\frac{k_{Ni} V_N}{B} \right) B X_{Bi} \quad 16-14$$

یا

$$b_i = A_{Ni} v_{Ni}$$

که $A_{Ni} = \frac{B}{k_{Ni} V_N}$ خواهد شد.

وقتی l_{ji} ها و b_i را توسط معادله‌های ۱۴-۱۰، ۱۴-۱۵ و ۱۴-۱۶ از معادله ۱۴-۱۲ حذف کنیم نتیجه زیر حاصل می‌شود.

$$\begin{array}{l}
 \text{Material} \\
 \text{balances} \\
 \text{and} \\
 \text{Equilibrium} \\
 \text{relationships}
 \end{array}
 \left\{ \begin{array}{l}
 -(A_{1i} + 1)d_i + v_{2i} = 0 \\
 A_{1i} d_i - (A_{2i} + 1)v_{2i} + v_{3i} = 0 \\
 A_{j-1,i} v_{j-1,i} - (A_{ji} + 1)v_{ji} + v_{j+1,i} = 0 \quad (j = 3, \dots, f - 2) \\
 A_{f-2,i} v_{f-2,i} - (A_{f-1,i} + 1)v_{f-1,i} + v_{fi} = -v_{Fi} \\
 A_{f-1,i} v_{f-1,i} - (A_{fi} + 1)v_{fi} + v_{f+1,i} = -l_{Fi} \\
 A_{j-1,i} v_{j-1,i} - (A_{ji} + 1)v_{ji} + v_{j+1,i} = 0 \quad (j = f + 1, f + 2, \dots, N - 1) \\
 A_{N-1,i} v_{N-1,i} - (A_{Ni} + 1)v_{Ni} = 0
 \end{array} \right.$$

این معادلات می‌توانند به صورت ماتریس زیر نشان داده شوند.

$$A_i v_i = -func_i$$

where

$$A_i = \begin{bmatrix}
 -\rho_{1i} & 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\
 A_{1,i} & -\rho_{2,i} & 1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 0 & 0 & A_{f-2,i} & -\rho_{f-1,i} & 1 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & A_{f-1,i} & -\rho_{fi} & 1 & 0 & 0 \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & A_{N-2,i} & -\rho_{N-1,i} & 1 \\
 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & A_{n-1,i} & -\rho_{Ni}
 \end{bmatrix} \tag{18-14}$$

$$v_i = [d_i \ v_{2i} \ v_{3i} \ \dots \ v_{f-1,i} \ v_{fi} \ \dots \ v_{N-1,i} \ v_{Ni}]^T$$

$$Func_i = [0 \ 0 \ \dots \ 0 \ v_{Fi} \ l_{Fi} \ 0 \ \dots \ 0 \ 0]^T$$

$$\rho_{ji} = (1 + A_{ji})$$

حل این ماتریس در ادامه توضیح داده خواهد شد. این محاسبات با حدس زدن دمای سینی‌ها (T_j) و دبی فاز بخار (V_j) شروع می‌شود و با استفاده از موازنه کلی می‌توان L_j ها را نیز بدست آورد. با استفاده از دماها و دبی‌های حدس زده شده، ضرایب جذب در رابطه ۱۴-۱۸ برای جزء i روی سینی زام بدست می‌آید وقتی که ضرایب جذب بدست آیند ماتریس ۱۴-۱۸، یک ماتریس سه قطری خواهد بود که توسط الگوریتم توماس [۳] که در ادامه توضیح داده می‌شود حل خواهد شد.

متغیرهای ماتریس را به صورت $x_1, x_2, \dots, x_{N-1}, x_N$ تعریف می‌کنیم و معادلات خطی ماتریس به صورت زیر در می‌آیند.

$$\begin{aligned}
 b_1 x_1 + c_1 x_2 &= d_1 \\
 a_2 x_1 + b_2 x_2 + c_2 x_3 &= d_2 \\
 a_3 x_2 + b_3 x_3 + c_3 x_4 &= d_3 \\
 &\dots \\
 a_{N-1} x_{N-2} + b_{N-1} x_{N-1} + c_{N-1} x_N &= d_{N-1} \\
 a_N x_{N-1} + b_N x_N &= d_N
 \end{aligned} \tag{19-14}$$

برای حل این ماتریس ابتدا باید f_k و g_k را از دو رابطه زیر بدست آوریم.

$$f_1 = c_1/b_1 \quad g_1 = d_1/b_1$$

$$f_k = \frac{c_k}{b_k - a_k f_{k-1}} \quad (k = 2, 3, \dots, N-1) \quad 20-14$$

$$g_k = \frac{d_k - a_k g_{k-1}}{b_k - a_k f_{k-1}} \quad (k = 2, 3, \dots, N)$$

پس از محاسبه f_k و g_k ، مقادیر متغیرهای x_1 تا x_N به صورت زیر بدست می‌آیند.

$$x_N = g_N \quad 21-14$$

$$x_k = g_k - f_k x_{k+1} \quad (k = N-1, N-2, \dots, 2, 1)$$

استفاده از روابط بالا در مثال ۱۴-۱ آورده شده است. برای برج تقطیر معمولی که مدل خوراک آن توسط مدل نشان داده شده در شکل ۱۴-۲ است روش بوستون و سولیوان^۱ نیز می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد که روابط آن به صورت زیر است.

$$f_1 = -\frac{1}{m_1} \quad m_1 = 1 + A_{1i}$$

$$f_2 = -\frac{m_1}{m_2} \quad m_2 = A_{2i} m_1 + 1$$

$$f_k = -\frac{m_{k-1}}{m_k} \quad m_k = A_{ki} m_{k-1} + 1 \quad (k = 2, 3, \dots, N-1)$$

$$g_1 = g_2 = \dots = g_{f-2} = 0 \quad 22-14$$

$$g_{f-1} = v_{Fi} \frac{m_{f-2}}{m_{f-1}}$$

$$g_f = \left(l_{Fi} + A_{f-1,i} g_{f-1} \right) \frac{m_{f-1}}{m_f}$$

$$g_k = A_{k-1,i} g_{k-1} \frac{m_{k-1}}{m_k} \quad (k = f+1, f+2, \dots, N)$$

پس از محاسبه f_k و g_k با استفاده از معادله ۲۱-۱۴ مقادیر مجهولات x_1 تا x_N بدست می‌آیند. پس با استفاده از حل این معادلات مقادیر $(v_{ji})_{Ca}$ بدست می‌آیند و با جایگزاری آنها در معادله ۱۴-۱۰ می‌توان $(l_{ji})_{Ca}$ را بدست آورد.

$(v_{ji})_{Ca}$: دبی محاسبه شده جزء i در فاز بخار روی سینی زام

$(l_{ji})_{Ca}$: دبی محاسبه شده جزء i در فاز مایع روی سینی زام

مقادیر بدست آمده در روش θ استفاده می‌شوند تا با استفاده از روش θ و روش ثابت تعادل (k_b) مسئله به طور کامل حل شود.

فرمولاسیون روش همگرایی θ

در روش θ از جزء مولی استفاده می‌شود تا بتوان توسط روش ثابت تعادل (k_b) حدس‌های بعدی دما را بدست آورد از طرفی روی سیستم‌ها موازنه جرم می‌نویسیم البته چون از جزء مولی استفاده کرده‌ایم موازنه مولی خواهد شد اما چون در سیستم هیچگونه واکنش شیمیایی رخ نمی‌دهد این موازنه مولی، معادل موازنه جرم است. پس با موازنه حول کل سیستم خواهیم داشت.

$$F X_i = (d_i)_{co} + (b_i)_{ca} \quad 23-14$$

$$\sum_{i=1}^c (d_i)_{co} = D \quad 24-14$$

با قرار دادن مقدار مناسب θ در رابطه زیر می‌توان دو معادله اخیر را حل نمود.

$$\left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{co} = \theta \left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{ca} \quad 25-14$$

اندیس ca برای کمیت‌های محاسبه شده و اندیس co برای کمیت‌های اصلاح شده است. با ترکیب کردن معادلات ۲۳-۱۴ و ۲۵-۱۴ خواهیم داشت.

$$(d_i)_{co} = \frac{F X_i}{1 + \theta \left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{ca}} \quad 26-14$$

طبق معادله ۲۴-۱۴ مجموع $(d_i)_{co}$ باید مساوی D باشد. برای بدست آوردن θ مناسب، معادله ۲۴-۱۴ را به صورت زیر مرتب می‌کنیم تا $g(\theta) = 0$ شود و برای حل آن بتوان از روش نیوتن رافسون استفاده کرد.

$$g(\theta) = \sum_{i=1}^c (d_i)_{co} - D = \sum_{i=1}^c \frac{F X_i}{1 + \theta \left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{ca}} - D \quad 27-14$$

θ در این حالت بزرگتر از صفر خواهد بود. روش حل گرافیکی معادله ۲۷-۱۴ برای $\theta > 0$ در شکل ۴-۱۴ نشان داده شده است.

برای بدست آوردن θ از روش نیوتن رافسون، به مشتق تابع $g(\theta)$ نیاز داریم.

$$g'(\theta) = -\sum_{i=1}^c \frac{\left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{ca} F X_i}{\left[1 + \theta \left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{ca}\right]^2} \quad 28-14$$

پس از محاسبه θ می‌توان $(b_i)_{co}$ را با استفاده از معادله ۲۵-۲۴ بدست آورد. لازم به ذکر است که در حل معادله ۲۷-۱۴ به روش نیوتن رافسون، حدس اولیه $\theta = 0$ در نظر گرفته می‌شود و در صورتی که بجای D مقدار دمای شبینم محصول بالای برج داده شود $g(\theta)$ به صورت زیر تعریف خواهد شد.

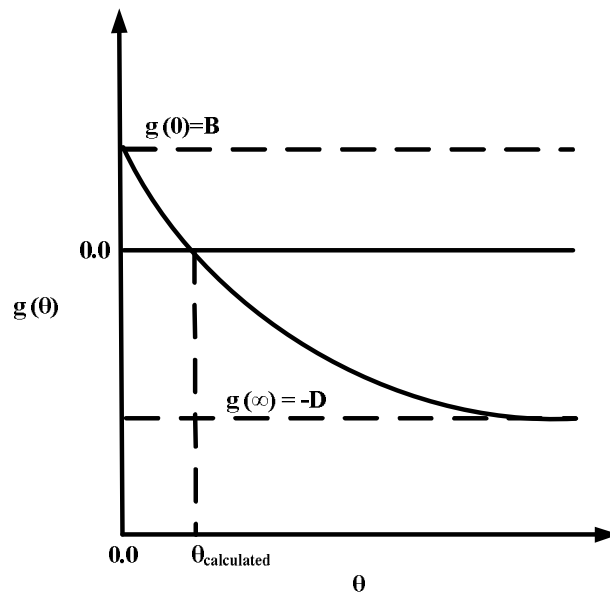
$$g(\theta) = \frac{1}{D_{co}} \left[\sum_{i=1}^c (d_i)_{co} / k_{li} \right] - 1$$

جزء مولی اصلاح شده برای فاز مایع و بخار به صورت زیر خواهد شد.

$$x_{ji} = \frac{(l_{ji}/d_i)_{ca} (d_i)_{co}}{\sum_{i=1}^c (l_{ji}/d_i)_{ca} (d_i)_{co}}$$

$$y_{ji} = \frac{(v_{ji}/d_i)_{ca} (d_i)_{co}}{\sum_{i=1}^c (v_{ji}/d_i)_{ca} (d_i)_{co}}$$

۲۹-۱۴



شکل ۱۴-۴: حل گرافیکی $g(\theta)$ برای مقادیر مثبت θ

بدست آوردن دما با استفاده از روش ثابت تعادل (k_b) بر اساس اجزاء مولی بدست آمده از معادله ۲۹-۱۴ (که با حدس اولیه دما بدست آمده است)، توزیع جدید دما توسط روش ثابت تعادل (k_b) به صورت زیر بدست می‌آید. برای سینی زهر کدام از معادله‌های زیر می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد.

$$k_{jb} \Big|_{T_{j,n+1}} = \frac{1}{\sum_{i=1}^c \alpha_{ji} \Big|_{T_{jn}} x_{ji}} \quad k_{jb} \Big|_{T_{j,n+1}} = \sum_{i=1}^c \frac{y_{ji}}{\alpha_{ji}} \Big|_{T_{jn}} \quad ۳۰-۱۴$$

اثبات دو رابطه اخیر در ضمیمه E آمده است.

که $\alpha_{ji} = \frac{k_{ji}}{k_{jb}}$ ضریب فراربت جزء i در دمای سینی j است و k_{jb} مقدار k برای جزء مبنا می‌باشد که در دمای سینی j محاسبه شده است. رابطه مقدار k با دما به صورت زیر است.

$$\ln k_{jb} = \frac{a}{T_j} + b \quad ۳۱-۱۴$$

که a و b برای دماهای مختلف توسط برازش منحنی^۱ بدست می‌آید. پس با داشتن k_{jb} می‌توان حدس‌های بعدی دما را بدست آورد.

دماهای جدید و غلظت‌های تصحیح شده در موازنه انرژی استفاده می‌شوند تا دوباره جریان‌های خروجی از هر سینی محاسبه شوند.

بدست آوردن دبی کل فازهای خروجی از هر سینی

با استفاده از موازنه انرژی و روش غلظت ثابت می‌توان دبی کل فازهای خروجی از هر سینی را بدست آورد. در این روش ابتدا یکی از دبی‌های کل (V_j یا L_j) از موازنه جرم (معادله ۱۴-۱) حذف می‌شود سپس با نوشتن موازنه انرژی و روش غلظت ثابت، دبی کل یکی از فازها بدست می‌آید و با نوشتن موازنه کلی دبی فاز دیگر نیز بدست می‌آید. برای نوشتن موازنه انرژی ابتدا باید انرژی وارد شده توسط هر جریان را محاسبه کنیم که به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$V_j H_j = V_j \sum_{i=1}^c H_{ji} y_{ji} = \sum_{i=1}^c H_{ji} v_{ji}$$

$$L_j h_j = L_j \sum_{i=1}^c h_{ji} x_{ji} = \sum_{i=1}^c h_{ji} l_{ji}$$

با استفاده از این مفهوم می‌توان برای یک سینی (سیستم شکل ۱۴-۱) موازنه انرژی نوشت.

$$V_{j+1} H_{j+1} - L_j h_j - D H_D - Q_C = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, f-2) \quad ۳۲-۱۴$$

که می‌تواند به صورت زیر بازنویسی شود.

$$\sum_{i=1}^c [H_{j+1,i} v_{j+1,i} - h_{ji} l_{ji} - H_{Di} d_i] - Q_C = 0 \quad ۳۳-۱۴$$

که برای یک برج با کندانسور کلی $H_{Di} = h_{li}$ و برای یک برج با کندانسور جزئی $H_{Di} = H_{li}$ خواهد بود. همچنین موازنه جرم برای یک سینی (سیستم شکل ۱۴-۱) به صورت زیر است.

$$v_{j+1,i} = l_{ji} + d_i \quad (j = 1, 2, \dots, f-2)$$

با استفاده از معادله موازنه جرم اخیر می‌توان v_{j+1} را از معادله ۱۴-۳۳ حذف کرد.

$$\sum_{j=1}^c [(H_{j+1,i} - h_{ji}) l_{ji} + (H_{j+1,i} - H_{Di}) d_i] - Q_C = 0$$

یا

$$L_j \sum_{i=1}^c (H_{j+1,i} - h_{ji}) x_{ji} + D \sum_{i=1}^c (H_{j+1,i} - H_{Di}) X_{Di} - Q_C = 0$$

با استفاده از این معادله می‌توان L_j را بدست آورد.

$$L_j = \frac{Q_C - D \sum_{i=1}^c (H_{j+1,i} - H_{Di}) X_{Di}}{\sum_{i=1}^c (H_{j+1,i} - h_{ji}) x_{ji}} \quad (j = 1, 2, \dots, f-2) \quad 34-14$$

و به طور مشابه خواهیم داشت.

$$L_{f-1} = \frac{Q_C - D \sum_{i=1}^c (H_{fi} - H_{Di}) X_{Di} + V_F \sum_{i=1}^c (H_{fi} - H_{Fi}) Y_{Fi}}{\sum_{i=1}^c (H_{fi} - h_{f-1,i}) x_{f-1,i}} \quad 35-14$$

محاسبه Q_C نیز به صورت زیر خواهد بود.

$$Q_C = L_1 \sum_{i=1}^c (H_{2i} - h_{1i}) x_{1i} + D \sum_{i=1}^c (H_{2i} - H_{Di}) X_{Di} \quad 36-14$$

برای بدست آوردن جریان‌های پایین برج می‌توان با بالای برج یا با پایین برج موازنه نوشت که معمولاً با پایین برج موازنه نوشته می‌شود که به صورت زیر خواهد بود.

$$V_{j+1} = \frac{Q_R - B \sum_{i=1}^c (h_{Ni} - h_{ji}) X_{Bi}}{\sum_{i=1}^c (H_{j+1,i} - h_{ji}) y_{j+1,i}} \quad (j = f, f+1, \dots, N-1) \quad 37-14$$

این روش به روش غلظت ثابت موسوم است چون کمیت‌های ترمودینامیکی در معادله‌های 34-14 تا 37-14 بر مبنای غلظت ثابت بدست آورده شده‌اند (از گرمای انحلال صرف نظر شده است). مقدار Q_R نیز با نوشتن یک موازنه کلی حول برج بدست می‌آید.

$$F H_F = B h_B + D H_D + Q_C - Q_R$$

برای دبی‌های کلی نیز می‌توان موازنه جرم نوشت.

$$V_{j+1} = L_j + D \quad (j = 1, 2, \dots, f-2)$$

$$V_f + V_F = L_{f-1} + D \quad 38-14$$

$$L_j = V_{j+1} + B \quad (j = f, f+1, \dots, N-1)$$

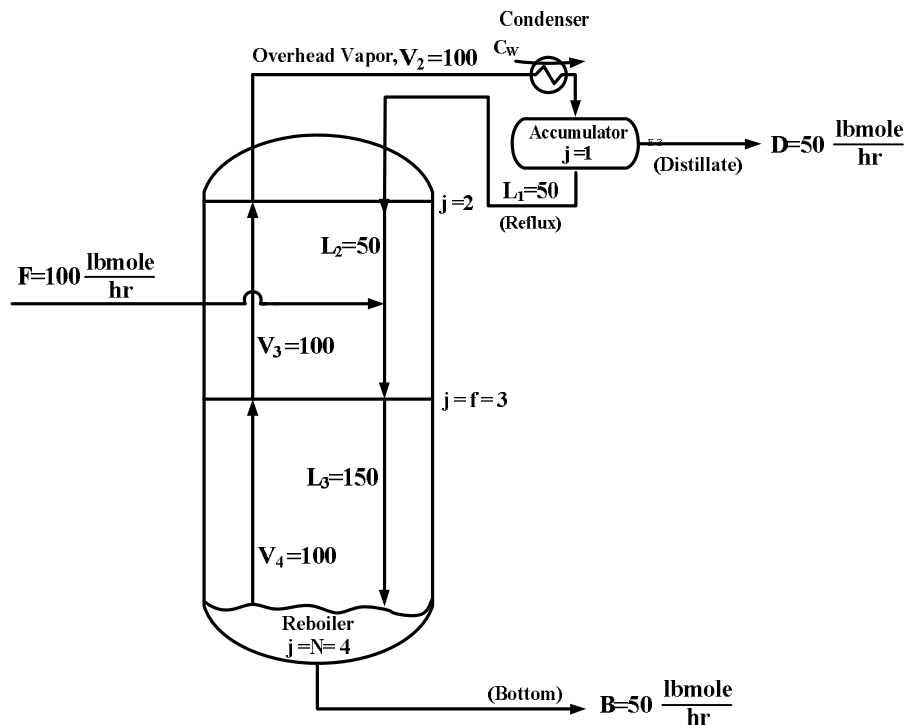
$$F = D + B$$

معمولاً برای بالای برج مقادیر L_j و برای پایین برج مقادیر V_j با استفاده از موازنه انرژی بدست می‌آیند و بقیه جریان‌ها با استفاده از معادله 38-14 محاسبه می‌شوند. مقادیر T ، V_j و L_j به عنوان حدس‌های بعدی در محاسبات مورد استفاده قرار می‌گیرند. این مراحل آنقدر تکرار می‌شوند تا به دقت مورد نظر دست یابیم. مراحل استفاده از روابط ذکر شده در زیر آمده است.

روش محاسبات برای یک محلول ایده‌آل

- ۱- دمای سینی‌ها (T_j) و دبی خروجی از هر سینی (V_j) را حدس می‌زنیم (با استفاده از معادله ۱۴-۳۸ می‌توان L_j ها را بدست آورد)
- ۲- بر مبنای دماها و دبی‌های حدس زده شده در مرحله قبل می‌توان ضرایب جذب را بدست آورد و با استفاده از معادلات ۱۴-۱۸ تا ۱۴-۲۱ (یا ۱۴-۲۲) می‌توان دبی همه اجزاء را بدست آورد.
- ۳- θ را طوری بدست می‌آوریم تا شرط $g(\theta) = 0$ برقرار شود. (این کار را می‌توان با استفاده از معادلات ۱۴-۲۶ تا ۱۴-۲۸ انجام داد حدس اولیه $\theta = 0$ در نظر گرفته می‌شود).
- ۴- با استفاده از معادله ۱۴-۲۹ مقادیر x_{ji} و y_{ji} را برای اجزاء بدست می‌آوریم.
- ۵- با استفاده از اجزاء مولی بدست آمده از مرحله قبل و استفاده از معادله ۱۴-۳۰ می‌توان مقدار k_{jb} را بدست آورد و با استفاده از k_{jb} و معادله ۱۴-۳۱ می‌توان دمای جدید سینی‌ها را بدست آورد.
- ۶- با استفاده از نتایج مرحله ۴، مرحله ۵ و معادلات ۱۴-۳۴ تا ۱۴-۳۸ می‌توان دبی کل فاز مایع ($L_{j,n+1}$) و دبی فاز بخار ($V_{j,n+1}$) را بدست آورد.
- ۷- در صورتی که دماها (T_j) و دبی‌های حدس زده شده (V_j) و محاسبه شده اختلاف بسیار کمی داشته باشند محاسبات قابل قبول است در غیر این صورت با مقادیر محاسبه شده دوباره مراحل ۲ تا ۶ را تکرار می‌کنیم.

در محاسبات فوق افت فشار از یک سینی تا سینی بعد در مقابل فشار کل قابل صرف نظر می‌باشد. در صورتی که نتوان از افت فشار صرف نظر کرد محاسبات متفاوت است که در قسمت های بعد به آن اشاره خواهد شد. حل موازنه جرم و معادله تعادل که در بالا ذکر شد توسط مثال زیر نشان داده شده است.



شکل ۱۴-۵ : برج تقطیر معمولی مربوط به مثال ۱۴-۱

مثال ۱۴-۱ : یک برج تقطیر مجهز به کندانسور کلی و جوش آور تعادلی شامل سه مرحله ایده آل در شکل ۱۴-۵ نشان داده شده است. اگرچه تقسیم کننده جریان در شکل با $j=1$ نشان داده شده است اما مرحله تعادلی محسوب نمی شود. فرض می شود برج ، کندانسور کلی و تقسیم کننده جریان در $P=1 atm$ کار می کند. غلظت خوراک ، مقادیر ثابت تعادل (k_i) و حدس اولیه دبی جریان های خروجی از سینی ها در جدول زیر ارائه شده است.

$$k_i = C_i \exp(-E_i / T^*)$$

Component	X_i	C_i	E_i	Specifications
1	1/3	$4 \times 10^3 / P^{**}$	4.6447×10^3	Total condenser , $P = 1 atm$, boiling point liquid feed ($l_{Fi} = FX_i$) , $N = 4$, $f = 3$, $F = 100 lbmol / hr$,
2	1/3	$8 \times 10^3 / P$	4.6447×10^3	$D = L_1 = L_2 = 50 lbmol / hr$, $L_3 = 150 lbmol / hr$,
3	1/3	$12 \times 10^3 / P$	4.6447×10^3	$V_2 = V_3 = V_4 = 100 lbmol / hr$

* T is in Rankine
** P is in atm

مقدار حدس اولیه دمای سینی ها نیز به صورت زیر است.

$$T_1 = T_2 = T_3 = T_4 = 560 R$$

الف : دبی هر کدام از اجزاء را در فاز مایع و بخار با استفاده از معادله ۱۴-۲۰ و ۱۴-۲۱ بدست آورید.

ب : موارد قسمت الف را با استفاده از معادلات ۱۴-۲۱ و ۱۴-۲۲ بدست آورید.

ضمناً غلظت هر کدام از اجزاء در خوراک $\frac{1}{3}$ است و به صورت مایع اشباع وارد برج می شود.

حل : ابتدا باید درجه آزادی مسئله را بدست آورده و با تعداد اطلاعات موجود در مسئله مقایسه کنیم در صورتی که این دو مقدار با هم برابر باشند مسئله قابل حل خواهد بود. مطابق جدول ۱۲-۲ قسمت B ، درجه آزادی این سیستم به صورت زیر خواهد بود.

$$N_D = 2N + C + 9$$

پس در صورتی مسئله قابل حل است که تعداد اطلاعات $2N + C + 9$ باشد که اطلاعات مسئله به صورت زیر می باشد.

Variable Specification	Number of Variable
Pressure of divider	1
Pressure of stages	N-1
Pressure of condenser	1
Pressure of reboiler	1
Feed stream specification	C+2
Feed stage location	1
Number of total stages	1
Flow rate of D and L ₁	2
Adiabatic stages (excluding boiler which is assumed to be a partial reboiler)	N-1
No heat transfer rate (loss) in divider	1
Condensate temperature (saturated liquid)	1
<hr/>	
2N+C+9	

از آنجا که مقدار درجه آزادی و تعداد اطلاعات مسئله با هم برابر هستند پس مسئله قابل حل خواهد بود که مراحل حل این مسئله به صورت زیر می باشد.

اجزاء ماتریس های A_i و f_i برای استفاده از معادله های ۱۴-۲۰ و ۱۴-۲۱ به صورت زیر می باشند.

$$\begin{array}{llll}
 b_1 = -(A_{1i} + 1) & c_1 = 1 & d_1 = 0 & \\
 a_2 = A_{1i} & b_2 = -(A_{2i} + 1) & c_2 = 1 & d_2 = 0 \\
 a_3 = A_{2i} & b_3 = -(A_{3i} + 1) & c_3 = 1 & d_3 = -F X_F \\
 a_4 = A_{3i} & b_4 = -(A_{4i} + 1) & & d_4 = 0
 \end{array}$$

محاسبات برای مقادیر A_{ji} به صورت زیر است.

Component	$A_{1i} = \frac{L_1}{D}$	k_{2i}, k_{3i}, k_{4i} @ 560 R and 1atm	$A_{2i} = \frac{L_2}{k_{2i} V_2}$	$A_{3i} = \frac{L_3}{k_{3i} V_3} = \frac{3}{2k_{3i}}$
1	1	1	1/2	3/2
2	1	2	1/4	3/4
3	1	3	1/6	1/2

Component	$A_{4i} = \frac{B}{k_{4i} V_4} = \frac{1}{2k_{4i}}$
1	1/2
2	1/4
3	1/6

حل ماتریس با استفاده از معادله‌های ۱۴-۲۰ و ۱۴-۲۱ به صورت زیر خواهد بود.

Component	b_1	c_1	d_1	a_2	b_2	c_2	d_2	a_3	b_3
1	-2	1	0	1	-1.50000	1	0	0.50000	-2.5
2	-2	1	0	1	-1.25000	1	0	0.25000	-1.75
3	-2	1	0	1	-1.16667	1	0	0.16667	-1.5

Component	c_3	d_3	a_4	b_4	c_4	$f_1 = \frac{c_1}{b_1}$	g_1	$a_2 f_1$
1	1	-33.33333	1.5	-1.50000	0	-0.5	0	-0.5
2	1	-33.33333	0.75	-1.25000	0	-0.5	0	-0.5
3	1	-33.33333	0.5	-1.16667	0	-0.5	0	-0.5

Component	$b_2 - a_2 f_1$	$f_2 = \frac{c_2}{b_2 - a_2 f_1}$	$d_2 - a_2 g_1$	$g_2 = \frac{d_2 - a_2 g_1}{b_2 - a_2 f_1}$	$a_3 f_2$	$b_3 - a_3 f_2$	$a_3 g_2$
1	-1.00000	-1.00000	0	0	-0.50000	-2.00000	0
2	-0.75000	-1.33333	0	0	-0.33333	-1.41667	0
3	-0.66667	-1.50000	0	0	-0.25000	-1.25000	0

Component	$d_3 - a_3 g_2$	$f_3 = \frac{c_3}{b_3 - a_3 f_2}$	$g_3 = \frac{d_3 - a_3 g_2}{b_3 - a_3 f_2}$	$a_4 f_3$	$b_4 - a_4 f_3$
1	-33.33333	-0.50000	16.6667	-0.75000	-0.750000
2	-33.33333	-0.70588	23.52941	-0.52941	-0.72059
3	-33.33333	-0.80000	26.66667	-0.40000	-0.76667

Component	$a_4 g_3$	d_4	$x_4 = g_4 = \frac{d_4 - a_4 g_3}{b_4 - a_4 f_3}$	$f_3 x_4$	$x_3 = g_3 - f_3 x_4$
1	24.99999	0	33.33333	-16.66667	33.33333
2	17.64706	0	24.48974	-17.28687	40.81629
3	13.33333	0	17.39131	-13.91305	40.57914

(Note : $v_{4i} = x_4$)

($v_{3i} = x_3$)

Component	$x_2 = g_2 - f_2 x_3$	$x_1 = g_1 - f_1 x_2$	$b_i = A_{4i} v_{4i}$	b_i / d_i
1	33.33333	16.66667	16.66667	1.00000
2	54.42162	27.21087	6.12243	0.225000
3	60.86956	30.43477	2.89855	0.095238
	($v_{2i} = x_2$)	($d_i = x_1$)		

ب : حل مسئله با استفاده از معادلات ۱۴-۲۱ و ۱۴-۲۲ به صورت زیر است.

Component	A_{1i}	$m_1 = A_{1i} + 1$	$f_1 = -\frac{1}{m_1}$	A_{2i}	$A_{2i} m_1$	$m_2 = A_{2i} m_1 + 1$	$f_2 = -\frac{m_1}{m_2}$
1	1	2	-1/2	1/2	1	2	-1
2	1	2	-1/2	1/4	1/2	3/2	-4/3
3	1	2	-1/2	1/6	1/3	4/3	-3/2

Component	A_{3i}	$A_{3i} m_2$	$m_3 = A_{3i} m_2 + 1$	$f_3 = -\frac{m_3}{m_3}$	A_{4i}	$A_{4i} m_3$	$m_4 = A_{4i} m_3 + 1$
1	3/2	3	4	-1/2	1/2	2	3
2	3/4	9/8	17/8	-12/17	1/4	17/32	49/32
3	1/2	2/3	5/3	-4/5	1/6	5/18	23/18

$g_1 = 0$ است و چون $v_{Fi} = 0$ است ، $g_2 = 0$ خواهد شد. پس $l_{Fi} = F X_i$ خواهد بود.

Component	$g_3 = F X_i \frac{m_2}{m_3}$	$A_{3i} g_3$	$\frac{m_3}{m_4}$	$v_{4i} = x_4 = g_4 = A_{3i} g_3 \frac{m_3}{m_4}$
1	16.66666	24.99999	1.33333	33.33333
2	23.52941	17.647057	1.387755	24.48978
3	26.66666	13.33333	1.304347	17.39130

Component	$f_3 x_4$	$v_{3i} = x_3 = g_3 - f_3 x_4$	$v_{2i} = x_2 = g_2 - f_2 x_3$	$d_i = x_i = g_1 - f_1 x_2$
1	-16.66666	33.33333	33.33333	16.66666
2	-17.28690	40.81631	54.42175	27.21087
3	-13.91304	40.57970	60.86956	30.43478

فرمولاسیون موازنه جرم و معادلات تعادل به صورت ماتریس سه قطری برای حل توسط کامپیوتر بسیار مناسب است و این فرمولاسیون برای انواع مختلفی از برجها کاربرد دارد اما تیلی و گدس [۱۰] پیشنهاد می-کنند برای حل دستی معادلات یک برج تقطیر ، استفاده از روش نستینگ^۱ مناسبتر است.

حل موازنه جرم و معادلات تعادل با استفاده از روش نستینگ

در روش نستینگ موازنه جرم معادله ۱۴-۱ بر حسب دبی هر کدام از اجزاء بیان می‌شود که به صورت زیر خواهد بود.

$$\begin{aligned} v_{j+1,i} &= l_{ji} + d_i & (j=1, 2, \dots, f-2) \\ v_{fi} + v_{Fi} &= l_{f-1,i} + d_i \\ v_{j+1,i} &= l_{ji} - b_i & (j=f, f+1, \dots, N-1) \\ F X_i &= d_i + b_i \end{aligned} \quad ۳۹-۱۴$$

با حذف l_{ji} از اولین معادله ۱۴-۳۹ با استفاده از معادله تعادل $l_{ji} = A_{ji} v_{ji}$ (معادله ۱۴-۱۰) و مرتب کردن آن، معادله زیر حاصل می‌شود.

$$\frac{v_{j+1,i}}{d_i} = A_{ji} \left(\frac{v_{ji}}{d_i} \right) + 1 \quad ۴۰-۱۴$$

برای مرحله اول در صورتی که کندانسور کلی باشد اولین معادله از معادلات ۱۴-۳۹ به صورت زیر خواهد بود.

$$\frac{v_{2i}}{d_i} = \frac{l_{1i}}{d_i} + 1 = \frac{L_1 x_{1i}}{D X_{Di}} + 1 = \frac{L_1}{D} + 1 \quad ۴۱-۱۴$$

چون $x_{1i} = X_{Di}$ می‌باشد.

برای کندانسور جزئی $y_{li} = X_{Di}$ و $y_{li} = k_{li} x_{li}$ یا $l_{li} = A_{li} d_i$ است برای مرحله اول خواهیم داشت.

$$\frac{v_{2i}}{d_i} = A_{li} + 1 \quad ۴۲-۱۴$$

که $A_{li} = \frac{L_1}{k_1 D}$ است. با استفاده از معادله ۱۴-۴۱ یا ۱۴-۴۲ و معادله ۱۴-۴۰ حل به روش نستینگ از

قسمت بالای برج شروع شده و تا سینی خوراک ادامه می‌یابد. وقتی که خوراک به صورت مایع اشباع یا زیر مایع اشباع باشد به محض رسیدن به $\frac{v_{fi}}{d_i}$ محاسبات برای بالای برج با پایان می‌رسد و برای حالتی که

خوراک به صورت بخار اشباع یا فوق اشباع باشد به محض رسیدن به $\frac{l_{f-1,i}}{d_i}$ محاسبات برای بالای برج به پایان می‌رسد.

معادلات روش نستینگ برای بخش دفع از جوش‌آور شروع شده و تا خوراک ادامه می‌یابد. برای جوش‌آور معادله تعادل به صورت زیر است.

$$y_{Ni} = k_{Ni} x_{Ni} = k_{Ni} x_{Bi} \quad \text{or} \quad v_{Ni} = S_{Ni} b_i$$

با استفاده از معادله تعادل اخیر، سومین معادله از معادلات ۱۴-۳۹ به صورت زیر در می‌آید.

$$\frac{l_{N-1,i}}{b_i} = \left(\frac{S_{Ni}}{b_i} \right) b_i + 1 = S_{Ni} + 1 \quad ۴۳-۱۴$$

که $S_{Ni} = \frac{k_{Ni} V_N}{B}$ است. برای محاسبه $\frac{l_{N-2,i}}{b_i}$ باید $\frac{v_{j+1,i}}{b_i}$ را توسط معادله تعادل $v_{ji} = S_{ji} l_{ji}$ حذف کنیم که با حذف $\frac{v_{j+1,i}}{b_i}$ عبارت زیر حاصل می‌شود.

$$\frac{l_{ji}}{b_i} = S_{j+1,i} \left(\frac{l_{j+1,i}}{b_i} \right) + 1 \quad 44-14$$

پس از اینکه به $\frac{l_{fi}}{b_i}$ رسیدیم باید پارامتر $\frac{v_{fi}}{b_i}$ را از معادله تعادل زیر محاسبه کنیم.

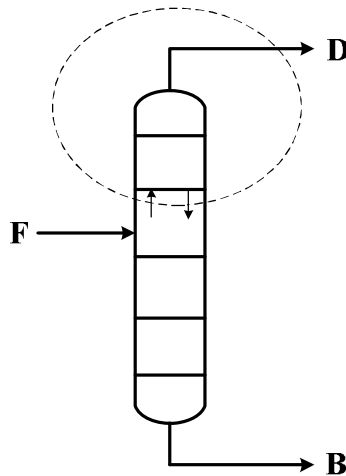
$$\frac{v_{fi}}{b_i} = S_{fi} \left(\frac{l_{fi}}{b_i} \right) \quad 45-14$$

برای حالتی که خوراک به صورت مایع اشباع یا زیر نقطه اشباع وارد برج می‌شود $v_{Fi} = F X_i$ و $v_{Fi} = 0$ است در این حالت مقدار بخاری که از سینی $f-1$ می‌گذرد همان مقدار بخاری است که از سینی f جدا

می‌شود پس می‌توان $\frac{b_i}{d_i}$ را با استفاده از مقادیر $\frac{v_{fi}}{d_i}$ و $\frac{v_{fi}}{b_i}$ بدست آورد.

$$\frac{b_i}{d_i} = \frac{v_{fi}/d_i}{v_{fi}/b_i} \quad 46-14$$

اما معادله ۱۴-۴۶ فقط برای همین حالت است و کلیت ندارد در صورتی که بخواهیم یک معادله کلی بدست آوریم باید برای سیستم زیر یک موازنه بنویسیم.



$$v_{fi} + v_{Fi} = l_{f-1,i} + d_i$$

معادله بالا را بر d_i تقسیم می‌کنیم.

$$\frac{v_{fi}}{d_i} + \frac{v_{Fi}}{d_i} = \frac{l_{f-1,i}}{d_i} + 1$$

سپس معادله اخیر را به صورت زیر مرتب می‌کنیم.

$$\left(\frac{v_{fi}}{b_i}\right)\left(\frac{b_i}{d_i}\right) + \left(\frac{v_{Fi}}{F X_i}\right)\left(\frac{F X_i}{d_i}\right) = \frac{l_{f-1,i}}{d_i} + 1 \quad 47-14$$

از طرفی خواهیم داشت.

$$F X_i = v_{Fi} + l_{Fi} \Rightarrow \frac{v_{Fi}}{F X_i} = 1 - \frac{l_{Fi}}{F X_i} \quad 48-14$$

$$F X_i = d_i + b_i \Rightarrow \frac{F X_i}{d_i} = 1 + \frac{b_i}{d_i} \quad 49-14$$

با جایگزین کردن معادله ۴۹-۱۴ در معادله ۴۷-۱۴ خواهیم داشت :

$$\frac{b_i}{d_i} = \frac{(l_{f-1,i}/d_i) + 1 - (v_{Fi}/F X_i)}{(v_{fi}/b_i) + (v_{Fi}/F X_i)} \quad 50-14$$

با جایگزین کردن معادله ۴۸-۱۴ در صورت معادله ۵۰-۱۴ خواهیم داشت :

$$\frac{b_i}{d_i} = \frac{(l_{f-1,i}/d_i) - (l_{Fi}/F X_i)}{(v_{fi}/b_i) + (v_{Fi}/F X_i)} \quad 51-14$$

معادله ۵۱-۱۴ برای هر شرایطی از خوراک کاربرد دارد در صورتی که خوراک مایع اشباع یا زیر نقطه اشباع باشد معادله ۵۱-۱۴ به معادله ۴۶-۱۴ ساده می شود.

مثال ۱۴-۲: مثال ۱۴-۱ را با استفاده از روش نستینگ حل کنید.

محاسبات قسمت پالایش به صورت زیر است.

Component	$\frac{L_1}{D}$	$\frac{v_{2i}}{d_i} = \frac{L_1}{D} + 1$	$k_{2i} @ 560 R$ and 1atm	$A_{2i} = \frac{L_2}{k_{2i} V_2}$	$\frac{l_{2i}}{d_i} = A_{2i} \left(\frac{v_{2i}}{d_i}\right)$	$\frac{v_{3i}}{d_i} = \frac{l_{2i}}{d_i} + 1$
1	1.0	2.0	1.0	0.5	1.0	2.0
2	1.0	2.0	2.0	0.25	0.5	1.5
3	1.0	2.0	3.0	0.1666667	0.33333333	1.33333333

محاسبات قسمت دفع به صورت زیر است.

Component	$k_{4i} @ 560 R$ and 1atm	$S_{4i} = \frac{k_{4i} V_4}{B}$	$\frac{l_{3i}}{b_i} = S_{4i} + 1$	$k_{3i} @ 560 R$ and 1atm	$S_{3i} = \frac{k_{3i} V_3}{L_3}$	$\frac{v_{3i}}{b_i} = S_{3i} \frac{l_{3i}}{b_i}$
1	1.0	2.0	3.0	1.0	0.6666666	1.999999
2	2.0	4.0	5.0	2.0	1.3333333	6.666666
3	3.0	6.0	7.0	3.0	1.9999999	13.999999

Component	$\frac{b_i}{d_i} = \frac{v_{3i}/d_i}{v_{3i}/b_i}$	$d_i = \frac{FX_i}{1 + b_i/d_i}$
1	1.000000	16.666666
2	0.225000	27.21088
3	0.095238	30.43478
		74.31232

محاسبات ذکر شده به روش نستینگ در حقیقت دومین مرحله از هفت مرحله ذکر شده جهت حل کامل یک مسئله تقطیر چندجزئی برای محلول ایده آل است.

مثال ۱۴-۳: با استفاده از $\frac{b_i}{d_i}$ بدست آمده در مثال ۱۴-۲ مقدار θ را برای برقراری $g(\theta) = 0$ با استفاده از روش نیوتن رافسون (معادلات ۱۴-۲۵ تا ۱۴-۲۸) بدست آورید.
حل: حدس اولیه را $\theta = 0$ در نظر می گیریم.

Component	$\left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{ca}$	$\theta_1 \left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{ca}$	$1 + \theta_1 \left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{ca}$	$(d_i)_{co} = \frac{FX_i}{1 + \theta_1 \left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{ca}}$	$\frac{FX_i}{\left[1 + \theta_1 \left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{ca}\right]^2}$	$\frac{FX_i (b_i/d_i)_{ca}}{\left[1 + \theta_1 \left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{ca}\right]^2}$
1	1	0	1	33.33333	33.33333	33.33333
2	0.225	0	1	33.33333	33.33333	7.49999
3	0.095238	0	1	33.33333	33.33333	3.17459
				100.00000		44.00791

$$g(\theta) = \sum_{i=1}^c (d_i)_{co} - D \quad g'(\theta) = -\sum_{i=1}^c \frac{FX_i (b_i/d_i)_{ca}}{\left[1 + \theta \left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{ca}\right]^2}$$

$$g(\theta) = 100 - 50 = 50 \quad , \quad g'(\theta) = -44.00791$$

بنابراین

با استفاده از روش نیوتن رافسون حدس بعدی به صورت زیر بدست می آید.

$$\theta_2 = \theta_1 - \frac{g(\theta_1)}{g'(\theta_1)} = 0.0 - \frac{50}{(-44.00791)} = 1.13616$$

برای حدس‌های بعدی $\theta = 1.13616$ در نظر گرفته می‌شود که محاسبات به صورت زیر است.

Component	$(\frac{b_i}{d_i})_{ca}$	$\theta_2(\frac{b_i}{d_i})_{ca}$	$1 + \theta_2(\frac{b_i}{d_i})_{ca}$	$(d_i)_{co} = \frac{FX_i}{1 + \theta_2(\frac{b_i}{d_i})_{ca}}$	$\frac{FX_i}{[1 + \theta_2(\frac{b_i}{d_i})_{ca}]^2}$	$\frac{FX_i(b_i/d_i)_{ca}}{[1 + \theta_2(\frac{b_i}{d_i})_{ca}]^2}$
1	1	1.13616	2.13616	15.60432	7.30485	7.30485
2	0.225	0.25564	1.25564	26.54688	21.14211	4.75697
3	$\frac{0.09523}{8}$	0.10821	1.10821	30.07853	27.14154	2.58490
				72.22973		14.64672

$$\sum_{i=1}^c (d_i)_{co} = 72.22973$$

$$g'(\theta_2) = -14.64672$$

$$g(\theta_2) = 22.22973$$

با استفاده از روش نیوتن رافسون خواهیم داشت :

$$\theta_3 = \theta_2 - \frac{g(\theta_2)}{g'(\theta_2)} = 1.13616 - \frac{22.22973}{(-14.64672)} = 2.65389$$

با ادامه دادن محاسبات برای $|g(\theta)| < 0.0001$ خواهیم داشت :

$$\theta = 3.687276$$

نتایج این مسئله برای بدست آوردن غلظت در فاز مایع و بخار مورد استفاده قرار می‌گیرد سپس غلظت مایع و بخار همراه با روش ثابت تعادل (k_b) برای بدست آوردن دما مورد استفاده قرار می‌گیرد.

مثال ۱۴-۴ : با استفاده از نتایج θ در مثال ۱۴-۳ ، غلظت فاز مایع و بخار را بدست آورید سپس حدس‌های بعدی دما را بدست آورید.

حل : ابتدا دمای همه مراحل را R 560 در نظر می‌گیریم.

Component	$\theta(\frac{b_i}{d_i})_{ca}$	$1 + \theta(\frac{b_i}{d_i})_{ca}$	$(d_i)_{ca} \frac{FX_i}{1 + \theta(\frac{b_i}{d_i})_{ca}}$	$X_{Di} = \frac{(d_i)_{ca}}{D}$	$\alpha_{i_i} @ 560 R$	$\alpha_{i_i} X_{Di}$
1	3.68728	4.68728	7.11145	0.14223	1	0.14223
2	0.82964	1.82964	18.21854	0.36437	2	0.72874
3	0.35117	1.35117	24.67001	0.49340	3	1.48020
			50.00000			2.35117

پس می‌توان دما را به صورت زیر بدست آورد.

$$k_{1b} = \frac{1}{\sum_{i=1}^c \alpha_{1i} X_{Di}} = \frac{1}{2.35117} = 0.42532 = C_b \exp(-E_b/T_1)$$

$$T_1 = \frac{E_b}{\ln(C_b/k_{1b})} = \frac{4.6447 \times 10^3}{\ln(4.0 \times 10^3/0.42532)} = 507.68 \text{ R} = 47.68 \text{ }^\circ\text{F}$$

برای محاسبه y_{2i} باید v_{ji} و d_i را از مثال ۱۴-۱ استخراج کنیم تا بتوان $\frac{v_{ji}}{d_i}$ را بدست آورد سپس این کسر

در $(d_i)_{co}$ ضرب می‌شود.

Component	$\left(\frac{v_{2i}}{d_i}\right)_{ca} (d_i)_{ca}$	$y_{2i} = \frac{(v_{2i}/d_i)_{ca} (d_i)_{ca}}{\sum_{i=1}^c (v_{2i}/d_i)_{ca} (d_i)_{ca}}$	$\alpha_{1i} @ 560 \text{ R}$	$\frac{y_{2i}}{\alpha_{2i}}$	$\left(\frac{v_{3i}}{d_i}\right)_{ca} (d_i)_{ca}$
1	14.22290	0.14223	1	0.14223	14.2229
2	36.43709	0.36437	2	0.18219	27.3278
3	49.34002	0.49340	3	0.16447	32.8933
	100.00001			0.48889	74.4440

$$k_{2b} = \sum_{i=1}^c \frac{y_{2i}}{\alpha_{2i}} = 0.48889 = C_b \exp(-E_b/T_2)$$

$$T_2 = \frac{E_b}{\ln(C_b/k_{2b})} = \frac{4.6447 \times 10^3}{\ln(4.0 \times 10^3/0.48889)} = 515.52 \text{ R} = 55.52 \text{ }^\circ\text{F}$$

Component	$y_{3i} = \frac{(v_{3i}/d_i)_{ca} (d_i)_{co}}{\sum_{i=1}^c (v_{3i}/d_i)_{ca} (d_i)_{co}}$	$\alpha_{3i} @ 560 \text{ R}$	$\frac{y_{3i}}{\alpha_{3i}}$
1	0.19105	1	0.19105
2	0.36709	2	0.18355
3	0.44185	3	0.14728
			0.52188

$$k_{3b} = \sum_{i=1}^c \frac{y_{3i}}{\alpha_{3i}} = 0.52188 = C_b \exp(-E_b/T_3)$$

$$T_3 = \frac{E_b}{\ln(C_b/k_{3b})} = \frac{4.6447 \times 10^3}{\ln(4.0 \times 10^3/0.52188)} = 519.29 \text{ R} = 59.29^\circ \text{ F}$$

مثال ۱۴-۵: با استفاده از غلظت‌ها و دماهای بدست آمده در مثال‌های ۱۴-۳ و ۱۴-۴ و جدول آنتالپی زیر مقادیر Q_c ، L_2 و V_3 را بدست آورید.

Component	h_i (Btu/lb mol)	H_i (Btu/lb mol)
1	$h_1 = 10000 + 30 T^*$	$H_1 = 17000 + 30 T^*$
2	$h_2 = 8000 + 20 T$	$H_2 = 13000 + 20 T$
3	$h_3 = 500 + T$	$H_3 = 800 + T$

* T is in $^\circ \text{ F}$

برای کندانسور کلی $h_{1i} = H_{Di}$ ، $x_{1i} = X_{Di}$ و $y_{2i} = X_{Di}$ می‌باشد پس خواهیم داشت:

$$Q_C = L_1 \sum_{i=1}^c (H_{2i} - h_{1i}) x_{1i} + D \sum_{i=1}^c (H_{2i} - H_{Di}) X_{Di} = (L_1 + D) \sum_{i=1}^c (H_{2i} - h_{1i}) X_{Di}$$

Component	H_{2i} @ 55.52° F	h_{1i} @ 47.68° F	$H_{2i} - h_{1i}$	$(H_{2i} - h_{1i}) X_{Di}$	H_{3i} @ 59.29° F	h_{2i} @ 55.52° F
1	18665.60	11430.40	7235.20	1029.06	18778.7	11665.60
2	14110.40	8953.60	5156.80	1878.98	14185.8	9110.40
3	855.52	547.68	307.84	151.89	859.29	555.52
				3059.93		

$$Q_C = (100)(3059.93) = 305993 \text{ Btu/hr}$$

و محاسبات L_2 به صورت زیر است.

$$L_2 = \frac{Q_C - D \left[\sum_{i=1}^c (H_{3i} - h_{1i}) X_{Di} \right]}{\sum_{i=1}^c (H_{3i} - h_{2i}) x_{2i}}$$

Component	$\left(\frac{l_{2i}}{d_i}\right)_{ca} (d_i)_{co}$	$x_{2i} = \frac{(l_{2i}/d_i)_{ca} (d_i)_{co}}{\sum_{i=1}^c (l_{2i}/d_i)_{ca} (d_i)_{co}}$	$(H_{3i} - h_{1i})$	$(H_{3i} - h_{1i}) X_{Di}$	$H_{3i} - h_{2i}$
1	7.11145	0.290927	7348.30	1045.15	7113.10
2	9.10927	0.372657	5232.20	1906.46	5075.40
3	8.22336	0.336415	311.61	153.75	303.77
	<u>24.44408</u>			<u>3105.36</u>	

Component	$(H_{3i} - h_{1i}) x_{2i}$
1	2069.39
2	1819.38
3	102.19
	<u>4062.96</u>

$$L_2 = \frac{305993 - 50 \times (3105.36)}{4062.96} = 37.10 \text{ lbmol/hr}$$

با استفاده از یک موازنه کلی V_3 بدست می‌آید.

$$V_3 = L_2 + D = 87.10 \text{ lbmole/hr}$$

مثال ۱۴-۶: روشی را که در مثال ۱۴-۱ تا ۱۴-۵ نشان داده شد را تا همگرایی تکرار کنید.

جدول ۱۴-۱: حل مثال ۱۴-۶ با استفاده از روش θ ، روش ثابت تعادل (k_b) و روش غلظت ثابت

Stage	Calculated values of the temperature, °F Trail					
	1	2	3	4	5	6
1	47.67480	47.57593	47.64648	47.68652	47.70581	47.71484
2	55.52295	55.35938	55.48169	55.55078	55.58423	55.59985
3	59.28833	60.60938	60.54272	60.50366	60.48169	60.46973
4	68.15991	68.31323	68.20361	68.14209	68.11208	68.09814
D (calculated)	74.31046	49.53528	50.02797	50.01648	55.00912	50.00485
θ	3.686828	0.9772162	1.001385	1.000813	1.000451	1.000240

Calculated values of the temperature, °F Trail

Stage	7	8	9	10	11	12
1	47.71924	47.72119	47.72217	47.72241	47.72266	47.72266
2	55.60718	55.61060	55.61279	55.61279	55.61328	55.61328
3	60.46313	60.45972	60.45801	60.45728	60.45679	60.45654
4	68.09155	68.08862	68.08716	68.08643	68.08618	68.08618
D (calculated)	50.00258	50.00131	50.00060	50.00290	50.00014	50.00005
θ	1.000128	1.000063	1.000031	1.000014	1.000008	1.000004

Final flow rates

Component	b_i	d_i
1	26.15640	7.176938
2	15.14437	18.18893
3	8.699208	24.63411

حل : مشخصه‌های همگرایی و ریز محاسبات در جدول ۱۴-۱ نشان داده شده است.

فاکتورهای همگرایی روش θ ، روش ثابت تعادل (k_b) و غلظت ثابت

روش همگرایی θ یک روش تکرار است که با مرتب نمودن معادلات مربوط به برج به طور مناسب ، باعث همگرایی آنها می‌شود. همچنین وقتی از روش ثابت تعادل (k_b) برای پیش‌بینی دما و از روش غلظت ثابت برای پیش‌بینی دبی مایع و بخار استفاده می‌شود حل مسئله بسیار پایدار و همگرا می‌شود. این روش برای برج‌های معمولی و پیچیده کاربرد دارد و از آن به عنوان یک روش سریع یاد می‌شود.

اگرچه همگرایی روش θ ، روش ثابت تعادل (k_b) و روش غلظت ثابت را توسط روابط ریاضی نمی‌توان اثبات کرد اما یک مورد از مثال‌های حل شده را جهت بررسی پارامترهای این روش مورد مطالعه قرار می‌دهیم. برای این منظور مثال ۱۴-۷ را مورد مطالعه قرار می‌دهیم شرایط این مثال در جدول ۱۴-۴ نشان داده شده است.

مثال ۱۴-۷: خوراکی با ترکیب نشان داده شده در جدول ۱۴-۴ به صورت مایع اشباع وارد برج می‌شود. برج دارای ۱۳ سینی و شامل کندانسور جزئی در فشار 300 psi کار می‌کند محصول بالای برج $D = 31.6 \text{ lbmole/hr}$ و $V_2 = 94.8 \text{ lbmole/hr}$ می‌باشد. داده‌های تعادلی و آنتالپی در جدول ۱۴-۲ و جدول ۱۴-۳ داده شده است پروفایل اولیه دما به صورت خطی، از $T_1 = 610 \text{ R}$ تا $T_{13} = 910 \text{ R}$ در نظر گرفته می‌شود. دبی بخار $V_j = 94.8$ ($j = 2, 3, \dots, 13$) در نظر گرفته شده و دبی مایع با استفاده از موازنه جرم بدست می‌آید. جزء ایزو بوتان ($i-C_4H_{10}$) به عنوان ماده مبنا است و ثابت‌های a, b موجود در معادله ۱۴-۳۱ بر مبنای مقادیر k در دماهای 510 R و 960 R محاسبه می‌شوند.

جدول ۱۴-۲: داده‌های تعادلی

$$P = 300 \text{ lb}_f / \text{in}^2 \text{ abs}, (k_i / T)^{1/3} = a_{1i} + a_{2i}T + a_{3i}T^2 + a_{4i}T^3 \quad (T \text{ in } R)$$

Component	$a_1 \times 10^2$	$a_2 \times 10^5$	$a_3 \times 10^8$	$a_4 \times 10^{12}$
CH ₄	32.718139	-9.6951405	6.9229334	-47.361298
C ₂ H ₄	-5.177995	62.124576	-37.562082	8.0145501
C ₂ H ₆	-9.8400210	67.545943	-37.459290	-9.0732459
C ₃ H ₆	-25.098770	102.39287	-75.221710	153.84709
C ₃ H ₈	-14.512474	53.638924	-5.3051604	-173.58329
i-C ₄ H ₈	-10.104481	21.400418	38.564266	-353.65419
i-C ₄ H ₁₀	-18.967651	61.239667	-17.891649	-90.855512
n-C ₄ H ₁₀	-14.181715	36.866353	16.521412	-248.23843
i-C ₅ H ₁₂	-7.5488400	3.2623631	58.507340	-414.92323
n-C ₅ H ₁₂	-7.5435390	2.0584231	59.138344	-413.12409
n-C ₆ H ₁₄	1.1506919	-33.885839	97.795401	-542.35941
n-C ₇ H ₁₆	5.5692758	-50.705967	112.17338	-574.89350
n-C ₈ H ₁₈	7.1714400	-52.608530	103.72034	-496.46551
400	2.5278960	-17.311330	33.502879	-126.25039
500	3.3123291	-16.652384	24.310911	-64.148982

جدول ۱۴-۳: داده‌های آنتالپی

$P = 300 \text{ lb}_f / \text{in}^2$

$(h_i)^{1/2} = c_{1i} + c_{2i} T + c_{3i} T^2 \text{ (T in R), Btu/lbmole}$

$(H_i)^{1/2} = e_{1i} + e_{2i} T + e_{3i} T^2 \text{ (T in R), Btu/lbmole}$

Component	c_1	$c_2 \times 10$	$c_3 \times 10^4$	e_1	$e_2 \times 10^4$	$e_3 \times 10^6$
CH ₄	-17.899210	1.7395763	-3.7596114	44.445874	501.04559	7.3207219
C ₂ H ₄	-7.2915000	1.5411962	-1.6088376	56.79638	615.93154	2.4088730
C ₂ H ₆	-8.4857000	1.6286636	-1.9498601	61.334520	588.75430	11.948654
C ₃ H ₆	-12.427900	1.8834652	-2.4839140	71.828480	658.55130	11.299585
C ₃ H ₈	-14.500060	1.9802223	-2.9048837	81.795910	389.81919	36.470900
i-C ₄ H ₈	-16.553450	2.1618650	-3.1476209	139.17444	-822.39488	120.39298
i-C ₄ H ₁₀	-16.5534050	2.1618650	-3.1476209	147.65414	-1185.2942	152.87778
n-C ₄ H ₁₀	-20.298110	2.3005743	-3.8663417	152.66798	-1153.4842	146.64125
i-C ₅ H ₁₂	-23.356460	2.5017453	-4.3917897	130.96679	-197.98604	82.549947
n-C ₅ H ₁₂	-24.371540	2.5636200	-4.6499694	128.90152	2.0509603	64.501496
n-C ₆ H ₁₄	-23.870410	2.6768089	-4.4197793	85.834950	1522.3917	-34.018595
n-C ₇ H ₁₆	-25.314530	2.8246389	-4.5418718	94.682620	1479.5387	-19.105299
n-C ₈ H ₁₈	-22.235050	2.8478429	-3.8850819	106.32806	1328.3949	1.6230737
400	-203.32192	6.3932857	-21.611909	72.328160	1893.3822	-59.003314
500	1.9205300	3.0179232	-2.2183809	138.49658	1497.8171	18.641269

Based on data taken from J.B.Maxwell : Data Book on Hydrocarbon , D.Van Nostrand Company , New York , 1955

جدول ۱۴-۴ : مشخصات خوراک مثال ۱۴-۷

Component	$F X_i$
CH ₄	2.0
C ₂ H ₆	10.0
C ₃ H ₆	6.0
C ₃ H ₈	12.5
i-C ₄ H ₁₀	3.5
n-C ₄ H ₁₀	15.0
n-C ₅ H ₁₂	15.2
n-C ₆ H ₁₄	11.3
n-C ₇ H ₁₆	9.0
n-C ₈ H ₁₈	8.5
400	7.0

پروفایل دمای بدست آمده با استفاده از غلظت‌های تصحیح شده و روش θ در جدول ۱۴-۵ نشان داده شده است. همچنین مقادیر D , θ محاسبه شده در انتهای هر تکرار نیز در جدول ۱۴-۵ آمده است. دبی بخار محاسبه شده با استفاده از روش غلظت ثابت و دماهای محاسبه شده (با استفاده از روش k_b) نیز در جدول ۱۴-۶ نشان داده شده است. و در نهایت مقادیر b_i و d_i محاسبه شده نیز در جدول ۱۴-۷ آمده است.

جدول ۱۴-۵ : توزیع دما و محاسبات D و θ

Stage	Temperature profiles (R)					
	Trial					
	1	2	3	4	5	6
1 (distillate)	573.59	567.84	567.56	567.56	567.56	567.56
2	596.60	590.67	594.54	594.13	594.42	594.33
3	607.01	606.81	612.61	611.63	611.99	611.89
4	612.65	627.85	631.10	629.91	630.26	630.25
5 (feed)	617.02	695.72	658.24	670.53	665.95	668.04
6	647.02	709.68	681.56	691.68	687.53	689.20

7	670.05	717.92	697.73	705.76	702.37	703.69
8	689.59	724.20	709.70	716.11	713.40	714.46
9	707.47	730.07	719.35	724.47	722.32	723.17
10	725.93	737.58	728.94	732.96	731.25	731.92
11	747.73	749.93	742.09	745.17	743.78	744.32
12	777.47	774.19	766.54	768.84	767.70	768.13
13 (bottoms)	833.68	833.41	825.47	827.21	826.36	826.68

D (calculated)	41.5475	30.4606	32.3414	31.37940	31.6940	31.5598
θ	22.4131	0.303676	2.34622	0.835224	1.07461	0.968934

Temperature profiles (R)

Trial

Stage	7	8	9	10	11	12
1 (distillate)	567.57	567.57	567.57	567.57	567.57	567.57
2	594.38	594.36	594.37	594.37	594.37	594.37
3	611.95	611.92	611.93	611.93	611.93	611.93
4	630.27	630.26	630.27	630.27	630.27	630.26
5 (feed)	667.14	667.53	667.37	667.44	667.41	667.41
6	688.47	688.79	688.65	688.71	688.68	688.69
7	703.11	703.36	703.25	703.30	703.28	703.28
8	714.00	714.19	714.11	714.14	714.13	714.13
9	722.79	722.95	722.88	722.91	722.90	722.90
10	731.63	731.75	731.70	731.72	731.71	731.71
11	744.08	744.18	744.13	744.15	744.15	744.15
12	767.94	768.02	767.99	768.00	767.99	768.00
13 (bottoms)	826.53	826.59	826.56	826.58	826.57	826.57
D (calculated)	31.6175	31.5925	31.6031	31.5986	31.60057	31.59977
θ	1.01356	0.994182	1.00243	0.668940	1.00042	1.00000

جدول ۱۴-۶: دبی بخار مراحل تئوری با استفاده از موازنه جرم و روش غلظت ثابت برای مثال ۱۴-۷

Vapor rates (lbmole / hr)						
Trial						
Stage	1	2	3	4	5	6
2	94.80	94.80	94.80	94.80	94.80	94.80
3	94.63	93.23	93.06	93.29	93.29	93.29
4	94.13	88.11	89.31	89.41	89.45	89.41
5	93.13	72.10	82.71	79.25	80.51	79.94
6	140.71	108.19	117.18	109.35	111.52	110.55
7	143.80	125.43	129.81	125.40	126.79	126.13
8	146.60	137.24	138.81	136.34	137.20	136.78
9	148.52	145.60	145.39	144.16	144.60	144.38
10	148.03	150.07	149.13	148.83	148.94	148.87
11	144.63	150.08	149.09	149.59	149.43	149.50
12	137.74	143.88	142.75	143.97	143.60	143.77
13	120.86	123.86	122.24	123.93	123.33	123.60

Vapor rates (lbmole / hr)						
Trial						
Stage	7	8	9	10	11	12
2	94.80	94.80	94.80	94.80	94.80	94.80
3	93.29	93.29	93.29	93.29	93.29	93.29
4	89.41	89.41	89.42	89.42	89.42	89.42
5	80.18	80.08	80.10	80.10	80.11	80.11
6	110.92	110.75	110.82	110.79	110.81	110.80
7	126.36	126.25	126.29	126.24	126.28	126.27
8	136.91	136.84	136.87	136.86	136.86	136.86
9	144.44	144.41	144.42	144.42	144.42	144.41
10	148.89	148.87	148.88	148.88	148.88	148.87

11	149.47	149.48	149.47	149.48	149.47	149.47
12	143.70	143.73	143.72	143.72	143.72	143.72
13	123.49	123.54	123.52	123.53	123.52	123.52

جدول ۱۴-۷: دبی نهایی اجزاء در محصول بالا و پایین برج برای مثال ۱۴-۷

Component	d_i	b_i
CH ₄	0.200000×10	0.11163×10^{-8}
C ₂ H ₆	0.999990×10	0.11627×10^{-3}
C ₃ H ₆	0.597230×10^2	0.27665×10^{-1}
C ₃ H ₈	0.12346×10^2	0.15358
i-C ₄ H ₁₀	0.74216	0.27578×10
n-C ₄ H ₁₀	0.53699	0.14462×10^2
n-C ₅ H ₁₂	0.20153×10^{-2}	0.15197×10^2
n-C ₆ H ₁₄	0.94035×10^{-5}	0.11299×10^2
n-C ₇ H ₁₆	0.94025×10^{-5}	0.89999×10
n-C ₈ H ₁₈	0.63427×10^{-7}	0.84999×10
400	0.65162×10^{-12}	0.69999×10

$$Q_C = 3.9628 \times 10^5 \text{ Btu/hr}$$

$$Q_R = 1.3278 \times 10^6 \text{ Btu/hr}$$

$$\text{Convergence criterion : } |g(1)| \leq 10^{-5}$$

در این مسئله برای همگرا شدن باید ۱۲ مرحله مسئله را تکرار کنیم. با حل مسائل مختلف می‌توان متوجه شد که شرایط ترمودینامیکی خوراک، تعداد سینی‌ها، حدس اولیه دمای سینی‌ها و حدس اولیه دبی مایع و بخار تاثیر محسوسی بر تعداد مراحل سعی و خطا ندارد اما وقتی که خوراک از موادی تشکیل شده باشد که دمای جوش آنها بسیار از هم دور باشد باعث زیاد شدن تعداد تکرارها خواهد شد.

استفاده از ماده‌ای با دمای جوش متوسط در خوراک به عنوان مبنا معمول است. استفاده از مواد سبک‌تر از این ماده باعث می‌شود که دمای سینی‌ها بیش از مقدار آن پیش‌بینی گردد و استفاده از ماده سنگین‌تر از این

ماده باعث می‌شود که دمای سینی‌ها کمتر از مقدار آن پیش‌بینی شود. اما استفاده از ماده با دمای جوش متوسط در خوراک این مشکل را برطرف می‌سازد.

مقایسه روش همگرایی θ و روش حل مستقیم

برخی از فاکتورهای روش همگرایی θ مورد بررسی قرار گرفت در روش حل مستقیم، محاسبه غلظت‌ها متفاوت از روش θ است. در روش مستقیم بجای معادله ۱۴-۲۹ از معادلات زیر برای بدست آوردن غلظت استفاده می‌شود.

$$x_{ji} = \frac{(l_{ji}/d_i)_{ca} (d_i)_{ca}}{\sum_{i=1}^c (l_{ji}/d_i)_{ca} (d_i)_{ca}} \quad ۵۲-۱۴$$

$$y_{ji} = \frac{(v_{ji}/d_i)_{ca} (d_i)_{ca}}{\sum_{i=1}^c (v_{ji}/d_i)_{ca} (d_i)_{ca}} \quad ۵۳-۱۴$$

با استفاده از مقایسه این دو معادله با معادلات ۱۴-۲۵، ۱۴-۲۶ و ۱۴-۲۹ مشهود است که در روش حل مستقیم برای حدس‌های مختلف در معادله ۱۴-۲۶ مقدار θ برابر یک در نظر گرفته شده است.

در روش حل مستقیم با ثابت نگه داشتنی $\frac{L}{V}$ ، هر چقدر پروفایل دمای حدس زده شده بیشتر باشد مقدار محاسبه شده برای D بیشتر از مقدار مورد نظر آن خواهد شد و بالعکس هر چقدر پروفایل دما کمتر در نظر گرفته شود مقدار محاسبه شده برای D کمتر از مقدار آن خواهد شد.

با توجه به معادلات ۱۴-۲۶ و ۱۴-۲۷، اگر مجموع مقادیر d_i بزرگتر از D شود یک مقدار مثبت و بزرگتر از یک برای θ وجود دارد که شرط معادله ۱۴-۲۷ $\{g(\theta)=0\}$ را برقرار می‌سازد و اگر مجموع مقادیر d_i کوچکتر از D شود نیز یک مقدار مثبت و کوچکتر از یک برای θ وجود دارد که شرط معادله ۱۴-۲۷ $\{g(\theta)=0\}$ را برقرار می‌کند. پس می‌توان نتیجه گرفت اگر پروفایل دما در حدس قبلی پایین در نظر گرفته شود مقدار θ آن نیز مثبت و کوچکتر از یک خواهد شد و در صورتی که پروفایل دما بالا در نظر گرفته شود مقدار θ آن بزرگتر از یک خواهد شد.

اثر فشار بر محاسبات

در محاسبات ذکر شده اثر افت فشار از یک سینی به سینی دیگر و تاثیر آن بر k_{ji} ، H_{ji} و h_{ji} در نظر گرفته نشده است اثر فشار بر این سه پارامتر در زیر اشاره شده است.

برای یک مخلوط ایده‌آل مقادیر ثابت تعادل (k_{ji}) و آنتالپی اجزاء در فاز بخار (H_{ji}) و آنتالپی اجزاء در فاز مایع (h_{ji}) تابعی از دما و فشار هر سینی می‌باشد. نحوه بدست آوردن این سه پارامتر در کتاب‌های مرجع و منابع ترمودینامیکی موجود است. برای بررسی تاثیر فشار بر مقادیر ثابت تعادل (k_{ji}) و آنتالپی دو حالت کلی زیر در نظر گرفته می‌شود. ابتدا یک برج با فشار بالا را در نظر می‌گیریم که افت فشار در مقابل فشار کل

قابل صرف نظر است. در چنین حالتی می توان یک فشار واحد را برای برج در نظر گرفت و محاسبات را انجام داد و مقادیر ثابت تعادل (k_{ji}) و آنتالپی را فقط تابعی از دما در نظر گرفت. برای یک برج که در فشار پایین کار می کند مانند برج های خلاء می توان از اثر فشار بر آنتالپی صرف نظر کرد چون در این حالت بخار یا گاز به عنوان یک گاز ایده آل عمل می کند و آنتالپی فقط تابع دماست. اما اثر فشار بر مقادیر ثابت تعادل (k_i) را نمی توان صرف نظر کرد. چون در این حالت بخار یا گاز شبیه به گاز ایده آل است مقادیر k به صورت زیر است.

$$k_i \cong \frac{P_i}{p} \quad 54-14$$

فرض کنید مقادیر k برای جزء i در فشار کل P_b برای دماهای مختلف بدست آمده است می توان این مقادیر را در فشار P_j ، روی یک منحنی بر حسب دما بدست آورد (تابعیت k را نسبت به دما بدست می آوریم) مقادیر k_{ji} در فشار P_j و T_j را می توان با استفاده از مقادیر $k_{ji}(P_b, T_j)$ با یک تقریب خوب به صورت زیر بدست آورد.

$$k_{ji}(P_j, T_j) = \frac{P_b}{P_j} k_{ji}(P_b, T_j) \quad 55-14$$

اصلاح روابط برای وجود مواد بی اثر

روش θ برای حالتی است که یک جزء بین محصول بالا و پایین برج توزیع می شود برای هر جزء مقدار $d_i > 0$ و $b_i > 0$ می باشد. یک ماده بی اثر ماده ای است که فقط در یک محصول ظاهر می شود. اگر این ماده بی اثر بسیار سبک باشد در محصول بالای برج $(b_i = 0, d_i = F X_i)$ ظاهر می شود و در صورتی که ماده بی اثر سنگین باشد در محصول پایین برج $(d_i = 0, b_i = F X_i)$ ظاهر خواهد شد. برای اینکه در روابط ۱۴-۲۶ و ۱۴-۲۹ در مخرج کسر مقادیر کوچک $(d_i)_{ca}$ ظاهر نشود بهتر است $(d_i)_{ca}$ به صورت زیر تعریف شود.

$$(d_i)_{co} = (d_i)_{ca} p_i \quad 56-14$$

که P_i به صورت زیر تعریف می شود.

$$p_i = \frac{F X_i}{(d_i)_{ca} + \theta (b_i)_{ca}} \quad 57-14$$

برای حالتی که ماده بی اثر سنگین باشد $(d_i)_{ca} = 0$ می شود و در این حالت با توجه به روابط ۱۴-۵۷ مقدار P_i محدود خواهد بود پس مطابق رابطه ۱۴-۵، $(d_i)_{co} = 0$ بدست می آید و با استفاده از یک موازنه جرم ساده خواهیم داشت :

$$(b_i)_{ca} = (b_i)_{co} = F X_i$$

حال برای اینکه چنین مشکلی در معادله ۱۴-۲۹ بوجود نیاید این معادله را به صورت زیر مرتب می کنیم.

$$x_{ji} = \frac{(l_{ji})_{ca} P_i}{\sum_{i=1}^c (l_{ji})_{ca} P_i} \quad 58-14$$

$$y_{ji} = \frac{(v_{ji})_{ca} P_i}{\sum_{i=1}^c (v_{ji})_{ca} P_i}$$

که P_i با استفاده از معادله ۵۷-۱۴ محاسبه می‌شود. به طور مشابه تابع $g(\theta)$ را نیز بر حسب P_i می‌توان به صورت زیر تعریف کرد.

$$g(\theta) = \sum_{i=1}^c (d_i)_{ca} p_i - D \quad 59-14$$

انواع دیگر مسائل

فرمولاسیون ذکر شده برای حالتی است که جریان محصول بالا و پایین برج و جریان برگشتی مشخص باشد. مسئله ممکن است به صورت‌های زیر بیان شود.

۱- جریان برگشتی و جزء مولی محصول بالای برج معلوم باشد. در این حالت نیز همان مراحل تکرار خواهند شد با این تفاوت که $g(\theta)$ به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$g(\theta) = \frac{\sum_k (d_i)_{co}}{\sum_k (d_i)_{spec}} - 1$$

یا

$$g(\theta) = \frac{\sum_k X_{Di}}{\sum_k (X_{Di})_{spec}} - 1$$

۲- جریان برگشتی (L_1) و نقطه شبنم (T_1) محصول بالای برج معلوم باشد. در این حالت نیز همان مراحل تکرار خواهد شد با این تفاوت که $g(\theta)$ به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$g(\theta) = \frac{1}{D_{co}} \left[\sum_{i=1}^c (d_i)_{co} / k_{li} \right] - 1 \quad D_{co} = \sum_{i=1}^c (d_i)_{co}$$

k_{li} : مقدار k برای جزء i در دمای T_1 می‌باشد.

منابع

- 1- Boston .J. F and S. L. Sullivan, Jr.: "An Improved Algorithm for Solving Mass Balance Equations in Multistage Separations Processes," *Can. J. Chem. Eng.* 50:663 (1972).
- 2- Billingsley .D. S , "On the Equations oh Holland in the Solution of Problems in Multicomponent Distillation," *IBM J. Res. Dev.*, 14:33 (1970).
- 3- Brice Carnahan, H. A. Luther, and J. O. Wilkes: *Applied Numerical Methods*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1964.

- 4- Fenske .M. R, "Fractionation of Straight-Run Pennsylvania Gasoline," *Ind. Eng. Chem.*, 24:482 (1932).
- 5- Holland .C. D and G. P. Pendon: "Splve More Distillation Paroblems: Part I. Improvements Give Exact Answers," *Hydrocarbon Process*, 53:148 (1974).
- 6- Eubank. P. T , " Solve More Distillation Problems : Part I I . Partial molar Enthalepies calculated ," *Hydrocarbon Process.*, 53:176 (1974).
- 7- Lewis. W. K and G. L. Matheson, " Studies in Distillation–Design of Rectifying Columns for Natural and Refinery Gasoline," *Ind. Eng. Chem.*, 24:494(1932).
- 8- Lyster. W. N, S. L. Sullivan, Jr., D. S. Billingsley, and C. D. Holland: "Figure Distillation This New Way: Part I—New Convergence Method Will Handle Many Cases," *Pet. Refiner* ,38 (6):221 (1959).
- 9- Nartker. T. A, J. M. Srygley, and C. D. Holland, "Solution of Problems Involving Systems of Distillation Columns," *Can. J. Chem. Eng.*, 44:217 (1966).
- 10- Thiele .E. W and R. L. Geddes, "Computation of Distillation Apparatus for Hydrocarbon Mixture," *Ind. Eng. Chem.*, 25: 289 (1933).

مسائل

- ۱- موارد زیر را تا همگرایی کامل ادامه دهید.
الف : محاسبات سعی و خطای مثال ۱۴-۳ را با همان حدس اولیه تا همگرایی کامل تکرار نمایید.
ب : محاسبات سعی و خطای مثال ۱۴-۴ را با همان حدس اولیه تا همگرایی کامل جهت بدست آوردن T_4 ، Q_R ، V_4 و L_3 انجام دهید.

۲- در صورتی که در مثال ۱۴-۱ مقادیر k به صورت زیر باشند.

Component	k_i^*
1	$0.01 T/P$
2	$0.0002 T^2/P$
3	$0.03 T/P$

* T is in $^{\circ}F$ and P is in atm

- الف : نشان دهید مقدار θ بدست آمده $\theta = 3.687276$ خواهد بود.
ب : نشان دهید مقادیر دماها برای سینی‌های مختلف به صورت زیر است.
 $T_1 = 42.53^{\circ}F$ ، $T_2 = 48.89^{\circ}F$ ، $T_3 = 52.19^{\circ}F$ ، $T_4 = 60.65^{\circ}F$
از روش k_b برای حل مسئله استفاده شود و $k_b = k_1$ در نظر گرفته شود.

۳- 100 grmole/hr خوراکی با شرایط زیر وارد برج تقطیر می‌شود. برج دارای دو سینی و مجهز به جوش‌آور کلی و کندانسور جزئی می‌باشد. می‌خواهیم نسبت d_i/b_i و دبی محصولات خروجی را بدست آوریم در صورتی که از رابطه فنسکی جهت توزیع محصولات استفاده کنیم نتایج زیر حاصل می‌شود.

Component	X_i	α_i	$\frac{b_i}{d_i}$	Other specifications
1	1/3	1	16	N=3, partial condenser
2	1/3	2	1	F=100mol/h, and
3	1/3	3	0.1975	Total reflex operation

ضمناً دبی محصول بالای برج $D = 56.2629 \text{ grmole/hr}$ بدست می‌آید. با استفاده از روش همگرایی θ ، توزیع محصولات بین بالا و پایین برج و همچنین دبی محصولات را بدست آورید. (حدس اولیه $\theta = 0.5$ در نظر گرفته شود)

۴- نشان دهید وقتی جریان برگشتی به برج (L_1) و دبی اجزاء در محصول بالای برج $[(d_i)_{spec}]$ معلوم باشد تابع g به صورت زیر خواهد بود.

$$g(\theta) = \frac{\sum_k (d_i)_{co}}{\sum_k (d_i)_{spec}} - 1$$

مقدار $(d_i)_{co}$ با استفاده از رابطه ۲-۵۷ بدست می‌آید.

۵- نشان دهید وقتی که جریان برگشتی به برج (L_1) و همچنین دمای شبنم محصول بالای برج (T_1) مشخص باشد تابع g به صورت زیر خواهد بود.

$$g(\theta) = \frac{1}{D_{co}} \left[\sum_{i=1}^c (d_i)_{co} / k_{1i} \right] - 1$$

مقدار $(d_i)_{co}$ با استفاده از رابطه ۲-۵۷ بدست می‌آید و D_{co} به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$D_{co} = \sum_{i=1}^c (d_i)_{co}$$

۶- نشان دهید وقتی که جریان برگشتی به برج (L_1) و همچنین کسر مولی اجزاء در محصول بالای برج مشخص باشد تابع g به صورت زیر خواهد بود.

$$g(\theta) = \frac{\sum_k X_{Di}}{\sum_k (X_{Di})_{spec}} - 1$$

ضمناً مقادیر X_{Di} به صورت زیر تعریف می شوند.

$$X_{Di} = (d_i)_{co} / D_{co}$$

فصل پانزدهم

کاربرد روش همگرایی θ برای برج‌های پیچیده

مقدمه

یک برج تقطیر که فقط یک ورودی و دو محصول خروجی داشته باشد را برج معمولی گویند. هرگاه علاوه بر جریان‌های ذکر شده برج دارای یک جریان ورودی دیگر یا یک جریان خروجی دیگر باشد برج را برج تقطیر پیچیده گویند. همچنین به مجموعه دو برج که جریان‌های آنها با هم ارتباط داشته باشند، برج پیچیده گویند.

در فصل قبل روش همگرایی θ ، روش ثابت تعادل (k_b) و روش غلظت ثابت برای برج‌های معمولی مورد استفاده قرار گرفت. در این فصل معادلات لازم برای استفاده از این روش برای برج‌های پیچیده ارائه خواهد شد.

برج تقطیر پیچیده^۱

قبل از بسط روش θ برای حل برج‌های پیچیده، در شکل ۱۵-۱ می‌توان یک برج تقطیر پیچیده را مشاهده کرد که این برج شامل دو خوراک و دو جریان جانبی (علاوه بر محصول بالا و پایین برج) می‌باشد. جریان‌های جانبی می‌تواند به صورت مایع یا بخار باشند.

مشخصاتی که در ادامه ذکر می‌شود باید مشخص باشد تا بتوان بقیه محاسبات را انجام داد.

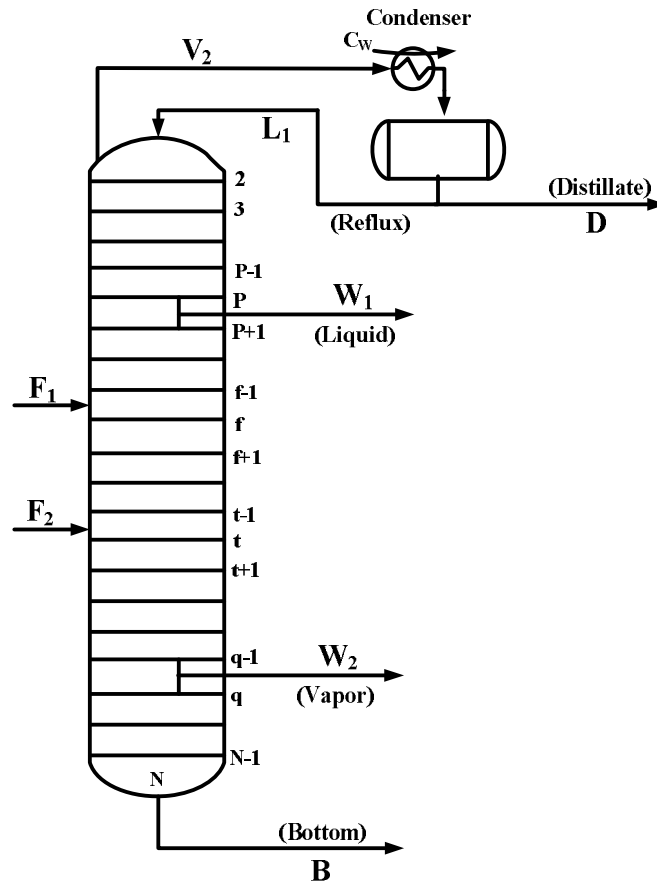
۱- فشار برج

۲- تعداد سینی‌ها

۳- دبی، غلظت و شرایط ترمودینامیکی خوراک

۴- محل وارد شدن خوراک (یا خوراک‌ها) و محل خروج جریان جانبی (یا جریان‌های جانبی)

و مشخصات اضافی از جریان‌ها که این مشخصات برای برج تقطیر نشان داده شده در شکل ۱-۱۵ می‌تواند V_2 (یا L_1) ، D ، W_1 و W_2 باشد که با داشتن این موارد می‌توان جریان B را توسط یک موازنه جرم کلی بدست آورد.

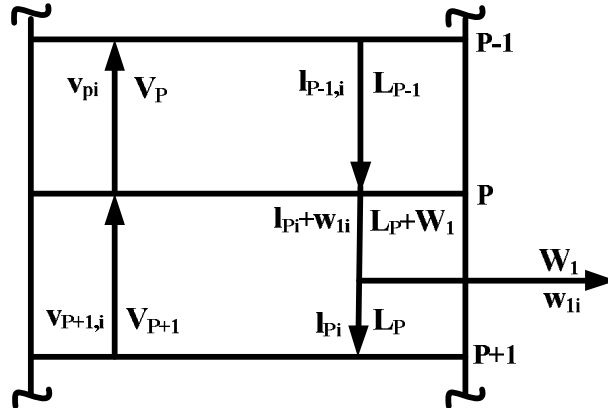


شکل ۱-۱۵ : شمایی از یک برج پیچیده با دو خوراک و دو جریان برگشتی

برای شروع حل مسئله، دمای سینی‌ها و مقادیر $\frac{L}{V}$ حدس زده می‌شوند. این حدس‌ها به ما اجازه می‌دهد که برای مواد روی هر سینی موازنه جرم بنویسیم. پس از انجام روش همگرایی θ می‌توان غلظت‌های اجزاء را روی سینی‌ها بدست آورد و با استفاده از این غلظت‌ها می‌توان دمای هر سینی را با استفاده از روش ثابت تعادل (k_b) بدست آورد و سپس با استفاده از غلظت‌های هر سینی و دمای آن می‌توان با نوشتن موازنه انرژی و روش غلظت ثابت ، دبی فاز مایع و بخار خروجی هر سینی را بدست آورد.

موازنه جرم برای اجزاء

در این قسمت هدف این است که موازنه جرم را بر حسب دبی اجزاء در یکی از فازها (مایع یا بخار) با استفاده از تعادل مایع و بخار ($l_{ji} = A_{ji} v_{ji}$) بدست آوریم. بجز سینی‌هایی که از آنها جریان جانبی خارج می‌شود موازنه جرم برای سینی‌ها به همان صورت است که در فصل قبل اشاره شد. سینی p از شکل ۱-۱۵ سینی جریان جانبی است و جریان‌های تفصیلی آن در شکل ۲-۱۵ نشان داده شده است که از آن جریان جانبی W_1 به صورت مایع خارج می‌شود.



شکل ۲-۱۵: شمایی از یک سینی با جریان جانبی (جریان جانبی مایع اشباع است)

موازنه جرم حول سینی p به صورت زیر خواهد بود.

$$v_{p+1,i} + l_{p-1,i} - v_{pi} - l_{pi} - w_{1i} = 0 \quad 1-15$$

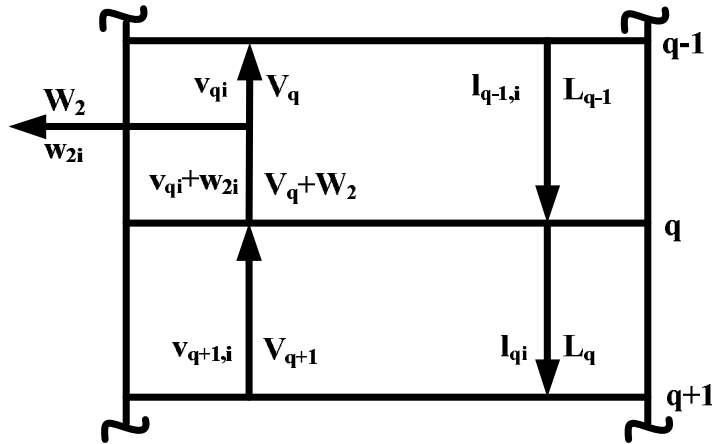
که w_{1i} غلظتی مشابه با l_{pi} ($l_{pi} = A_{pi} v_{pi}$) دارد پس می‌توان رابطه زیر را برای آن نوشت.

$$w_{1i} = \frac{W_1}{L_p} l_{pi} = \frac{W_1}{L_p} A_{pi} v_{pi} \quad 2-15$$

با استفاده از این معادله می‌توان معادله ۱-۱۵ را بر حسب دبی اجزاء در فاز بخار به صورت زیر نوشت.

$$A_{p-1,i} v_{p-1,i} - \left[1 + A_{pi} \left(1 + \frac{W_1}{L_p} \right) \right] v_{pi} + v_{p+1,i} = 0 \quad 3-15$$

همچنین سینی q از شکل ۱-۱۵، سینی جریان جانبی است و جریان‌های تفصیلی آن در شکل ۳-۱۵ نشان داده شده است که از آن جریان جانبی W_2 به صورت بخار خارج می‌شود.



شکل ۱۵-۳: شمایی از یک سینی با جریان جانبی (جریان جانبی بخار اشباع است)

موازنه جرم حول سینی q به صورت زیر خواهد بود.

$$v_{q+1,i} + l_{q-1,i} - v_{qi} - l_{qi} - w_{2i} = 0 \quad ۴-۱۵$$

جریان‌های w_2 و v_q دارای غلظت‌های مشابهی هستند پس می‌توان رابطه زیر را نوشت.

$$w_{2i} = \frac{W_2}{V_q} v_{qi} \quad ۵-۱۵$$

با استفاده از رابطه اخیر و معادله تعادل ۱۴-۱۰ می‌توان رابطه ۱۵-۴ را بر حسب دبی اجزاء در فاز بخار به صورت زیر نوشت.

$$A_{q-1,i} v_{q-1,i} - \left[1 + A_{qi} + \frac{W_2}{V_q} \right] v_{qi} + v_{q+1,i} = 0 \quad ۶-۱۵$$

موازنه جرم برای کل سینی‌ها را می‌توان به صورت ماتریس بیان کرد که مشابه با ماتریس ارائه شده برای برج‌های معمولی است.

$$A_i v_i = -func_i \quad ۷-۱۵$$

اجزاء A_i مشابه با برج‌های معمولی است با این تفاوت که برای سینی‌هایی که جریان جانبی از آن خارج می‌شود (سینی q ، p) مقادیر ρ_{qi} و ρ_{pi} به صورت زیر است.

$$\rho_{pi} = 1 + A_{pi} \left(1 + \frac{W_1}{L_p} \right) \quad ۸-۱۵$$

$$\rho_{qi} = 1 + A_{qi} + \frac{W_2}{V_q}$$

وقتی که مدل ۲ که در شکل ۱۴-۲ نشان داده شده برای سینی خوراک برقرار باشد f_i شامل دبی مایع و بخار هر خوراک خواهد بود.

$$v_i = [d_i \quad v_{2i} \quad v_{3i} \quad \dots \quad v_{f-1,i} \quad v_{fi} \quad \dots \quad v_{t-1,i} \quad v_{ti} \quad \dots \quad v_{Ni}]^T \quad ۹-۱۵$$

$$func_i = [0 \quad \dots \quad 0 \quad v_{F1i} \quad l_{F1i} \quad 0 \quad \dots \quad 0 \quad v_{F2i} \quad l_{F2i} \quad 0 \quad \dots \quad 0]^T$$

اجزاء v_{f-1} و v_{F1} ، v_{fi} و l_{F1i} ، v_{t-1} و v_{F2i} ، v_{ii} و l_{F2i} در یک ستون و به ترتیب در ردیف‌های $f-1$ ، f ، $t-1$ و t قرار می‌گیرند.

با حل موازنه جرم $(A_i V_i = -f_i)$ ، دبی اجزاء در فاز بخار (v_{ji}) و محصول بالای برج (d_i) بدست می‌آیند این معادله می‌تواند توسط معادله $۲۰-۱۴$ و $۲۱-۱۴$ به روش نشان داده شده در مثال $۱۴-۱$ حل شود. پس از اینکه معادله موازنه جرم حل شد مقادیر d_i ، v_{2i} ، v_{3i} ، ... ، v_{Ni} بدست می‌آیند و دبی اجزاء در فاز مایع نیز با استفاده از معادله تعادل (معادله $۱۴-۱۰$) بدست می‌آید. سپس از روش همگرایی θ استفاده می‌شود.

فرمولاسیون روش همگرایی θ

فرمولاسیون روش همگرایی θ برای برج‌های پیچیده توسط لیستر و همکاران [۶] انجام شده است. در ابتدا ضریب θ برای هر جریان مستقلی که از برج خارج می‌شود تعریف خواهد شد. برای شکل $۱۵-۱$ سه متغیر از چهار متغیر D ، W_1 ، W_2 و B می‌تواند متغیر مستقل باشد برای مثال جریان‌های D ، W_1 و W_2 می‌توانند به عنوان جریان‌های مستقل در نظر گرفته شوند چون با استفاده از این سه جریان و یک موازنه کلی می‌توان جریان B را بدست آورد. پس ضرایب θ برای هر کدام از جریان‌های مستقل به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\begin{aligned} \left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{co} &= \theta_0 \left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{ca} \\ \left(\frac{w_{1i}}{d_i}\right)_{co} &= \theta_1 \left(\frac{w_{1i}}{d_i}\right)_{ca} \\ \left(\frac{w_{2i}}{d_i}\right)_{co} &= \theta_2 \left(\frac{w_{2i}}{d_i}\right)_{ca} \end{aligned} \quad ۱۰-۱۵$$

که برای این سه معادله $\theta_0 > 0$ ، $\theta_1 > 0$ و $\theta_2 > 0$ خواهد بود. موازنه جرم کلی برای برج به صورت زیر است.

$$F X_i = (d_i)_{co} + (w_{1i})_{co} + (w_{2i})_{co} + (b_i)_{co} \quad ۱۱-۱۵$$

که $F x_i = F_1 X_{1i} + F_2 X_{2i}$ است.

با ترکیب معادله $۱۰-۱۵$ و $۱۱-۱۵$ خواهیم داشت :

$$(d_i)_{co} = \frac{F X_i}{1 + \theta_0 (b_i/d_i)_{ca} + \theta_1 (w_{1i}/d_i)_{ca} + \theta_2 (w_{2i}/d_i)_{ca}} \quad ۱۲-۱۵$$

مطابق مطالبی که در فصل قبل ذکر شد برای اینکه مواد خیلی سبک و مواد خیلی سنگین مشکلی در محاسبات ایجاد نکنند $(d_i)_{co}$ به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$(d_i)_{co} = (d_i)_{ca} p_i \quad ۱۳-۱۵$$

که p_i به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$p_i = \frac{F X_i}{(d_i)_{ca} + \theta_0 (b_i)_{ca} + \theta_1 (w_{1i})_{ca} + \theta_2 (w_{2i})_{ca}} \quad 14-15$$

وقتی که معادله ۱۵-۱۰ بر حسب p_i تعریف می‌شود معادلات به صورت زیر درمی‌آیند.

$$\begin{aligned} (b_i)_{co} &= \theta_0 (b_i)_{ca} p_i \\ (w_{1i})_{co} &= \theta_1 (w_{1i})_{ca} p_i \\ (w_{2i})_{co} &= \theta_2 (w_{2i})_{ca} p_i \end{aligned} \quad 15-15$$

باید θ_0 ، θ_1 و θ_2 به نحوی بدست آیند که معادلات زیر مساوی صفر شوند.

$$\begin{aligned} g_0(\theta_0, \theta_1, \theta_2) &= \sum_{i=1}^c (d_i)_{co} - D \\ g_1(\theta_0, \theta_1, \theta_2) &= \sum_{i=1}^c (w_{1i})_{co} - W_1 \\ g_2(\theta_0, \theta_1, \theta_2) &= \sum_{i=1}^c (w_{2i})_{co} - W_2 \end{aligned} \quad 16-15$$

وقتی که معادلات اخیر برقرار شد مقادیر θ و p_i برای محاسبه غلظت‌ها بکار می‌روند. برای رفع برخی مشکلات ریاضی بهتر است g_0 ، g_1 و g_2 بدون بعد شده و به صورت زیر تعریف شوند.

$$\begin{aligned} g_0 &= \frac{1}{D} \sum_{i=1}^c (d_i)_{co} - 1 \\ g_1 &= \frac{1}{W_1} \sum_{i=1}^c (w_{1i})_{co} - 1 \\ g_2 &= \frac{1}{W_2} \sum_{i=1}^c (w_{2i})_{co} - 1 \end{aligned}$$

محاسبه جزء مولی روی هر سینی

جزء مولی روی هر سینی توسط هر کدام از روابط زیر می‌تواند محاسبه شود.

$$\begin{aligned} x_{ji} &= \frac{(l_{ji}/d_i)_{ca} (d_i)_{co}}{\sum_{i=1}^c (l_{ji}/d_i)_{ca} (d_i)_{co}} \quad or \quad x_{ji} = \frac{(l_{ji})_{ca} p_i}{\sum_{i=1}^c (l_{ji})_{ca} p_i} \\ y_{ji} &= \frac{(v_{ji}/d_i)_{ca} (d_i)_{co}}{\sum_{i=1}^c (v_{ji}/d_i)_{ca} (d_i)_{co}} \quad or \quad y_{ji} = \frac{(v_{ji})_{ca} p_i}{\sum_{i=1}^c (v_{ji})_{ca} p_i} \end{aligned} \quad 17-15$$

که $(d_i)_{ca}$ با استفاده از معادله ۱۵-۱۳ و p_i با استفاده از معادله ۱۵-۱۴ محاسبه می‌شود.

محاسبه دمای تصحیح شده با استفاده از روش ثابت تعادل (k_b)

پس از اینکه مقادیر x_{ji} و y_{ji} توسط روش اخیر محاسبه شد دمای هر سینی توسط روش ثابت تعادل (k_b) همانگونه که در فصل قبل برای برج‌های معمولی ذکر شد محاسبه می‌شود.

محاسبه دبی‌های خروجی از هر سینی

در این مرحله باید با استفاده از موازنه انرژی و روش غلظت ثابت، دبی مایع و بخار خروجی از هر سینی تصحیح شود. بسط موازنه انرژی و روش غلظت ثابت برای بدست آوردن دبی مایع و بخار خروجی از هر سینی شبیه به موارد ذکر شده در فصل قبل می‌باشد. با نوشتن موازنه جرم برای بالای سینی j که بین سینی p و $f-1$ (در شکل ۱۵-۱) می‌باشد، به معادله زیر خواهیم رسید.

$$\sum_{i=1}^c [H_{j+1,i} v_{j+1,i} - h_{ji} l_{ji} - h_{pi} w_{li} - H_{Di} d_i] - Q_C = 0 \quad 18-15$$

با یک موازنه کلی خواهیم داشت:

$$v_{j+1,i} = l_{ji} + w_{li} + d_i \quad 19-15$$

با حذف $v_{j+1,i}$ از معادله ۱۸-۱۵ توسط معادله ۱۹-۱۵ خواهیم داشت.

$$\sum_{i=1}^c [(H_{j+1,i} - h_{ji}) l_{ji} + (H_{j+1,i} - h_{pi}) w_{li} + (H_{j+1,i} - H_{Di}) d_i] - Q_C = 0$$

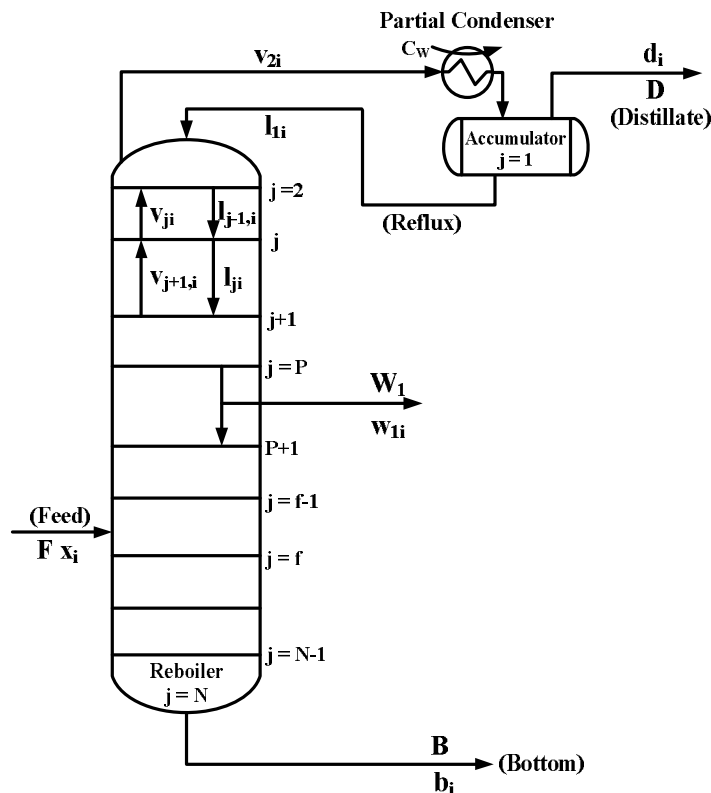
از آنجا که $d_i = D X_{Di}$ و $w_{li} = W_1 X_{pi}$ ، $l_{ji} = L_j x_{ji}$ می‌باشد موازنه جرم اخیر را به صورت زیر مرتب می‌کنیم.

$$L_j = \frac{-W_1 \sum_{i=1}^c (H_{j+1,i} - h_{pi}) X_{pi} - D \sum_{i=1}^c (H_{j+1,i} - H_{Di}) X_{Di} + Q_C}{\sum_{i=1}^c (H_{j+1,i} - h_{ji}) x_{ji}} \quad 20-15$$

رابطه اخیر برای قسمت بین جریان W_1 و خوراک F_1 است. برای بقیه قسمت‌ها نیز عباراتی تقریباً مشابه بدست می‌آید که با استفاده از آنها مقادیر دبی مایع خروجی از هر سینی (L_j) بدست می‌آید و با استفاده از یک موازنه کلی جرم می‌توان دبی بخار خروجی از هر سینی (V_j) را نیز محاسبه کرد.

نشان دادن حل گرافیکی توابع g

برای نشان دادن حل گرافیکی توابع g یک حالت ساده را در نظر می‌گیریم که برج یک جریان جانبی (W_1) علاوه بر محصول بالای برج (D) و پایین برج (B) مطابق شکل ۱۵-۴ داشته باشد.



شکل ۱۵-۴: یک برج پیچیده با یک جریان جانبی

برای این حالت دو ضریب θ (θ_0, θ_1) تعریف می‌شود. این دو ضریب مطابق دو عبارت اول معادله ۱۵-۱۰ می‌باشند و توابع g_0 و g_1 برای آن به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$g_0(\theta_0, \theta_1) = \sum_{i=1}^c (d_i)_{co} - D \quad 21-15$$

$$g_1(\theta_0, \theta_1) = \sum_{i=1}^c (w_{1i})_{co} - W_1 \quad 22-15$$

که $(d_i)_{co}$ به صورت زیر است.

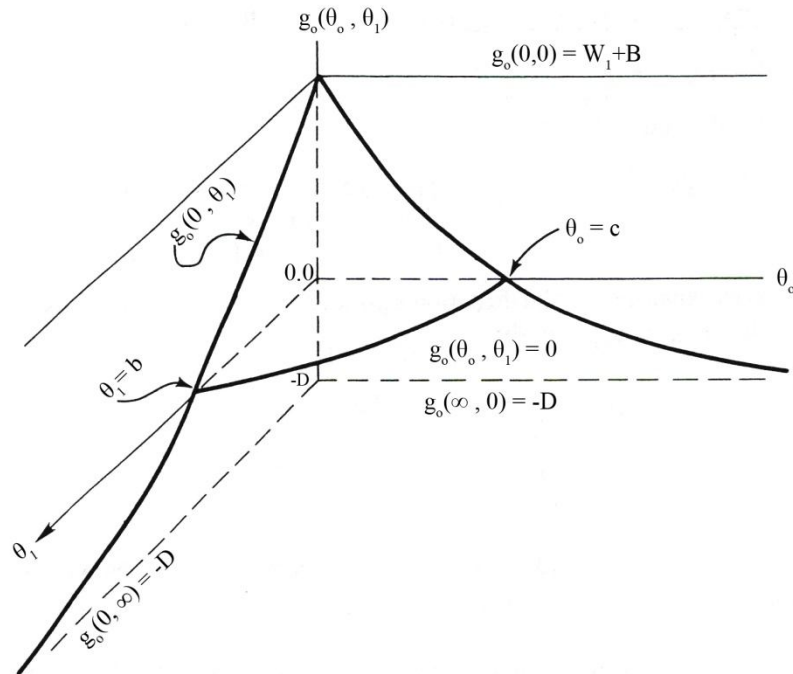
$$(d_i)_{co} = \frac{F X_i}{1 + \theta_0 (b_i/d_i)_{ca} + \theta_1 (w_{1i}/d_i)_{ca}}$$

$(d_i)_{co}$ می‌تواند بر حسب p_i مطابق روابط ۱۵-۱۳ و ۱۵-۱۴ تعریف شود.

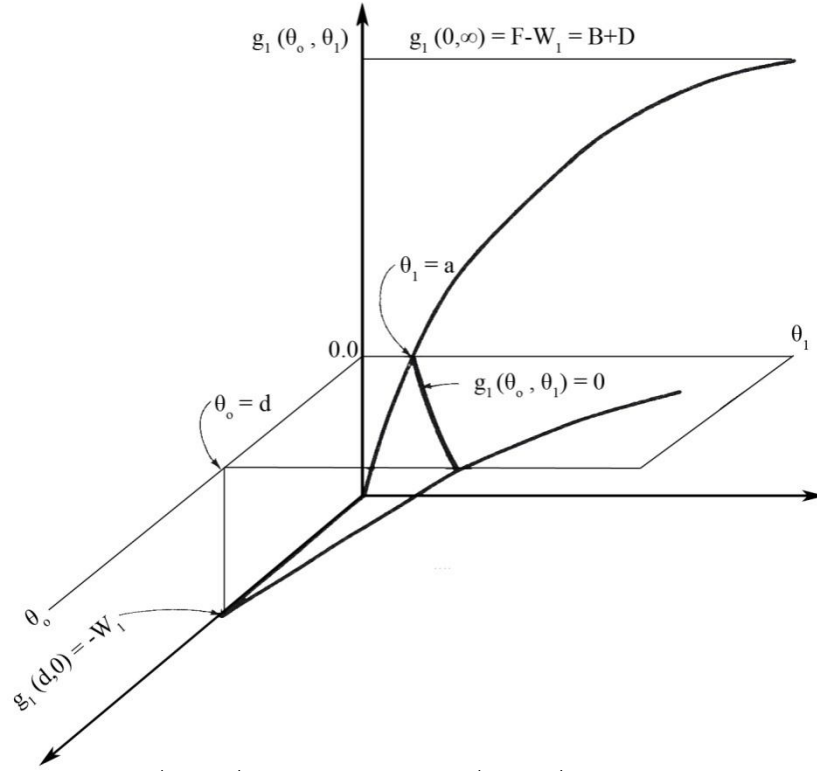
رسم تابع g_0 بر حسب θ_0 (g_0, θ_0) ، g_0 بر حسب θ_1 (g_0, θ_1) و θ_0 بر حسب θ_1 ($\overline{\theta_0, \theta_1}$) در شکل ۱۵-۱۵ نشان داده شده است و همچنین رسم تابع g_1 بر حسب θ_0 (g_1, θ_0) ، g_1 بر حسب θ_1 (g_1, θ_1) و θ_0 بر حسب θ_1 ($\overline{\theta_1, \theta_0}$) در شکل ۱۵-۱۶ نشان داده شده است. حل مطلوب این توابع ، تقاطع رسم توابع g_0 و g_1 در سیستم $(\overline{\theta_1, \theta_0})$ (جایی که $g_0 = g_1 = 0$ است) می‌باشد این رسم در شکل ۱۵-۱۷ نشان داده شده است.

این شکل نشان می‌دهد که برای مقادیر مثبت θ_0 و θ_1 تابع پیوسته است و به دلیل پیوسته بودن می‌توان این توابع را توسط روش‌های عددی حل کرد.

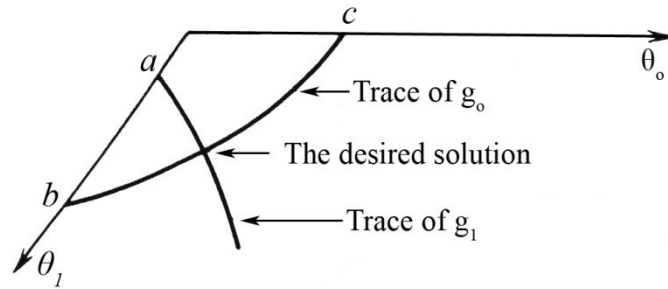
مقادیر θ را می‌توان با استفاده از روش نیوتن رافسون بدست آورد در این روش ابتدا حدس اولیه برای دو متغیر در نظر گرفته می‌شود و هر دو معادله غیرخطی به دو معادله خطی تبدیل می‌شوند و سپس در یک دستگاه حل می‌شوند. جواب‌های بدست آمده با حدس مقایسه می‌شوند و در صورتی که یکسان باشند به جواب مورد نظر رسیده‌ایم در غیر این صورت با حدس‌های جدید همان مراحل را تکرار می‌کنیم.



شکل ۱۵-۵: رسم تابع g_0 بر حسب θ_0 ($\overline{g_0 \theta_0}$)، g_0 بر حسب θ_1 ($\overline{g_0 \theta_1}$) و θ_0 بر حسب θ_1 ($\overline{\theta_0 \theta_1}$)



شکل ۱۵-۶: رسم تابع g_1 بر حسب $(\overline{g_1 \theta_0})$ ، g_1 بر حسب $(\overline{g_1 \theta_1})$ و θ_1 بر حسب $(\overline{\theta_1 \theta_0})$



شکل ۱۵-۷: رسم توابع g_1 و g_0 در سیستم $(\overline{\theta_1 \theta_0})$

برای اینکه دو معادله غیر خطی را به دو معادله خطی تبدیل کنیم از بسط تیلور استفاده می‌کنیم. بسط تیلور برای توابع g_1 و g_0 به صورت زیر است.

$$0 = g_0 + \frac{\partial g_0}{\partial \theta_0} \Delta \theta_0 + \frac{\partial g_0}{\partial \theta_1} \Delta \theta_1 \quad ۲۳-۱۵$$

$$0 = g_1 + \frac{\partial g_1}{\partial \theta_0} \Delta \theta_0 + \frac{\partial g_1}{\partial \theta_1} \Delta \theta_1$$

استفاده از بسط تیلور و روش نیوتن رافسون در مثال زیر نشان داده شده است.

مثال ۱۵-۱: مقادیر مثبت x, y را برای اینکه $f_1 = f_2 = 0$ شود تا دو مرحله انجام دهید.

$$f_1(x, y) = x^2 - y^2 + 1$$

$$f_2(x, y) = x^2 + y^2 - 2$$

حدس‌های اولیه را $x_0 = y_0 = 1$ در نظر بگیرید.

حل : ابتدا با استفاده از حدس‌های اولیه ، مقدار توابع را بدست می‌آوریم.

$$f_1(1,1) = 1 - 1 + 1 = 1$$

$$f_2(1,1) = 1 + 1 - 2 = 0$$

مشتق توابع را نسبت به x, y بدست می‌آوریم.

$$\frac{\partial f_1}{\partial x} = 2x \quad \frac{\partial f_1}{\partial y} = -2y \quad \frac{\partial f_2}{\partial x} = 2x \quad \frac{\partial f_2}{\partial y} = 2y$$

با استفاده از حدس‌های اولیه مقادیر مشتق را بدست می‌آوریم و در بسط تیلور (معادله ۱۵-۲۳) قرار می‌دهیم.

$$0 = 1 + 2 \Delta x - 2 \Delta y$$

$$0 = 0 + 2 \Delta x + 2 \Delta y$$

با حل این دو معادله خطی خواهیم داشت :

$$\Delta x = -\frac{1}{4} \quad , \quad \Delta y = \frac{1}{4}$$

با استفاده از مقادیر بدست آمده حدس‌های بعدی را بدست می‌آوریم.

$$x_1 = x_0 + \Delta x = 1 - \frac{1}{4} = \frac{3}{4} \quad , \quad y_1 = y_0 + \Delta y = 1 + \frac{1}{4} = \frac{5}{4}$$

حال با توجه به اینکه مقادیر بدست آمده با حدس اولیه متفاوت هستند همین مراحل را با مقادیر بدست آمده تکرار می‌کنیم.

مرحله دوم : مقدار توابع را در حدس‌های بعدی $\left(x_1 = \frac{3}{4}, y_1 = \frac{5}{4}\right)$ بدست می‌آوریم.

$$f_1(3/4, 5/4) = (3/4)^2 - (5/4)^2 + 1 = 0$$

$$f_2(3/4, 5/4) = (3/4)^2 + (5/4)^2 - 2 = 1/8$$

مقادیر توابع مشتق را در این حدس‌ها بدست می‌آوریم.

$$\frac{\partial f_1}{\partial x} = (2)(3/4) = 3/2 \quad \frac{\partial f_2}{\partial x} = (2)(3/4) = 3/2$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial y} = (-2)(5/4) = -5/2 \quad \frac{\partial f_2}{\partial y} = (2)(5/4) = 5/2$$

مقادیر بدست آمده را در بسط تیلور جایگزین می‌کنیم.

$$0 = 0 + (3/2) \Delta x - (5/2) \Delta y$$

$$0 = 1/8 + (3/2) \Delta x + (5/2) \Delta y$$

با حل معادلات اخیر خواهیم داشت :

$$\Delta x = -1/24 \quad x_2 = 3/4 - 1/24 = 17/24 = 0.7083$$

$$\Delta y = -1/40 \quad y_2 = 5/4 - 1/40 = 49/40 = 1.225$$

که مقدار دقیق حل این دو تابع در نهایت به صورت زیر خواهد بود.

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}} = 0.7071 \quad \text{and} \quad y = \sqrt{3/2} = 1.2247$$

مشخصه‌های همگرایی روش θ برای برج‌های پیچیده

برای بررسی برخی مشخصه‌های همگرایی روش θ برای برج‌ها پیچیده، مثال ۱۵-۲ بررسی می‌گردد.

مثال ۱۵-۲: خوراکی با ترکیب ارائه شده در جدول ۱۵-۱ به صورت مایع اشباع وارد برج می‌شود و روی سینی ششم برج نشان داده شده در شکل ۱۵-۴ می‌ریزد. برج مجهز به ۱۱ سینی، کندانسور جزئی و جوش‌آور جزئی می‌باشد که در فشار 300 Psi کار می‌کند. دبی محصول بالای برج $D = 32.298 \frac{\text{lbmole}}{\text{hr}}$ و دبی

محصول جانبی $W_1 = 25.0 \frac{\text{lbmole}}{\text{hr}}$ که به صورت مایع از سینی دهم خارج می‌شود. نسبت جریان برگشتی در برج $\frac{L_1}{D} = 2.25$ می‌باشد. مقادیر k و آنتالپی در جدول ۱۴-۲ و جدول ۱۴-۳ داده شده است.

حدس اولیه دما را $T_2 = 200^\circ F$ تا $T_{12} = 300^\circ F$ به صورت خطی در نظر می‌گیریم. مقادیر $T_1 = 200^\circ F$ و $T_{13} = 300^\circ F$ در نظر گرفته می‌شود و مقادیر L_j/V_j و V_{13}/B به صورت زیر قرار داده می‌شود.

$$\frac{L_j}{V_j} = 1 \quad (j = 2, 3, \dots, 12) \quad \frac{V_B}{B} = 1.0$$

جدول ۱۵-۱: ترکیب خوراک ورودی به برج برای مثال ۱۵-۲

Component	FX_i (lbmol/hr)
CH ₄	2.0
C ₂ H ₆	10.0
C ₃ H ₆	6.0
C ₃ H ₈	12.5
i-C ₄ H ₁₀	3.5
n-C ₄ H ₁₀	15.0
n-C ₅ H ₁₂	15.2
n-C ₆ H ₁₄	11.3
n-C ₇ H ₁₆	9.0
n-C ₈ H ₁₇	8.5
400	7.0

حل : ابتدا باید درجه آزادی مسئله را بدست آورده و با تعداد اطلاعات مسئله مقایسه می‌کنیم در صورتی که درجه آزادی و تعداد اطلاعات مسئله با هم برابر باشند مسئله قابل حل خواهد بود. درجه آزادی برج نشان داده شده در شکل ۴-۱۵ را بررسی می‌کنیم این برج شامل اجزاء زیر می‌باشد.

Element of unit	N_D
Partial condenser	C+4
(P-1) stages above side stream	2(P-1)+2C+5
Side stream tray	2C+7
(F-1-P) stages between side stream and feed	2(F-1-P)+2C+5
Feed stage	3C+8
(N-F) stage below the feed	2(N-F)+2C+5
Partial reboiler	C+4
<hr/>	
$2N+13C+34$	

با توجه با اجزاء در نظر گرفته شده مقدار $N_R = 12$ است ضمناً متغییر اضافی در سیستم وجود ندارد پس $N_A = 0$ خواهد بود.

$$(N_D)_{unit} = \sum_{\substack{\text{all} \\ \text{elements, } e}} (N_D)_e - N_R(C+2) + N_A$$

$$(N_D)_{unit} = (2N + 13C + 34) - 12(C+2) + 0 = 2N + C + 10$$

با توجه به صورت مسئله ، داده‌های مسئله به صورت زیر می‌باشد.

Variable specification	Number of variable
Feed stream specification	C+2
Total number of tray	1
Feed stage location	1
Side stream stage location	1
Flow rates, D , W ₁	2
No heat loss for each stage	N
Pressure of stages	N
Pressure of condenser	1
Pressure of reboiler	1
Reflux ratio	1
	2N+C+10

از آنجا که درجه آزادی و تعداد اطلاعات مسئله با هم برابر هستند مسئله قابل حل است که جزئیات حل آن به صورت زیر می باشد.

چون برج علاوه بر محصول بالا و پایین ، یک جریان جانبی نیز دارد دو ضریب θ (θ_0, θ_1) برای آن تعریف می شود که به صورت دو عبارت اول معادله ۱۵-۱۰ می باشند و توابع g به صورت معادله های ۱۵-۲۱ و ۱۵-۲۲ تعریف می شوند.

مشخصه ها همگرایی در جدول ۱۵-۲ و مقادیر T_j, V_j, d_i و w_{li} در جدول ۱۵-۳ نشان داده شده است. برای همگرایی مسئله به ۱۲ مرحله نیاز است.

جدول ۱۵-۲: مشخصه‌های همگرایی مثال ۱۵-۲

Trial	θ_0	θ_1	Temp. of D, °F	Temp. of B, °F	Calculated Value of D	Calculated Value of W_1
1	0.7365	0.8632	125.79	410.82	31.9304	24.4257
2	1.16464	1.16219	115.13	443.44	32.6193	24.7670
3	0.984057	0.962613	114.25	441.59	32.2084	24.7236
4	1.03172	1.02741	114.13	446.36	32.3555	25.0021
5	0.984476	0.989619	114.13	445.68	32.22745	24.95864
6	1.00754	1.006039	114.13	446.53	32.3110	25.00688
7	0.996285	0.997367	114.25	446.28	32.29217	24.99218
8	1.001739	1.001348	114.13	446.45	32.30094	25.00218
9	0.9991422	0.999384	114.13	446.39	32.29664	24.99829
10	1.000344	1.000269	114.13	446.42	32.29861	25.00039
11	0.9998121	0.9998789	114.13	446.41	32.29772	24.99945
12	1.0000	1.0000	114.13	446.41	32.29811	24.99993

جدول ۱۵-۳: مقادیر w_{ii} و d_i ، V_j ، T_j

1. Final temperature, liquid, and vapor profiles			
Stage	T_j (°F)	L_j (lbmol/hr)	V_j (lbmol/hr)
1	114.13	72.671	32.298
2	145.45	61.302	104.97
3	165.40	68.080	103.60
4	183.47	58.993	100.38
5	217.13	194.95	91.291
6	239.30	212.35	127.25
7	253.55	222.45	144.65
8	264.68	227.36	154.75
9	276.18	227.38	159.66
10	292.27	196.97	159.67
11	319.29	186.10	154.27

12	363.18	164.71	143.39
13	456.41	42.702	122.01

2. Final product flow rates

Component	d_i (lb mol/hr)	w_{i1} (lb mol/hr)	b_i (lb mol/hr)
CH ₄	0.20000×10^1	0.32125×10^{-6}	0.30273×10^{-9}
C ₂ H ₆	0.99985×10^1	0.15077×10^{-2}	0.19926×10^{-4}
C ₃ H ₆	0.59356×10^1	0.61044×10^{-1}	0.33848×10^{-2}
C ₃ H ₈	0.12224×10^2	0.24742	0.18230×10^{-1}
i-C ₄ H ₁₀	0.11119×10^1	0.19577×10^1	0.43043
n-C ₄ H ₁₀	0.10242×10^1	0.10428×10^2	0.35483×10^1
n-C ₅ H ₁₂	0.36429×10^{-2}	0.64835×10^1	0.87129×10^1
n-C ₆ H ₁₄	0.18929×10^{-4}	0.25252×10^1	0.87747×10^1
n-C ₇ H ₁₆	0.15019×10^{-6}	0.13819×10^1	0.76181×10^1
n-C ₈ H ₁₇	0.12374×10^{-8}	0.10969×10^1	0.74031×10^1
400	0.14162×10^{-11}	0.80727	0.61927×10^1

$$Q_C = 0.47243 \times 10^6 \text{ Btu/hr}$$

$$Q_R = 0.15519 \times 10^7 \text{ Btu/hr}$$

سیستم‌هایی شامل چند برج تقطیر با تبادل جریان^۱

معمولاً حل مسائل سیستم برج‌های تقطیر با تبادل جریان که یک نمونه از آن در شکل ۸-۱۵ نشان داده شده بسیار مشکل به نظر می‌رسد چون غلظت جریان پایین برج دوم که وارد برج اول می‌شود و همچنین غلظت خوراک برج دوم که از پایین برج اول گرفته می‌شود نامعلوم است.

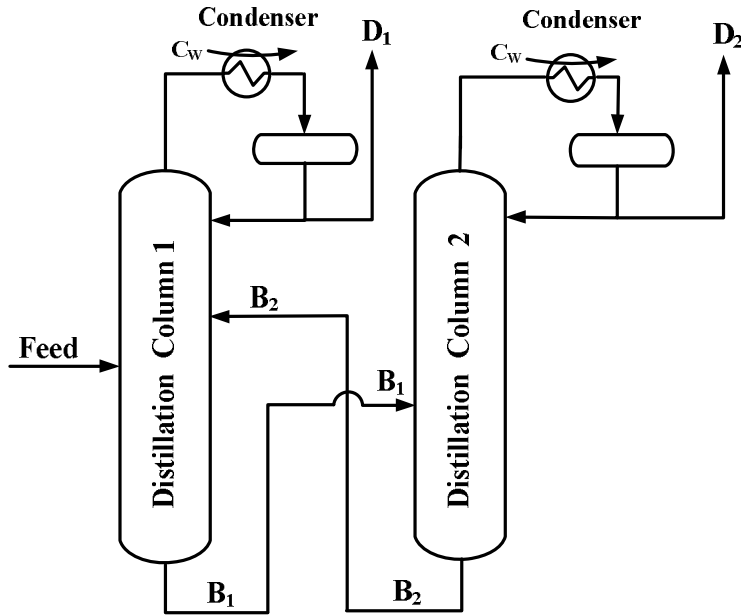
برای حل چنین مسائلی تام و هالند^۲ [۷] روشی پیشنهاد کرده‌اند که به روش^۳ موسوم است. این روش برای سیستم‌هایی بکار می‌رود که دارای جریان‌هایی با غلظت نامعلوم باشند و شبیه به روش همگرایی θ است و برای هر جریان خارجی مستقل یک مقدار θ تعریف می‌شود. این ضریب برای موازنه جرم جریان‌های خارجی و بدست آوردن غلظت آنها بکار می‌رود.

در ابتدا فرمولاسیون روش θ برای یک سیستم‌های ساده که یک نمونه از آن در شکل ۸-۱۵ نشان داده شده ، مورد بررسی قرار می‌گیرد و در قسمت‌های بعد این فرمولاسیون برای موارد پیچیده بسط داده می‌شود.

1- System of interconnected distillation column

2- Tomme and Holand

3- Capital θ method



شکل ۱۵-۸ : شمایی از دو برج تقطیر با جریان متقابل

فرمولاسیون روش Θ برای یک سیستم با دو برج تقطیر

سیستم شکل ۱۵-۸ که نمونه‌ای از یک سیستم ساده است را در نظر می‌گیریم محصول بالای هر برج با D و محصول پایین هر برج با B نشان داده شده است و اندیس آنها نشان دهنده شماره برج تقطیر است مثلاً d_{i1} دبی جزء i در محصول بالای برج تقطیر اول و b_{i2} دبی جزء i در محصول پایین برج تقطیر دوم می‌باشد. برای سیستم نشان داده شده در شکل ۱۵-۸ به ازای هر برج یک موازنه برای جزء i می‌توان نوشت.

$$F X_i + (b_{i,2})_{co} - (d_{i,1})_{co} - (b_{i,1})_{co} = 0 \quad 24-15$$

$$(b_{i,1})_{co} - (d_{i,2})_{co} - (b_{i,2})_{co} = 0$$

در دو معادله اخیر چهار مجهول وجود دارد پس برای حل به دو معادله دیگر نیاز داریم. برای نوشتن دو معادله دیگر از ضریب Θ استفاده می‌کنیم که به صورت زیر خواهد بود.

$$\left(\frac{b_{i,1}}{d_{i,1}} \right)_{co} = \Theta_1 \left(\frac{b_{i,1}}{d_{i,1}} \right)_{ca} \quad 25-15$$

$$\left(\frac{b_{i,2}}{d_{i,2}} \right)_{co} = \Theta_2 \left(\frac{b_{i,2}}{d_{i,2}} \right)_{ca}$$

مقادیری که با اندیس ca نشان داده شده‌اند مقادیر محاسبه شده هستند که در ادامه، روش محاسبه آنها ذکر خواهد شد.

برای دو ضریب Θ باید دو تابع g تعریف کنیم این توابع می‌توانند روی هر کدام از جریان‌های D_1 ، D_2 ، B_1 و B_2 نوشته شوند که در اینجا دو جریان D_2 و B_1 انتخاب شده‌اند و توابع آنها به صورت زیر است.

$$g_1(\Theta_1, \Theta_2) = \sum_{i=1}^c b_{i,1} - B_1 \quad 26-15$$

$$g_2(\Theta_1, \Theta_2) = \sum_{i=1}^c b_{i,2} - D_2$$

ضرایب Θ مقادیر مثبتی هستند که باعث برقراری شرط $g_1 = g_2 = 0$ خواهند شد. این ضرایب می‌توانند توسط روش نیوتن رافسون محاسبه شوند.

روابط موجود در معادله ۱۵-۲۵ به صورت زیر مرتب می‌شوند

$$b_{i,1} = r_{i,1} d_{i,1} \quad 27-15$$

$$b_{i,2} = r_{i,2} d_{i,2}$$

که r_{i1} و r_{i2} به صورت زیر می‌باشند.

$$r_{i,1} = \Theta_1 (b_{i,1}/d_{i,1})_{ca}$$

$$r_{i,2} = \Theta_2 (b_{i,2}/d_{i,2})_{ca}$$

حال معادلات ۱۵-۲۴ و معادلات ۱۵-۲۷ را می‌توان به طور همزمان حل کرد تا چهار مجهول بدست آیند. با حذف b_{i1} و b_{i2} در معادله ۱۵-۲۴ توسط معادله ۱۵-۲۷ خواهیم داشت :

$$-(1+r_{i,1})d_{i,1} + r_{i,2}d_{i,2} = -F X_i \quad 28-15$$

$$r_{i,1}d_{i,1} - (1+r_{i,2})d_{i,2} = 0$$

با حل دو معادله اخیر خواهیم داشت.

$$d_{i,1} = \frac{F X_i (1+r_{i,2})}{1+r_{i,1}+r_{i,2}} \quad 29-15$$

$$d_{i,2} = \frac{F X_i r_{i,1}}{1+r_{i,1}+r_{i,2}} \quad 30-15$$

تعداد Θ تعریف شده برای هر سیستم می‌تواند از رابطه زیر بدست آید.

تعداد برج‌ها - تعداد جریان‌های نامعلوم = تعداد Θ تعریف شده

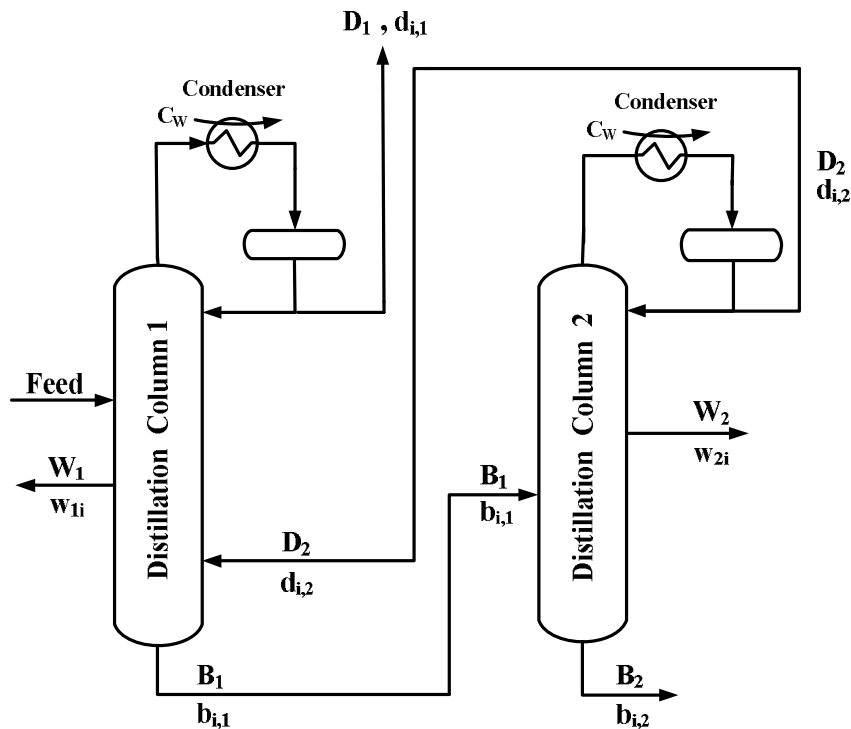
یا

تعداد برج‌ها + تعداد جریان‌های جانبی = تعداد Θ تعریف شده

روش انجام محاسبات

روش محاسباتی که توسط نارتکر و همکاران^۱ [۸] ارائه شده ، شامل انجام روش همگرایی θ (برای برج‌های معمول و برج‌های پیچیده) است و دبی اجزاء که با اندیس ca نشان داده شده‌اند محاسبه می‌شوند البته ابتدا برای شروع محاسبات مجبوریم غلظت جریان‌ها ارتباطی بین برج‌ها را حدس بزنیم. مثلاً برای شکل ۱۵-۸ برای انجام محاسبات برای برج اول باید غلظت B_2 را حدس بزنیم و برای این برج باید یک مرحله را طی کنیم. یک مرحله شامل حل روش θ ، روش ثابت تعادل (k_b) و موازنه انرژی همراه با روش غلظت ثابت

است. پس از اینکه دما توسط روش ثابت تعادل (k_p) محاسبه و دبی اجزاء توسط موازنه انرژی و روش غلظت ثابت محاسبه شد مقادیر دبی کل فازها بدست می‌آیند حال با استفاده از روش Θ می‌توان غلظت جریان‌ها ارتباطی بین برج‌ها را تصحیح کرد. این کار تا زمانی انجام می‌شود که حدس غلظت جریان‌های ارتباطی و میزان بدست آمده اختلاف کمی داشته باشند.



شکل ۹-۱۵: شمایی از دو برج پیچیده با جریان‌های ارتباطی

مشخصه‌های همگرایی روش Θ

برای نشان دادن مشخصه‌های همگرایی روش Θ مثال ۳-۱۵ انتخاب شده است این مثال شامل دو برج پیچیده است که در شکل ۹-۱۵ نشان داده شده است.

مثال ۳-۱۵: برج اول: خوراکی با ترکیب نشان داده شده در جدول ۴-۱۵ به صورت مایع زیر اشباع در دمای 317.75 k و فشار 270 mmHg وارد سینی دهم برج تقطیر می‌شود. برج تقطیر شامل ۵۰ سینی، کندانسور کلی و جوش‌آور کلی است (در محاسبات کندانسور کلی به عنوان مرحله اول و جوش‌آور جزئی به عنوان مرحله پنجاه و دوم در نظر گرفته شود) دبی محصول بالای برج $D_1 = 52 \frac{\text{Kgrmole}}{\text{hr}}$ و جریان جانبی با دبی $W_1 = 11 \frac{\text{Kgrmole}}{\text{hr}}$ از سینی ۲۱ خارج می‌شود. محصول بالای برج دوم به سینی ۴۵ برج اول برگردانده می‌شود. فشار کندانسور 40 mmHg و فشار سینی اول 50 mmHg است که به صورت خطی تا فشار جوش-

آور (270 mmHg) تغییر می‌کند. جریان برگشتی $\frac{L_1}{D_1} = 2.5$ است و داده‌های تعادلی و آنتالپی در جدول ۷-۱۵ و جدول ۸-۱۵ موجود است.

حدس اولیه دما 325.15 k (دمای جوش اتیل بنزن خالص در فشار 40 mmHg) برای کندانسور در نظر گرفته می‌شود که به طور خطی تا 381.413 k برای جوش‌آور (دمای جوش استایرن در فشار 270 mmHg) تغییر می‌کند.

حدس جریان مایع و بخار به صورت زیر است.

$$V_j = 182 \text{ Kgrmole/hr} \quad (j = 2, 3, \dots, 52)$$

$$L_j = 130 \text{ Kgrmole/hr} \quad (j = 1, \dots, 9)$$

$$L_j = 230 \text{ Kgrmole/hr} \quad (j = 10, \dots, 21)$$

$$L_j = 219 \text{ Kgrmole/hr} \quad (j = 22, 23, \dots, 44)$$

$$L_j = 235 \text{ Kgrmole/hr} \quad (j = 45, \dots, 51)$$

استایرن به عنوان ماده مبنا در نظر گرفته می‌شود.

برج دوم: همه مشخصات برج دوم، شبیه به برج اول است با این تفاوت که دبی محصول بالای برج

از سینی ۲۱ خارج می‌شود و محصول پایینی برج اول (B_1) وارد سینی ۳۱ برج دوم می‌شود. جریان

برگشتی، حدس اولیه دمای سینی‌ها و دبی‌ها شبیه به برج اول است.

حدس غلظت جریان D_2 به صورت زیر است.

فرض می‌کنیم کل اتیل بنزن خوراک در محصول بالای برج اول ظاهر شود.

$$d_{2,2} = D_1 - F X_2 = 52 - 51 = 1$$

و فرض می‌کنیم که جریان D_2 شامل استایرن است.

$$d_{3,2} = D_2 - d_{2,2} = 16 - 1 = 15$$

بنابراین

$$d_{1,2} = d_{4,2} = d_{5,2} = d_{6,2} = d_{7,2} = 0$$

جدول ۱۵-۴ : ترکیب خوراک ورودی به برج برای مثال ۱۵-۳

No.	Component	$F X_i$ (Kg mole/hr)
1	Toluene	0.80000
2	Ethyl benzene	0.5100×10^2
3	Styrene	0.4777×10^2
4	Isopropyl benzene	0.5000×10^{-1}
5	1-methyl-3-Ethyl benzene	0.1000×10^{-1}
6	α -methyl styrene	0.1300
7	Cis-1-propyl benzene	0.2000

حل : ابتدا باید درجه آزادی کل سیستم را بدست آوریم برای این منظور درجه آزادی برج اول و برج دوم را به طور جداگانه مورد بررسی قرار می دهیم.
برج اول شامل اجزاء زیر می باشد.

Element of first column	$(N_D)_e$
Total condenser	C+4
Reflux divider	C+5
(F-1) stages above the first feed (F_1)	$2(F-1)+2C+5$
Feed stage for F_1	$3C+8$
(P-1-F) stages between first feed (F_1) and side stream (W_1)	$2(P-1-F)+2C+5$
Side stream stage for W_1	$2C+7$
(q-1-P) stages between side stream (W_1) and second feed (D_2)	$2(q-1-P)+2C+5$
Feed stage for D_2	$3C+8$
(N-q) stages below second feed	$2(N-q)+2C+5$
Total reboiler	C+4
	$2N+19C+50$

درجه آزادی برج اول به صورت زیر بدست می‌آید.

$$(N_D)_{First\ Column} = \sum_{\substack{all \\ elements, e}} (N_D)_e - N_R(C+2) + N_A$$

تعداد جریان‌های بین اجزاء $N_R = 17$ و تعداد متغیرهای اضافی $N_A = 0$ می‌باشد.

$$(N_D)_{First\ Column} = (2N + 19C + 50) - 17(C + 2) + 0 = 2N + 2C + 16$$

برج دوم نیز شامل اجزاء زیر می‌باشد.

Element of second column	$(N_D)_e$
Total condenser	C+4
Reflux divider	C+5
(P-1) stages above side stream	2(P-1)+2C+5
Side stream stage	2C+7
(F-1-P) stages between side stream and feed	2(F-1-P)+2C+5
Feed stage	3C+8
(N-F) stages below feed	2(N-F)+2C+5
Total reboiler	C+4
	2N+14C+39

تعداد جریان‌های بین اجزاء $N_R = 16$ و تعداد متغیرهای اضافی $N_A = 0$ می‌باشد پس درجه آزادی برج دوم به صورت زیر خواهد بود.

$$(N_D)_{Second\ Column} = (2N + 14C + 39) - 13(C + 2) + 0 = 2N + C + 13$$

کل سیستم شامل اجزاء ذیل است.

Element of unit	$(N_D)_e$
First column	2N+2C+16
Second column	2N+C+13

$$4N+3C+29$$

تعداد جریان‌های بین اجزاء $N_R = 2$ و تعداد متغیرهای اضافی $N_A = 0$ می‌باشد پس درجه آزادی کل سیستم به صورت زیر بدست می‌آید.

$$(N_D)_{Unit} = (4N + 3C + 29) - 2(C + 2) + 0 = 4N + C + 25$$

پس درجه آزادی سیستم $4N + C + 25$ است حال باید تعداد اطلاعات مسئله مشخص شود. اطلاعات مسئله برای برج اول به صورت زیر می‌باشد.

Specified variable for first column	Number of variable
Feed stream specification	C+2
Total number of stages	1
First feed stage location	1
Flow rates , D_1 , W_1	2
Side stream stage location	1
Seconf feed stage location	1
Adiabatic stages	N
Pressure of stages	N
Pressure of reboiler	1
Pressure of divider	1
Pressure of condenser	1
State of D_1 (saturated liquid)	1
Reflux ratio , L_1/D_1	1
No heat loss from divider	1
	2N+C+14

اطلاعات مسئله در مورد برج دوم نیز به صورت ذیل است.

Specified variable for second column	Number of variable
Total number of stages	1
Flow rates , D_2 , W_2	2
Feed stage location	1
Side stream stage location	1
Reflux ratio, L_2/D_2	1
Adiabatic stages	N
Pressure of stages	N
Pressure of reboiler	1
Pressure of divider	1
Pressure of condenser	1
State of D_1 (saturated liquid)	1
No heat loss from divider	1
	2N+11

پس کل اطلاعات سیستم $4N + C + 25$ است از آنجا که تعداد اطلاعات مسئله و درجه آزادی با هم برابر هستند می توان نتیجه گرفت که مسئله قابل حل است.
حل نهایی این مسئله در جدول ۱۵-۵ نشان داده شده است.

جدول ۱۵ - ۵ : حل مثال ۱۵-۳ برای برج اول

I. Final temperature and vapor rate profiles for column 1					
Stage	T_j (K)	V_j (kg mole/hr)	Stage	T_j (K)	V_j (kg mole/hr)
1	326.69	52.0	27	363.32	204.10
2	332.41	182.0	28	364.08	204.42
3	334.80	183.56	29	364.84	204.73
4	336.93	183.38	30	365.57	205.03
5	338.86	183.24	31	366.30	205.32
6	340.64	183.12	32	367.01	205.60
7	342.30	183.04	33	367.74	205.87
8	343.83	182.98	34	368.41	206.13
9	345.28	182.92	35	369.10	206.38
10	346.66	182.87	36	369.78	206.62
11	347.96	196.73	37	370.46	206.86
12	349.19	197.35	38	371.14	207.08
13	350.35	197.95	39	371.81	207.28
14	351.48	198.52	40	372.49	207.48
15	352.56	199.06	41	373.17	207.66
16	353.60	199.59	42	373.85	207.83
17	354.61	200.09	43	374.54	207.98
18	355.59	200.58	44	375.24	208.12
19	356.54	201.05	45	375.94	208.25
20	357.47	201.50	46	376.65	211.97
21	358.36	201.95	47	377.38	212.10
22	359.24	202.37	48	378.13	212.22
23	360.10	202.74	49	378.91	212.30
24	360.93	203.10	50	379.71	212.36
25	361.75	203.44	51	380.55	212.39
26	362.54	203.78	52	381.44	212.37

II. Solution sets of product rates profiles for column 1

Component	$d_{i,1}$ (Kgmole/hr)	$w_{1,i}$ (Kgmole/hr)	$b_{i,2}$ (Kgmole/hr)
1	0.8000	0.54160×10^{-5}	0.14787×10^{-14}
2	0.40954×10^2	0.57845×10^1	0.10105×10^2
3	0.10244×10^2	0.51932×10^1	0.42530×10^2
4	0.20858×10^{-2}	0.45960×10^{-2}	0.45430×10^{-1}
5	0.20724×10^{-4}	0.72101×10^{-3}	0.92581×10^{-2}
6	0.51283×10^{-4}	0.87917×10^{-2}	0.12115
7	0.11536×10^{-5}	0.11275×10^{-1}	0.18871

$$Q_{C,1} = 0.18264 \times 10^{10} \text{ cal/hr}$$

$$Q_{R,1} = 0.20182 \times 10^{10} \text{ cal/hr}$$

ادامه جدول ۱۵-۵: حل مثال ۱۵-۳ برای برج دوم

III . Final temperature and vapor rate profiles for column 2

Stage	T_j (K)	V_j (Kgmole/hr)	Stage	T_j (K)	V_j (Kgmole/hr)
1	330.55	16.000	27	364.39	56.304
2	336.13	56.000	28	365.11	56.270
3	338.27	56.515	29	365.83	56.236
4	240.16	56.486	30	366.54	56.200
5	341.85	56.475	31	367.24	56.161
6	343.41	56.472	32	367.91	52.425
7	344.86	56.474	33	368.57	52.564
8	346.22	56.478	34	369.21	52.700
9	347.51	56.482	35	369.84	52.834
10	348.74	56.485	36	370.47	52.966
11	349.92	56.488	37	371.08	53.095
12	351.05	56.490	38	371.68	53.221

13	352.14	56.492	39	372.28	53.345
14	353.19	56.492	40	362.86	53.467
15	354.20	56.492	41	373.44	53.587
16	355.19	56.490	42	374.02	53.703
17	356.14	56.489	43	374.59	53.818
18	357.07	56.486	44	375.15	53.930
19	357.96	56.483	45	375.72	54.093
20	358.84	56.479	46	376.29	54.145
21	359.64	56.475	47	376.86	54.247
22	360.52	56.470	48	377.44	54.345
23	361.33	56.437	49	378.03	54.439
24	362.12	56.404	50	378.64	54.527
25	362.89	56.370	51	379.29	54.606
26	363.65	56.337	52	380.01	54.665

IV. Solution sets of product rates profiles for column 2

Component	$d_{i,2}$ (Kg mole / hr)	$w_{2,i}$ (Kg mole / hr)	$b_{i,2}$ (Kgmole / hr)
1	0.13988×10^{-14}	0.79899×10^{-16}	0.18892×10^{-20}
2	0.57999×10^1	0.12848×10^1	0.30208×10^1
3	0.10198×10^2	0.57079×10^1	0.26624×10^2
4	0.21138×10^{-2}	0.58192×10^{-2}	0.37496×10^{-1}
5	0.38839×10^{-6}	0.21680×10^{-3}	0.90409×10^{-2}
6	0.13979×10^{-6}	0.12231×10^{-2}	0.11993
7	0.30294×10^{-12}	0.23966×10^{-4}	0.18869

$$Q_{C,2} = 0.57000 \times 10^9 \text{ cal / hr}$$

$$Q_{R,2} = 0.52253 \times 10^9 \text{ cal / hr}$$

تغییر مقادیر θ و Θ برای حدس‌های مختلف در جدول ۱۵-۶ نشان داده شده است.

جدول ۱۵-۶: مشخصه‌های همگرایی برای مثال ۱۵-۳

1-Column θ 's				
Trial	Column 1		Column 2	
	θ_0	θ_1	θ_0	θ_1
1	435.43	29.111	94.863	3.0438
2	0.091353	0.11463	0.39932	0.48084
3	2.9271	2.4237	1.4243	1.2706
4	0.56381	0.62113	0.89824	0.91891
5	1.3090	1.3016	1.0657	1.0492
6	0.88564	0.89622	0.96894	0.97597
7	1.0402	1.0449	1.0165	1.0126
8	0.98519	0.98711	0.99377	0.99512
9	1.0066	1.0045	1.0022	1.0017
10	0.99671	0.99741	0.99913	0.99935
11	1.0012	1.0014	1.0004	1.0004
12	0.99953	0.99935	0.99973	0.99980
13	0.99995	1.0001	1.0001	1.0001
14	1.0	1.0	1.0	1.0

2-System Θ 's				
Trial	Θ_1	Θ_2	Θ_3	Θ_4
1	1.1727	1.2217	1.0173	1.0521
2	1.0446	1.0755	1.0235	1.0276
3	0.99716	0.99252	0.99827	0.99714
4	1.0161	1.0308	1.0099	1.0140
5	1.0006	1.0013	1.0004	1.0006
6	0.99918	0.99817	0.9942	0.99916
7	1.0008	1.0018	1.0006	1.0009
8	1.0	1.0	1.0	1.0
9	0.99984	0.99965	0.99989	0.99985
10	1.0	1.0	1.0	1.0

11	0.99953	0.9935	0.99973	0.99980
12	1.0	1.0	1.0	1.0
13	1.0	1.0	1.0	1.0

3- The convergence criteria were satisfied at the end of the 14th trial. 16.84 seconds of computer time were required on an AMDAHL 470 V/6 computer with a WATFIV compiler

The convergence criterion for the system was that the euclidean norm of the g functions for the system $\leq 10^{-4}$, that is,

$$\left[\frac{(g_1)^2 + (g_2)^2 + (g_3)^2 + (g_4)^2}{4} \right]^{\frac{1}{2}} \leq 10^{-4}$$

When the g functions are evaluated at $\Theta_1 = \Theta_2 = \Theta_3 = \Theta_4 = 1$

جدول ۱۵-۷: داده‌های فشار بخار برای بدست آوردن مشخصات تعادلی

I. Vapor Pressures : constants for the Antoine equation

$$\ln P(\text{mm Hg}) = A - \frac{B}{C + T(K)}$$

Component	A	B	C
Toluene	16.01365	3096.516	-53.6680
Ethylbenzene	16.01951	3279.456	-59.9440
Styrene	16.01933	3328.571	-63.7200
Isopropyl benzene	15.97224	3363.593	-65.3730
1-methyl-3-ethyl benzene	16.15452	3521.067	-64.6410
α -methyl styrene	13.88532	2216.659	-132.9380
Cis-1-propyl benzene	15.22500	3056.589	-95.6551

- Selected Values of Hydrocarbon and Related Compounds , American Research Project 44 , Thermodynamics Research Center , Chemical Engineering Division , Texas Engineering Experimental Station.

فرمولاسیون این مثال به صورت زیر است.

برای هر جزء ، حول هر برج می‌توان یک موازنه جرم نوشت.

$$F X_i + d_{2i} - d_{1i} - w_{1i} - b_{1i} = 0$$

۳۱-۱۵

$$b_{1i} - d_{2i} - w_{2i} - b_{2i} = 0$$

در دو معادله اخیر شش مجهول وجود دارد پس چهار ضریب Θ باید تعریف شود که به صورت زیر می‌باشند.

$$\left(\frac{w_{1i}}{d_{1i}}\right)_{co} = \Theta_1 \left(\frac{w_{1i}}{d_{1i}}\right)_{ca}, \quad \left(\frac{b_{1i}}{d_{1i}}\right)_{co} = \Theta_2 \left(\frac{b_{1i}}{d_{1i}}\right)_{ca}$$

$$\left(\frac{w_{2i}}{d_{2i}}\right)_{co} = \Theta_3 \left(\frac{w_{2i}}{d_{2i}}\right)_{ca}, \quad \left(\frac{b_{2i}}{d_{2i}}\right)_{co} = \Theta_4 \left(\frac{b_{2i}}{d_{2i}}\right)_{ca}$$

۳۲-۱۵

جدول ۱۵-۸ : داده‌های آنتالپی

II. Vapor Enthalpies : Curve fit constants for the enthalpy function

$$\frac{H - H_0^\circ}{T} = A + BT + CT^2 + DT^3$$

Where H is the enthalpy in the standard state of a perfect gas at the temperature $T(K)$ in $Cal/grmole$, and H_0° is the enthalpy of the perfect gas at $0 K$.

Component	A	B	C	D
Toluene	-1.658389	0.7856237×10^{-1}	$-0.1114677 \times 10^{-3}$	0.9747316×10^{-7}
Ethyl benzene	7.417126	0.2327917×10^{-1}	0.515253×10^{-4}	$-0.3961877 \times 10^{-7}$
Styrene	18.09991	$-0.6840097 \times 10^{-1}$	$0.28509830 \times 10^{-3}$	$-0.2388318 \times 10^{-6}$
Isopropyl Benzene	21.29170	$-0.8031827 \times 10^{-1}$	0.3468338×10^{-3}	$-0.2915282 \times 10^{-6}$
1- methyl 3- ethylbenzene	14.81064	$-0.1858342 \times 10^{-1}$	0.1802130×10^{-3}	$-0.1501775 \times 10^{-6}$
methyl Styrene- α	149.5145	-1.079530	0.2885290×10^{-2}	$-0.2408575 \times 10^{-5}$
Cis-1-propyl-benzene	149.5145	-1.079530	0.2885290×10^{-2}	$-0.2408575 \times 10^{-5}$

III. Liquid Enthalepies

$$h - H_0^\circ = H - H_0^\circ - \lambda$$

By use of the Clausius -Clapeyron equation

$$\frac{d \ln P}{dT} = \frac{\lambda}{RT^2}$$

And the Antoine equation of part I, the following expression is obtained for the latent heat of vaporization λ .

$$\lambda = RT^2 \left| \frac{B}{(C+T)^2} \right|$$

که ضرایب Θ_1 ، Θ_2 ، Θ_3 و Θ_4 باید شرط $g_0 = g_1 = g_2 = g_3 = 0$ را برقرار سازند. توابع ذکر شده می-توانند برای هر کدام از جریان‌های W_1 ، B_1 ، W_2 ، B_2 ، D_1 و D_2 نوشته شود که جریان‌های W_1 ، B_1 ، W_2 و B_2 انتخاب شده‌اند.

$$g_0 = \sum w_{1i} - W_1 = 0, \quad g_1 = \sum b_{1i} - B_1 = 0$$

$$g_2 = \sum w_{2i} - W_2 = 0, \quad g_3 = \sum b_{2i} - B_2 = 0$$

روابط موجود در معادله ۱۵-۳۲ به صورت زیر بازنویسی می‌شوند.

$$\begin{aligned}
 w_{1i} &= r_{1i} d_{1i} & r_{1i} &= \Theta_1 \left(\frac{w_{1i}}{d_{1i}} \right)_{ca} \\
 b_{1i} &= r_{2i} d_{1i} & r_{2i} &= \Theta_2 \left(\frac{b_{1i}}{d_{1i}} \right)_{ca} \\
 w_{2i} &= r_{3i} d_{2i} & r_{3i} &= \Theta_3 \left(\frac{w_{2i}}{d_{2i}} \right)_{ca} \\
 b_{2i} &= r_{4i} d_{2i} & r_{4i} &= \Theta_4 \left(\frac{b_{2i}}{d_{2i}} \right)_{ca}
 \end{aligned}$$

۳۳-۱۵

چهار رابطه موجود در معادله ۱۵-۳۳ و دو رابطه موجود در معادله ۱۵-۳۱ به طور همزمان حل می‌شوند تا غلظت جریان‌های ارتباطی بدست آیند.

منابع

- 1- Billingsley .D. S, " On the Equations of Holland in the Solution of Problems in Multicomponent Distillation," *IBM J. Res. Develop.*, 14:33 (1970).
- 2- Brice Carnahan, H. A. Luther, and J. O. Wilkes , *Applied Numerical Methods*, John Wiley and Sons, Inc, New York, 1964.
- 3- Fenske .M. R , "Fractionation of Straight-run Pennsylvania Gasoline," *Ind. Eng .Chem.*, 24:482 (1932).
- 4- Holland .C. D, *Usteady State Processes with Applications in Multicomponent Distillation*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J., 1966
- 5- Pendon .G. P , " Solve More Distillation Problems: Part 1. Improvements Give Extract Answers," *Hydrocarbon Process.*, 53(7) : 148 (1974).
- 6- Lyster .W. N, S. L. Sullivan, Jr., D. S. Billingsley, and C. D. Holland: "Figure Distillation This New Way : Part 3—Cornsider Multi-Feed Columns whit Sidestreams." *Pet. Refiner*, 38 (10) : 139 (1959).
- 7- Tomme .W. J and C. D. Holland , "Figure Distillation This New Way : Part II—When Columns are Operated as a Unit," *Pet. Refiner*, 41 (6):139 (1962).
- 8- Nartker .T. A, J. M. Srygley, and C. D. Holland: "Solution of Problem Involving System of Distillation Columns," *Can. J. Chem. Eng.*, 44: (1966).

مسائل

۱- برای یک برج که علاوه بر محصول بالا و پایین برج ، شامل جریان جانبی نیز می‌باشد نشان دهید مشتقات توابع g_0 و g_1 به صورت زیر می‌باشند.

$$(a) \frac{\partial g_0}{\partial \theta_0} = -\sum_{i=1}^c \frac{(b_i)_{ca} (d_i)_{ca} F X_i}{[(d_i)_{ca} + \theta_0 (b_i)_{ca} + \theta_1 (w_{1i})_{ca}]^2}$$

$$(b) \frac{\partial g_0}{\partial \theta_1} = -\sum_{i=1}^c \frac{(w_{1i})_{ca} (d_i)_{ca} F X_i}{[(d_i)_{ca} + \theta_0 (b_i)_{ca} + \theta_1 (w_{1i})_{ca}]^2}$$

$$(c) \frac{\partial g_1}{\partial \theta_0} = -\sum_{i=1}^c \frac{\theta_1 (w_{1i})_{ca} (d_i)_{ca} F X_i}{[(d_i)_{ca} + \theta_0 (b_i)_{ca} + \theta_1 (w_{1i})_{ca}]^2}$$

$$(d) \frac{\partial g_1}{\partial \theta_1} = \sum_{i=1}^c \frac{(w_{1i})_{ca} [(d_i)_{ca} + \theta_0 (b_i)_{ca}] F X_i}{[(d_i)_{ca} + \theta_0 (b_i)_{ca} + \theta_1 (w_{1i})_{ca}]^2}$$

۲- 100 grmole/hr خوراکی با ترکیب زیر وارد یک برج می‌شود. برج دارای پنج سینی و مجهز به کندانسور کلی و جوش‌آور جزئی می‌باشد خوراک وارد سینی سوم می‌شود و جریان جانبی از سینی دوم خارج می‌شود.

Component	X_i	α_i
1	1/3	1
2	1/3	2
3	1/3	3

الف : در صورتی که $w_{1b}/d_b = 10$ و $b_b/d_b = 16$ باشد مقادیر w_{1i}/d_i ، b_i/d_i ، D و W_1 را بدست آورید.

ب : در صورتی که $w_{1b}/d_b = 5$ و $b_b/d_b = 8$ باشد مورد الف را تکرار نمایید. جواب نهایی مسئله به صورت زیر می‌باشد.

Component	b_i / d_i	w_i / d_i
1	16	10
2	1	2.5
3	0.1975	1.11111
D = 23.0808		W ₁ = 46.9075
D = 34.6522		W ₁ = 38.2498

۳- با استفاده از مقادیر w_{1i}/d_i و b_i/d_i برای $D = 23.0808$ و $W_1 = 46.9075$ برای قسمت الف مسئله قبل ، مقادیر w_{1i}/d_i و b_i/d_i را برای $D = 34.6522$ و $W_1 = 38.2494$ با استفاده از روش همگرایی θ بدست آورید.

Component	X_i	α_i	$(b_i/d_i)_1$	$(w_i/d_i)_1$
1	1/3	1	16	10
2	1/3	2	1	2.5000
3	1/3	3	0.1975	1.1111

مقادیر حدس اولیه $\theta_0 = 0.5$ و $\theta_1 = 0.5$ در نظر گرفته شود. جواب نهایی مسئله به صورت زیر می باشد.

Component	b_i/d_i	w_i/d_i
1	8.000	5.0000
2	0.500	1.2500
3	0.09875	0.5555

۴- 100 grmole/hr خوراکی با ترکیب زیر وارد دو برج متصل به هم مطابق شکل ۱۵-۸ می شود. هر کدام از برجها دارای پنج سینی و مجهز به کندانسور کلی می باشند نسبت جریان برگشتی در هر دو برج دو می باشد. الف : در صورتی که ماده 1 به عنوان مینا b (base) در نظر گرفته شود و همچنین $b_{b,1}/d_{b,1} = 16$ و $b_{b,2}/d_{b,2} = 8$ باشد، مقادیر D_1 ، D_2 ، B_1 و B_2 را محاسبه نمایید. ب : در صورتی که $b_{b,1}/d_{b,1} = 8$ و $b_{b,2}/d_{b,2} = 4$ باشد قسمت الف را تکرار نمایید.

Component	Column 1, X_i	α_i , columns 1 And 2
1	1/3	1
2	1/3	2
3	1/3	3

فصل شانزدهم

روش همگرایی θ برای برج‌های تقطیر آزنوتروپی و استخراجی

مقدمه

تقطیر آزنوتروپی و استخراجی از روش‌های قدیمی تقطیر می‌باشند که در حدود سال ۱۹۳۰ به صورت صنعتی مورد استفاده قرار گرفته‌اند. در سال ۱۹۰۸ روش استخراج روغن از الکل تخمیری توسط گایلام^۱ [۸] ارائه شد نام تقطیر استخراجی ابتدا توسط دان و همکاران^۲ [۶] مورد استفاده قرار گرفت. برج‌های تقطیر آزنوتروپی و استخراجی برای جدا کردن مخلوط‌های غیر ایده‌آل بکار گرفته می‌شوند. در قسمت زیر جنبه‌های مختلف تقطیر آزنوتروپی و استخراجی به صورت کیفی مورد بررسی قرار گرفته است و در ادامه روش حل آنها مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

بررسی مشخصه‌های تقطیر آزنوتروپی و استخراجی

برای اینکه مخلوط‌هایی که دمای جوش اجزاء آن به هم نزدیک هستند را به طور اقتصادی از هم جدا کنیم از تقطیر آزنوتروپی و استخراجی استفاده می‌کنیم. چون وقتی که دمای جوش اجزاء به هم نزدیک هستند تعداد مراحل تعادلی در تقطیر ساده بسیار زیاد خواهد شد و جداسازی اقتصادی نخواهد بود. به دلیل رفتار غیر ایده‌آل این مخلوط‌ها با اضافه کردن برخی مواد اختلاف فراریت بین دو ماده افزایش خواهد یافت که به ماده اضافه شده اصطلاحاً حلال^۳ گویند. هرگاه حلال اضافه شده با یک یا چند ماده از مخلوط تشکیل نقطه آزنوتروپ دهد فرآیند را اصطلاحاً تقطیر آزنوتروپی گویند. اما وقتی که حلال اضافه شده اصلاً با مواد تشکیل نقطه آزنوتروپ ندهد و فقط باعث افزایش فراریت بین اجزاء شود، فرآیند را اصطلاحاً تقطیر استخراجی گویند.

1- Emile Guillaume

2- Dunn et al

3- Solvent

رفتار حلال

یک حلال موثر حلالی است که باعث جداسازی یک یا چند جزء می‌شود. این کار با کاهش یا افزایش فراریت نسبی این اجزاء امکان‌پذیر است. تئوری‌های مختلفی بسط داده شده تا قوانینی برای انتخاب حلال بدست آید. در تقطیر استخراجی، خارج کردن یک یا چند جزء توسط حلال به یک یا ترکیبی از عوامل زیر نسبت داده می‌شود.

۱- پیوند هیدروژنی

۲- مشخصه‌های قطبیت حلال و بقیه اجزاء سیستم

۳- تشکیل یک کمپلکس ضعیف شیمیایی

۴- واکنش شیمیایی میان حلال با یک یا چند جزء از سیستم

در استخراج آزنوتروپی حلال باید تمایل اجزاء به یکدیگر را در فاز مایع کم کند تا از این طریق فراریت نسبی آنها افزایش یابد. به طور مثال معمولاً یک حلال غیر قطبی به یک محلول قطبی افزوده می‌شود تا فراریت نسبی جزئی که قطبیت بیشتری دارد نسبت به جزئی که قطبیت کمتری دارد افزایش یابد. به هر حال با استفاده از یک تئوری نمی‌توان اثر همه حلال‌ها در تقطیر آزنوتروپی و استخراجی را توجیه کرد اما با استفاده از این تئوری‌ها می‌توان یک قانون نسبی برای انتخاب حلال بدست آورد. ایده قطبیت حلال ابتدا توسط هاپکینز و فریچ^۱ [۱۴] مطرح گردید. در این ایده از یک ترکیب اکسیژن‌دار به عنوان حلال برای جداسازی هیدروکربن‌ها استفاده شد. این ترکیبات اکسیژن‌دار شامل اترها، اکسیدها، آلدئیدها، کتون‌ها، استالها و الکل‌ها می‌باشند. از آنجا که در هیدروکربن‌هایی با پیوند دوگانه معمولاً با افزایش جرم ملکولی قطبیت افزایش می‌یابد و همچنین ترکیبات خطی قطبیت بیشتری نسبت به ترکیبات شاخه‌دار دارند و ترکیبات اولفینی بسیار قطبی‌تر از ترکیبات پارافینی هستند پس اضافه کردن مواد قطبی باعث جذب مواد قطبی موجود در محلول (به صورت ایجاد نقطه آزنوتروپ) خواهد شد و جداسازی به صورت اقتصادی امکان‌پذیر می‌شود.

جداسازی ترکیبات اکسیژن‌دار با استفاده از تقطیر آزنوتروپی و استخراجی

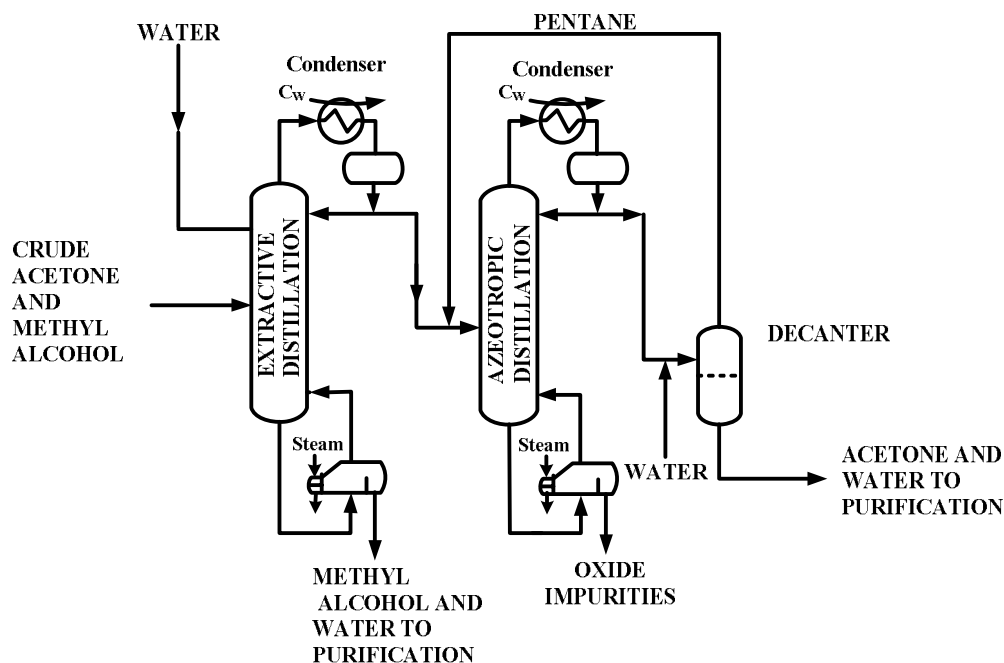
ترکیبات اکسیژن‌دار هیدروکربنی معمولاً اختلاف نقطه جوش کمی با یکدیگر دارند که یک نمونه از این محصولات در جدول ۱۶-۱ نشان داده شده است.

جدول ۱۶-۱: ترکیبات اکسیژن‌دار هیدروکربنی

Compound	Normal boiling Point °C
Propionaldehyde	48.8
Acrolein	52.5
Ethyl acetate	77.1
Methyl propionate	79.7
Allyl alcohol	96.6
n-Propyl alcohol	97.8
Sec-butyl alcohol	99.5

تقطیر مستقیم این ترکیبات برای بدست آوردن محصولات خالص عملاً به علت زیاد بودن تعداد مراحل تئوری اقتصادی نخواهد بود. یک محصول هیدروکربنی که توسط کلانس^۱ سنتز شده حاوی بیش از ۵۰ هیدروکربن است که در حدود ۵۰ آزئوتروپ دوجزئی با یکدیگر ایجاد می‌کنند همچنین چندین آزئوتروپ سه‌جزئی نیز در این سیستم وجود دارد. تعدادی از این آزئوتروپ‌های دو جزئی در جدول ۱۶-۲ نشان داده شده است که دمای جوش اجزاء خالص و دمای نقاط آزئوتروپ آنها نشان می‌دهد که امکان جداسازی این اجزاء توسط تقطیر ساده امکان‌پذیر نیست.

در صورتی که حلال مورد استفاده بسیار قطبی باشد باعث جذب مواد قطبی خواهد شد و فراریت آنها را به شدت کاهش می‌دهد و همراه با خود از پایین برج خارج می‌سازد و مواد غیر قطبی موجود در محلول از بالای برج خارج می‌شوند و در صورتی که حلال مورد استفاده غیر قطبی باشد باعث دور شدن مواد قطبی از یکدیگر می‌شود و فراریت آنها را افزایش می‌دهد که در این حالت مواد قطبی از بالای برج خارج می‌شوند و مواد غیر قطبی از پایین برج بدست می‌آیند.



شکل ۱۶-۱: فرآیند جداسازی استن و متانول با استفاده از تقطیر آزئوتروپی و استخراجی

جدول ۱۶-۲: دمای جوش ترکیبات اکسیژن‌دار و آزن‌تروپ‌های آنها

Pure compound or binary azeotrope	Normal boiling Point °C
Acetone, methyl alcohol	55.5
Acetone	56.5
Methyl alcohol, methyl ethyl ketone	63.5
Methyl alcohol	64.7
Methyl ethyl ketone, water	73.4
Ethyl alcohol, methyl ethyl ketone	75.7
Methyl ethyl ketone, isopropyl alcohol	77.9
Ethyl alcohol , water	78.2
Ethyl alcohol	78.4
Methyl ethyl ketone, tert-butyl alcohol	78.7
Methyl ethyl ketone	79.6
teri-butyl alcohol, water	69.9
Isopropyl alcohol, water	80.3
Isopropyl alcohol	82.5
teri-butyl alcohol	82.9
n-propyl alcohol, water	87.0
Sec-butyl alcohol, water	87.5
Isopropyl alcohol, water	89.8
Water, n-propyl alcohol	92.7
n-propyl alcohol	99.5
Sec-butyl alcohol	99.5
Water	100.0
Isobutyl alcohol	108.0
n-butyl alcohol	117.5

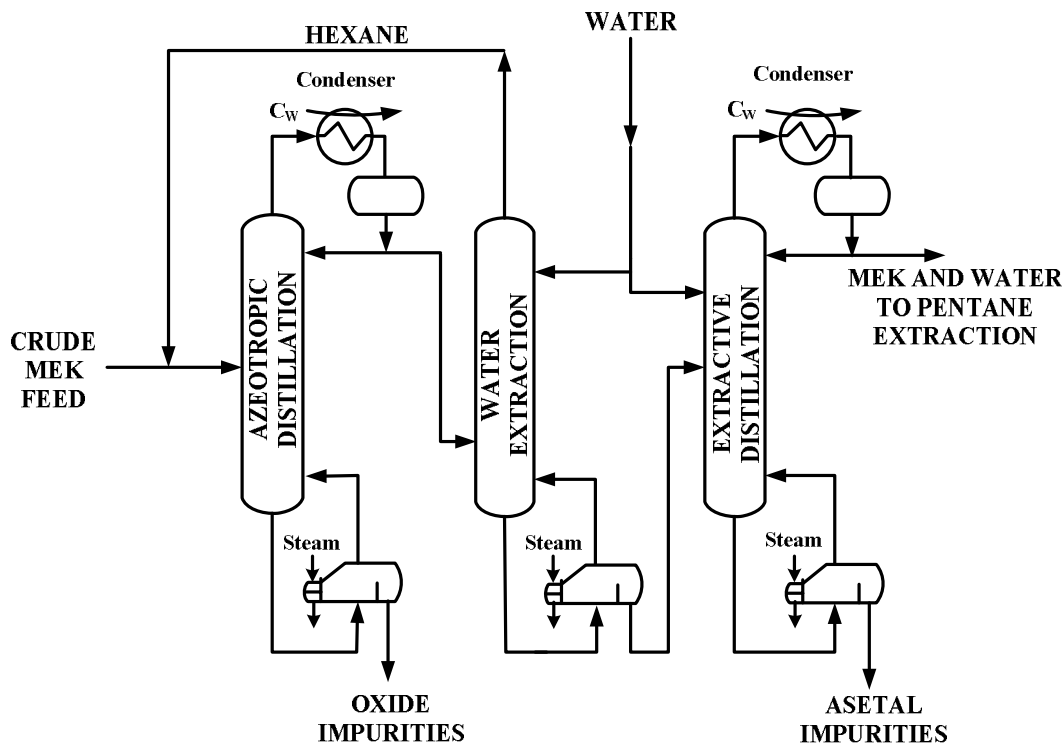
جداسازی استن و متانول

استفاده از حلال‌های قطبی و غیر قطبی برای جداسازی متانول و استن از مخلوط آنها با تترامتیلن و دیگر ترکیبات اکسیژن‌دار توسط هاپکینز و فریچ [۱۴] شرح داده شده است. شمایی از این فرآیند جداسازی در شکل ۱۶-۱ نشان داده شده است.

آزئوتروپ سه‌جزئی استن-متانول-تترامتیلن در تقطیر استخراجی توسط حلال آب (یک حلال قطبی قوی) شکسته می‌شود که حلال اضافه شده باعث می‌شود تا فراریت متانول نسبت به آزئوتروپ استن و تترامتیلن بسیار کاهش یابد و در نتیجه متانول و آب از پایین برج و استن و تترامتیلن از بالای برج خارج می‌شوند. در برج دوم که یک برج آزئوتروپی است توسط حلال پنتان ترکیب آزئوتروپی استن و تترامتیلن از هم جدا می‌شوند. در این سیستم پنتان و استن تشکیل آزئوتروپ دمای مینیمم (32°C) می‌دهند و از بالای برج خارج می‌شوند و تترامتیلن از پایین برج خارج می‌شود. سپس آزئوتروپ استن و پنتان توسط آب شکسته می‌شود و پنتان به فرآیند بازمی‌گردد و استن و آب برای خلوص بیشتر به مراحل دیگر فرستاده می‌شوند.

جداسازی متیل اتیل کتون از ترکیبات اکسیژن‌دار

یکی دیگر از فرآیندهایی که توسط هاپکینز و فریچ [۱۴] ارائه شده جداسازی متیل اتیل کتون از ترکیبات اکسیژن‌دار شامل متیل تتراهیدروفوران، فرمالها، استالها و دیگر ترکیبات اکسیژن‌دار می‌باشد که توسط تقطیر آزئوتروپی و استخراجی امکان‌پذیر است. مراحل این فرآیند در شکل ۱۶-۲ نشان داده شده است در برج آزئوتروپی ابتدا با اضافه کردن حلال هگزان، ترکیبات اکسیژن‌دار ناخالص از پایین برج و مخلوط آزئوتروپی با دمای 65°C از بالای برج خارج می‌شود. در ادامه توسط حلال آب در یک برج استخراج مایع-مایع، حلال هگزان از مواد گرفته می‌شود سپس در برج تقطیر استخراجی توسط حلال آب با درصد وزنی ۶۰٪ روی سینی‌ها، بقیه ناخالصی‌ها از متیل اتیل کتون گرفته می‌شود در این برج چون آب یک حلال قطبی است باعث کم کردن جاذبه بین متیل اتیل کتون و استال‌ها می‌شود. در نتیجه فراریت استال کاهش می‌یابد و فراریت متیل اتیل کتون افزایش می‌یابد و همراه با آب از بالای برج خارج می‌شود و در نهایت محلول آب و متیل اتیل کتون برای جداسازی به واحد استخراج با پنتان فرستاده می‌شود.

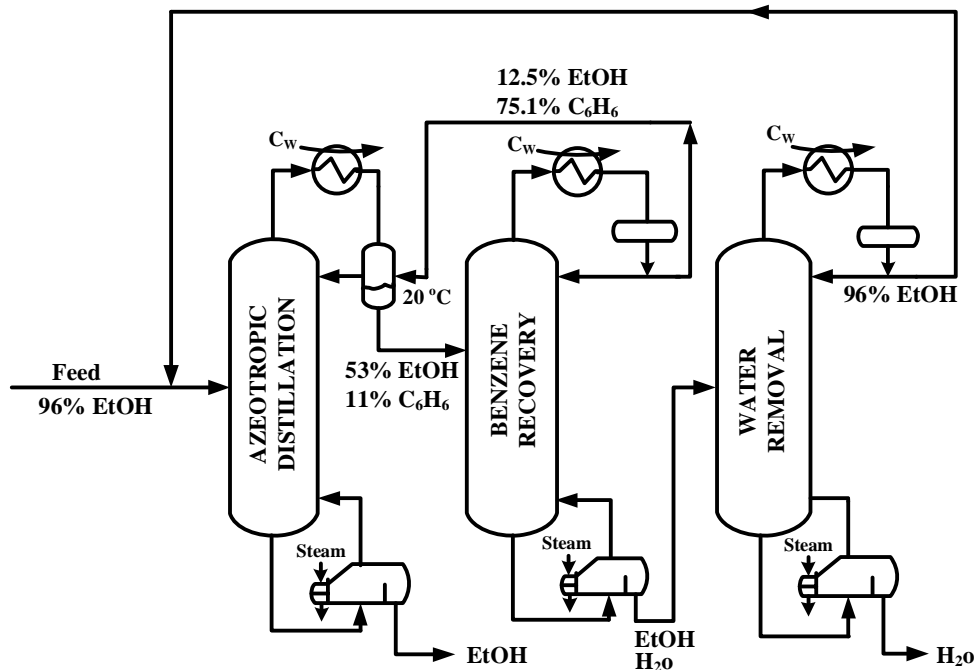


شکل ۱۶- ۲: خالص سازی متیل اتیل کتون با استفاده از تقطیر آزنوتروپی و استخراجی

جداسازی اتانول و آب

فرآیند جداسازی اتانول و آب با حلال بنزن در برج های آزنوتروپی و استخراجی توسط گوینوت و کلارک^۱ [۹] ارائه شده است. این فرآیند بر این موضوع استوار است که بنزن، اتانول و آب یک آزنوتروپ سه جزئی ایجاد می کنند که در آن نسبت آب به اتانول بسیار زیادتر از نسبت آب به اتانول در آزنوتروپ دوجزئی آب و اتانول می باشد. در برج اول که در شکل ۱۶-۳ نشان داده شده است توسط حلال بنزن، آزنوتروپ سه جزئی بنزن- اتانول و آب از اتانول جدا می شود و اتانول خالص از پایین برج و آزنوتروپ سه جزئی از بالای برج خارج می شود. سپس محصول بالای برج اول و محصول بالای برج دوم در یک جداکننده قرار می گیرند تا جریان برگشتی به برج اول از بنزن تغلیظ شود و در ادامه محلول آب- اتانول و بنزن وارد برج دوم می شود تا بنزن آن جدا شود و سپس در برج سوم اتانول و آب از هم جدا می شود که آب خالص از پایین برج خارج می شود و محصول بالای برج شامل ۹۶٪ اتانول است که به ورودی برج اول منتقل می شود.

در صورتی که خوراک این فرآیند محلول اتانول و آب با غلظت ۹۶٪ باشد مطابق شکل ۱۶-۳ باید به برج اول وارد شود و در صورتی که غلظت آن پایین باشد باید به خروجی پایین برج دوم اضافه شود و به عنوان خوراک وارد برج سوم شود.



شکل ۱۶-۳: فرآیند جداسازی آزنوتروپی اتانول و آب با استفاده از حلال بنزن

حلال برای جداسازی هیدروکربن‌ها

پس از جنگ جهانی دوم تقاضا برای دو محصول خالص تلون و بوتادین به شدت افزایش یافت که تلون برای تولید ترکیبات انفجاری و بوتادین برای تولید ترکیبات لاستیکی مورد استفاده قرار می‌گرفت. برای این منظور از سیستم‌هایی شامل برج‌های آزنوتروپی و استخراجی در مقیاس وسیع استفاده می‌شد.

حلالی که در این فرآیند مورد استفاده قرار می‌گیرد باید شرایط زیر را داشته باشد.

۱- حلال باعث خوردگی فلزات نشود.

۲- با اجزاء خوراک واکنش ندهد تا منجر به تولید مواد ناخواسته نشود.

۳- اختلاف فراریت مواد را افزایش دهد تا تعداد سینی‌های لازم کاهش یابد و فرآیند اقتصادی شود.

۴- حلال با مواد موجود در خوراک باید اختلاف نقطه جوش مناسبی داشته باشد تا بتوان در مراحل بعدی آن را مورد جداسازی قرار داد.

۵- حلال سمی نباشد.

۶- به مقدار کافی و قیمت مناسب در دسترس باشد.

جداسازی بوتادین از مخلوط هیدروکربن‌ها

جداسازی بوتادین از مخلوط هیدروکربن‌ها (هیدروکربن‌های دارای چهار کربن) توسط حلال آمونیاک امکان‌پذیر است این فرآیند در یک سیستم تقطیر آزنوتروپی انجام می‌شود که توسط پوفنبرگ و همکاران^۱ [۲۱] شرح داده شده است. حلال‌های دیگری مانند فرفورال و استونیتریل نیز می‌توانند مورد استفاده قرار گیرند.

نمونه‌های دیگر از تقطیر آزنوتروپی

برای جداسازی تلون و بقیه آروماتیک‌ها از ترکیب هیدروکربن‌ها، حلال‌های مختلفی پیشنهاد شده است. یک لیست از حلال‌هایی که می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد توسط دان و همکاران [۶] ارائه شده است و استفاده از فنول برای جداسازی تلون نیز توسط آنها شرح داده شده است. در این فرآیند نسبت حلال به خوراک ۳ به ۱ می‌باشد. اولین واحد جداسازی تلون توسط حلال فنول در سال ۱۹۴۰ در پالایشگاه Houston مربوط به شرکت Shell تاسیس شد.

تولید بوتادین نیز مستلزم جداسازی بوتان و بوتن می‌باشد. جداسازی این دو ترکیب توسط حلال استن و آب (۸۵٪ استن و ۱۵٪ آب) توسط اتکینز و بویر^۲ [۱] پیشنهاد شد که نسبت حلال به خوراک ۰/۸۵ می‌باشد.

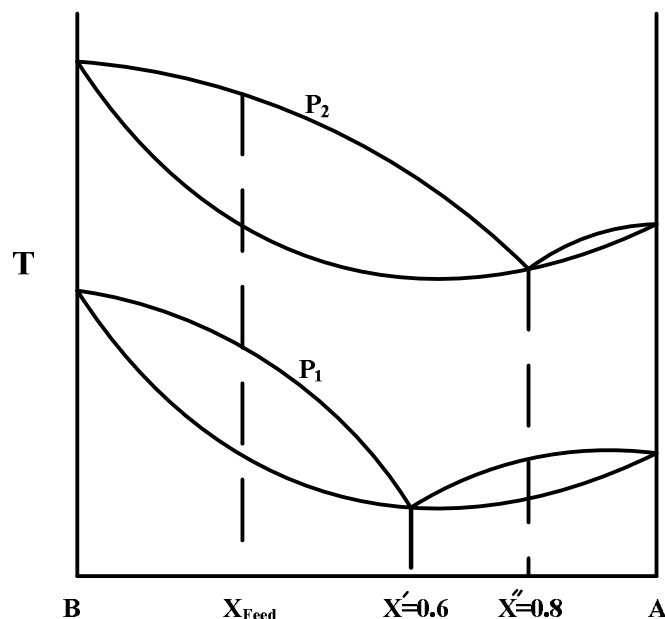
جداسازی آزنوتروپ‌ها با استفاده از تقطیر

نقطه آزنوتروپ در یک محلول باعث محدود کردن تقطیر خواهد شد اما اگر نقطه آزنوتروپ نسبت به فشار کل حساس باشد می‌توان جداسازی را در یک فرآیند همگن در دو برج تقطیر با فشارهای متفاوت انجام داد این فرآیند توسط ون وینکل^۳ [۲۶] پیشنهاد شده است.

جداسازی محلول آزنوتروپ دمای مینیمم همگن

محلول آزنوتروپ همگن به محلولی اطلاق می‌شود که فقط یک فاز مایع و بخار در تعادل وجود داشته باشند. فرض کنید نمودار دمای جوش محلول بر حسب جزء سبک (جزء با فشار بخار بالاتر یا دمای جوش پایین‌تر) به صورت شکل ۱۶-۴ باشد.

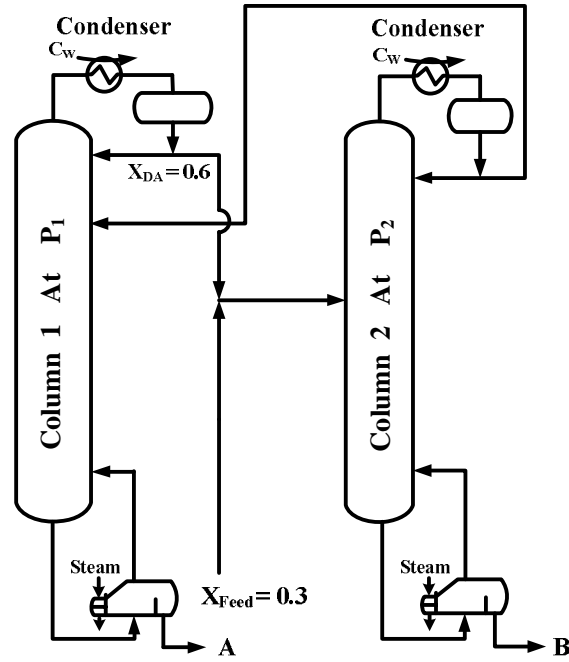
1- Poffenberger et al
2- Atkins and Boyer
3- Van Winkle



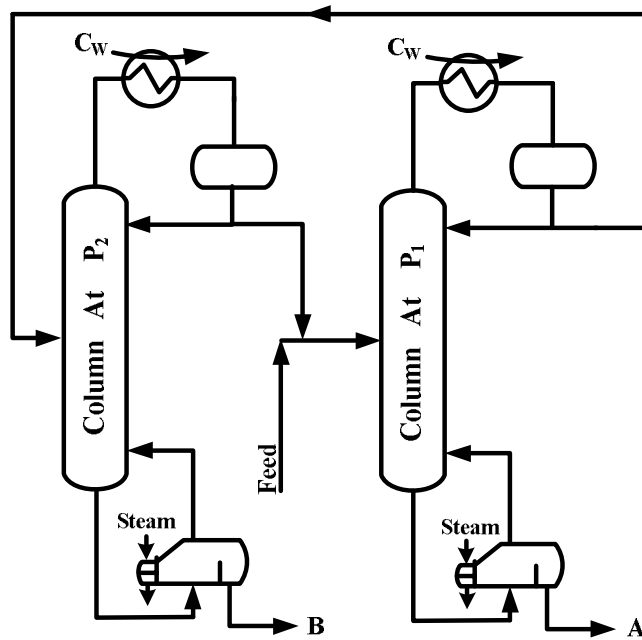
شکل ۱۶-۴: دیاگرام دمای جوش برای یک محلول آزنوتروپ دمای مینیمم همگن که نسبت به فشار کل حساس است

در این شکل، نقطه آزنوتروپ محلول نسبت به فشار کل حساس است و نقطه $x' = 0.6$ ، غلظت ماده سبک در نقطه آزنوتروپ در فشار P_1 و $x'' = 0.8$ ، غلظت ماده سبک در نقطه آزنوتروپ در فشار P_2 می‌باشد. برای خوراک ورودی به فرآیند سه حالت زیر پیش می‌آید.

۱- در صورتی که غلظت خوراک ورودی به فرآیند $x_F < x'$ باشد. ابتدا خوراک مطابق شکل ۱۶-۵ وارد برج دوم با فشار P_2 می‌شود که در این حالت ماده A مطابق شکل ۱۶-۴ تمایل دارد بیشتر در فاز بخار باشد پس ماده B تقریباً خالص از پایین برج و محلولی از A و B (ماکزیمم مقدار غلظت برای A $x_A = 0.8$ خواهد بود) از بالای برج خارج می‌شود. غلظت ماده A در محلول خارج شده از بالای برج باید بیشتر از x' باشد ($x' < x_{A_{D2}} < x''$). سپس محصول بالای برج دوم به عنوان خوراک وارد برج اول با فشار P_1 خواهد شد. در این حالت مطابق شکل ۱۶-۴ ماده A بیشتر تمایل دارد در فاز مایع باشد پس ماده A تقریباً خالص از پایین برج خارج می‌شود و از بالای برج محلولی شامل A و B خارج می‌شود که پس از اضافه شدن به خوراک ورودی به سیستم وارد برج دوم می‌شود.



شکل ۱۶-۵: استفاده از دو برج در فشارهای مختلف برای جداسازی یک محلول آزئوتروپ دمای مینیمم همگن در حالتی که $x_F < x'$ باشند.



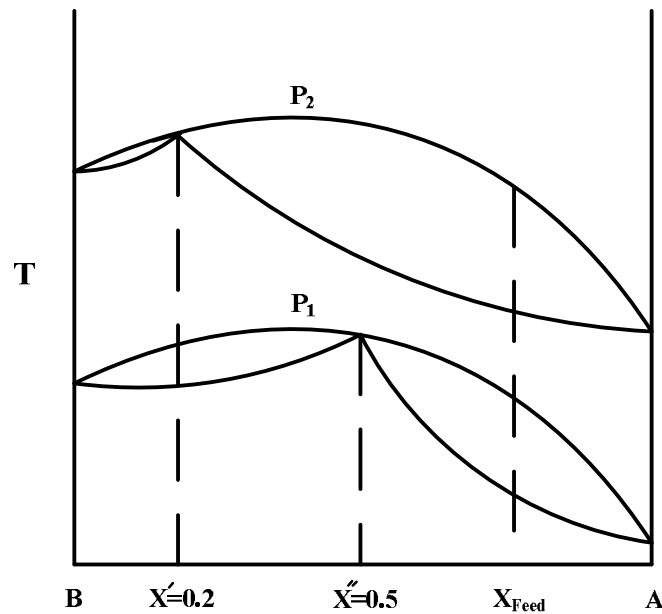
شکل ۱۶-۶: استفاده از دو برج در فشارهای مختلف برای جداسازی یک محلول آزئوتروپ دمای مینیمم همگن در حالتی که $x_F > x''$ باشد.

۲- در صورتی که غلظت خوراک ورودی به فرآیند $x_F > x''$ باشد ابتدا مطابق شکل ۱۶-۶ خوراک وارد برج اول با فشار P_1 می‌شود که در این حالت مطابق شکل ۱۶-۴ چون ماده A تمایل دارد بیشتر در فاز مایع باشد ماده A تقریباً خالص از پایین برج و محلولی از ماده A و B از بالای برج خارج می‌شود. باید مینیمم غلظت A خروجی از بالای برج $x_A = 0.6$ باشد، ضمناً غلظت ماده A محلول خارج شده از بالای برج باید کمتر از x'' باشد ($x' < x_A < x''$). سپس محلول بالای برج اول به عنوان خوراک وارد برج دوم با فشار P_2 می‌شود. در این حالت مطابق شکل ۱۶-۴ چون ماده B بیشتر تمایل دارد در فاز مایع باشد از پایین برج به صورت تقریباً خالص خارج می‌گردد و محلولی شامل A و B از بالای برج خارج می‌شود که پس از اضافه شدن به خوراک ورودی به سیستم وارد برج اول می‌شود.

۳- در صورتی که $x' < x_F < x''$ باشد هر کدام از مراحل بالا برای جداسازی ماده A و B امکان‌پذیر است و هر کدام اقتصادی‌تر باشد مورد استفاده قرار می‌گیرد.

جداسازی محلول آزنوتروپ دمای ماکزیمم همگن

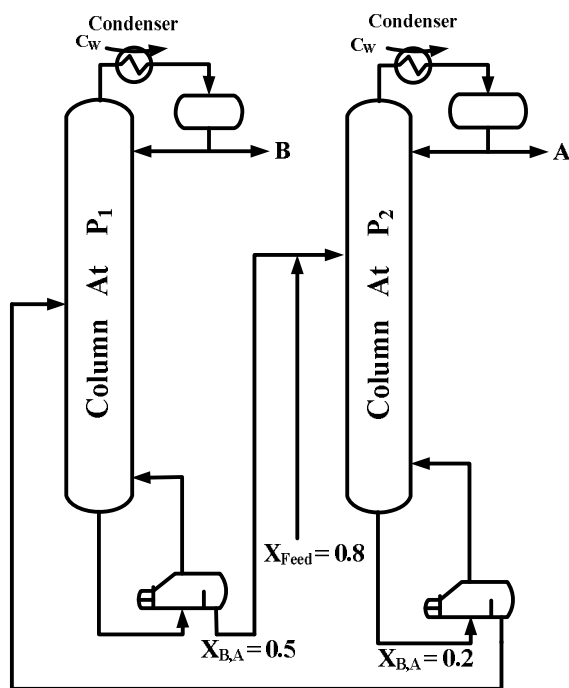
در این حالت نیز نقطه آزنوتروپ محلول نسبت به فشار کل حساس است که یک نمونه از نمودار دمای جوش محلول با آزنوتروپ دمای ماکزیمم بر حسب غلظت ماده سبک در شکل ۱۶-۷ نشان داده شده است که در این شکل $x' = 0.2$ ، غلظت ماده سبک در نقطه آزنوتروپ در فشار P_2 و $x'' = 0.5$ غلظت ماده سبک در نقطه آزنوتروپ در فشار P_1 می‌باشد.



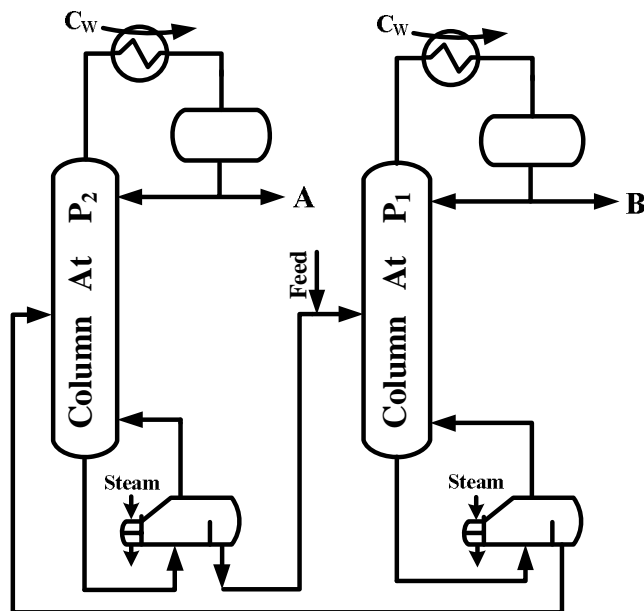
شکل ۱۶-۷: دیاگرام دمای جوش برای یک محلول آزنوتروپ دمای ماکزیمم همگن که نسبت به فشار کل حساس است

۱- در صورتی که غلظت خوراک ورودی به فرآیند بزرگتر از x'' ($x_F > x''$) باشد ابتدا خوراک مطابق شکل ۱۶-۸ وارد برج با فشار P_2 می‌شود. چون در این فشار مطابق شکل ۱۶-۷ ماده A بیشتر تمایل دارد در فاز بخار باشد از بالای برج به صورت تقریباً خالص خارج می‌شود و از پایین برج محلولی از A و B (مینیمم مقدار غلظت ماده A $x_A = x' = 0.2$ خواهد بود) خارج می‌شود. ضمناً غلظت ماده A در محلول خارج شده از پایین برج باید کوچکتر از x'' باشد ($x' < x_{A_{D2}} < x''$). سپس محصول پایین برجی که فشارش P_2 است به عنوان خوراک به برج اول با فشار P_1 تزریق می‌شود در این حالت مطابق شکل ۱۶-۷، ماده B بیشتر تمایل دارد در فاز بخار باشد و از بالای برج به صورت تقریباً خالص خارج می‌شود و محصول پایین برج پس از اضافه شدن به خوراک ورودی به سیستم وارد برج دوم می‌گردد.

۲- در صورتی که غلظت خوراک ورودی به فرآیند کوچکتر از x' ($x_F < x'$) باشد ابتدا مطابق شکل ۱۶-۹ خوراک وارد برج با فشار P_1 می‌شود. چون در این فشار مطابق شکل ۱۶-۷، ماده B تمایل بیشتری دارد که در فاز بخار باشد به صورت تقریباً خالص از بالای برج خارج می‌شود و از پایین برج محلولی از A و B (ماکزیمم مقدار غلظت ماده A $x_A = x'' = 0.5$ خواهد بود) خارج می‌شود. ضمناً غلظت این محلول باید بیشتر از x' باشد ($x' < x_{A_{B1}} < x''$). سپس محصول پایین برجی که فشارش P_1 است به عنوان خوراک وارد برج با فشار P_2 می‌شود. در این فشار مطابق شکل ۱۶-۷، ماده A تمایل بیشتری دارد که در فاز بخار باشد و به صورت تقریباً خالص از بالای برج خارج می‌شود و محصول پایین برج پس از اضافه شدن به خوراک ورودی سیستم وارد برج اول می‌گردد.



شکل ۱۶-۸: استفاده از دو برج در فشارهای مختلف برای جداسازی یک محلول آزئوتروپ دمای ماکزیمم همگن در حالتی که $x_F > x''$ باشد.



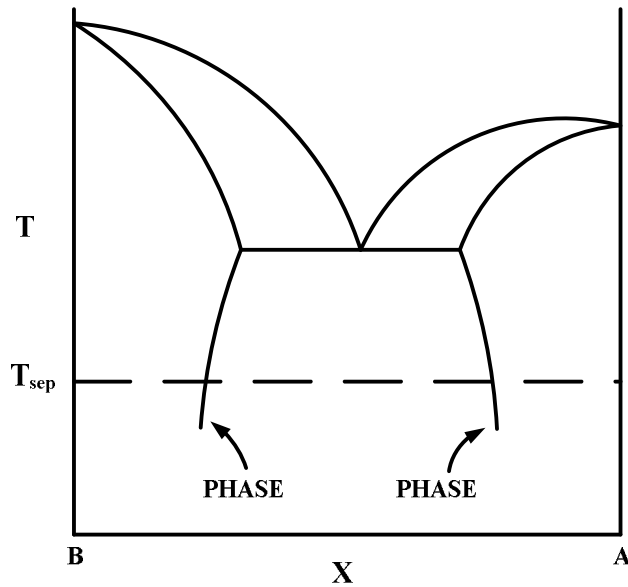
شکل ۹-۱۶: استفاده از دو برج در فشارهای مختلف برای جداسازی یک محلول آزئوتروپ دمای ماکزیمم همگن در حالتی که $x_F < x'$ باشد.

۳- در صورتی که غلظت خوراک $x' < x_F < x''$ باشد هر کدام از فرآیندهای اخیر برای جداسازی A و B امکان پذیر است و هر کدام اقتصادی تر باشد مورد استفاده قرار می گیرد.

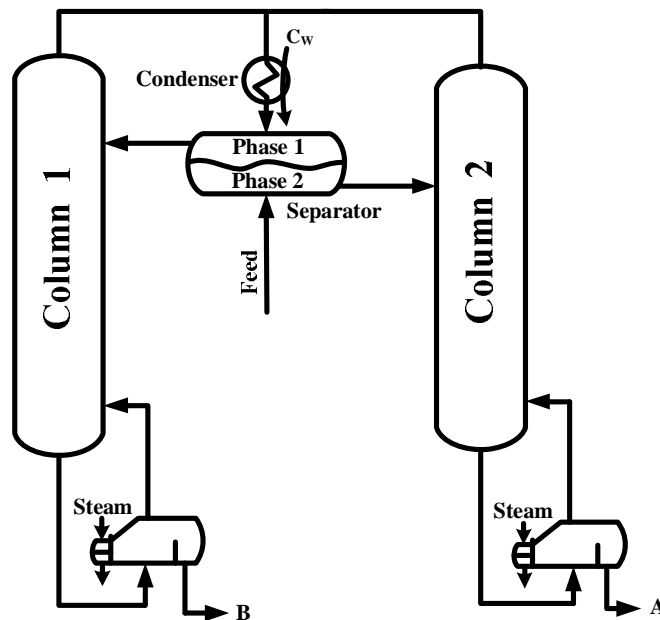
جداسازی محلول های آزئوتروپ غیر همگن

محلول آزئوتروپ غیر همگن، محلولی است که در یک محدوده دمایی به جای اینکه فازهای مایع و بخار در حال تعادل باشند دو فاز مایع در تعادل با یکدیگر وجود دارند. نمونه ای از دیاگرام دمای جوش یک محلول آزئوتروپ دمای مینیمم غیر همگن در شکل ۱۶-۱۰ نشان داده شده است.

در این موارد با توجه به دیاگرام و دمای محلول باید ابتدا خوراک را به دو فاز تبدیل کنیم سپس مطابق شکل ۱۶-۱۱ فازهای مختلف را به برج های مختلف هدایت می کنیم با توجه به شکل ۱۶-۱۰ وقتی دمای فاز I را افزایش دهیم محلول در منطقه دوفازی مایع و بخار قرار می گیرد که ماده A تمایل دارد بیشتر در فاز بخار باشد و ماده B بیشتر تمایل دارد در فاز مایع قرار گیرد که ماده B به صورت تقریباً خالص از پایین برج خارج می شود. وقتی دمای فاز II را افزایش می دهیم در منطقه دوفازی مایع و بخار قرار می گیرد که ماده A بیشتر تمایل دارد در فاز مایع و ماده B بیشتر تمایل دارد در فاز بخار باشد پس ماده A تقریباً خالص از پایین برج خارج می شود. سپس محصول بالای دو برج پس از سرد شدن به جداکننده فرستاده می شوند تا پس از مخلوط شدن با خوراک به دو فاز تبدیل شوند.



شکل ۱۶- ۱۰: دیاگرام دمای جوش برای یک محلولی آزنوتروپ دمای مینیمم غیرهمگن



شکل ۱۶- ۱۱: استفاده از دو برج برای جداسازی یک محلول آزنوتروپ دمای مینیمم غیرهمگن

جداسازی محلول‌های غیر ایده‌آل در برج‌های مرتبط

دو روش کلی برای حل سیستم‌های متصل به هم برای محلول‌های غیر ایده‌آل وجود دارد در روش اول که توسط کوبینک و همکاران^۱ [۱۹] پیشنهاد شده با استفاده از روش نیوتن-رافسون همه معادلات به طور

1- Kubicek et al

همزمان حل می‌شوند. روش دوم نیز توسط هاتچیتسون و شچوک^۱ [۱۸] ارائه شده است. در فرمولاسیون این مسائل سینی اول برج اول به عنوان اولین سینی و سینی آخر برج آخر به عنوان آخرین سینی در نظر گرفته می‌شود و معادلات بدست آمده توسط روش نیوتن-رافسون حل می‌شوند. همچنین می‌توان برای هر برج به طور جداگانه روش همگرایی θ را انجام داد و پس از یک یا چند مرحله سعی و خطا، روش Θ را برای برج‌ها اعمال نمود.

فرمولاسیون روش Θ برای سیستم برج‌های آرتوتروپی و استخراجی

با توجه به شکل ۱۶-۱۲ جریان پایین برج اول B_1 و جریان پایین برج دوم B_2 می‌باشد که ۹۴٪ از محصول پایین برج دوم به عنوان خوراک به برج اول بازمی‌گردد و ۶٪ دیگر آن به عنوان محصول از سیستم خارج می‌شود. ضمناً غلظت و جریان خوراک‌ها (F_1, F_2, F_3) کاملاً معلوم است. موازنه حول برج اول و دوم به صورت زیر است.

$$F_1 X_{1i} + F_2 X_{2i} + 0.94b_{i,2} - b_{i,1} - d_{i,1} = 0 \quad ۱-۱۶$$

$$F_3 X_{3i} + b_{i,1} - b_{i,2} - d_{i,2} = 0 \quad ۲-۱۶$$

از آنجا که در دو معادله اخیر چهار مجهول وجود دارد پس به دو معادله دیگر نیاز داریم که دو معادله با استفاده از دو ضریب Θ_1 و Θ_2 بدست می‌آیند. ضرایب Θ_1 و Θ_2 به صورت زیر تعریف می‌شوند.

$$\frac{b_{i,1}}{d_{i,1}} = \Theta_1 \left(\frac{b_{i,1}}{d_{i,1}} \right)_{ca} \quad ۳-۱۶$$

$$\frac{b_{i,2}}{d_{i,2}} = \Theta_2 \left(\frac{b_{i,2}}{d_{i,2}} \right)_{ca} \quad ۴-۱۶$$

چهار معادله اخیر (معادله ۱-۱۶ تا ۴-۱۶) باید به طور همزمان حل شوند تا مقادیر $d_{i,1}$ ، $d_{i,2}$ ، $b_{i,1}$ ، $b_{i,2}$ بدست آیند برای اینکه در محاسبات مشکل ریاضی (تقسیم کردن بر عدد خیلی کوچک) پیش نیاید بهتر است معادلات با استفاده از مقادیر $p_{i,1}$ و $p_{i,2}$ که به صورت زیر تعریف می‌شوند حل شوند.

$$p_{i,1} = d_{i,1} / (d_{i,1})_{ca} \quad ۵-۱۶$$

$$p_{i,2} = d_{i,2} / (d_{i,2})_{ca} \quad ۶-۱۶$$

پس معادلات ۳-۱۶ و ۴-۱۶ به صورت زیر تعریف می‌شوند.

$$b_{i,1} = r_{i,1} p_{i,1} \quad ۷-۱۶$$

$$b_{i,2} = r_{i,2} p_{i,2} \quad ۸-۱۶$$

که $r_{i,1}$ و $r_{i,2}$ به صورت زیر خواهند بود.

$$r_{i,1} = \Theta_1 (b_{i,1})_{ca}$$

$$r_{i,2} = \Theta_2 (b_{i,2})_{ca}$$

با حذف متغیرهای b_{i2} و b_{i1} از معادلات ۱-۱۶ و ۲-۱۶ با استفاده از معادلات ۷-۱۶ و ۸-۱۶ ماتریس زیر حاصل خواهد شد.

$$\begin{bmatrix} -R_{i,1} & 0.94 r_{i,2} \\ r_{i,1} & -R_{i,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{i,1} \\ p_{i,2} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} (F_1 X_{1i} + F_2 X_{2i}) \\ F_3 X_{3i} \end{bmatrix} \quad 9-16$$

که R_{i1} و R_{i2} به صورت زیر تعریف می‌شوند.

$$R_{i,1} = (d_{i,1})_{ca} + r_{i,1}$$

$$R_{i,2} = (d_{i,2})_{ca} + r_{i,2}$$

با حل ماتریس ۹-۱۶ مقادیر $p_{i,1}$ و $p_{i,2}$ به صورت زیر بدست می‌آیند.

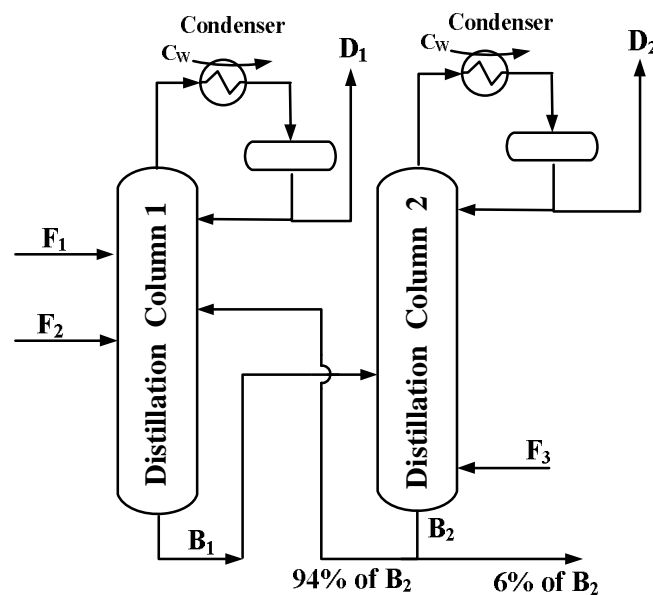
$$p_{i,1} = \frac{0.94 F_2 X_{3i} r_{i,2} + (F_1 X_{1i} + F_2 X_{2i}) R_{i,2}}{R_{i,1} R_{i,2} - 0.94 r_{i,1} r_{i,2}} \quad 10-16$$

$$p_{i,2} = \frac{(F_1 X_{1i} + F_2 X_{2i}) r_{i,1} + R_{i,1} F_3 X_{3i}}{R_{i,1} R_{i,2} - 0.94 r_{i,1} r_{i,2}} \quad 11-16$$

مقادیر مثبت Θ هم باید در موازنه جرم ۹-۱۶ صدق کند هم باید با دبی جریان‌های خارجی برج همخوانی داشته باشد، بنابراین علاوه بر اینکه Θ باید در موازنه جرم ۹-۱۶ صدق کند باید شرایط $g_1 = g_2 = 0$ را نیز داشته باشد.

$$g_1(\Theta_1, \Theta_2) = \frac{1}{B_1} \left[\sum_{i=1}^c b_{i,1} \right] - 1 \quad 12-16$$

$$g_2(\Theta_1, \Theta_2) = \frac{1}{B_2} \left[\sum_{i=1}^c b_{i,2} \right] - 1 \quad 13-16$$



شکل ۱۶-۱۲: شمایی از برج با جریان جانبی برای مثال ۱-۱۶ و ۲-۱۶

مقادیر B_2 و B_1 در مسائل معلومند و مقادیر b_{i2} و b_{i1} را می‌توان با استفاده از روابط ۷-۱۶ و ۸-۱۶ بدست آورد. مقادیر Θ_1 و Θ_2 با استفاده از روش نیوتن-رافسون بدست می‌آیند سپس با استفاده از مقادیر b_i و d_i دوباره محاسبات را تکرار می‌کنیم. برای نشان دادن کاربرد روابط بالا دو مثال زیر طراحی شده است. داده‌های مثال ۱-۱۶ و ۲-۱۶ در جدول ۳-۱۶ نشان داده شده است که شکل قرار گرفتن برج‌ها و جریان‌های ارتباطی آنها به صورت شکل ۱۲-۱۶ می‌باشد.

جدول ۳-۱۶: شرایط خوراک و برج برای مثال‌های ۱-۱۶ و ۲-۱۶

Variable	Example 16-1	Example 16-2
Number of stages		
Column 1	25	50
Column 2	20	40
Type of condenser	Total	Total
Reflux ratio		
Column 1	2.5	2.5
Column 2	1.5	1.5
Pressure	760 mm Hg	760 mm Hg
B_1	285 lbmole/h fed to Stage 10 of column 2	275 lbmole/h fed to Stage 21 of column 2
B_2	215 lbmole/h , 94% of B_2 is fed to stage 3 of Column 1	215 lbmole/h , 94% of B_2 is fed to stage 6 of Column 1
Feed plate location		
F_1	2	4
F_2	10	21
F_3	17	17
Thermal condition of		
F_1	Liquid at $100^\circ F$	Liquid at $100^\circ F$
F_2	Liquid at $170^\circ F$	Liquid at $100^\circ F$
F_3	Liquid at $100^\circ F$	Liquid at $100^\circ F$

بقیه مشخصات برای مثال ۱-۱۶ و ۲-۱۶

Component	Flow rate (lbmole/h)		
	$F_1 X_{1i}$	$F_2 X_{2i}$	$F_3 X_{3i}$
Methanol	0	65	15
Acetone	0	25	0
Ethanol	0	5	0
Water	5	5	5

برای حل مثال ۱-۱۶ دمای بالای برج $100^\circ F$ و دمای پایین برج $175^\circ F$ در نظر گرفته می‌شود که برای حدس اولیه فرض می‌شود دمای سینی‌ها از بالا تا پایین برج به صورت خطی تغییر می‌کند. پس از این فرض، ابتدا روش همگرایی θ را برای هر برج اعمال می‌کنیم سپس روش همگرایی Θ را برای همه برج‌ها اعمال نموده تا جریان‌های ارتباطی میان برج‌ها تصحیح شوند. نتایج حل این دو مثال در جدول ۴-۱۶ تا جدول ۶-۱۶ ارائه شده است.

اگرچه مثال ۲-۱۶ توسط گالون^۱ برای نشان دادن محاسبات طراحی شده است اما در حقیقت یک تقطیر استخراجی است که در این تقطیر استخراجی از آب به عنوان حلال استفاده شده است. استن در برج اول و الکل در برج دوم استخراج می‌شوند که با استفاده از تغییر دبی‌ها می‌توان خلوص استن بدست آمده از برج اول را تغییر داد، پس باید دبی بهینه برای خلوص بیشتر استن نیز مورد بررسی قرار گیرد.

جدول ۴-۱۶: حل جریان‌های برج برای مثال ۱-۱۶ و ۲-۱۶

حل جریان‌های برج برای مثال ۱-۱۶				
Component	$d_{i,1}$	$b_{i,1}$	$d_{i,2}$	$b_{i,2}$
Methanol	8.9252	98.9252	68.3395	45.5857
Acetone	8.4422	16.5579	16.5577	0.0001267
Ethanol	1.1318	12.0196	3.34823	8.6713
Water	3.6008	157.4972	1.75426	160.7429
حل جریان‌های برج برای مثال ۲-۱۶				
Component	$d_{i,1}$	$b_{i,1}$	$d_{i,2}$	$b_{i,2}$
Methanol	5.0092	64.9705	74.6729	5.2976

Acetone	24.9999	1.981×10^{-5}	1.981×10^{-5}	0.0
Ethanol	0.3614	4.8876	4.6227	0.2648
Water	1.7297	205.1428	0.7042	209.4387
Temperature ($^{\circ}F$) of steam indicated				
Example	D_1	B_1	D_2	B_2
6-1	138.38	159.14	141.52	177.04
6-2	132.07	176.37	151.13	203.43

جدول ۱۶-۵ : توزیع دما و دبی مایع در برج اول برای مثال ۱۶-۲

I. Profile

Plate	Temp ($^{\circ}F$)	Liquid flow rate (lbmol/h)	Plate	Temp ($^{\circ}F$)	Liquid flow rate (lbmol/h)
1	132.07	30.247	26	162.38	371.07
2	133.11	78.563	27	164.56	370.92
3	135.00	75.795	28	166.45	370.88
4	139.39	76.965	29	167.89	270.90
5	148.86	69.805	30	168.90	370.94
6	171.36	265.91	31	169.57	370.97
7	172.43	266.02	32	169.98	371.00
8	172.89	266.07	33	170.23	371.02
9	173.09	266.09	34	170.38	371.03
10	173.18	266.10	35	170.48	371.03
11	173.21	266.10	36	170.53	371.04
12	173.21	266.10	37	170.56	371.04
13	173.20	266.11	38	170.58	371.04
14	173.15	266.12	39	170.59	371.04
15	173.05	266.14	40	170.60	371.04

16	172.85	266.18	41	170.560	371.04
17	172.45	266.26	42	170.60	371.04
18	171.66	266.44	43	170.61	371.04
19	170.00	266.90	44	170.61	371.04
20	166.12	268.54	45	170.61	371.04
21	154.94	372.96	46	170.62	371.04
22	155.66	372.65	47	170.65	371.02
23	156.73	372.25	48	170.81	370.89
24	158.23	371.80	49	171.63	370.13
25	160.17	371.38	50	176.37	275.00

II. Final values of other variables

Component	y_{li}^*
Methanol	0.150667
Acetone	0.809183
Ethanol	0.0062675
Water	0.033923

$$Q_c = 1.5515 \times 10^6 \text{ Btu/h}$$

$$Q_R = 1.6023 \times 10^6 \text{ Btu/h}$$

* Mole fraction of each component in the vapor above the liquid in the accumulator

جدول ۱۶-۶: توزیع دما و دبی مایع در برج دوم برای مثال ۱۶-۲

I. Profile

Plate	Temp (°F)	Liquid flow rate (lb mol/h)	Plate	Temp (°F)	Liquid flow rate (lb mol/h)
1	151.13	120.00	21	174.48	385.37
2	152.05	119.85	22	174.47	385.37
3	152.93	119.69	23	174.45	385.37

4	153.73	119.54	24	174.43	385.37
5	154.44	119.37	25	174.41	385.37
6	155.06	119.20	26	174.40	385.37
7	155.60	119.02	27	174.38	385.37
8	156.07	118.82	28	174.36	385.37
9	156.65	118.60	29	174.34	385.37
10	156.91	118.35	30	174.32	385.37
11	157.31	118.07	31	174.29	385.38
12	157.75	117.73	32	174.22	385.42
13	158.25	117.33	33	174.08	385.53
14	158.85	116.84	34	173.73	385.82
15	159.66	116.22	35	172.79	406.87
16	160.74	115.44	36	173.47	406.33
17	162.20	114.46	37	175.31	404.86
18	164.24	113.25	38	180.22	402.04
19	167.02	111.85	39	190.81	400.25
20	170.58	110.45	40	203.41	215.00

II. Final values of other variables

Component	y_{li} *
Methanol	0.960544
Acetone	0.625244×10^{-6}
Ethanol	0.0351114
Water	0.0043440

$$Q_c = 3.132158 \times 10^7 \text{ Btu/hr}$$

$$Q_R = 3.272744 \times 10^7 \text{ Btu/hr}$$

* Mole fraction of each component in the vapor above the liquid in the accumulator

منابع

- 1- Atkins G. T and C. M. Boyer , "Application of the McCabe-Thiele Method to Extractive Distillation Calculations," *Chem. Eng. Prog.*, 45:533 (1949).
- 2- Benedic .M and L. C. Rubin: " Extractive and Azeotropic Distillation, Theoretical Aspects 1," *Trans. AIChE*, 45: 353 (1945).
- 3- Berg .L , "Aeotropic and Extractive Distillation-Selecting the Agent for Distillation," *Chem. Eng. Proc.*, 65(9) : 52 (1969).
- 4- Carlson .C. S, P. V. Smith, Jr., and C. E. Morrell , "Separation Oxygenated Organic Compounds by Water Extractive Distillation," *Ind. Eng. Chem.*, 46:350 (1954).
- 5- Carnahan .B, H. Luther, and J. O. Wilkes, *Applied Numerical Methods*, John Wiley and Sons, New York, 1969
- 6- Dunn .C. L, R. W. Millar, G. J. Pierotti, R. N. Shiras, and Mott Souders, Jr., " Toluene Recovery of Extractive Distillation," *Trans. AIChE*, 41:631 (1945).
- 7- Gallun .S. E and C. D. Holland , " Solve More Distillation Problems." ,Part 5. *Hydrocarbon Process.*, 55(1):137 (1976).
- 8- Guillaume E , U.S. Patent 887,793 (May 19, 1908).
- 9- Guinot .H and F. W. Clark: "Azeotropic Distillation in Industry," *Trans. Inst. Chem. Eng.* (London), 16 :187 (1938).
- 10- Happel .J , P. W. Cornell, Du B. Eastman, M. J. Fowle, C. A. Porter, and A. H. Schutte, "Extractive Distillation-Separation of C₄ Hydrocarbons Using Furfural," *Trans. Am. Inst. Chem. Eng.*, 42 : 189(1946).
- 11- Hess .H. V , E. A. Naragon, And C. A. Coghlan, "Extractive Distillation and Separation of n-Butane from 2-Butenes," *Chem. Eng. Prog. Symp. Ser.*, (2):72 (1952).
- 12- Gallun .S. E , G. W. Bentzen, and C. D. Holland, "Solve More Distillation Problems, Part 8 – Which Method to Use," *Hydrocarbon Process.*, 56 (6):181 (1977).
- 13- Holland .C. D , *Fundamentals and Modeling of Separation Processes, Absorption, Distillation, Evaporation, and Extraction*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J., 1975.
- 14- Hopkins .W. C and J. J. Fritsch, "How Celanese Separates Complex Petrochemical Mixtures," *Chem. Eng.*, 51(8) : 361 (1955).
- 15- Horsley .L. H, *Azeotropic Data*, American Chemical Society, Washington, D.C., 1952.
- 16- Householder. A. S , *Principles of Numerical Analysis*, McGraw-Hill Book Company, New York, 1953.
- 17- Holmes M. J and M. Van Winkle, "Prediction of Ternary Vapor –Liquid Equilibria From Binary Data," *Ind. Eng. Chem.*, 62 (1):20 (1970).
- 18- Hutchison .H. P and C. F. Shewchuk , "A Computational Method for Multiple Distillation Towers," *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 52 : 325 (1974).
- 19- Kubicek, V. Hlavacek, and F. Prochaska , "Global Modular Newton-Raphson Technique for Simulation of an Interconnected Plant Applied to Complex Rectifying Columns," *Chem. Eng. Sci.*, 31 : 277 (1976).
- 20- Null .H. R and D. A. Palmer, "Azeotropic and Extractive Distillation-Predicting Phase Equilibria." *Chem. Eng. Prog.*, 66(9):47 (1969).
- 21- Poffenberger .N , L. H. Horsley, H. S. Nutting, and C. E. Britton, "Separation of Butadiene by Azeotropic Distillation with Ammonia," *Trans AIChE.*, 42 : 815 (1946).
- 22- Prausnitz. J. M , C. A. Echert, R. V. Orye, and J. P. O'Connell, *Computer Calculations for Multi-Component Vapor-Liquid Equilibria*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1967.
- 23- Robertson.N. C , (to Celanese Corporation of America), U.S Patent 2,477,087 (July 16, 1949).
- 24- Tassios .D , "Choosing Solvents for Extractive Distillation," *Chem. Eng.*, 118 (Feb. 10. 1969).
- 25- Tewarson .R. P, *Sparse Matrices*, Academic Press, New York, 1973.

26- Van Winkle .M , *Distillation*, McGraw-Hill Book Company, New York, 1967.

بخش چهارم
انتخاب آرایش بهینه

فصل هفدهم

آرایش برج‌ها در جداسازی چندجزئی

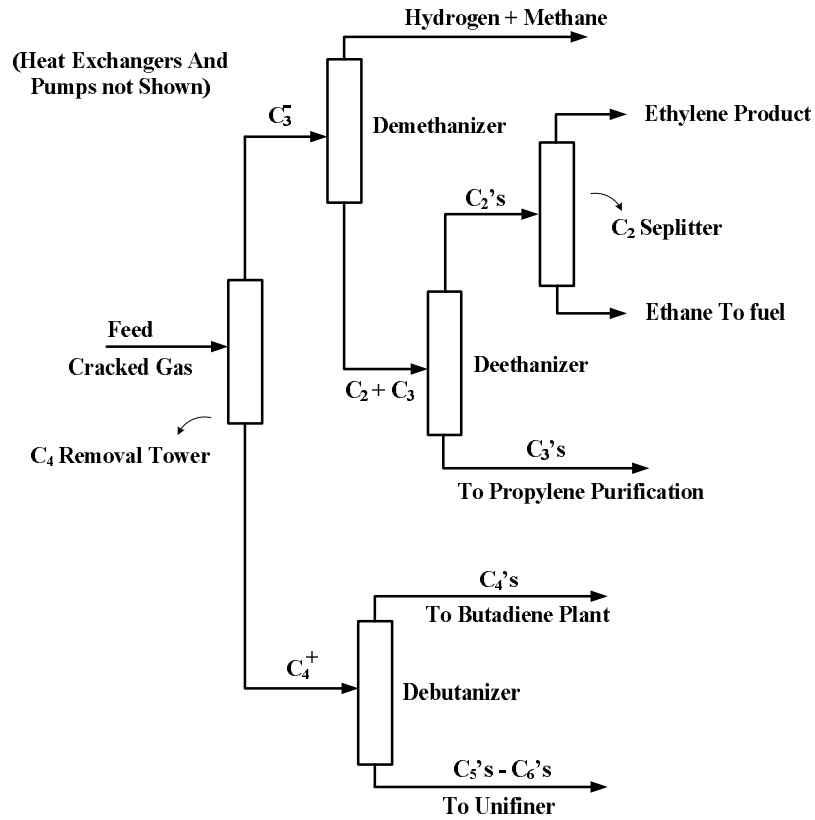
مقدمه

در مسائل صنعتی معمولاً جداسازی یک مخلوط چند جزئی به بیش از دو محصول مد نظر است. اگرچه می‌توان با ساخت یک برج پیچیده و استفاده از جریان‌های جانبی، محصولات مورد نظر را بدست آورد اما استفاده از چندین برج با آرایش خاص می‌تواند جایگزین برج پیچیده شود و از نظر اقتصادی مقرون به صرفه باشد.

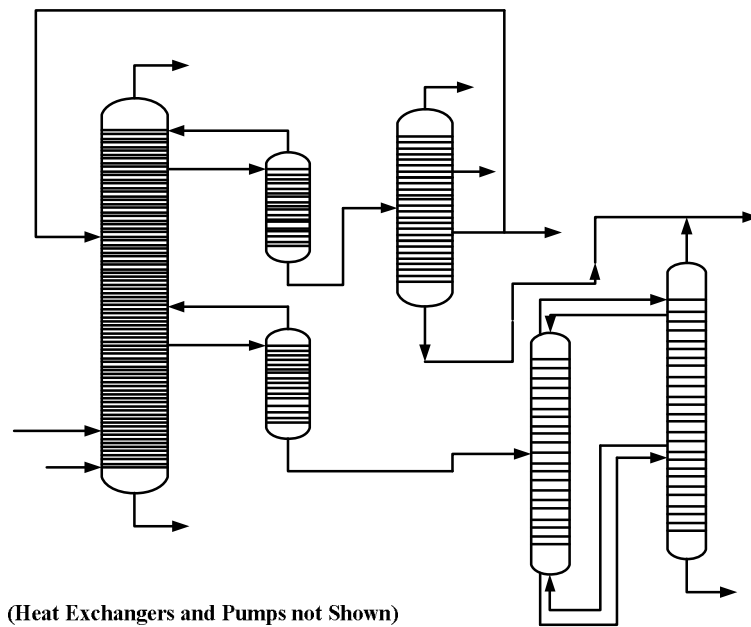
فاکتورهای ابتدایی انتخاب آرایش

در توالی برج‌ها ممکن است از یک آرایش ساده (مانند شکل ۱۷-۱) یا یک آرایش پیچیده (مانند شکل ۱۷-۲) استفاده شود. البته از لحاظ عملیاتی بهتر است که برج‌ها با هم تبادل انرژی نداشته باشند و جریان برگشتی یک برج از برج دیگر تامین نشود تا کنترل برج‌ها راحت‌تر انجام شود. در این فصل سعی می‌شود برای جداسازی اجزاء از یکدیگر از آرایش ساده استفاده شود.

پس از طراحی، هزینه هر برج باید مورد بررسی قرار گیرد که هزینه یک برج شامل هزینه‌های سرمایه‌گذاری و هزینه عملیاتی است. هزینه آرایش برج‌ها برابر با هزینه کل برج‌های آن آرایش می‌باشد. با بررسی هزینه آرایش برج‌ها می‌توان به آرایش بهینه اقتصادی که معمولاً نزدیک به آرایش مطلوب است نزدیک شد، سپس فاکتورهایی مانند کنترل شرایط عملیاتی، انعطاف‌پذیری و ایمنی برای تصمیم‌نهایی مورد بررسی قرار می‌گیرد.



شکل ۱-۱۷: یک آرایش ساده برای خالص سازی اتیلن

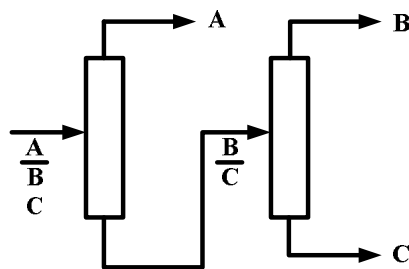


شکل ۲-۱۷: شمایی از یک آرایش پیچیده

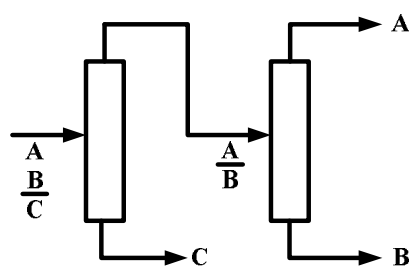
تعداد آرایش‌ها برای یک خوراک مشخص

آرایش برج‌ها در جداسازی اجزاء، به روش جداسازی و تعداد محصولات برج بستگی دارد. فرض می‌کنیم که هر برج یک خوراک و دو محصول بالا و پایین داشته باشد و جداسازی بر اساس اختلاف نقطه جوش و بدون اضافه کردن حلال باشد. این نوع آرایش که به آرایش برج‌های تقطیر ساده معروف است به طور وسیعی در صنایع مورد استفاده قرار می‌گیرد. در این فرآیندها یک خوراک که شامل R ماده است وارد یک فرآیند می‌شود که اجزاء دارای فراریت‌های متفاوت می‌باشند و باید به R محصول تقریباً خالص تبدیل شود.

اگر خوراک فرآیند شامل سه ماده A ، B و C باشد، دو نوع آرایش برای جداسازی می‌توان در نظر گرفت که در هر آرایش دو برج تقطیر ساده مورد نیاز است. این دو نوع آرایش در شکل ۱۷-۳ نشان داده شده است. اگر بخواهیم جداسازی را بین A و B انجام دهیم یا اصطلاحاً نقطه جداسازی بین ماده A و ماده B باشد باید از آرایش A شکل ۱۷-۳ استفاده کنیم و در صورتی که نقطه جداسازی بین B و C باشد باید از آرایش B شکل ۱۷-۳ استفاده کنیم و در صورتی که نقطه جداسازی بین A و C باشد یا اصطلاحاً بخواهیم بین مواد A و C جداسازی انجام دهیم این کار در یک آرایش ساده امکان‌پذیر نیست و آن را باید در یک برج با جریان جانبی انجام داد. در ادامه در مورد انتخاب نقطه جداسازی به صورت مفصل بحث خواهد شد.



(a)



(b)

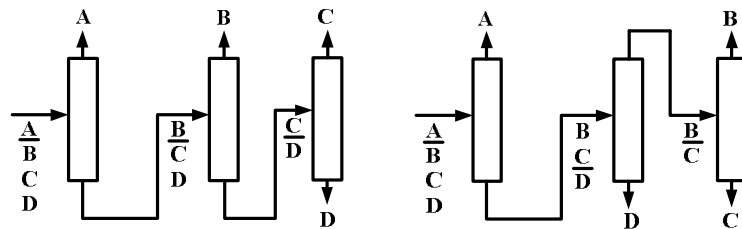
شکل ۱۷-۳: آرایش‌های مختلف برای جداسازی سه جزء (a) روش مستقیم (b) روش غیرمستقیم

برای جداسازی یک خوراک R جزئی به R محصول تقریباً خالص می‌توان از S آرایش مختلف استفاده کرد که با استفاده از تحلیل زیر می‌توان مقدار S را بدست آورد. برای جداسازی بین R جزء، $(R-1)$ نقطه جداسازی وجود دارد که z جزء از مواد در محصول بالای برج و $(R-z)$ جزء در محصول پایین برج ظاهر

خواهند شد. اگر S_j تعداد آرایش‌ها برای جداسازی جزء j ام در برج اول باشد، تعداد کل آرایش‌ها برای جداسازی $S_j S_{R-j}$ خواهد بود. بنابراین جمع کل آرایش‌ها به صورت زیر خواهد بود.

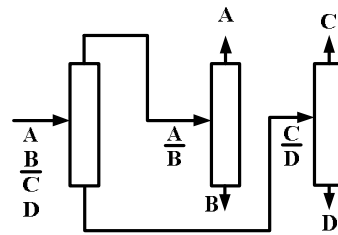
$$S_R = \sum_{j=1}^{R-1} S_j S_{R-1} = \frac{[2(R-1)]!}{R!(R-1)!} \quad 1-17$$

در صورتی که $R=2$ باشد یعنی خوراک شامل دو جزء باشد یک آرایش برای جداسازی این دو جزء وجود دارد و در صورتی که $R=3$ باشد دو آرایش برای جداسازی این سه جزء وجود دارد. این آرایش‌ها در شکل ۳-۱۷ نشان داده شده است. برای تعداد اجزاء مختلف R تا یازده جزء نتایج در جدول ۱-۱۷ نشان داده شده است. پنج آرایش موجود برای جداسازی چهار جزء نیز در شکل ۴-۱۷ نشان داده شده است.

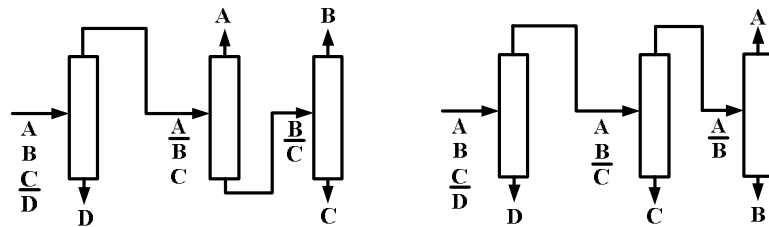


(Direct Sequence)

(a)



(b)



(Indirect Sequence)

(c)

شکل ۴-۱۷: پنج آرایش موجود برای جداسازی چهار جزء

جدول ۱۷-۱: تعداد جداکننده‌ها، آرایش‌ها، جریان‌های زیرگروه و برج‌های یکتا برای آرایش‌های ساده

R , Number of Components	Number of Separators in a Sequence	S , Number of Sequences	G , Number of Subgroups	U , Number of Unique Splits
2	1	1	3	1
3	2	2	6	4
4	3	5	10	10
5	4	14	15	20
6	5	42	21	35
7	6	132	28	56
8	7	429	36	84
9	8	1430	45	120
10	9	4862	55	165
11	10	16796	66	220

در جداسازی خوراک‌های چند جزئی تعدادی جریان زیر گروه ایجاد می‌شوند که از یک برج به برج دیگر منتقل می‌شوند یا به صورت محصول نهایی از سیستم خارج می‌شوند. برای مثال در آرایش‌های جداسازی یک خوراک چهار جزئی، تعداد جریان‌های زیر گروه ۱۰ می‌باشد. این جریان‌ها در پنج آرایش مختلف شکل ۱۷-۴ بکار رفته‌اند و در جدول ۱۷-۲ لیست شده‌اند. به طور کلی تعداد جریان‌های زیر گروه (G) به صورت زیر محاسبه می‌شوند.

$$G = \sum_{j=1}^R j = \frac{R(R+1)}{2} \quad ۲-۱۷$$

در جداسازی خوراک‌هایی که شامل بیش از سه جزء هستند برخی از نقاط جداسازی در دو یا چند آرایش مورد استفاده قرار می‌گیرند. مثلاً برای خوراک چهار جزئی در هر آرایش سه برج وجود دارد پس در ۵ آرایش، ۱۵ برج وجود دارد. همانطور که در شکل ۱۷-۴ و جدول ۱۷-۳ مشاهده می‌شود ده برج از این پانزده برج یکتا هستند و بقیه به صورت تکراری ظاهر می‌شوند تعداد برج‌های یکتا (U) را می‌توان از رابطه زیر بدست آورد.

$$U = \sum_{j=1}^{R-1} j(R-j) = \frac{R(R-1)(R+1)}{6} \quad ۳-۱۷$$

جدول ۱۷-۲: جریان‌های زیرگروه برای جداسازی چهار جزء

Process Feed First Separator	Feeds to Subsequent Separators		Products
$\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$	(A)
	$\begin{pmatrix} B \\ C \\ D \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix}$	(B)
		$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$	(C)
			(D)

جدول ۱۷-۳: برج‌های یکتا برای جداسازی چهار جزء

Splits for First Separator	Splits for subsequent separators	
$\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$
$\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix}$
$\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} B \\ C \\ D \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$
	$\begin{pmatrix} B \\ C \\ D \end{pmatrix}$	

مقادیر U و G را برای مقادیر R مختلف تا یازده جزء می‌توان در جدول ۱۷-۱ مشاهده کرد. با استفاده از روابط موجود می‌توان نتایج زیر را بدست آورد.

$$R \rightarrow \infty \quad G\{R+1\}/G\{R\} \rightarrow 1$$

$$R \rightarrow \infty \quad U\{R+1\}/U\{R\} \rightarrow 1$$

$$R \rightarrow \infty \quad S\{R+1\}/S\{R\} \rightarrow 4$$

نتایج بالا نشان می‌دهد وقتی که تعداد اجزاء خوراک خیلی زیاد باشد به ازای افزودن یک جزء جدید به خوراک، تعداد آرایش‌ها چهار برابر می‌شود، در صورتی که تعداد جریان‌های زیر گروه و تعداد برج‌های یکتا تقریباً ثابت می‌ماند. پس برای مقادیر کوچک R چون تعداد برج‌های یکتا کم است می‌توان همه برج‌ها را طراحی و تخمین قیمت کرد اما این کار برای مقادیر بزرگ R بسیار زمان‌بر و خسته کننده است.

در صورتی که یک خوراک R جزئی را بخواهیم به P محصول تبدیل کنیم ($R > P$) در روابط ۱۷-۱، ۱۷-۲ و ۱۷-۳ باید به جای R مقدار P را جایگزین کنیم. نتایج در صورتی صحیح خواهد بود که یک محصول مستقیماً از برج خارج شود بدین معنا که محصول از مخلوط شدن دو جریان دیگر حاصل نشود.

مثال ۱۷-۱: خوراکی به ترتیب بزرگی ضریب فراریت شامل C_2 ، \bar{C}_3 ، C_3 ، $1 - \bar{C}_4$ و $n - C_4$ می‌باشد. می‌خواهیم این خوراک وارد یک آرایش جداسازی شود و به ترتیب محصولات $(\bar{C}_3, 1 - \bar{C}_4)$ و $(C_3, n - C_4)$ خارج شود. تعداد آرایش‌های ممکن برای انجام این فرآیند چقدر است؟

حل: ترکیب محصولات خارج شده از نظر فراریت پشت سر هم واقع نیستند. مثلاً یکی از محصولات $(\bar{C}_3, 1 - \bar{C}_4)$ است که ماده C_3 از نظر فراریت بین دو ماده موجود در محصول واقع می‌شود، در نتیجه \bar{C}_3 و $1 - \bar{C}_4$ از نظر فراریت پشت سر هم واقع نمی‌شوند به همین دلیل این جداسازی با مخلوط کردن جریان‌ها بدست می‌آید. پس با استفاده از جدول ۱۷-۱ و با استفاده از $R = 5$ مقدار $S = 14$ بدست می‌آید. در صورتی که مواد موجود در همه محصولات از نظر فراریت پشت سر هم بودند باید از $R = 3$ استفاده می‌کردیم.

روابط ۱۷-۱، ۱۷-۲ و ۱۷-۳ در جدول ۱۷-۱ برای یک نوع مکانیسم جداسازی خلاصه شده است. در صورتی که از چند نوع مکانیسم جداسازی در آرایش جداسازی استفاده شده باشد تعداد آرایش‌های ممکن از رابطه تامسون و کینگ^۱ [۱] بدست می‌آید.

$$S = T^{R-1} S_R \quad 4-17$$

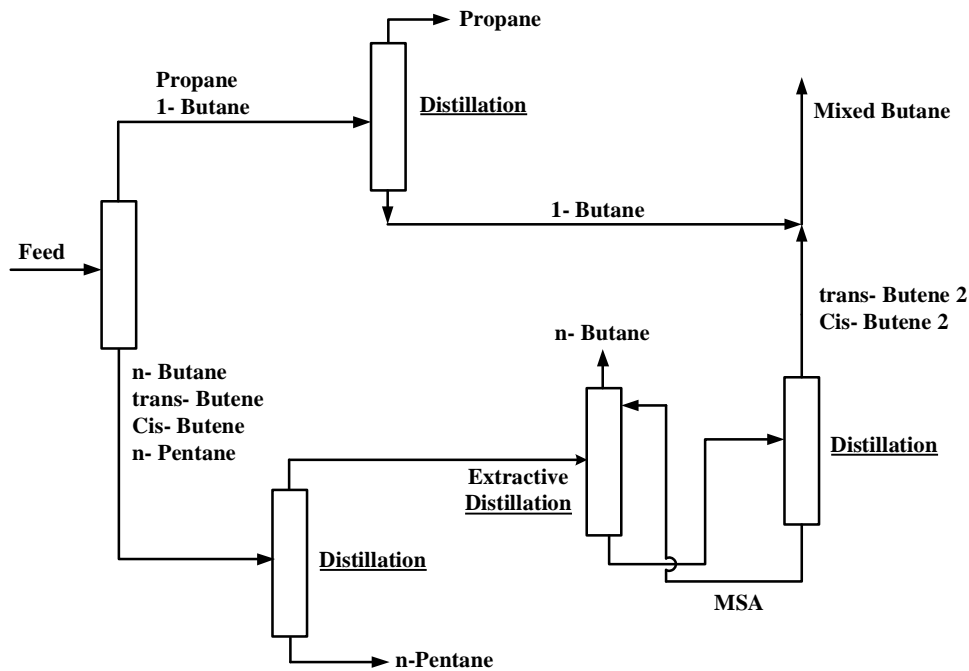
مثلاً در شکل ۱۷-۵ برای جداسازی دو ماده از یک حلال^۲ (MSA) استفاده می‌شود و همین حلال در برج بعدی بازیابی می‌شود. این دو برج به عنوان یک مکانیسم جداسازی محسوب می‌شوند زیرا همه برج‌ها بر اساس اختلاف نقطه جوش کار می‌کنند در صورتی که این دو برج بر اساس اضافه کردن حلال عمل می‌کنند. ضمناً حلال اضافه شده جزء تعداد مواد محسوب نمی‌شود.

1- Thompson and King
2-Mass Separating Agent

در رابطه اخیر T تعداد مکانیسم‌های جداسازی در آرایش می‌باشد. برای مثال خوراکی شامل چهار جزء ($R=4$) وارد یک آرایش جداسازی می‌شود که توسط تقطیر ساده، تقطیر استخراجی با استفاده از حلال فنول، تقطیر استخراجی با استفاده از حلال آنیلین و استخراج مایع-مایع با استفاده از متانول جداسازی می‌تواند انجام شود. با استفاده از رابطه ۱-۱۷ یا جدول ۱-۱۷ و رابطه ۴-۱۷ خواهیم داشت.

$$S = 4^{4-1} (5) = 64 (5) = 320$$

پس تعداد آرایش‌های ممکن ۶۴ برابر حالتی است که فقط از تقطیر ساده استفاده می‌شود. در این محاسبات فرض شده است که محصولات برج‌ها با یکدیگر مخلوط نمی‌شوند. مثلاً این محاسبات برای شکل ۵-۱۷ که محصول بوتن از مخلوط شدن ۱- بوتن و ۲- بوتن حاصل می‌شود صادق نیست. ضمناً هرگاه حلال مورد استفاده در جداسازی به طور مستقیم در برج بعدی جدا نشود و همچنین مخلوط شدن جریان‌ها آزاد باشد تعداد آرایش‌های ممکن به شدت افزایش خواهد یافت و بالعکس هرگاه برخی از مکانیسم‌های جداسازی به علت مشکلات عملیاتی یا اقتصادی کنار گذاشته شوند تعداد آرایش‌های ممکن بسیار کاهش خواهد یافت.



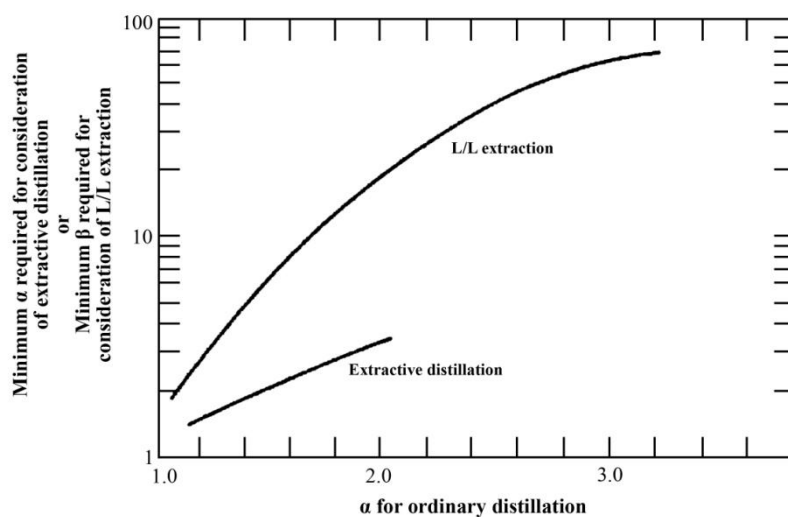
شکل ۵-۱۷: نمونه یک آرایش جداسازی صنعتی

پس برای کاهش تعداد آرایش‌های ممکن باید مکانیسم‌های جداسازی که کارایی کمتری دارند حذف شوند. برای این منظور برخی از فاکتورهای این مکانیسم‌ها با هم مقایسه می‌شوند تا به صورت مقدماتی بتوان از برخی مکانیسم‌ها صرف‌نظر کرد. معمولاً برای بررسی مقدماتی از روش ترسیمی سودرز^۱ [۲] که ساده و معمول است استفاده می‌شود. در این روش ابتدا تقطیر ساده برای جداسازی در نظر گرفته می‌شود چون دارای تکنولوژی بسیار ساده‌ای است و در محدوده دمایی زیادی کار می‌کند. شرط دمایی این روش، پایداری مواد در این محدوده

و وجود دو فاز مایع و بخار در کنار یکدیگر است. فشار عملیاتی برج تقطیر نیز توسط روش ذکر شده در فصل ۴ و شکل ۴-۴ مورد بررسی قرار گرفت. در صورتی که برای بالای برج به سردساز^۱ نیاز باشد بهترین گزینه به جای تقطیر می‌تواند برج جذب ساده یا برج جذب مجهز به جوش‌آور باشد و در صورتی که برای تقطیر به برج خلاء نیاز باشد بهترین گزینه به جای تقطیر استفاده از استخراج مایع-مایع با حلال‌های مختلف می‌باشد. همچنین زمانی که ضریب فراریت کوچکتر از ۱/۰۵ باشد ($\alpha < 1.05$) استفاده از تقطیر معمولی مقرون به صرفه نیست و بهترین گزینه به جای آن استفاده از تقطیر استخراجی و یا استخراج مایع-مایع می‌باشد.

روش‌های دیگر جداسازی

در شکل ۱۷-۶ تقطیر ساده با تقطیر استخراجی و استخراج مایع-مایع مقایسه شده است. در این شکل، ضریب فراریت تقطیر ساده (α) و ضریب فراریت تقطیر استخراجی (α) با هزینه یکسان و همچنین ضریب فراریت تقطیر ساده (α) و ضریب جداسازی برای استخراج مایع-مایع (β) با هزینه یکسان مقایسه شده است. در این شکل برای یک جداسازی در صورتی که نقطه حاصل روی دیاگرام که محور افقی آن ضریب فراریت تقطیر ساده و محور عمودی آن ضریب جداسازی مایع-مایع است در سمت چپ منحنی قرار گیرد باید از استخراج مایع-مایع استفاده شود و در صورتی که این نقطه سمت راست منحنی قرار گیرد باید از تقطیر ساده استفاده شود و در صورتی که نقطه روی منحنی قرار گیرد استفاده از هر دو روش دارای هزینه یکسان خواهد بود اما به دلیل تکنولوژی ساده و کنترل آسان برج تقطیر ساده، از این مکانیسم استفاده می‌شود. همین موضوع نیز برای منحنی تقطیر استخراجی صادق است. بدین ترتیب که برای یک جداسازی در صورتی که نقطه حاصل روی دیاگرام که محور افقی آن ضریب فراریت تقطیر ساده و محور عمودی آن ضریب فراریت تقطیر استخراجی است در سمت چپ منحنی قرار گیرد باید از تقطیر استخراجی و در صورتی که سمت راست منحنی قرار گیرد از تقطیر ساده استفاده می‌شود و در صورتی که نقطه روی منحنی قرار گیرد تقطیر ساده و تقطیر استخراجی دارای هزینه یکسان خواهند بود که به علت عملیات راحت تر، تقطیر ساده انتخاب می‌شود.



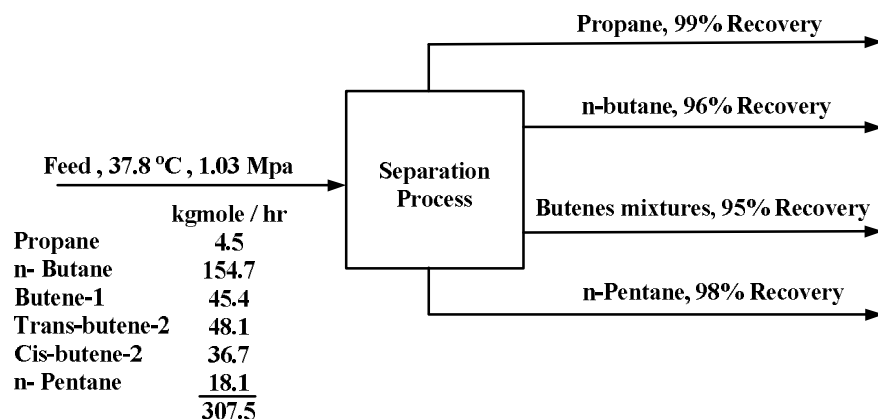
شکل ۱۷-۶: مقایسه تقطیر ساده با تقطیر استخراجی و استخراج مایع-مایع

در رسم این منحنی‌ها سودرز فرض کرده است که غلظت حلال ۶۷٪ است و شدت مایع در استخراج مایع-مایع چهار برابر شدت مایع در تقطیر ساده است. ضمناً وقتی که ضریب فراریت در تقطیر ساده بیشتر از ۲ باشد ($\alpha > 2$) گزینه تقطیر استخراجی اصلاً مد نظر نیست.

مثال ۱۷-۲: جداسازی بررسی شده توسط هندری و هاگز^[۳] در شکل ۱۷-۷ نشان داده شده است. در این جداسازی از برج‌های تقطیر با یک خوراک و دو محصول استفاده می‌شود. تقطیر ساده به عنوان روش I و بقیه روش‌های جداسازی (در صورت لزوم) به عنوان روش II در نظر گرفته می‌شود. تعداد نقاط جداسازی ممکن و تعداد آرایش‌های ممکن برای این جداسازی را بدست آورید.

جدول ۱۷-۴: دمای جوش نرمال، دمای بحرانی، فشار بحرانی و ضریب فراریت اجزاء مثال ۱۷-۲

Species	Normal boiling point, °C	Critical temperature, °C	Critical pressure, Mpa	Approximate relative volatility at 0.101 Mpa (1atm)
Propane	-42.1	96.7	4.17	4.4
Butene-1	-6.3	146.4	3.94	1.25
n-Butane	-0.5	152.0	3.73	1.055
trans-Butene-2	0.9	155.4	4.12	1.11
Cis-Butene-2	3.7	161.4	4.02	3.2
n-Pentane	36.1	196.3	3.31	



شکل ۱۷-۷: یک نمونه جداسازی چندجزئی

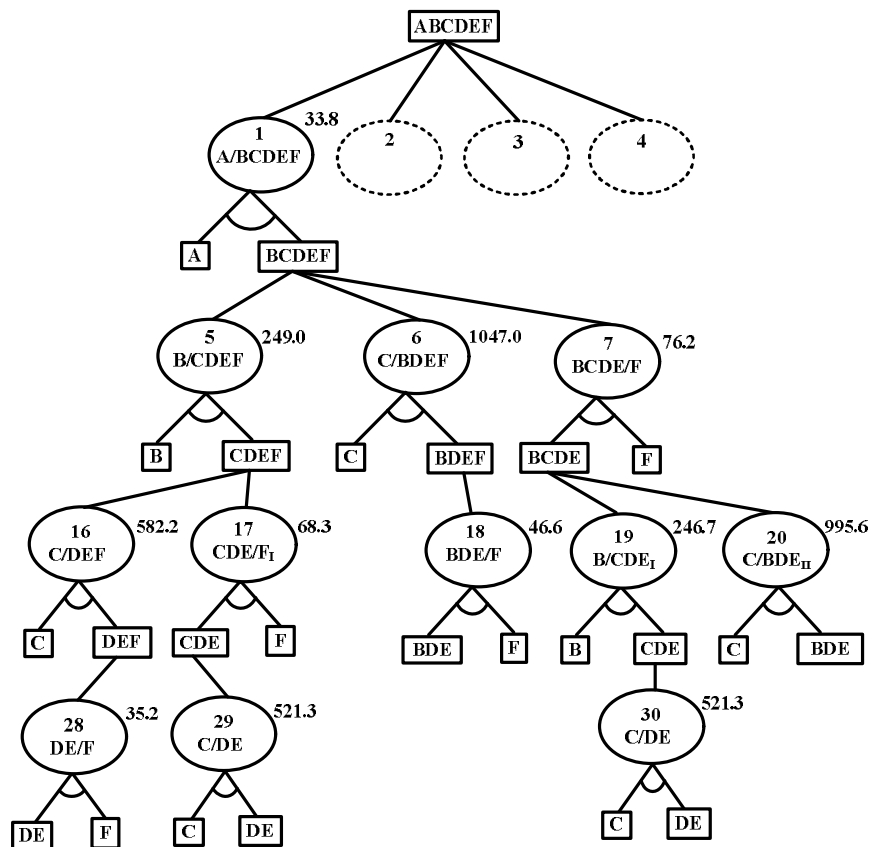
حل: دمای جوش نرمال هر شش جزء در جدول ۱۷-۴ آورده شده است. چون هر دو ماده ۲- ترانس بوتن و ۲- سیس بوتن در محصول بوتن ظاهر می‌شوند و از نظر فراریت و دمای جوش پشت سر هم واقع می‌شوند و هیچ ماده دیگری بین این دو وجود ندارد پس نیازی به جداسازی آنها نیست. برج‌هایی که در فشاری بالاتر از اتمسفر کار می‌کنند و کندانسور آنها با آب خنک می‌شود را مشخص می‌کنیم. حال فراریت را در دمای $150^{\circ}F$ ($65.5^{\circ}C$) و فشار برج با فرض ایده‌آل بودن مخلوط‌ها برای هر دو جفت ماده محاسبه می‌کنیم. ضریب فراریت بین ۲- ترانس بوتن و ۲- سیس بوتن لازم نیست چون هر دو در محصول بوتن ظاهر می‌شوند و نیازی به جداسازی آنها وجود ندارد.

Adjacent Binary pair	Approximate relative volatility at $150^{\circ}F$ ($65.5^{\circ}C$)
Propane/ 1-Butene (A/B)	2.45
1-Butene/ n-Butane (B/C)	1.18
n-Butane/trans-Butene-2 (C/D)	1.03
Cis-Butene-2 / n-Pentane(E/F)	2.50

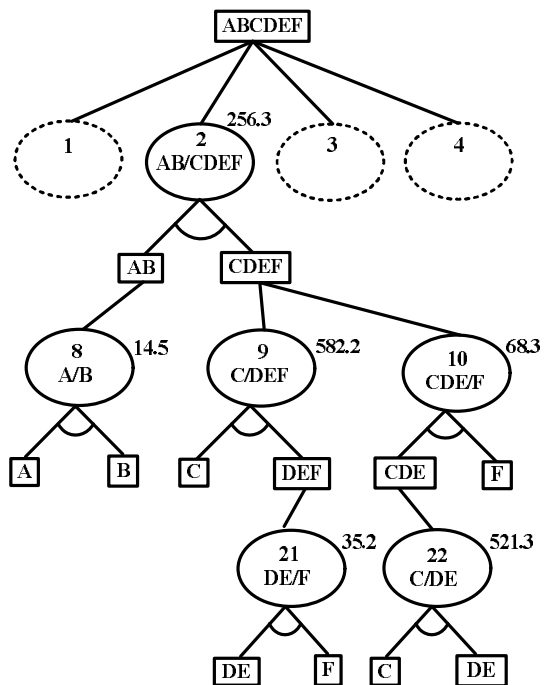
چون ضریب فراریت بین دو جفت A/B و E/F بدون در نظر گرفتن بقیه هیدوکربن‌ها بالاست می‌توان از تقطیر ساده برای جداسازی این زوج‌ها استفاده کرد اما جداسازی بین اجزاء C/D با استفاده از تقطیر ساده امکان‌پذیر نیست (چون فراریت آنها کوچکتر از ۱/۰۵ است) اجزاء B/C را می‌توان با استفاده از تقطیر ساده از هم جدا کرد اما استفاده از بقیه مکانیسم‌های جداسازی نیز مد نظر است.

مطابق آزمایش‌های بول و بواترایت^۱ [۴] با استفاده از محلول ۹۶٪ وزنی فرفورال به عنوان حلال تقطیر استخراجی، می‌توان ضریب فراریت پارافین‌ها را در مقابل اولفین‌ها افزایش داد. پس در صورتی که از تقطیر استخراجی استفاده شود فراریت ۱- بوتن و نورمال بوتان برعکس خواهد شد و ترتیب اجزاء بر حسب ضریب فراریت به صورت *ACBDEF* خواهد شد. وقتی از حلال فرفورال استفاده می‌شود اولفین‌ها (*BDE*) پشت سر هم واقع می‌شوند و جداسازی آنها به عنوان یک گروه بسیار آسانتر خواهد شد. با اضافه کردن حلال فرفورال، ضریب فراریت *C/B* به ۱/۱۷ می‌رسد و از آنجا که در ترکیب اجزاء (*ACBDEF*) مواد *A* و *C* پشت سر هم قرار می‌گیرند فراریت نسبی آنها به ۲/۸۹ خواهد رسید که برای جداسازی مطلوب‌تر است.

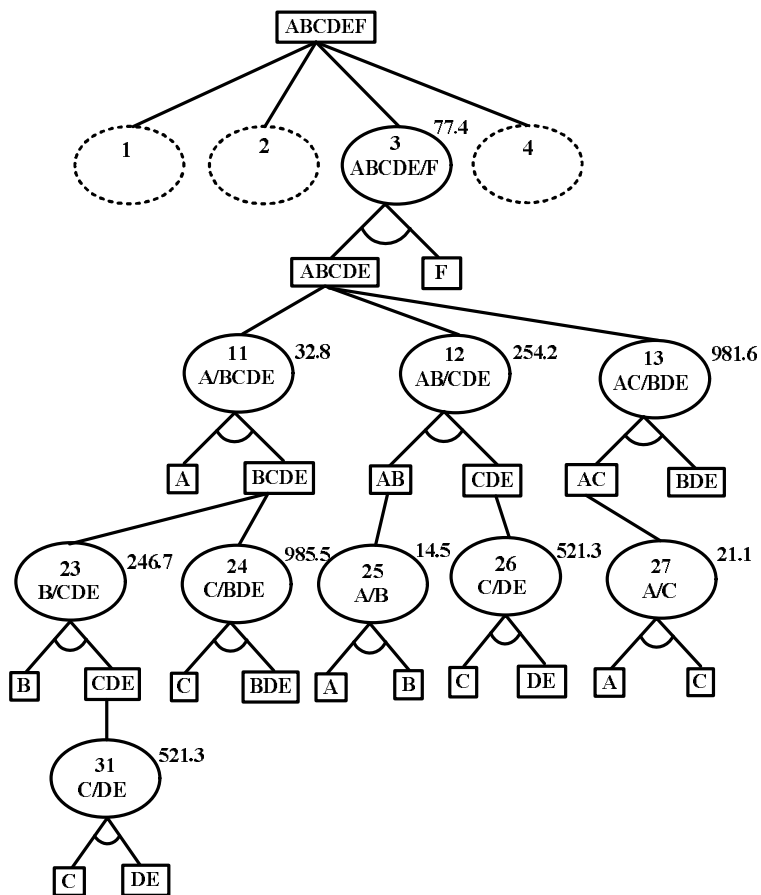
پس با توجه به مقادیر اخیر جفت‌های $(A/B...)_I$ ، $(...B/C...)_I$ ، $(...E/F)_I$ ، $(A/C...)_I$ ، $(...C/B...)_II$ و $(...C/D...)_II$ قابل جداسازی هستند. با توجه به جفت‌های قابل جداسازی می‌توان آرایش‌های مختلف را برای جداسازی نهایی طراحی کرد که در شکل ۱۷-۸ نشان داده شده است. در این شکل علامت مستطیل نشان دهنده جریان‌های زیر گروه و علامت دایره نشان دهنده برج، شماره برج و زوج جدا شونده در برج می‌باشد و اعداد بالای سمت راست دایره‌ها نشان دهنده هزینه برج است. علامت I درون دایره‌ها نشان دهنده تقطیر ساده و علامت II نشان دهنده تقطیر استخراجی همراه با برج احیای حلال است. شکل ۱۷-۸ شامل ۳۱ جداکننده مختلف و ۱۲ آرایش متفاوت می‌باشد که آرایش‌های مختلف و هزینه آنها در جدول ۱۷-۵ آورده شده است.



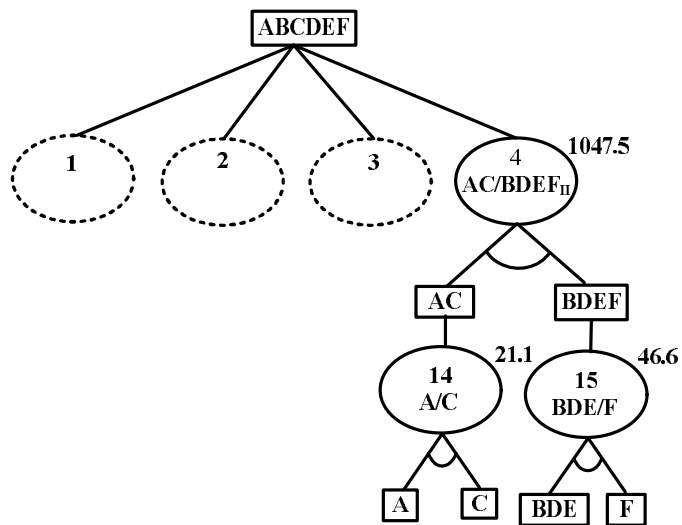
شکل ۱۷-۸ : شاخه اول آرایش برای مثال ۱۷-۲



ادامه شکل ۱۷-۸ : شاخه دوم آرایش برای مثال ۱۷-۲



ادامه شکل ۱۷-۸: شاخه سوم آرایش برای مثال ۱۷-۲



ادامه شکل ۱۷-۸: شاخه چهارم آرایش برای مثال ۱۷-۲

جدول ۱۷- ۵ : آرایش‌های مختلف و هزینه آنها

Sequence	Cost, \$/yr
1-5-16-28	900200
1-5-17-29	872400
1-6-18	1127400
1-7-19-30	878000
1-7-20	1095600
$2 \begin{matrix} /8 \\ \backslash_{9-21} \end{matrix}$	888200
$2 \begin{matrix} /8 \\ \backslash_{10-22} \end{matrix}$	860400
3-11-23-31	878200
3-11-24	1095700
$3-12 \begin{matrix} /25 \\ \backslash_{26} \end{matrix}$	867400
3-13-27	1080100
4-14-15	1115200

هزینه برج‌ها در حقیقت هزینه سالیانه بر حسب $\frac{\$}{\text{year}}$ است که از داده‌های هندری^۱ [۷] استخراج شده است. هزینه آرایش‌ها نیز در جدول ۱۷-۵ آورده شده است. ارزان‌ترین آرایش در شکل ۱۷-۵ نشان داده شده است و گران‌ترین آرایش حدوداً ۳۱٪ گرانتر از ارزان‌ترین آرایش می‌باشد. زوج‌های $(E/F)_{II}$ و $(A/C)_{II}$ نیز توسط هنری و هاگز [۳] به بقیه زوج‌ها اضافه شد که در این حالت تعداد برج‌های یکتا ۶۴ و تعداد آرایش‌های ممکن ۲۲۷ خواهد شد.

روش اکتشافی و تکاملی برای رسیدن به آرایش مطلوب

روش اکتشافی یک روش قابل قبول برای رسیدن به آرایش بهینه و یا نزدیک شدن به آرایش بهینه است که به طور گسترده استفاده می‌شود اما یک روش کاملاً دقیق نیست. با استفاده از این روش می‌توان به سرعت به آرایش مطلوب نزدیک شد. همچنین برای زمانی که تعداد اجزاء زیاد است نیازی نیست که همه برج‌های یکتا را

1- Hendry

طراحی کنیم بلکه می‌توان فقط یک یا چند آرایش را که به حالت بهینه نزدیک است طراحی و تخمین قیمت کرد. این روش برای حالتی که از تقطیر ساده در آرایش‌ها استفاده می‌شود کاربرد فراوانی دارد [۱۰,۹,۸]. تعدادی از قوانین این روش توسط سیدر و وستبرگ^۱ [۱۱] ارائه شده که با استفاده از اجزاء خوراک و درصد‌های آنها می‌توان به آرایش بهینه نزدیک شد. این قوانین به صورت زیر می‌باشند.

۱- ابتدا ضریب فرارایت بین اجزاء پشت سر هم خوراک را دو به دو بدست می‌آوریم در صورتی که ضریب فرارایت‌ها با هم خیلی متفاوت باشند ابتدا دو جزئی را که ضریب فرارایت بیشتری دارند از هم جدا می‌کنیم سپس اجزائی که ضریب فرارایت کمتری دارند از هم جدا می‌کنیم و در نهایت اجزائی که ضریب فرارایت‌شان از همه کمتر است باید از هم جدا شوند.

۲- در صورتی که ضرایب فرارایت جفت‌های مجاور با هم متفاوت نباشند هر کدام از اجزاء که درصد بیشتری دارد باید مورد جداسازی قرار گرفته و سپس درصد‌های کمتر مورد جداسازی قرار گیرند چون وقتی که مواد با درصد‌های بالا مورد جداسازی قرار گیرند دبی جریان‌های زیر دستی که وارد برج‌های بعدی می‌شوند بسیار کمتر خواهد شد و قطر برج‌های بعدی بسیار کاهش می‌یابد و هزینه سالیانه برج‌ها بسیار کمتر خواهد شد.

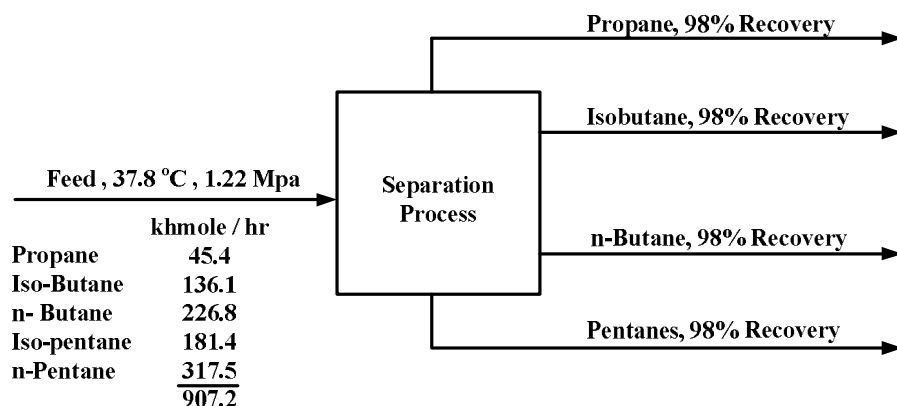
۳- در صورتی که ضرایب فرارایت جفت‌های مجاور و همچنین درصد همه اجزاء به هم نزدیک باشند، مواد موجود در خوراک باید یکی یکی جدا شوند که به این آرایش، آرایش مستقیم گویند. نمونه آرایش مستقیم در قسمت A شکل ۱۷-۳ و قسمت A شکل ۱۷-۴ نشان داده شده است.

این سه قانون همراه با اثر بقیه اجزاء بر جداسازی اجزاء مجاور و قیمت برج باعث انتخاب آرایش بهینه می‌شود. قیمت برج به تعداد مراحل تئوری و شدت جریان برگشتی بستگی دارد. هرچقدر تعداد مراحل تئوری زیاد شود طول برج افزایش و در نهایت قیمت برج افزایش می‌یابد و هرچقدر شدت جریان برگشتی زیاد شود قطر برج افزایش و قیمت برج نیز افزایش خواهد یافت.

مثال ۱۷-۳: با توجه به جداسازی شکل ۱۷-۹ در صورتی که جداسازی ایزوپنتان و نرمال پنتان مورد نیاز باشد با استفاده از قوانین روش اکتشافی، آرایش بهینه که شامل برج‌های تقطیر معمولی هستند را بدست آورید.

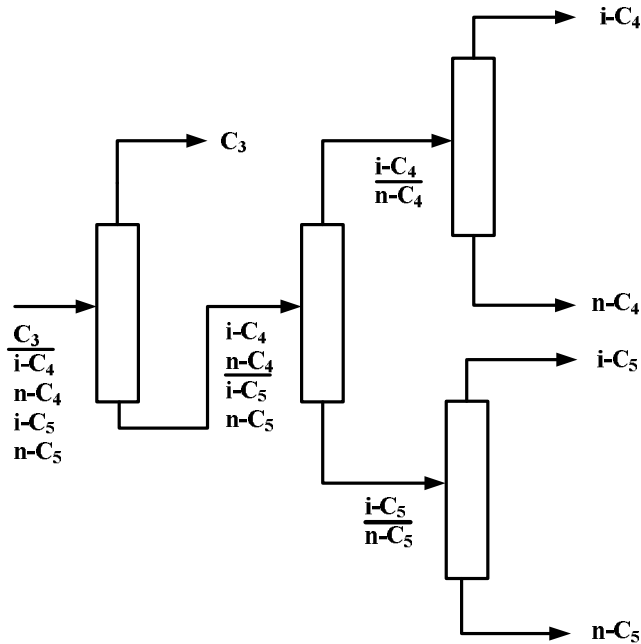
جدول ۱۷-۶: دمای جوش نرمال و ضریب فراریت اجزاء مثال ۱۷-۳

Species	Normal boiling Point , °C	Approximate relative volatility at 1 atm (0.103 MPa)
Propane	-42.1	3.6
Isobutane	-11.7	1.5
n-Butane	-0.5	2.8
Isopentane	27.8	
n-Pentane	36.1	

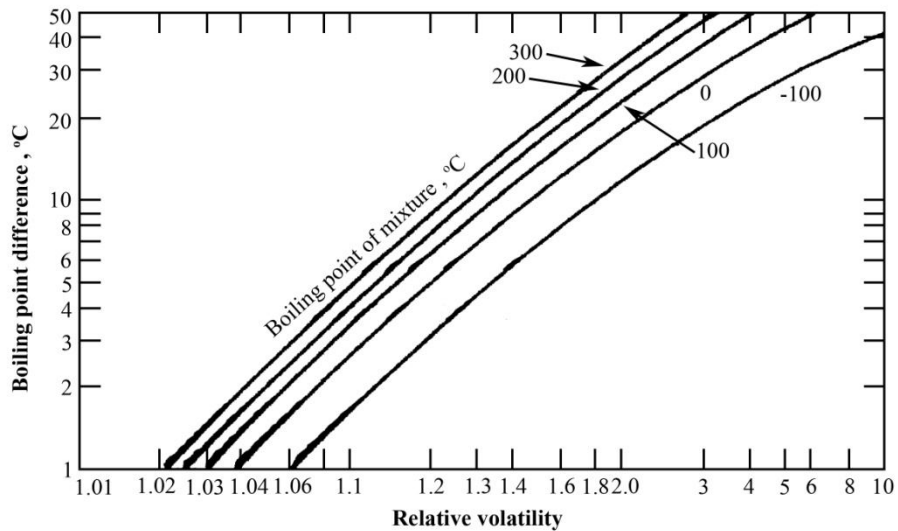


شکل ۱۷-۹: جداسازی پارافین

حل: ضریب فراریت تخمینی برای همه اجزاء مجاور غیر از iC_5/nC_5 در جدول ۱۷-۶ آورده شده است. از آنجا که اختلاف نقطه جوش بین nC_5 و iC_5 ، $8.3^\circ C$ است. با استفاده از شکل ۱۷-۱۱ می‌توان ضریب فراریت را بدست آورد که $\alpha = 1.35$ است. برای این مثال تغییرات ضریب فراریت بین اجزاء مجاور زیاد و همچنین درصدها متفاوت است در صورتی که از تغییرات ضریب فراریت بین اجزاء مجاور استفاده کنیم چون ضریب فراریت بین C_3/iC_4 بیشتر از بقیه است ابتدا C_3 را جدا می‌کنیم سپس ضریب فراریت بین nC_4/iC_5 بیشتر از بقیه است پس این زوج باید از هم جدا شوند سپس زوج‌های iC_4/nC_4 و iC_5/nC_5 از هم جدا می‌شوند. این آرایش که نزدیک به آرایش بهینه است در شکل ۱۷-۱۰ نشان داده شده است.



شکل ۱۷- ۱۰ : استفاده از قانون اول اکتشافی برای نزدیک شدن به آرایش بهینه



شکل ۱۷- ۱۱ : تخمین ضریب فراریت دو جزئی در فشار اتمسفریک

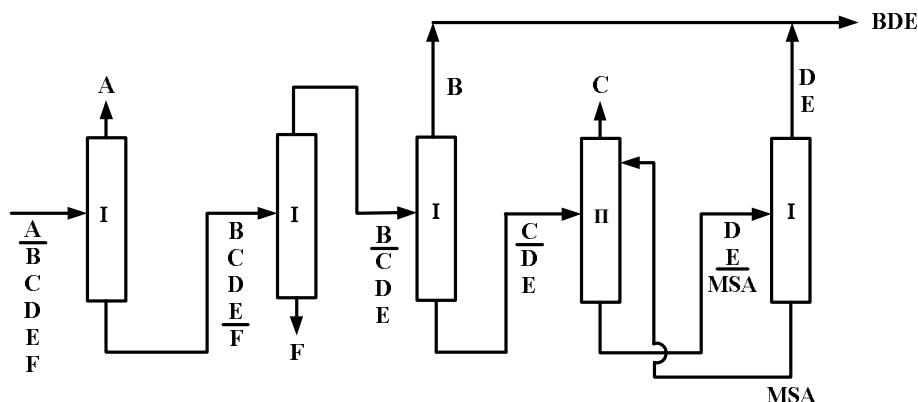
وقتی که در آرایش از یک مکانیسم جداسازی غیر از تقطیر ساده استفاده شود (مخصوصاً وقتی که از یک حلال استفاده می‌شود) دو قانون به قوانین اخیر اضافه می‌شود.

۴- وقتی یک حلال در یک برج استفاده می‌شود بلافاصله باید در برج بعدی جدا شود.

۵- در تقطیر چند جزئی بهتر است از آرایش‌هایی که از تقطیر ساده با کمترین مخلوط کردن جریان‌ها بهره می‌برند استفاده شود مگر در مواردی که ضریب فراریت خیلی پایین باشد.

مثال ۱۷-۴: با استفاده از روش اکتشافی بهترین آرایش را برای مثال ۱۷-۲ بدست آورید.

حل: با توجه به مثال ۱۷-۲ جفت‌های $(A/B...)_I$ و $(...E/F)_I$ دارای ضریب فراریت بالایی هستند از آنجا که درصد‌های ماده A و F در خوراک کم است از قانون اول استفاده می‌کنیم ابتدا A و سپس F را جدا می‌کنیم. حال با استفاده از قانون ۵ چون فراریت بین بقیه اجزاء پایین است باید با اضافه کردن یک حلال از تقطیر استخراجی استفاده کنیم. با استفاده از این روش C را از مخلوط BDE جدا می‌کنیم $(C/BDE)_{II}$ و از قانون چهارم استفاده می‌کنیم و پس از آن حلال استفاده شده را بازیابی می‌کنیم با این روش BDE به طور مستقیم بدست می‌آید. اما ضعف این قسمت این است که ضریب فراریت $(C/BDE)_{II}$ کم است بهتر است در این حالت از قانون دوم استفاده کرده و B را جدا کنیم تا قطر برج‌های بعدی کم شود سپس C و DE را با استفاده از حلال از هم جدا کنیم چون ضریب فراریت $(C/DE)_{II}$ نیز ۱/۷ است و سپس برای تولید محصول BDE می‌توان جریان B را با DE مخلوط کنیم این آرایش در شکل ۱۷-۱۲ نشان داده شده است که دارای هزینه سالانه \$ ۸۷۸۰۰۰ است. این آرایش بهینه نیست اما نزدیک به آرایش بهینه است و می‌توان آن را به آرایش بهینه که در شکل ۱۷-۵ نشان داده شده نزدیک کرد. در این آرایش در صورتی که ابتدا F و سپس A را جدا کنیم هزینه سالانه آرایش به \$ ۸۷۸۲۰۰ افزایش می‌یابد (اثر قانون اول را نشان می‌دهد) آرایش بهینه که در شکل ۱۷-۵ نشان داده شده دارای هزینه سالانه \$ ۸۶۰۴۰۰ است.



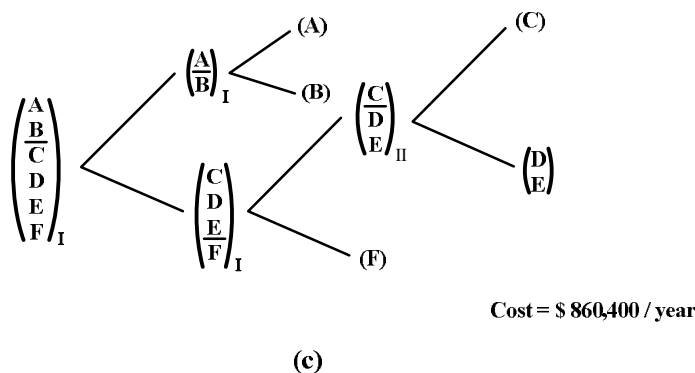
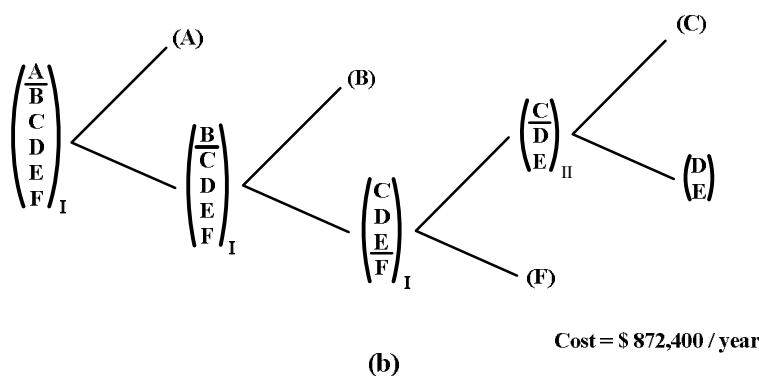
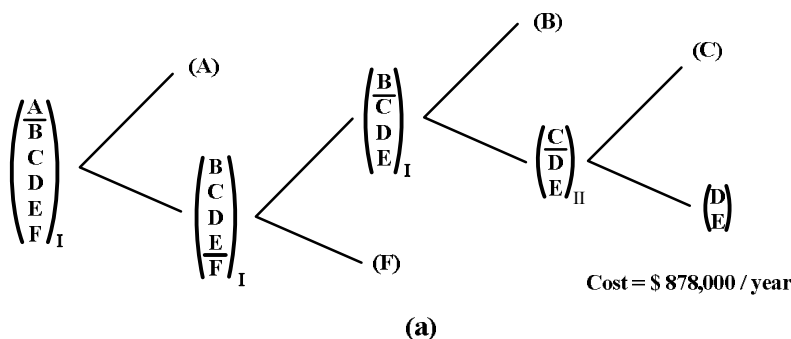
شکل ۱۷-۱۲: استفاده از قوانین اکتشافی برای نزدیک شدن به آرایش بهینه

برای رسیدن به آرایش بهینه با استفاده از آرایش بدست آمده از روش تکاملی ارائه شده توسط سیدر و وستربگ [۱۱] استفاده می‌کنیم در این روش با اعمال تغییرات روی آرایش بدست آمده سعی می‌کنیم که به آرایش بهینه برسیم. آرایش جدید بدست آمده باید ارزیابی اقتصادی شود تا اثر تغییرات مشخص شود. همچنین می‌توان از قوانین تکاملی استفانوپولوس و وستربگ^۱ [۱۳] که یک روش منظم است استفاده کرد این قوانین به صورت زیر است.

۱- جابجا کردن برج‌های مجاور

1- Stephanopoulos and Westerberg

۲- استفاده از تقطیر استخراجی (روش II) به جای تقطیر ساده (روش I) معمولاً با استفاده از روش اکتشافی و تکاملی می‌توان آرایش بهینه را بدون بررسی همه آرایش‌ها بدست آورد.



شکل ۱۷-۱۳ : روش تکاملی برای حل مثال ۱۷-۵ (a) آرایش اولیه (b) نتایج تغییرات اولیه (c) نتایج تغییرات ثانویه و نهایی

مثال ۱۷-۵ : با استفاده از روش تکاملی و آرایش بدست آمده در مثال ۱۷-۴ ، آرایش بهینه را بدست آورید.
 حل : آرایش بدست آمده در مثال ۱۷-۴ به عنوان آرایش مبنا مورد تحلیل قرار می‌گیرد و نمودار درختی آن همراه با تخمین هزینه سالیانه در قسمت A شکل ۱۷-۱۳ نشان داده شده است. قانون دوم تکاملی را نمی‌توان اعمال کرد چون ضریب فراریت بین اجزاء مجاور معقول است. در صورتی که بخواهیم قانون اول تکاملی را اعمال کنیم تغییرات زیر قابل اعمال است.

الف : تغییر برج جداسازی $(A/B...)_I$ با $(...E/F)_I$

ب : تغییر برج جداسازی $(B/C...)_I$ با $(...E/F)_I$

ج : تغییر برج جداسازی $(B/C...)_I$ و $(C/D...)_II$

اعمال حالت (الف) تغییر محسوسی در هزینه سالیانه آرایش نخواهد داشت. از قوانین اکتشافی ۱ و ۲ می‌توان دریافت که چون ضریب فراریت در هر دو برج در محدوده قابل قبولی است و از آنجا که دبی A و دبی F کم است اعمال حالت الف تغییر چندانی ایجاد نخواهد کرد.

اعمال حالت (ب) می‌تواند موثر باشد با توجه به شکل ۱۷-۷ می‌توان دریافت که میزان (B) *1-Butene* بسیار بیشتر از (F) *n-Pentane* است. با توجه به قانون دوم اکتشافی باید ماده‌ای که دبی بیشتری دارد ابتدا مورد جداسازی قرار گیرد. در حقیقت در مثال ۱۷-۴ از قانون اول اکتشافی استفاده شده بود و از قانون دوم اکتشافی صرف‌نظر شده بود. با اعمال این تغییر ابتدا باید B را جدا کرد سپس F را مورد جداسازی قرار داد.

اعمال حالت (ج) نمی‌تواند موثر باشد. مطابق قانون دوم اکتشافی ابتدا باید B جدا شود چون دبی بیشتری دارد. پس فقط باید تغییر حالت (ب) را اعمال کنیم که نمودار درختی آرایش جدید و قیمت آن در قسمت B شکل ۱۷-۱۳ نشان داده شده است و قیمت آرایش به \$ ۸۷۲۴۰۰ کاهش می‌یابد.

همچنین با استفاده از قانون اول تکامل تغییرات زیر را نیز می‌توان اعمال کرد.

د : تغییر نقطه جداسازی $(A/B...)_I$ با نقطه جداسازی $(...B/C...)_I$

ه : تغییر برج $(...E/F)_I$ با $(C/D...)_II$

اعمال تغییر حالت (د) مخالف قانون اول اکتشافی و موافق قانون دوم اکتشافی است. در این حالت قانون دوم مهمتر است چون مقدار A در خوراک زیاد نیست اما مقدار B در خوراک زیاد است. پس با جداسازی AB از بقیه اجزاء، دبی خوراک برج‌های بعدی بسیار کم می‌شود و هزینه آنها کاهش خواهد یافت.

اعمال تغییر حالت (ه) مخالف قانون اول اکتشافی است و قابل انجام نیست.

پس تغییر حالت (د) را اعمال می‌کنیم که نمودار درختی و هزینه سالیانه آرایش در قسمت C شکل ۱۷-۱۳ نشان داده شده که دارای هزینه سالیانه \$ ۸۶۰۴۰۰ می‌باشد. هیچ تغییر دیگری لازم نیست و آرایش بدست آمده، آرایش بهینه است.

استفاده از الگوریتم آرایش‌ها

هیچکدام از روش‌های اکتشافی و تکاملی نمی‌توانند به طور قطعی آرایش بهینه را ایجاد کنند. این روش‌ها برای طراحی اولیه مفید هستند. برای طراحی تفصیلی باید از یک روش دقیقتر برای رسیدن به آرایش بهینه استفاده کرد. برای این منظور باید به روش بهینه‌سازی اقتصادی همراه با طراحی دقیق و تخمین قیمت برج‌ها متصل شویم این روش توسط هندری و هاگز [۳] و همچنین وستربریگ و استفانوپولوس [۱۴] پیشنهاد شده است. متغیرهای طراحی برج که باید مشخص شود شامل موارد زیر می‌باشد.

۱- فشار برج

۲- شدت جریان برگشتی و درجه سرد کردن در صورت لزوم

۳- سرد کردن یا گرم کردن خوراک ورودی به برج

۴- محل سینی خوراک

۵- انتخاب سینی

۶- انتخاب کندانسور و جوش‌آور

۷- دور بودن از حالت طغیان

در برج‌های تقطیر استخراجی شرایط ورود حلال که شامل موارد زیر است باید مشخص شود.

۱- دبی حلال

۲- میزان سرد کردن یا گرم کردن حلال

۳- محل اضافه کردن حلال به برج

تحقیقات جداگانه مختلف که توسط هیون^۱ [۱۵]، هندری^۲ [۷]، کینگ^۳ [۱۶] و تدر^۴ [۱۷] ارائه شده نشان می‌دهد بهینه‌سازی یک برج تاثیر چندانی بر قیمت کلی فرآیند ندارد مگر اینکه برای جوش‌آور یا کندانسور از تجهیزات خاص (مواد گرم کننده خاص غیر از بخار آب و مواد خنک کننده غیر از آب یا هوا) استفاده شود. بنابراین از نمودار درختی ارائه شده توسط رودریگو و سیدر^۵ [۶] که در شکل ۱۷-۱۳ نشان داده شده می‌توان برای رسیدن به آرایش بهینه استفاده کرد. با فرضیات زیر می‌توان برج‌های شبیه به هم را در آرایش‌های مختلف مانند یکدیگر طراحی کرد.

۱- مقدار کم اجزاء غیر کلیدی تاثیر کمی بر قیمت برج دارند.

۲- توزیع محصولات بین بالا و پایین برج به اجزاء کلیدی بستگی دارد.

برای مثال در شکل ۱۷-۸ برج‌های ۲۵، ۸، ۱۶، ۹، ۱۷، ۱۰، ۲۷، ۱۴، ۱۵، ۱۸، ۲۳، ۱۹، ۲۰ و ۲۴، ۲۱ و ۲۸ باید شبیه به هم طراحی شوند. همچنین برج‌های ۲۲، ۲۶، ۲۹، ۳۰ و ۳۱ باید شبیه به هم طراحی شوند. بنابراین از ۳۱ برج موجود باید ۱۹ برج طراحی شوند.

بدست آوردن آرایش بهینه با استفاده از این روش شامل دو مرحله است. ابتدا با توجه به شکل ۱۷-۸ از خوراک شروع می‌کنیم و در توالی بعدی هر جداسازی که دارای کمترین قیمت باشد انتخاب می‌شود همین کار را ادامه می‌دهیم تا حدس اولیه بدست آید. البته حدس اولیه را با استفاده از روش اکتشافی و تکاملی نیز می‌توان بدست آورد. در مرحله دوم باید از حدس اولیه برای رسیدن به آرایش بهینه استفاده کنیم. برای این منظور از آخرین جداکننده آرایش اولیه شروع می‌کنیم و به جریان زیرگروه قبلی بازمی‌گردیم و یک جداسازی که حداقل قیمت

1- Heaven
2- Hendry
3- King
4- Tedder
5- Rodrigo and Seader

را داشته باشد انتخاب می‌کنیم تا آرایش بعدی بدست آید. قیمت آرایش بدست آمده را با آرایش اولیه مقایسه می‌کنیم و ارزان‌ترین آرایش را انتخاب می‌کنیم. همین کار را ادامه می‌دهیم تا بقیه آرایش‌ها نیز بدست آیند.

مثال ۱۷-۶: با استفاده از نمودار درختی، آرایش بهینه را برای مثال ۱۷-۲ بدست آورید.

حل: با استفاده از اطلاعات داده شده در شکل ۱۷-۸ حداقل هزینه را برای جداسازی اول در نظر می‌گیریم. مرحله اول جداسازی شامل برج‌های ۱، ۲، ۳ و ۴ می‌باشد که برج ۱ دارای حداقل هزینه می‌باشد. حال برج‌های زیردستی برج اول (برج ۱) را مورد بررسی قرار می‌دهیم. برج‌های زیردستی برج اول شامل برج‌های ۵، ۶ و ۷ می‌باشند که بین آنها برج ۷ دارای حداقل هزینه است. حال برج‌های زیردستی برج ۷ را مورد بررسی قرار می‌دهیم. برج‌های زیردستی برج ۷ شامل برج‌های ۱۹ و ۲۰ می‌باشند که برج ۱۹ دارای حداقل هزینه است، سپس برج زیردستی برج ۱۹ که برج شماره ۳۰ است را در نظر می‌گیریم. موارد ذکر شده در جدول ۱۷-۷ نشان داده شده است.

جدول ۱۷-۷: بدست آوردن آرایش اولیه

Phase 1				
	Step 1	Step 2	Step 3	Step 4
	1*	5	19*	30*
Separators	2	6	20	
	3	7*		
	4			
Products Formed by cheapest branch	A	F	B	B, DE

پس آرایش ۳۰-۱۹-۷-۱ به عنوان آرایش اولیه در نظر گرفته می‌شود. برای انجام مرحله دوم از آخرین جداکننده آرایش اولیه (برج ۳۰) شروع می‌کنیم و به جریان زیر گروه *BCDE* برمی‌گردیم که جریان پایین برج شماره ۷ می‌باشد. حال مسیر دیگری را برای آرایش در نظر می‌گیریم در این صورت آرایش بعدی، آرایش ۲۰-۱-۷ می‌باشد این آرایش‌ها به همراه هزینه سالیانه هر کدام در جدول ۱۷-۸ آمده است. سپس به جریان زیرگروه قبلی برمی‌گردیم که جریان زیرگروه *BCDEF* است. از آنجا که یک بار برج ۷ در نظر گرفته شده باید بین برج‌های ۵ و ۶ یک برج را انتخاب کنیم چون برج ۵ هزینه کمتری دارد انتخاب می‌شود. برج‌های زیرگروه برج ۵ شامل برج‌های ۱۶ و ۱۷ می‌باشد که چون برج ۱۷ هزینه کمتری دارد انتخاب می‌شود بدین ترتیب آرایش بعدی آرایش ۲۹-۱۷-۵-۱ خواهد بود. بقیه آرایش‌ها در جدول ۱۷-۸ آورده شده است.

جدول ۱۷-۸ : آرایش‌های مختلف و هزینه آنها برای مثال ۱۷-۶

Sequence (or Partial Sequence) by Separator Numbers From Fig 17-8	Total Cost \$/yr (or Partial Cost),	Comments
1-7-19-30	878000	Initial upper bound (cheapest first sequence)
1-7-20	1095600	
1-5-17-29	872400	New upper bound
1-5-16-28	900200	
(1-6)	(1080800)	
3-11-23-31	878200	
3-11-24	1095700	
$3-12 \begin{matrix} /_{25} \\ \backslash_{26} \end{matrix}$	867400	New upper bound
(3-13)	(1059000)	
$2 \begin{matrix} /_{8} \\ \backslash_{10-22} \end{matrix}$	860400	New upper bound (Optimal sequence)
$2 \begin{matrix} /_{8} \\ \backslash_{9-21} \end{matrix}$	888200	
(4)	(1047500)	

با توجه به جدول ۱۷-۸ نه آرایش از دوازده آرایش باید به طور دقیق تخمین قیمت شوند. بنابراین ۲۷ برج از ۳۱ برج باید مورد بررسی قرار گیرند که ۱۷ برج از ۱۹ برج یکتا باید کاملاً طراحی شوند. آرایش بهینه حدود ۲٪ هزینه کمتری نسبت به مورد بدست آمده توسط روش اکتشافی و تکاملی دارد.

منابع

- 1- Thompson, R. W., and C. J. King, "Synthesis of Separation Schemes," Technical Report No. LBL-614, Lawrence Berkeley Laboratory (July, 1972).
- 2- Souders, M., *Chem. Eng. Progr.*, 60 (2), 75-82 (1964).
- 3- Hendry, J. E., and R. R. Hughes, *Chem. Eng. Progr.*, 68 (6) 71-76 (1972).

- 4- Buell, C. K., and R. G. Boatright, *Ind. Eng. Chem.*, 39, 695-705 (1947).
- 5- Nilsson, N. J., *Problem-Solving Methods in Artificial Intelligence*, McGraw-Hill book Co., New York, 1971.
- 6- Rodrigo, B. F. R., and J. D. Seader, *AIChE J.*, 21, 885-894 (1975).
- 7- Hendry, J. E., Ph.D. *thesis in chemical engineering*, University of Wisconsin, Madison, 1972.
- 8- Lockhart, F. J., *Petroleum Refiner*, 26 (8), 104-108 (1947).
- 9- Rod, V., and J. Marck, *Collect. Czech. Chem. Commun.*, 24, 3240-3248 (1959).
- 10- Nishimura, H., and Y. Hiraizumi, *Int. Chem. Eng.*, 11, 188-193 (1971).
- 11- Seader, J. D., and A. W. Westerberg, *AIChE J.*, 23, 951-954 (1977).
- 12- Thompson, R. W., and C. J. King, *AIChE J.*, 18, 941-948 (1972).
- 13- Stephanopoulos, G., and A. W. Westerberg, *Chem. Eng. Sci.*, 31, 195-204 (1976).
- 14- Westerberg, A. W., and G. Stephanopoulos, *Chem. Eng. Sci.*, 30, 963-972 (1975).
- 15- Heaven, D. L., M. S. *thesis in chemical engineering*, University of California, Berkeley, 1969.
- 16- King, C. J., *Separation Processes*, McGraw-Hill Book Co., New York, 1971.
- 17- Tedder, D. W., Ph.D. *thesis in chemical engineering*, University of Wisconsin, Madison, 1975.

مسائل

۱- یک جریان تثبیت شده فرعی از واحد هیدروژناسیون به شرح زیر می‌باشد که قرار است به پنج محصول خالص تبدیل شود برای این منظور به چهار برج جداسازی نیاز است. مطابق رابطه ۱۷-۱ این چهار برج می‌توانند به چهارده صورت کنار یکدیگر قرار گیرند. این آرایش‌ها را رسم کنید.

Component	Feed Flow rate , lbmole/hr	Approximate relative volatility relative to C ₅
Propane (C3)	10.0	8.1
Butene-1 (B1)	100.0	3.7
n-Butane (NB)	341.0	3.1
Butane-2 isomers (B2)	187.0	2.7
n-pentane (C5)	40.0	1.0

۲- خوراک یک واحد جداسازی شامل اجزاء زیر می‌باشد.

Species Number	Species
1	Ethane
2	Propane
3	Butene-1
4	n-Butane

می‌خواهیم توسط این واحد جداسازی خوراک را به اجزاء خالص تبدیل کنیم. این کار توسط دو روش انجام می‌شود.

روش اول : تقطیر ساده

روش دوم : تقطیر استخراجی

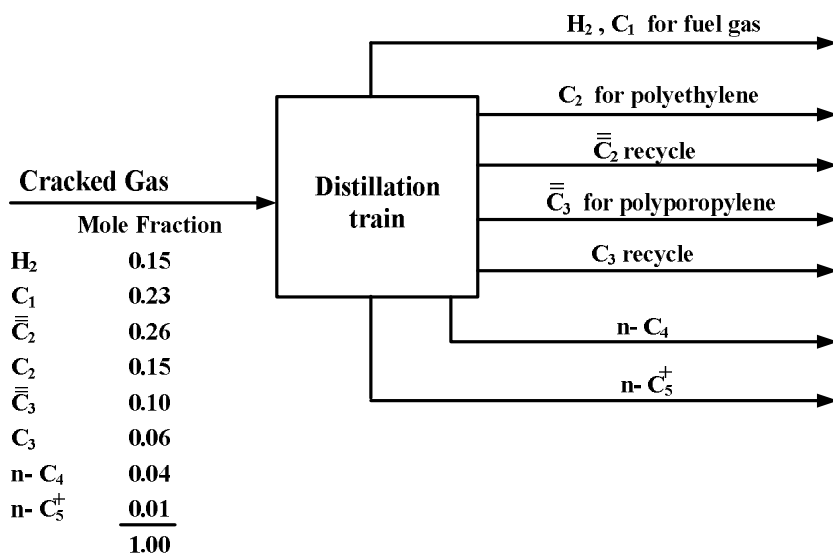
روند ضریب فراریت برای دو روش جداسازی به صورت زیر است.

	Separator Type	
	1	2
Species number	1	1
	2	2
	3	4
	4	3
	5	5

الف : تعداد آرایش‌های ممکن برای هر کدام از روش‌ها را بدست آورید.

ب : برای کاهش تعداد آرایش‌ها از کدام آرایش می‌توان صرف‌نظر کرد.

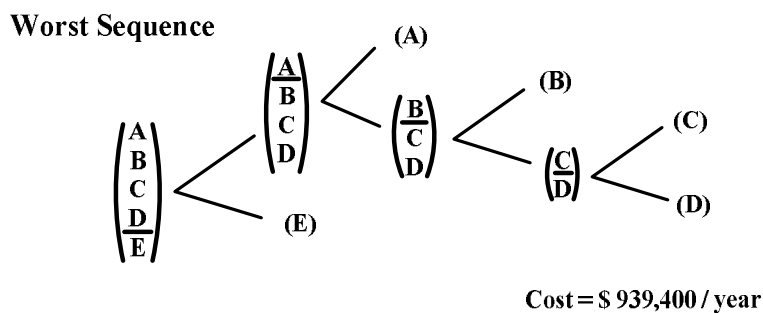
۳- محصول واحد کراکینگ نفتا که به صورت گاز است با ترکیب زیر وارد یک واحد جداسازی می‌شود و قرار است به محصولات نشان داده شده تبدیل شود. با استفاده از قانون دوم اکتشافی بهترین آرایش را بدست آورید.



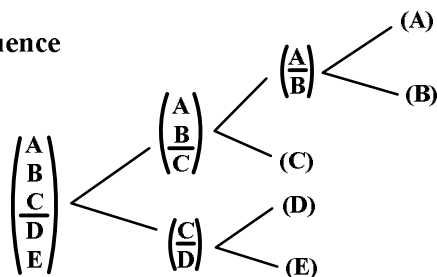
۴- برای جداسازی مخلوط پنج جزئی زیر با دبی 200 lbmole/hr به محصولاتی با غلظت ۹۸٪ دقیقاً ۱۴ آرایش وجود دارد.

Species	Symbol	Feed , mole fraction	Approximate relative volatility relative n-pentane
Propane	A	0.05	8.1
Isobutane	B	0.15	4.3
n-Butane	C	0.25	3.1
Isopentane	D	0.20	1.25
n-pentane	E	0.35	1.0
		1.00	

دانشگاه کالیفرنیا پیشنهاد کرده است همه حالت‌ها از نظر اقتصادی بررسی شوند. برای هر آرایش، هزینه سالیانه که شامل استهلاک دستگاه‌ها نیز می‌باشد بررسی شده است نتایج تخمین قیمت شامل سه طرح برتر و همچنین بدترین طرح به صورت زیر می‌باشد.

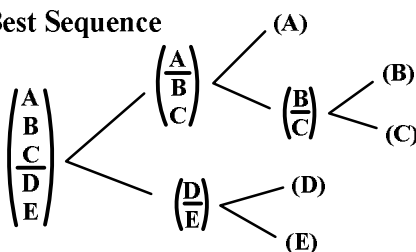


Best Sequence



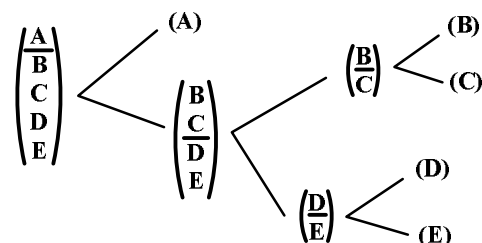
Cost = \$ 858,780 / year

Second-Best Sequence



Cost = \$ 863,580 / year

Third-Best Sequence



Cost = \$ 871,460 / year

با استفاده از قوانین اکتشافی ، بهترین و بدترین طرح را بدست آورید. در این مسئله کدام یک از قوانین اکتشافی نقش بیشتری دارد؟

۵- با استفاده از قوانین اکتشافی دو آرایش برتر را برای مثال ۱۷-۱ بدست آورید.

۶- یک شاخه فرعی خروجی از راکتور شامل ترکیبات هیدروکربنی کلردار و همچنین HCl می باشد با استفاده از قوانین اکتشافی و اطلاعات زیر، دو آرایش برتر را بدست آورید. ضمناً نباید فراموش کنیم که HCl یک ماده خورنده است.

Species	lbmole/hr	α , relative to RCl_3	Purity desired
HCL	52	4.7	80%
RH_3	58	15.0	85%
RCl_3	16	1.0	98%
RH_2Cl	30	1.9	95%
RHCl_2	14	1.2	98%

۷- جریان زیر در 100°F و 480 Psia وارد یک فرآیند جداسازی می‌شود و قرار است به چهار محصول مشخص شده در جدول زیر تبدیل شود. با استفاده از قوانین اکتشافی، بهترین آرایش را بدست آورید.

Species	Feed. lbmole / hr	Percent Recovery			
		Product 1	Product 2	Product 3	Product 4
H_2	1.5	~ 100			
CH_2	19.3	99			
Benzene	262.8		98		
Toluene	84.7			98	
Biphenyl	5.1				90

۸- جریان زیر در 100°F و 20 Psia وارد یک فرآیند جداسازی می‌شود و قرار است به چهار محصول مشخص شده در جدول زیر تبدیل شود. با استفاده از قوانین اکتشافی، بهترین آرایش را بدست آورید.

species	Feed. lbmole / hr	Percent Recovery			
		Product 1	Product 2	Product 3	Product 4
Benzene	100	98			
Toluene	100		98		
Ethylbenzene	200			98	
p-Xylene	200			98	
m-Xylene	200			98	
o-Xylene	200				98

۹- برای مسئله ۱ هزینه سالیانه جداسازی اجزاء که شامل استهلاک نیز می‌باشد در جدول زیر داده شده است. با تشکیل نمودار درختی موارد زیر را بدست آورید.

الف : بهترین آرایش

ب : دومین آرایش برتر

ج : بدترین آرایش

Split	Cost , \$/yr
C3 / B1	15000
B1 / NB	190000
NB / B2	420000
B2 / C5	32000
C3 , B1 / NB	197000
C3 / B1 , NB	59000
B1 , NB / B2	500000
B1 / NB , B2	247000
NB , B2 / C5	64000
NB / B2 , C5	460000
C3 , B1 , NB / B2	510000
C3 , B1 / NB , B2	254000
C3 / B1 , NB , B2	85000
B1 , NB , B2 / C5	94000
B1 , NB / B2 , C5	530000
B1 / NB , B2 , C5	254000
C3 , B1 , NB , B2 / C5	95000
C3 , B1 , NB / B2 , C5	540000
C3 , B1 / NB , B2 , C5	261000
C3 / B1 , NB , B2 , C5	90000

۱۰- یک مخلوط فرضی چهار جزئی (A, B, C, D) قرار است به چهار محصول تقریباً خالص تبدیل شود. برای این منظور دو مکانیسم جداسازی مدنظر است که در هیچکدام از مکانیسم‌ها از حلال استفاده نمی‌شود. ترتیب جداسازی اجزاء در دو مکانیسم به صورت زیر است.

Separator	Separator
Type I	Type II
A	B
B	A
C	C
D	D

هزینه سالیانه جداسازی اجزاء در هر کدام از مکانیسم‌ها به صورت زیر است. با تشکیل نمودار درختی موارد زیر را بدست آورید.

Subgroup	Split	Type Separator	Annual Cost × \$10000
(A,B)	A/B	I	8
		II	15
(B,C)	B/C	I	23
		II	19
(C,D)	C/D	I	10
		II	18
(A,C)	A/C	I	20
		II	6
(A,B,C)	A/B , C	I	10
		II	25
		I	25
		II	20
(B,C,D)	B/C , D	I	27
		II	22
		I	12
		II	20
(A,C,D)	A/C , D	I	23
		II	10
		I	11
		II	20
(A,B,C,D)	A/B , C , D	I	14
		II	20
		I	27
		II	25
		I	13
		II	21

الف : بهترین آرایش
ب : دومین آرایش برتر

ج : بدترین آرایش

۱۱- جریان زیر در $100^\circ F$ و 250 Psia وارد یک فرآیند جداسازی می شود و قرار است به چهار محصول نشان داده شده در جدول زیر تبدیل شود. هزینه سالانه جداکننده ها یکتا نیز داده شده است با تشکیل نمودار درختی موارد زیر را بدست آورید.

الف : بهترین آرایش

ب : دومین آرایش برتر

Species	Symbol	Feed Rate, lbmole /hr	Percent Recovery			
			Product 1	Product 2	Product 3	Product 4
Propane	A	100	98			
i-Butane	B	300		98		
n-Butane	C	500			98	
i-Pentane	D	400				98

Unique Separator	Cost , \$/yr
A/B	26100
B/C	94900
C/D	59300
A/BC	39500
AB/C	119800
B/CD	112600
BC/D	76800
A/BCD	47100
AB/CD	140500
ABC/D	94500

۱۲- جریان زیر در $100^{\circ}F$ و 300 Psia وارد یک فرآیند جداسازی می‌شود و قرار است به چهار محصول تقریباً خالص تبدیل شود هزینه سالیانه جداکننده‌های یکتا نیز داده شده است.
 الف : همه آرایش‌های ممکن را بدست آورید.
 ب : با تشکیل نمودار درختی ، بهترین آرایش را بدست آورید.

Species	Symbol	Feed Rate, lbmole/hr
i-Butane	A	300
n-Butane	B	500
i-Pentane	C	400
n-Pentane	D	700

Unique Separator	Cost,\$/yr
A/B	94900
B/C	59300
C/D	169200
A/BC	112600
AB/C	76800
B/CD	78200
BC/D	185300
A/BCD	133400
AB/CD	94400
ABC/D	241800

۱۳- می‌خواهیم با استفاده از تقطیر معمولی اجزاء پروپان (A) ، ایزوبوتان (B) ، نرمال بوتان (C) ، ایزوپنتان (D) و نرمال پنتان (E) را مورد جداسازی قرار دهیم.
 الف : تعداد آرایش‌های ممکن و تعداد برج‌های یکتا را بدست آورید.

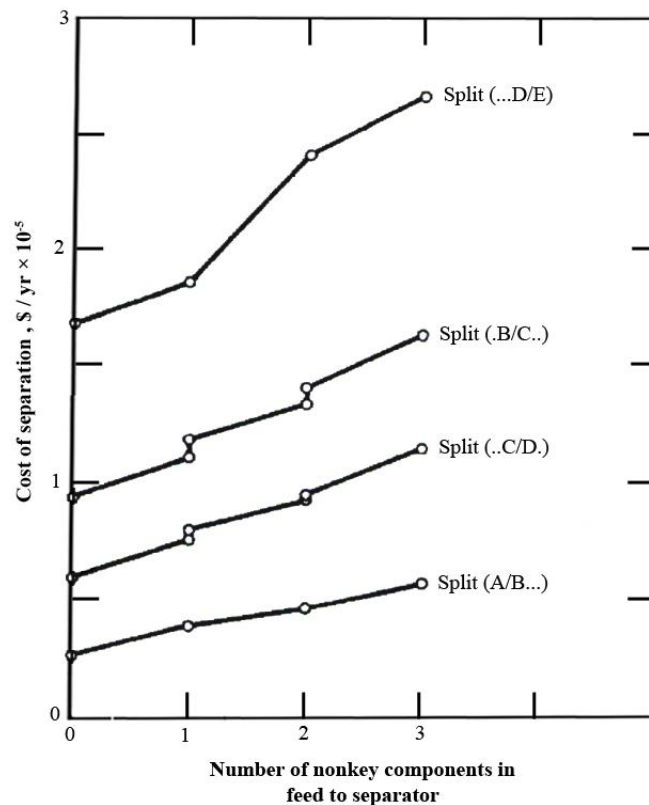
با استفاده از قوانین اکتشافی موارد زیر را بدست آورید.

ب : در صورتی که خوراکی هم مولار شامل همه اجزاء وارد فرآیند شود و محصولات شامل A ، (B, C) و (D, E) باشد تعداد آرایش‌های ممکن ، تعداد برج‌های یکتا و بهترین آرایش را بدست آورید.

ج : در صورتی که خوراک شامل 10 lbmole/hr ماده A ، 10 lbmole/hr ماده B ، 60 lbmole/hr ماده C ، 10 lbmole/hr ماده D و 20 lbmole/hr ماده E باشد، بهترین آرایش را برای رسیدن به محصولات تقریباً خالص بدست آورید.

د : داده‌های [A.Gomez and J.D.Seader ,AIChE j,22 ,970 (1976) Gomez and Seader تاثیر اجزاء غیر کلیدی یک جداسازی را بر هزینه سالیانه جداکننده نشان می‌دهد که در شکل زیر نشان داده شده است. با استفاده از اطلاعات زیر بهترین آرایش را برای یک خوراک هم مولار شامل همه اجزاء بدست آورید.

Component	Pressure Boiling-pt °F at 100	α at Boiling point pressure
A	210	
B	65	2.2
C	35	1.44
D	5	2.73
E	0	1.25



فصل هجدهم

جلوگیری از اتلاف انرژی و بازده ترمودینامیکی

مقدمه

بجز مواردی که در جداسازی از حلال استفاده می‌شود برای اکثر جداسازی‌ها انرژی (کار و گرما) مصرف می‌شود. نتایج اقتصادی سالهای گذشته در مورد دستگاه‌ها نشان داده است که قیمت انرژی بسیار مهمتر از استهلاک دستگاهها می‌باشد. در سالهای اخیر قیمت انرژی بسیار بالا رفته و این موضوع بیش از پیش مورد توجه قرار گرفته است. برای اینکه انرژی مصرف شده در فرآیند جداسازی را بهینه کنیم لازم است که ابتدا مینیمم انرژی لازم جهت یک جداسازی را بدست آورده و سپس سعی کنیم که انرژی مصرفی سیستم را به مینیمم مقدار آن نزدیک کنیم. برای این منظور از آنالیزهای ترمودینامیکی استفاده می‌کنیم همچنین با استفاده از این روش می‌توان میان چند سیستم که کار مشابهی را انجام می‌دهند، مقایسه انجام داد. این تحلیل برای جداسازی‌های دمای بالا و دمای پایین و جداسازی با استفاده از سیکل‌های سردساز مانند جداسازی هوا بسیار مهم می‌باشد.

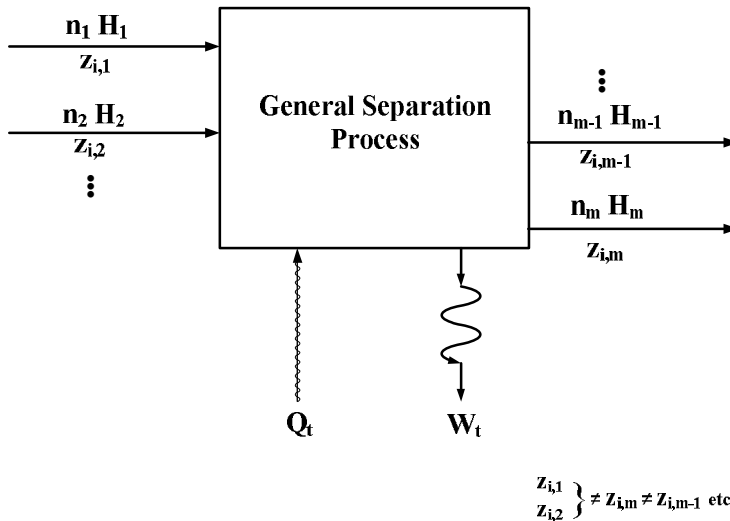
حداقل کار لازم جهت جداسازی

یک سیستم پایا^۱ و پیوسته^۲ که شامل m جریان است در شکل ۱-۱۸ نشان داده شده است تعداد j جریان به صورت یک‌فازی وارد سیستم و تعداد k جریان به صورت یک‌فازی از سیستم خارج می‌شوند. غلظت همه جریان‌ها با هم متفاوت هستند. در این سیستم هیچگونه واکنش شیمیایی رخ نمی‌دهد و فقط جداسازی بین اجزاء رخ خواهد داد. دبی جریان‌ها با n ، غلظت‌های مولی با z_i ، آنتالپی مولی با H و آنتروپی با S نشان داده می‌شوند. حرارت تبادل شده بین سیستم و محیط با Q_i و کار تبادل شده بین سیستم و محیط با W_i

1- Steady State
2- Continuous

نشان داده می‌شوند. مطابق معمول انتقال حرارت از محیط به سیستم مثبت و انجام کار توسط سیستم روی محیط نیز مثبت در نظر گرفته می‌شود. از تغییرات انرژی پتانسیل، جنبشی، انرژی سطح و سایر انرژی‌ها صرف نظر می‌شود. با اعمال قانون اول ترمودینامیک خواهیم داشت.

$$\sum_{in} n_j H_j + Q_t = \sum_{out} n_k H_k + W_t \quad 1-18$$



شکل ۱-۱۸: شمایی از یک سیستم جداسازی کلی

یک حالت ایده‌آل برای سیستم در نظر گرفته می‌شود بدین ترتیب که فرآیند همدمای و برگشت پذیر باشد، پس انتقال حرارت بین سیستم و محیط در دمای ثابت T_0 انجام می‌شود که با استفاده از قانون دوم ترمودینامیک خواهیم داشت.

$$Q_t = T_0 \left[\sum_{out} n_k S_k - \sum_{in} n_j S_j \right] \quad 2-18$$

با جایگذاری رابطه ۲-۱۸ در رابطه ۱-۱۸ می‌توان یک عبارت برای حداقل میزان کار انجام شده روی سیستم بدست آورد.

$$-W_{Min} = \sum_{out} n_k H_k - \sum_{in} n_j H_j - T_0 \left[\sum_{out} n_k S_k - \sum_{in} n_j S_j \right] \quad 3-18$$

پس حداقل میزان کار انجام شده روی سیستم فقط به غلظت خوراک و محصولات بستگی دارد. تعریف انرژی آزاد گیبس در دمای T_0 با استفاده از ترمودینامیک کلاسیک به صورت زیر می‌باشد.

$$G = H - T_0 S \quad 4-18$$

با جایگذاری رابطه ۴-۱۸ در رابطه ۳-۱۸ خواهیم داشت.

$$-W_{Min} = \sum_{out} n_k G_k - \sum_{in} n_j G_j \quad 5-18$$

پس میزان حداقل کار انجام شده روی سیستم به تغییرات انرژی آزاد گیبس خوراک‌ها و محصولات بستگی دارد. انرژی آزاد گیبس یک مخلوط از رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$G = \sum_i z_i \bar{G}_i \quad 6-18$$

انرژی گیبس جزئی هر جزء در دمای T با استفاده از فوگاسیته هر جزء بدست می‌آید.

$$\bar{G}_i = \bar{G}_i^\circ + RT \left(\ln f_i - \ln f_i^\circ \right) \quad 7-18$$

در صورتی که همه جریان‌های ورودی و خروجی در یک فشار ثابت (P) در نظر گرفته شوند میزان \bar{G}_i° و f_i° برای همه اجزاء یکسان خواهد بود و با ترکیب معادلات ۵-۱۸، ۶-۱۸ و ۷-۱۸ می‌توان حداقل کار انجام شده روی سیستم را بر حسب فوگاسیته خوراک و محصولات به صورت زیر نوشت.

$$-W_{Min} = RT \left[\sum_{out} n_k \left(\sum_i z_{i,k} \ln f_{i,k} \right) - \sum_{in} n_j \left(\sum_i z_{i,j} \ln f_{i,j} \right) \right] \quad 8-18$$

مخلوط گازهای ایده‌آل

برای مخلوط گازهایی که ایده‌آل هستند می‌توان از قوانین این گازها که شامل $z_i = y_i$ و $f_i = y_i P$ می‌باشد استفاده نمود و معادله ۸-۱۸ به معادله زیر تبدیل خواهد شد.

$$-W_{Min} = RT \left\{ \sum_{out} n_k \left[\sum_i y_{i,k} \ln(y_{i,k}) \right] - \sum_{in} n_j \left[\sum_i y_{i,k} \ln(y_{i,k}) \right] \right\} \quad 9-18$$

پس مشخص می‌شود که حداقل کار انجام شده روی سیستم به فشار سیستم و ضریب فراریت بین اجزاء بستگی ندارد، ضمناً حداقل کار انجام شده روی سیستم برای جداسازی کامل محدود خواهد بود. برای مثال برای جداسازی کامل یک خوراک گازی دوجزئی که شامل مواد A و B می‌باشد و محصولات خروجی در دما و فشار خوراک باشند با استفاده از رابطه ۹-۱۸ خواهیم داشت.

$$\frac{-W_{Min}}{n_F RT} = -[(y_A)_F \ln(y_A)_F + (y_B)_F \ln(y_B)_F] \quad 10-18$$

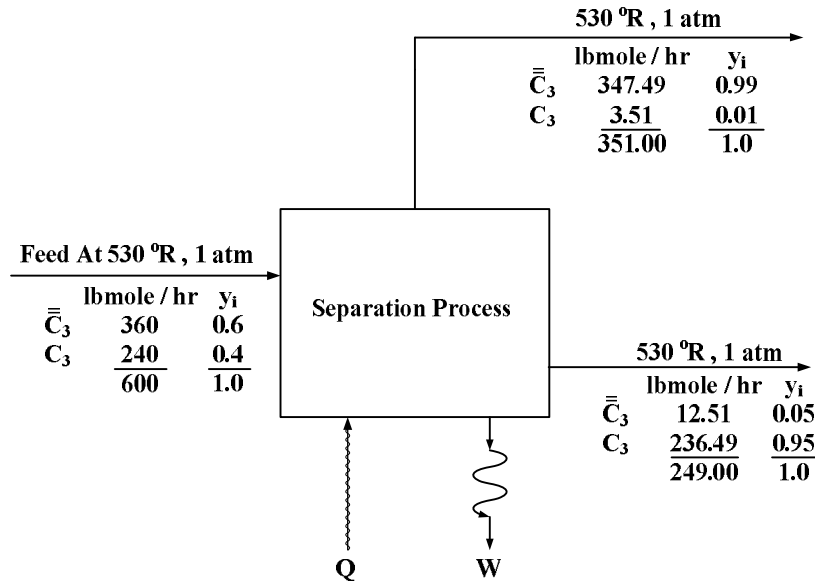
که رابطه اخیر به صورت بدون بعد نوشته شده است. اندیس F مربوط به شرایط خوراک است. در صورتی که خوراک شامل مول‌های مساوی از هر دو جزء باشد میزان کار انجام شده بدون بعد 0.6931 خواهد بود.

مثال ۱-۱۸: همانطور که در شکل ۱۸-۲ نشان داده شده خوراکی شامل ۶۰٪ مولی پروپیلن و ۴۰٪ مولی پروپان در شرایط محیط وارد یک سیستم جداسازی می‌شود. یکی از محصولات شامل ۹۹٪ پروپیلن و محصول دیگر شامل ۹۵٪ پروپان می‌باشد، محصولات نیز در دما و فشار محیط از سیستم خارج می‌شوند. حداقل میزان کار انجام شده روی سیستم را بدست آورید.

حل: خوراک و محصولات در دما و فشار یکسان هستند از آنجا که ساختار اجزاء شبیه به هم هستند و فشار سیستم 1 atm است مخلوط، گاز ایده‌آل خواهد بود و می‌توان از قانون گاز ایده‌آل استفاده نمود. بنابراین

می‌توان از رابطه ۹-۱۸ جهت محاسبه حداقل کار انجام شده روی سیستم استفاده کرد. با توجه به اینکه دمای محیط $T_o = 530 R$ است خواهیم داشت.

$$-W_{Min} = (1.987)(530)\{(351)[0.99 \ln(0.99) + 0.01 \ln(0.01)] + (249)[0.05 \ln(0.05) + 0.95 \ln(0.95)] - (600)[0.60 \ln(0.60) + 0.40 \ln(0.40)]\} = 352497.15 \text{ Btu/hr (587.5 Btu/lbmole of feed)}$$



شکل ۱۸-۲: مشخصات سیستم جداسازی پروپان و پروپیلن

مخلوط مایعات در فشار کم

یک حالت ایده‌آل دیگر برای رابطه ۸-۱۸ حالتی است که مایع در فشار نزدیک به فشار اتمسفریک باشد. در این حالت $z_i = x_i$ و $f_i = \gamma_i x_i P_i^S$ خواهد بود که ضریب اکتیویته فاز مایع و P_i^S فشار بخار اجزاء سیستم می‌باشد که رابطه ۸-۱۸ به صورت زیر خواهد شد.

$$-W_{Min} = RT_o \left\{ \sum_{out} n_k \left[\sum_i x_{i,k} \ln(\gamma_{i,k} x_{i,k}) \right] - \sum_{in} n_j \left[\sum_i x_{i,j} \ln(\gamma_{i,j} x_{i,j}) \right] \right\} \quad 11-18$$

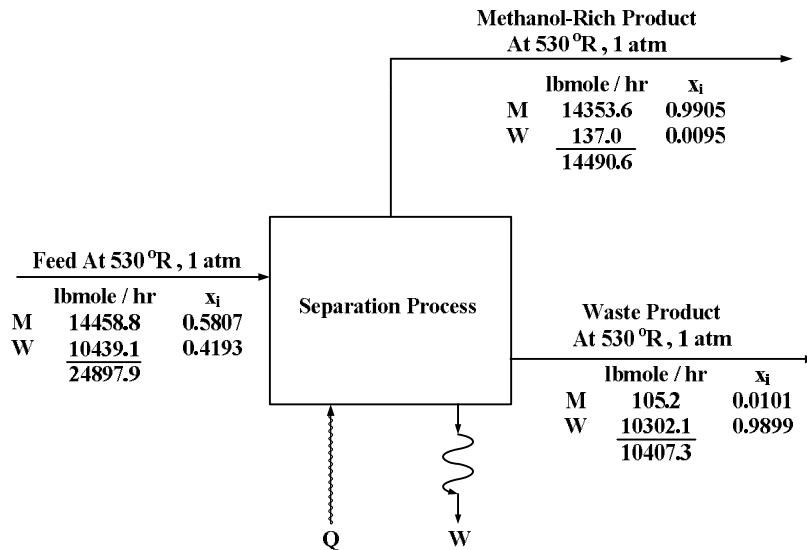
پس میزان حداقل کار انجام شده روی سیستم به فشار و ضریب فراریت بین اجزاء بستگی ندارد و فقط تابع غلظت و اکتیویته اجزاء در فاز مایع خواهد بود. برای جداسازی کامل در فاز مایع، میزان حداقل کار انجام شده روی سیستم به صورت زیر می‌باشد.

$$\frac{-W_{Min}}{n_F RT_o} = -[x_{A,F} \ln(\gamma_{A,F} x_{A,F}) + x_{B,F} \ln(\gamma_{B,F} x_{B,F})] \quad 12-18$$

که میزان حداقل کار انجام شده روی سیستم در جداسازی کامل مقداری محدود خواهد بود. برای حالتی که $\gamma_i > 1$ است میزان حداقل کار انجام شده روی سیستم کمتر از حالتی است که $\gamma_i < 1$ باشد. طبق رابطه ۱۸-۱۸

۱۲ وقتی که $\gamma_{B,F} x_{B,F} = 1$ و $\gamma_{A,F} x_{A,F} = 1$ باشد $(-W_{Min}) = 0$ خواهد بود، زیرا در این حالت دو فاز مایع کاملاً نامحلول هستند و نیازی به جداسازی آنها نیست و خود به خود از هم جدا می‌شوند.

مثال ۱۸-۲: یک سیستم جداساز متانول (M) و آب (W) در شکل ۱۸-۳ نشان داده شده است. میزان حداقل کار انجام شده روی سیستم را بدست آورید.



شکل ۱۸-۳: مشخصات سیستم جداساز متانول و آب برای مثال ۱۸-۲

حل: همه فازها به صورت مایع می‌باشند و ضرایب اکتیویته اجزاء در فاز مایع در دمای $530 R$ با استفاده از معادله ون لار به صورت زیر خواهد بود.

$$\log \gamma_M = \frac{0.25}{[1 + 1.25 x_M / x_W]^2}$$

$$\log \gamma_W = \frac{0.20}{[1 + 0.80 x_M / x_W]^2}$$

برای غلظت‌های داده شده در شکل ۱۸-۳ میزان ضرایب اکتیویته با استفاده از رابطه اخیر به صورت زیر خواهد بود.

Component	γ		
	Feed	Methanol-Rich Product	Waste Product
Methanol	1.08	1.00	1.75
Water	1.20	1.57	1.00

با استفاده از رابطه ۱۸-۱۱ و خواص لگاریتم، تاثیر ضرایب اکتیویته جداگانه در نظر گرفته می‌شود.

$$\begin{aligned}
-W_{Min} &= RT_0 \left\{ \sum_{out} n_k \left[\sum_i x_{i,k} \ln x_{i,k} \right] - \sum_{in} n_j \left[\sum_i x_{i,j} \ln x_{i,j} \right] \right\} \\
&RT_0 \left\{ \sum_{out} n_k \left[\sum_i x_{i,k} \ln \gamma_{i,k} \right] - \sum_{in} n_j \left[\sum_i x_{i,j} \ln \gamma_{i,j} \right] \right\} \\
&= (1.987)(530) \{ (14490.6) [0.9905 \ln(0.9905) + 0.0095 \ln(0.0095)] \\
&+ (10407.3) [0.0101 \ln(0.0101) + 0.9899 \ln(0.9899)] \\
&- (24897.9) [0.5807 \ln(0.5807) + 0.4193 \ln(0.4193)] \} \quad 13-18 \\
&+ (1.987)(530) \{ (14490.6) [0.9905 \ln(1.00) + 0.0095 \ln(1.57)] \\
&+ (10407.3) [0.0101 \ln(1.75) + 0.9899 \ln(1.00)] \\
&- (24897.9) [0.5807 \ln(1.08) + 0.4193 \ln(1.2)] \\
&= 16,393,000 - 2,887,000 = 13,506,000 \text{ Btu/hr}
\end{aligned}$$

پس انحراف مثبت از حالت ایده‌آل باعث کاهش ۱۷/۶٪ در میزان حداقل کار انجام شده روی سیستم نسبت به حالت ایده‌آل خواهد شد.

همانطور که در شکل‌های ۱-۱۸، ۲-۱۸ و ۳-۱۸ دیده می‌شود انتقال حرارت بین سیستم و محیط وجود دارد که ابتدا باید میزان حداقل کار انجام شده روی سیستم مشخص شود سپس میزان انتقال حرارت با استفاده از رابطه ۱-۱۸ بدست می‌آید.

برای حالتی که خوراک ورودی گاز باشد و محصولات خروجی نیز به صورت گاز باشند و همچنین همه ورودی و خروجی‌ها در دما و فشار محیط باشند و آنتالپی مخلوط شدن نیز صفر باشد تغییرات آنتالپی صفر خواهد بود در نتیجه میزان انتقال حرارت بین سیستم و محیط برابر با حداقل میزان کار انجام شده روی سیستم است. بنابراین برای مثال ۱-۱۸ میزان حرارت خارج شده از سیستم 352497.15 Btu/hr خواهد بود. برای حالتی که فاز مایع ایده‌آل باشد و جریان مایعات ورودی و خروجی در دما و فشار محیط باشند میزان حرارت تبادل شده بین سیستم و محیط برابر با میزان حداقل کار انجام شده روی سیستم خواهد بود. اما زمانی که فاز مایع غیر ایده‌آل باشد میزان حرارت تبادل شده بین سیستم و محیط با میزان حداقل کار انجام شده روی سیستم برابر نخواهد شد زیرا آنتالپی جریان‌های ورودی و خروجی با هم برابر نخواهند بود. میزان حرارت تبادل شده بین سیستم و محیط با استفاده از رابطه ۱-۱۸ به صورت زیر خواهد بود.

$$Q = -(-W_{Min}) + \sum_{out} n_k H_k^E - \sum_{in} n_j H_j^E \quad 14-18$$

که H^E آنتالپی اضافی^۱ می‌باشد که با استفاده از رابطه Van Laar به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$H^E = RT_0 \sum_i x_i \ln \gamma_i \quad 15-18$$

که در نهایت تغییرات آنتالپی جریان‌های ورودی و خروجی به صورت زیر خواهد شد.

$$\sum_{out} n_k H_k^E - \sum_{in} n_j H_j^E = RT_o \left\{ \sum_{out} n_k \left[\sum_i x_{i,k} \ln \gamma_{i,k} \right] - \sum_{in} n_j \left[\sum_i x_{i,j} \ln \gamma_{i,j} \right] \right\} \quad ۱۶-۱۸$$

سمت راست معادله ۱۶-۱۸ دقیقاً برابر با ترم دوم سمت راست معادله ۱۳-۱۸ است بنابراین تغییر آنتالپی جریان‌های ورودی و خروجی با اختلاف حداقل کار انجام شده روی سیستم برای حالت ایده‌آل و غیرایده‌آل می‌باشد و حرارت تبادل شده بین سیستم و محیط برابر با حداقل کار انجام شده در حالت ایده‌آل خواهد بود. برای حالتی که مخلوط انحراف مثبت از حالت ایده‌آل داشته باشد تغییرات آنتالپی اضافی مثبت خواهد بود و فرآیند مخلوط شدن گرماگیر^۱ خواهد بود و حرارت تبادل شده بین سیستم و محیط برابر با مجموع گرمای انحلال خروجی از سیستم و حداقل کار تبادل شده بین سیستم و محیط می‌باشد. در مثال ۱۸-۲ گرمال انحلال خروجی از سیستم $2.887 \times 10^6 \text{ Btu/hr}$ است و میزان انتقال حرارت بین سیستم و محیط $1.6393 \times 10^7 \text{ Btu/hr}$ می‌باشد.

کار خالص مصرف شده و راندمان ترمودینامیکی

برای بررسی راندمان ترمودینامیکی یک سیستم می‌توان حداقل کار انجام شده روی سیستم جداسازی را با مقدار کار واقعی انجام شده روی سیستم مقایسه نمود. این کار در نگاه اول مشکل به نظر می‌رسد چون انرژی مورد استفاده در سیستم‌های جداسازی عمدتاً به صورت تبادل حرارت بین سیستم و محیط می‌باشد که می‌توان توسط کار خالص مصرف شده^۲ برای سیستم‌های جداسازی این مشکل را برطرف کرد. این موضوع توسط رابینسون و گیلیلاند [۲] مورد بحث قرار گرفته است. در این تحقیق پیشنهاد شده است که انتقال حرارت ورودی به سیستم جداسازی را توسط یک سیکل کارنو به کار تبدیل کنیم و کار محاسبه شده را در محاسبات شرکت دهیم. در این سیکل کارنو فرضی، حرارت دفع شده و جذب شده در دمای محیط (T_o) انجام می‌شود.

برای مثال در قسمت A شکل ۱۸-۴ بخش پایین برج تقطیر نشان داده شده است که حرارت Q_{in} وارد جوش‌آور می‌شود این حرارت توسط بخار آب در دمای T_s به جوش‌آور منتقل می‌شود. حال حرارت Q_{in} را به یک سیکل کارنو فرضی وارد می‌کنیم تا کار معادل (W_{eq}) بدست آید. سیکل کارنو فرضی در قسمت B شکل ۱۸-۴ نشان داده شده است. با استفاده از روابط ترمودینامیکی کلاسیک ارتباط میان حرارت وارد شده (Q_{in}) و کار معادل (W_{eq}) به صورت زیر می‌باشد.

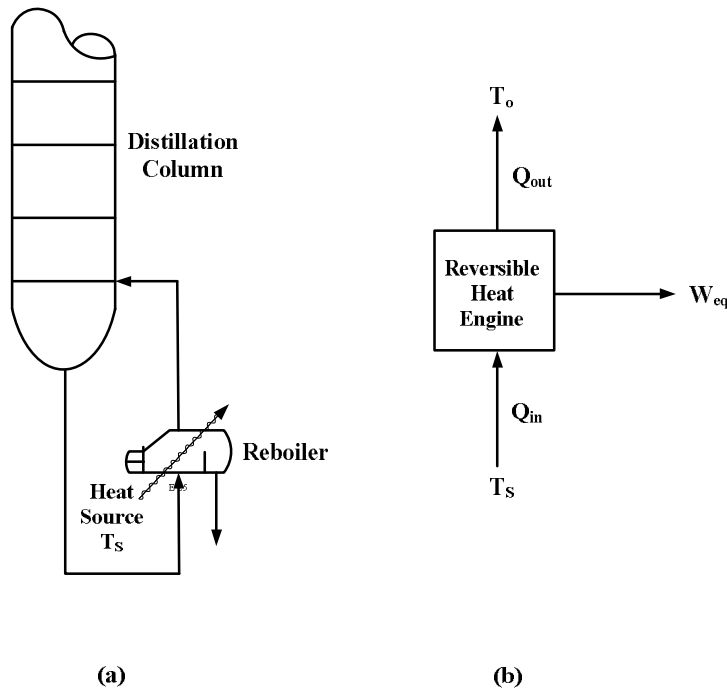
$$W_{eq} = Q_{in} \left(\frac{T_s - T_o}{T_s} \right) \quad ۱۷-۱۸$$

در صورتی که $T_s > T_o$ باشد مقدار حرارت تبادل شده (Q_{in}) بیشتر از کار معادل (W_{eq}) خواهد بود و در صورتی که حرارت جذب شده در دمای متغییر T تبادل شود فرم دیفرانسیلی معادله ۱۷-۱۸ که به صورت زیر است مورد استفاده قرار می‌گیرد.

1-Endothermic
2- Net Work Consumption

$$dW_{eq,out} = \left(\frac{T - T_o}{T} \right) dQ_{in}$$

۱۸-۱۸



شکل ۱۸-۴: کار معادل با حرارت داده شده به برج تقطیر (a) انتقال حرارت به جوش آور برج تقطیر (b) سیکل کارنو فرضی جهت محاسبه کار معادل

در تحقیقات دنبای^۱ [۳] سعی شده است که بین کار خالص مصرف شده و حداقل کار انجام شده روی سیستم ارتباط برقرار شود این کار برای سیستم‌هایی با چند جریان ورودی و خروجی با دما و فشارهای مختلف شامل چندین منبع گرمایی انجام شده است. برای این منظور ابتدا قانون اول ترمودینامیک را برای سیستم پایا و پیوسته اعمال می‌کنیم.

$$\Delta H = Q_o + \sum_i Q_i + \sum (-W_s) \quad ۱۹-۱۸$$

$$\Delta H = \sum_{out} n_k H_k - \sum_{in} n_j H_j$$

که W_s کار محوری است و زمانی که سیستم کار روی محیط انجام می‌دهد با علامت مثبت و عکس آن علامت منفی خواهد داشت و Q_o میزان انتقال حرارت از منبع گرمایی در دمای T_o به سیستم است که مقداری مثبت خواهد بود و در صورتی که جهت تبادل حرارت عکس باشد مقداری منفی است. Q_i میزان انتقال حرارت از منبع گرمایی در دمای T_i به سیستم است که مقداری مثبت خواهد بود و در صورتی که جهت تبادل حرارت عکس باشد مقداری منفی خواهد بود. قانون دوم ترمودینامیک برای سیستم مورد بحث به صورت زیر است.

$$\Delta S + \Delta S_0 + \sum_i \Delta S_i = \Delta S_{irr} \quad 20-18$$

که ΔS ، ΔS_0 ، ΔS_i و ΔS_{irr} به ترتیب تغییرات آنتروپی فرآیند، منبع گرمایی در دمای T_0 ، منبع گرمایی در دمای T_i و تغییرات آنتروپی ناشی از برگشت‌ناپذیری است. تغییرات آنتروپی منبع گرمایی در دمای T_0 و بقیه منابع گرمایی به صورت زیر تعریف می‌شوند.

$$\Delta S_i = -Q_i/T_i \quad \text{و} \quad \Delta S_0 = -Q_0/T_0$$

با جایگذاری $\Delta S_0 = -Q_0/T_0$ در معادله ۱۸-۱۹ خواهیم داشت.

$$\Delta H = -T_0 \Delta S_0 + \sum Q_i + \sum (-W_s) \quad 21-18$$

و با جایگذاری $\Delta S_i = -Q_i/T_i$ در معادله ۱۸-۲۰ خواهیم داشت.

$$\Delta S + \Delta S_0 - \sum \frac{Q_i}{T_i} = \Delta S_{irr} \quad 22-18$$

با استفاده از رابطه ۱۸-۲۲ میزان ΔS_0 به صورت زیر خواهد بود.

$$\Delta S_0 = -\Delta S + \sum \frac{Q_i}{T_i} + \Delta S_{irr} \quad 23-18$$

با جایگذاری رابطه ۱۸-۲۳ در ۱۸-۲۱ معادله زیر حاصل می‌شود.

$$\Delta H = T_0 \Delta S + \sum Q_i \left(1 - \frac{T_0}{T_i}\right) + \sum (-W_s) - T_0 \Delta S_{irr}$$

در صورتی که موارد تبادل شده بین سیستم و محیط را یک طرف معادله نگه‌داریم معادله زیر حاصل خواهد شد.

$$\Delta B = \Delta H - T_0 \Delta S = \sum Q_i \left(1 - \frac{T_0}{T_i}\right) + \sum (-W_s) - T_0 \Delta S_{irr} \quad 24-18$$

تابع B امکان‌پذیری فرآیند را نشان می‌دهد و ترم $T_0 \Delta S_{irr}$ به عنوان کار تلف شده^۱ LW شناخته می‌شود که با اعمال این تعریف در معادله ۱۸-۲۴، معادله زیر بدست می‌آید.

$$\Delta B = \sum (1 - T_0/T_i) Q_i + \sum (-W_s) - LW \quad 25-18$$

که ترم Q_i در معادله اخیر دقیقاً شبیه به معادله ۱۸-۱۷ می‌باشد. بدین معنا که Q_i در دمای T_i وارد یک سیکل کارنو فرضی شده و حرارت خروجی در دمای T_0 دفع شده و کار بدست آمده کار معادل خواهد بود. مجموع کارهای معادل (W_{eq}) و کارهای محوری ($-W_s$) به عنوان کار خالص مصرف شده شناخته می‌شوند.

$$(-W_{net}) = \sum (1 - T_0/T_i) Q_i + \sum (-W_s) = \Delta B + LW \quad 26-18$$

برای فرآیند برگشت‌پذیر $LW = 0$ است و $(-W_{Net}) = \Delta B$ خواهد بود. برای یک فرآیند واقعی $LW > 0$ است و $(-W_{Net}) > \Delta B$ خواهد بود. راندمان ترمودینامیکی به صورت نسبت تابع ΔB به کار خالص مصرف شده $(-W_{Net})$ تعریف می‌شود.

$$\eta = \frac{\Delta B}{(-W_{net})} \quad \text{if } \Delta B = (+) \quad 27-18$$

در صورتی که همه جریان‌ها شرایط گاز ایده‌آل را داشته باشند و در دما و فشار یکسان باشند می‌توان از قانون گاز ایده‌آل استفاده کرد و $(-W_{Min})$ را از معادله ۹-۱۸ بدست آورد که برابر با ΔB می‌باشد و در صورتی که همه جریان‌ها مایع و در دما و فشار یکسان باشند می‌توان از معادله ۱۱-۱۸ جهت محاسبه $(-W_{Min})$ استفاده نمود که برابر با ΔB می‌باشد. در برخی از فرآیندها که ΔB منفی باشد راندمان ترمودینامیکی به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\eta = \frac{(-W_{net})}{\Delta B} \quad \text{if } \Delta B = (-) \quad 28-18$$

مثال ۱۸-۳: یک فرآیند واقعی جداسازی پروپان و پروپیلن که در شکل ۱۸-۲ و مثال ۱۸-۱ مورد بررسی قرار گرفت طراحی شده است. به نظر می‌رسد این فرآیند که در شکل ۱۸-۵ نشان داده شده بهینه نباشد. این فرآیند توسط تیرس و لیبین^۱ [۵] ارائه شده است. برای این جداسازی از یک برج در فشار 300 Psia استفاده می‌شود که کندانسور آن با آب کار می‌کند. ضریب فراریت بین اجزاء از بالا به پایین برج از $1/14$ تا $1/0.8$ تغییر می‌کند. نسبت جریان برگشتی به برج $15/9$ و نزدیک به حداقل نسبت جریان برگشتی به برج است. بدلیل اینکه ضریب فراریت بین اجزاء پایین است و محصولات غلیظ مورد نیاز می‌باشد از 200 سینی برای جداسازی استفاده می‌شود. و چون تعداد سینی‌ها بالاست از دو برج متصل به هم که فاصله بین سینی‌ها 24 in است استفاده می‌شود. راندمان سینی‌ها 100% در نظر گرفته می‌شود. از آنجا که از دو برج استفاده می‌شود، نیاز است که مایع برج دوم توسط پمپ به بالای برج اول فرستاده شود. افت فشار در طول هر دو برج 20 Psi است. برای اینکه فشار خوراک به فشار برج افزایش داده شود از یک کمپرسور دو مرحله‌ای آیزنتروپیک^۲ استفاده می‌شود و بین مراحل این کمپرسور از خنک‌کننده استفاده می‌شود. بخار خروجی از مرحله دوم کمپرسور توسط کندانسور میعان شده و پس از عبور از یک تانک^۳ توسط یک پمپ به برج اول فرستاده می‌شود. محصولات مشخص شده در دما و فشار محیط از سیستم خارج می‌شوند. از شیرهای فشار شکن جهت کاهش فشار جریان به فشار 1 atm استفاده می‌شود.

دو منبع تبادل حرارت در سیستم وجود دارد یکی از این منابع آب خنک‌کننده^۴ است که در مبدل بین دو کمپرسور، کندانسور بعد از مرحله دوم کمپرسور، کندانسور جزئی بالای برج دوم، گرم‌کننده پروپان و گرم‌کننده پروپیلن مورد استفاده قرار می‌گیرد. اگرچه دمای آب در طول این مبدل‌ها تغییر می‌کند اما می‌توان دمای متوسط آب را 70° F (530 R) در نظر گرفت که این دما همان دمای محیط (T_0) می‌باشد. منبع دیگر بخار است که در جوش‌آور پایین برج اول مورد استفاده قرار می‌گیرد و دمای آن 220° F (680 R) است.

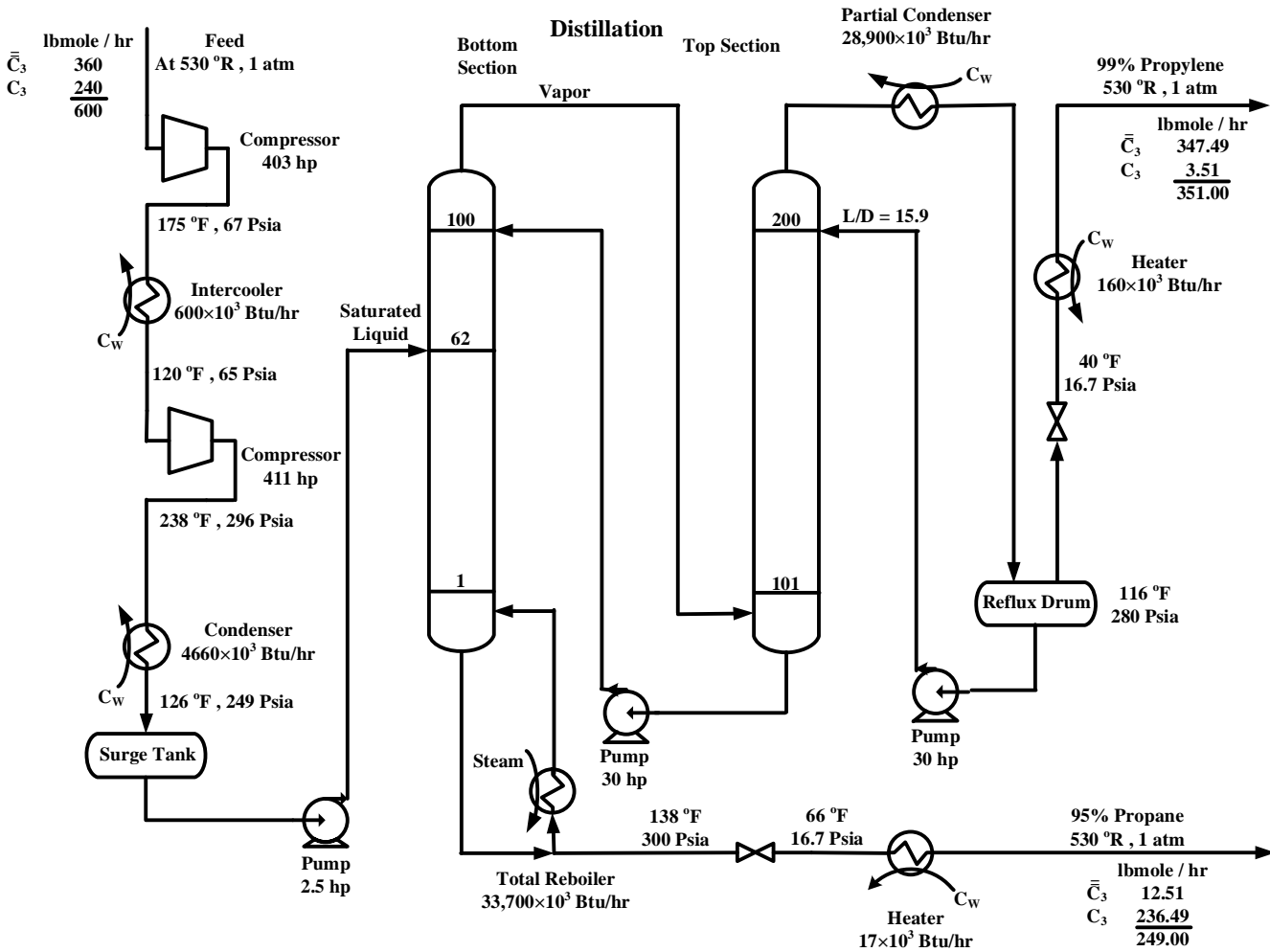
1- Tyreus and Luyben

2- Isentropic

3- Surge Tank

4- Cooling water

میزان کار خالص مصرف شده، راندمان ترمودینامیکی و کار تلف شده را بدست آورید. با استفاده از چه روش-هایی می‌توان راندمان ترمودینامیکی سیستم را افزایش داد؟



شکل ۱۸-۵: سیستم جداسازی پروپان و پروپیلن با استفاده از تقطیر در فشار بالا

حل: شرایط خوراک ورودی و محصولات خروجی مانند مثال ۱۸-۱ است پس کار خالص انجام شده با جمع کردن کارهای محوری و کارهای معادل با استفاده از رابطه ۱۸-۲۶ بدست می‌آید. لازم به ذکر است که بعد و واحد همه ترم‌ها باید یکی باشد تا بتوان آنها را با هم جمع کرد. کار محوری مرحله اول کمپرسور به صورت زیر می‌باشد.

$$(-W_s) = (403hp) \left(2545 \frac{Btu}{hp \cdot hr} \right) = 1,025,635 \text{ Btu/hr}$$

تبدیل واحد بقیه کارهای محوری نیز در جدول ۱۸-۱ ارائه شده است.

کار معادل با حرارت تبادل شده در جوش آور را می‌توان با استفاده از رابطه ۱۸-۱۷ و با توجه به اینکه $T_s = 680 R$ است بدست آورد.

$$(-W_{eq}) = 33,700,000 \text{ Btu/hr} \left(1 - \frac{530}{680}\right) = 7,434,220 \text{ Btu/hr}$$

که این محاسبه نشان می‌دهد ۲۲/۰۶٪ از بار حرارتی جوش آور را توسط یک چرخه کارنو فرضی می‌توان به کار تبدیل نمود. کار معادل برای بقیه مبدل‌ها نیز در جدول ۱۸-۱ ارائه شده است. از آنجا که برخی مبدل‌ها با آب کار می‌کنند چون $T_i = T_o$ است میزان کار معادل برای این موارد صفر خواهد بود. با استفاده از جدول ۱۸-۱ کار خالص مصرف شده $9,664,912.5 \text{ Btu/hr}$ می‌باشد که با استفاده از رابطه ۱۸-۲۷ راندمان ترمودینامیکی این سیستم به صورت زیر خواهد بود.

$$\eta = (352,497.15) / (9,664,912.5) \times 100 \% = 3.65 \%$$

با استفاده از رابطه ۱۸-۲۶ می‌توان کار تلف شده (LW) را بدست آورد.

$$LW = 9,664,912.5 - 352,497.15 = 9,312,415.35 \text{ Btu/hr}$$

یا

$$\frac{9,312,415.35}{2545} = 3659.1 \text{ hp}$$

روش‌هایی که با استفاده از آنها می‌توان راندمان ترمودینامیکی را افزایش داد به صورت زیر می‌باشند.

- ۱- کاهش فشار برج جهت کاهش کار محوری مراحل کمپرسور
- ۲- حذف مبدل بین مراحل کمپرسور و همچنین کندانسور بعد از کمپرسور جهت کاهش بار حرارتی جوش آور
- ۳- جایگزینی شیرهای فشار شکن با توربین جهت کاهش کار محوری

کاهش انرژی لازم در تقطیر

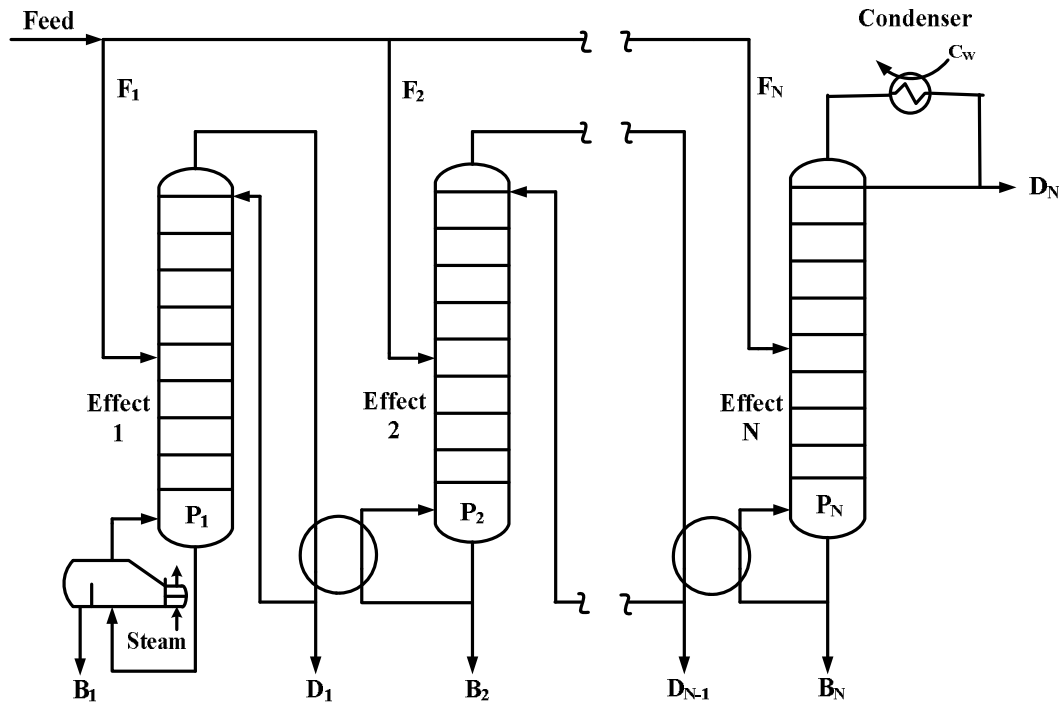
مصرف انرژی زیاد در فرآیند جداسازی معمولاً مربوط به وجود کمپرسورها، جوش آور و کندانسورهایی که به صورت چرخه سردساز هستند مربوط می‌شود. در تحقیقات [2] Robinson and Gilliland و [6] King تاثیر مصرف انرژی بر اقتصاد مسئله با جزئیات بیشتری مورد بررسی قرار گرفته است متأسفانه این تحقیقات نشان می‌دهند که برای جلوگیری از مصرف زیاد انرژی باید از تجهیزاتی که سرمایه‌گذاری اولیه زیادی دارند استفاده نمود. زیرا قیمت انرژی رشد بیشتری نسبت به قیمت تجهیزات داشته است. برای جلوگیری از مصرف زیاد انرژی چندین طرح در نظر گرفته می‌شود که در این فصل مورد بررسی قرار می‌گیرد.

جدول ۱۸-۱: محاسبه کار خالص مصرف شده برای مثال ۱۸-۳

Item	Rate of Work Done by Surroundings, hp	Rate of Heat Transfer to Process, Btu/hr	Percent of Heat Transfer Available for Work	Equivalent Rate Of work Done on the Process, Btu/hr
Compressor 1	403	--	--	1025635
Compressor 2	411	--	--	1045995
Distillation feed pump	2.5	--	--	6362.5
Intercolumn pump	30	--	--	76350
Reflux pump	30	--	--	76350
Total reboiler	--	33700000	22.06	7434220
Partial condenser	--	-28900000	0.0	0
Intercooler	--	-600000	0.0	0
Aftercooler -condenser	--	-4660000	0.0	0
Propane heater	--	17000	0.0	0
Propylene heater	--	160000	0.0	0
Valves	0	--	--	0
NET WORK CONSUMPTION				9664912.5

تقطیر در چند مرحله^۱

طرح کلی تقطیر در چند مرحله در شکل ۱۸-۶ نشان داده شده است. در این آرایش خوراک به صورت مساوی یا غیر مساوی بین N برج که به صورت موازی و در فشارهای مختلف کار می‌کنند تقسیم می‌شود. فشار برج‌ها از چپ به راست کاهش می‌یابد. با اعمال این تغییرات فشار کندانسور برج اول و جوش‌آور برج دوم تقریباً در یک دما کار می‌کنند و می‌توانند با هم تبادل حرارت داشته باشند. تغییرات فشار در برج‌ها باید طوری در نظر گرفته شود که بین کندانسور برج اول و جوش‌آور برج دوم اختلاف دمایی جهت انتقال حرارت وجود داشته باشد. این اختلاف دما، جهت انتقال حرارت بین بقیه برج‌ها نیز باید وجود داشته باشد. البته فشار برج‌ها باید در محدوده‌ای باشد که مواد در دمای بحرانی خود قرار نگیرند و همچنین دمای بالا باعث تجزیه مواد نشود. فشار برج‌ها باید به گونه‌ای باشد که جوش‌آور برج اول را بتوان با بخار آب و کندانسور برج N را بتوان با آب سرد خنک کرد. اگر ضریب فراریت را در همه برج‌ها ثابت در نظر بگیریم میزان انرژی مصرف شده در تقطیر چند مرحله‌ای $1/N$ برابر انرژی مصرف شده در یک برج واحد خواهد بود.

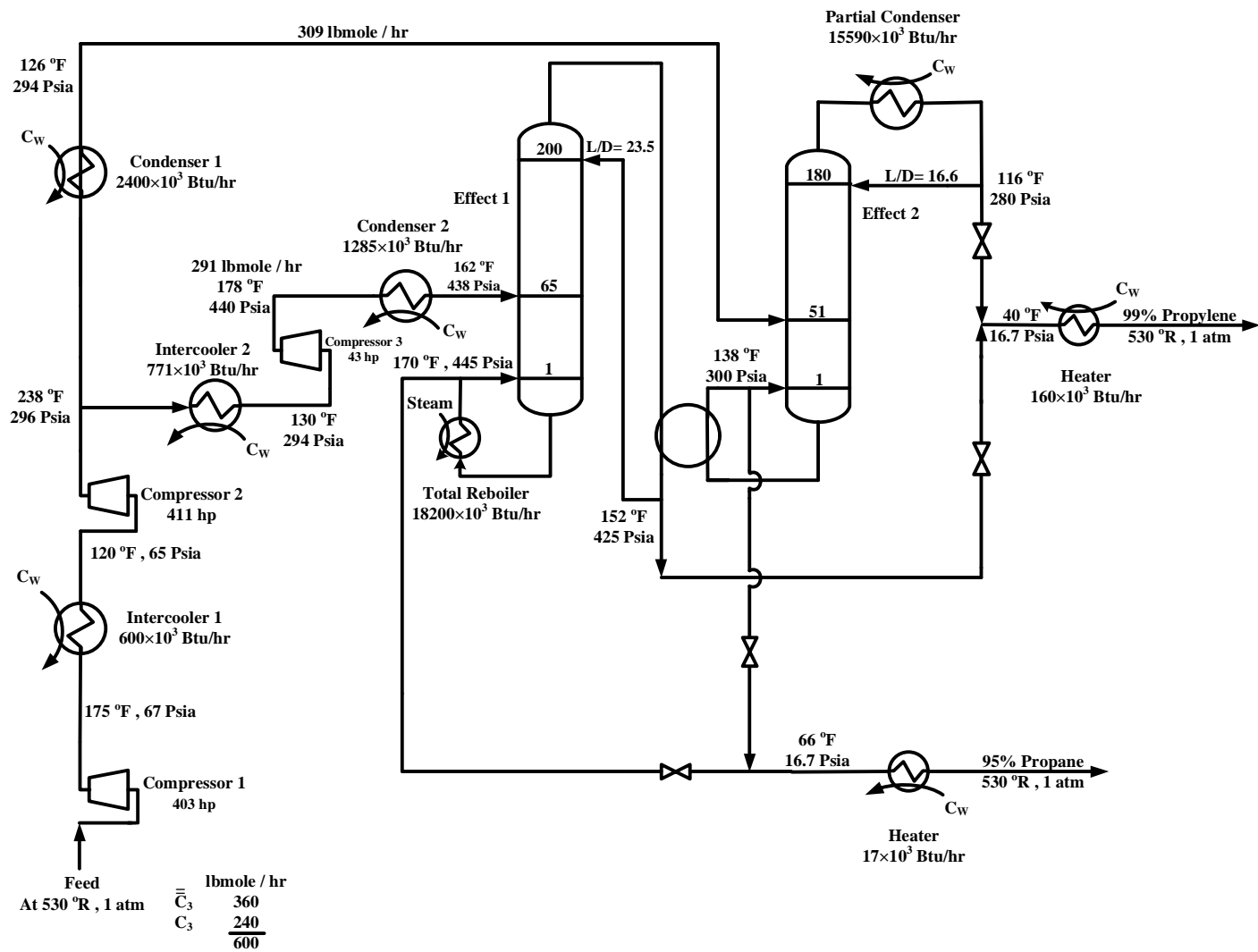


Note :

$$P_1 > P_2 > \dots > P_N$$

شکل ۱۸-۶ : شمایی از تقطیر در چند مرحله

در تحقیقات تیرس و لیبن [۵] ، تقطیر دو مرحله‌ای برای جداسازی متانول و آب و همچنین جداسازی پروپان و پروپیلن پیشنهاد شده است. فرایند جداسازی پروپان و پروپیلن که در این تحقیقات پیشنهاد شده است در شکل ۱۸-۷ نشان داده شده است که می‌توان آن را با برج جداسازی پروپان و پروپیلن که در شکل ۱۸-۵ نشان داده شده مقایسه نمود. محاسبات برای کار خالص مصرف شده در سیستم تقطیر دو مرحله‌ای برای شکل ۱۸-۷ با استفاده از منبع حرارت و دفع حرارت ذکر شده در مثال ۱۸-۳ در جدول ۱۸-۲ آمده است. نتایج این جدول نشان می‌دهد راندمان ترمودینامیکی برای تقطیر در دو مرحله ۵/۵٪ است که قابل مقایسه با راندمان ترمودینامیکی تقطیر یک مرحله‌ای در مثال ۱۸-۳ (۳/۶۵٪) می‌باشد. کار تلف شده در تقطیر دو مرحله‌ای نسبت به تقطیر یک مرحله‌ای ۳۵٪ کاهش یافته و از 3659.1 hp به 2374.6 hp تقلیل یافته است.



شکل ۱۸-۷: تقطیر دو مرحله‌ای برای جداسازی پروپان و پروپیلن

جدول ۱۸-۲: محاسبه کار خالص مصرف شده توسط فرآیند شکل ۱۸-۷

Item	Rate of Work Done by Surroundings, hp	Rate of Heat Transfer to Process, Btu/hr	Percent of Heat Transfer Available for Work	Equivalent Rate Of work Done on the Process, Btu/hr
Compressor 1	403	--	--	1025635
Compressor 2	411	--	--	1045995
Compressor 3	43	--	--	109435
Effect 1 feed pump	1.3	--	--	3308.5
Effect 2 feed pump	1.2	--	--	3054
Effect 1 intercolumn pump	22	--	--	55990
Effect 1 reflux pump	22	--	--	55990
Effect 2 intercolumn pump	16	--	--	40720
Effect 2 reflux pump	16	--	--	40720
Total reboiler	--	18200000	22.06	4014920
Partial condenser	--	-15590000	0	0
Intercooler 1	--	-600000	0	0
Condenser 1	--	2400000-	0	0
Intercooler 2	--	-771000	0	0
Condenser 2	--	1285000-	0	0
Propane heater	--	17000	0	0
Propylene heater	--	160000	0	0
Valves	0	--	--	0
NET WORK CONSUMPTION				6395767.5

راندمان ترمودینامیکی یک فاکتور بسیار موثر جهت مقایسه بین سیستم‌های جداسازی می‌باشد. برای پی بردن به صحت این روش سعی می‌کنیم که نتایج این روش را با نتایج اقتصادی سیستم‌های جداسازی مقایسه کنیم. در جدول زیر قیمت بخار، آب و جریان الکتریکی ارائه شده است.

جدول ۱۸-۳: هزینه آب، برق و بخار

Utility	Cost	Equivalent cost, \$/10 ⁶ Btu
Steam (17.2 psia saturated condensed at same pressure)	1.6 \$ / 1000 lb _m	1.66
Cooling Water (20 °F rise)	0.04 \$ / 1000 gal	0.24
Electricity	0.04 \$ / kWh	11.72

نتایج مقایسه تقطیر دو مرحله‌ای برای جداسازی پروپان و پروپیلن و تقطیر یک مرحله‌ای برای این جداسازی با توجه به قیمت‌های ارائه شده در جدول بالا، در جدول ۱۸-۴ نشان داده شده است. مبنای این محاسبات ۲۴ ساعت کار در هر روز و ۳۵۰ روز کاری در سال است. نتایج جدول ۱۸-۴ نشان می‌دهد هزینه عملیاتی جداسازی پروپان و پروپیلن توسط تقطیر دو مرحله‌ای ۳۰٪ کمتر از جداسازی این دو ماده در تقطیر یک مرحله‌ای است و سالیانه ۲۲۸۵۵۰ دلار صرفه‌جویی دارد که نرخ بازگشت سرمایه بسیار قابل توجهی می‌باشد.

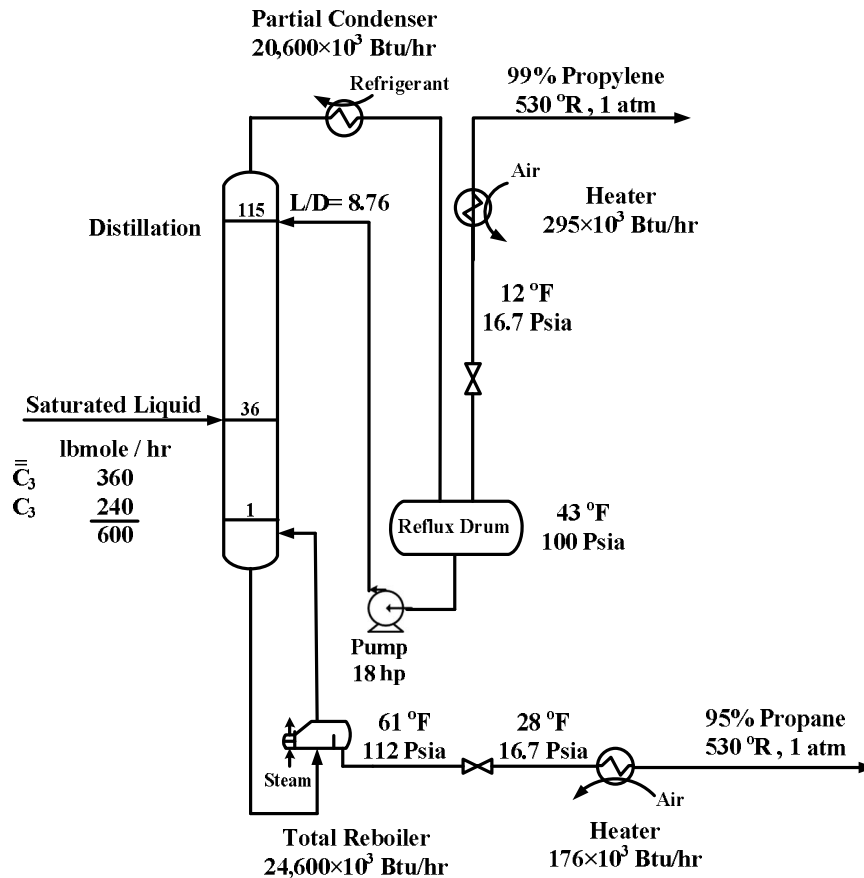
جدول ۱۸-۴: هزینه عملیاتی روزانه واحد جداسازی پروپان و پروپیلن

Utility	Costs, \$/day	
	Single-Effect Scheme (Fig 18-5)	Double-Effect Scheme (Fig 18-7)
Steam	1341	724
Cooling water	198	120
Electricity	628	670
TOTAL	2167	1514

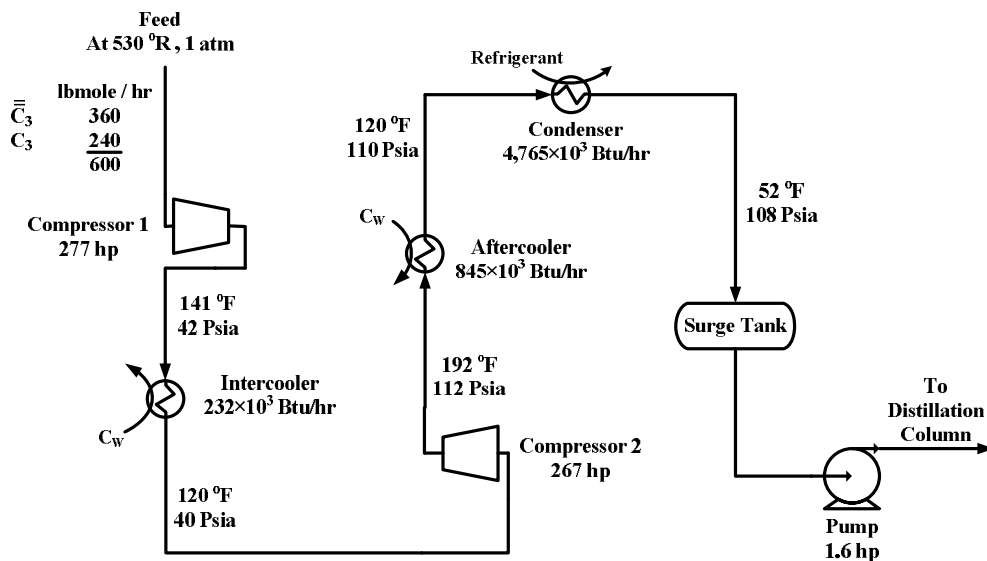
استفاده از پمپ گرمایی برای تقطیر در دمای پایین

علاوه بر اینکه فشار برج باید بالا در نظر گرفته می‌شود تا در بالای برج، کندانسور با آب (در دمای نزدیک به محیط) خنک شود، می‌توان فشار برج را پایین در نظر گرفت اما در بالای برج جهت میعان بخار باید از پمپ گرمایی (سیکل سردساز) استفاده نمود. مثلاً جداسازی پروپان و پروپیلن که در شکل ۱۸-۲ نشان داده شده را می‌توان در فشار 100 Psia انجام داد این جداسازی که به تقطیر در دمای پایین معروف است در شکل ۱۸-۸ نشان داده شده است ضمناً خوراک این برج باید مطابق شکل ۱۸-۹ جهت ورود به برج آماده شود. همانطور که در شکل ۱۸-۹ نشان داده شده است برای آماده کردن خوراک ابتدا فشار آن در یک کمپرسور دو مرحله‌ای بالا برده می‌شود که هر مرحله کمپرسور مجهز به یک مبدل خنک کننده می‌باشد. سپس توسط یک چرخه

سردساز میعان می‌شود تا به صورت مایع وارد برج تقطیر شود. کندانسور موجود در شکل ۱۸-۸ توسط چرخه سردسازی باعث میعان بخار در $43^{\circ}F$ و 100 Psia می‌شود. در 100 Psia ضریب فراریت متوسط بین پروپان و پروپیلن $\alpha = 1.2$ می‌باشد که $1/8$ بیشتر از مقدار آن در 300 Psia ($\alpha = 1.11$) برای برج نشان داده شده در شکل ۱۸-۵ است. پس با کاهش فشار برج، ضریب فراریت متوسط افزایش می‌یابد و افزایش ضریب فراریت متوسط باعث کاهش سینی‌ها از ۲۰۰ با ۱۱۵ و کاهش نسبت جریان برگشتی از $15/9$ به $8/76$ خواهد شد. ضمناً بار حرارتی کندانسور و جوش‌آور نیز کاهش خواهد یافت.

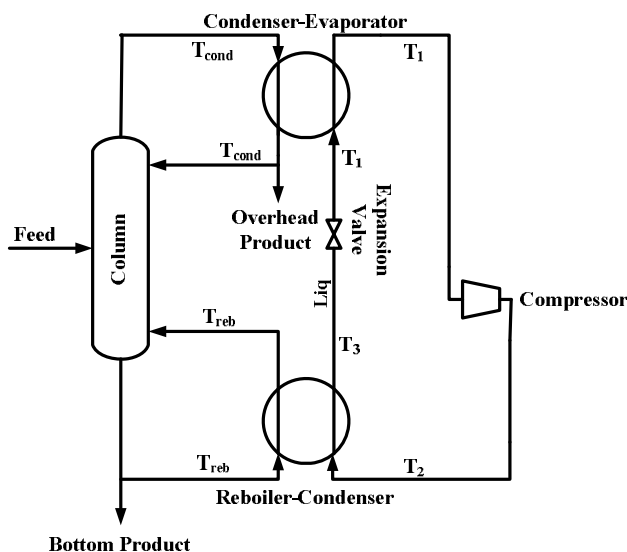


شکل ۱۸-۸: تقطیر معمولی در دمای پایین برای جداسازی پروپان و پروپیلن در 100 Psia



شکل ۱۸-۹: سیستم آماده سازی خوراک برای جداسازی پروپان و پروپیلن در 100 Psia

تحقیقات جداگانه فرسواتر^۱ [۷] و نول^۲ [۸] نشان داد که می‌توان از یک چرخه سردسازی کمک گرفت و حرارت خروجی از کندانسور را به جوش آور منتقل نمود با این کار انرژی لازم جهت جداسازی کاهش خواهد یافت. سه روش ممکن برای انجام این کار توسط نول ارائه شده که در شکل ۱۸-۱۰ نشان داده شده است. در هر سه آرایش نشان داده شده از کمپرسور و شیر فشارشکن جهت انتقال حرارت از کندانسور به جوش آور استفاده شده است، البته زمانی که بار حرارتی کندانسور و جوش آور با هم برابر نباشند از کندانسور یا جوش آور کمکی استفاده می‌شود که این مورد در شکل ۱۸-۱۰ نشان داده نشده است.

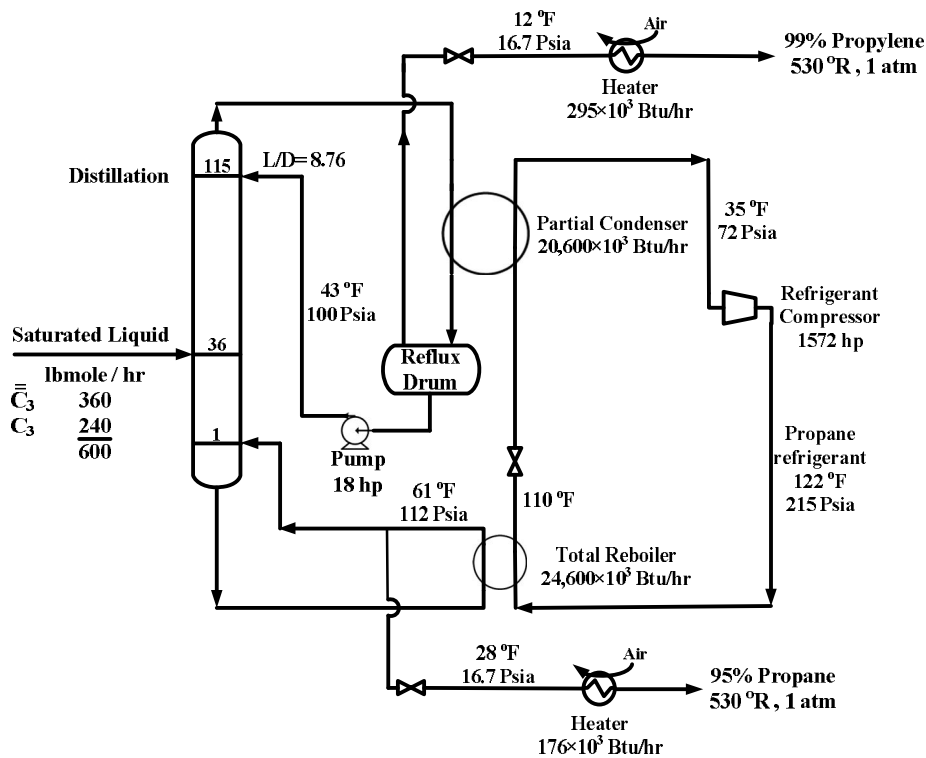


(a)

- 1- Freshwater
- 2 -Null

تبخیر می‌شود سپس با افزایش فشار توسط کمپرسور در $110^{\circ}F$ حرارت را به جوش‌آور منتقل می‌نماید. در این حالت کار انجام شده توسط کمپرسور سیکل خارجی 1572 hp است و حرارت کندانسور و جوش‌آور با هم توافق دارند و به کندانسور و جوش‌آور کمکی نیازی نیست.

وقتی که محصول بالای برج را بتوان به عنوان ماده سردساز استفاده کرد می‌توان از آرایش قسمت B شکل ۱۸-۱۰ استفاده نمود در این آرایش محصول بخار بالای برج آنقدر فشرده می‌شود که دمای میعان آن بیشتر از دمای جوش‌آور شود و در هنگام میعان، حرارت به جوش‌آور منتقل می‌شود سپس مایع با فشار بالا از یک شیر فشار شکن عبور کرده و فشارش تا فشار بالای برج تقلیل می‌یابد. با این کاهش فشار، بخشی از مایع تبخیر می‌شود که دوباره همراه با بخار بالای برج در سیکل سردسازی شرکت می‌کند و مقداری که به صورت مایع باقی می‌ماند به عنوان محصول و جریان برگشتی به برج، مورد استفاده قرار می‌گیرد. برای جداسازی پروپان و پروپیلن نیز می‌توان از این آرایش استفاده نمود که در شکل ۱۸-۱۲ نشان داده شده است. در این آرایش برای جداسازی پروپان و پروپیلن، چون چرخه سردساز قادر به تامین کل حرارت جوش‌آور نیست از جوش‌آور کمکی نیز استفاده شده است.

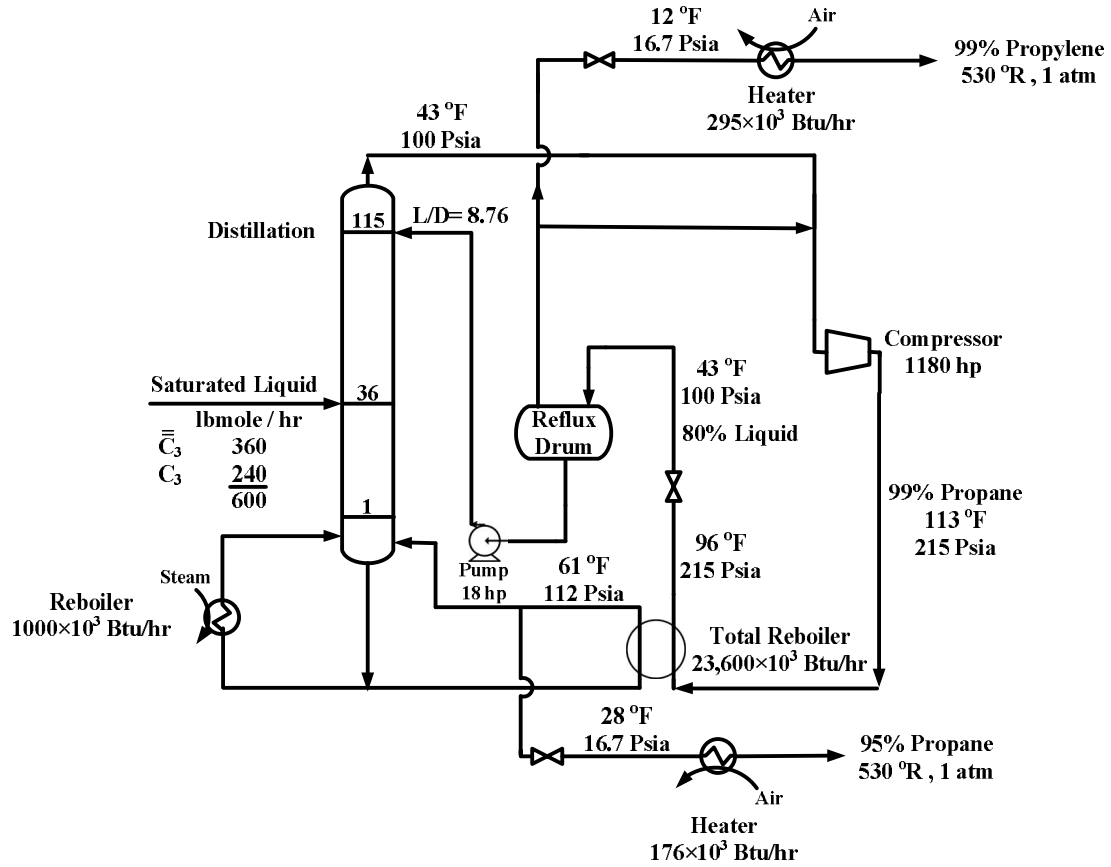


شکل ۱۸-۱۱: تقطیر در دمای پایین با استفاده از سیکل خارجی جهت جداسازی پروپان و پروپیلن

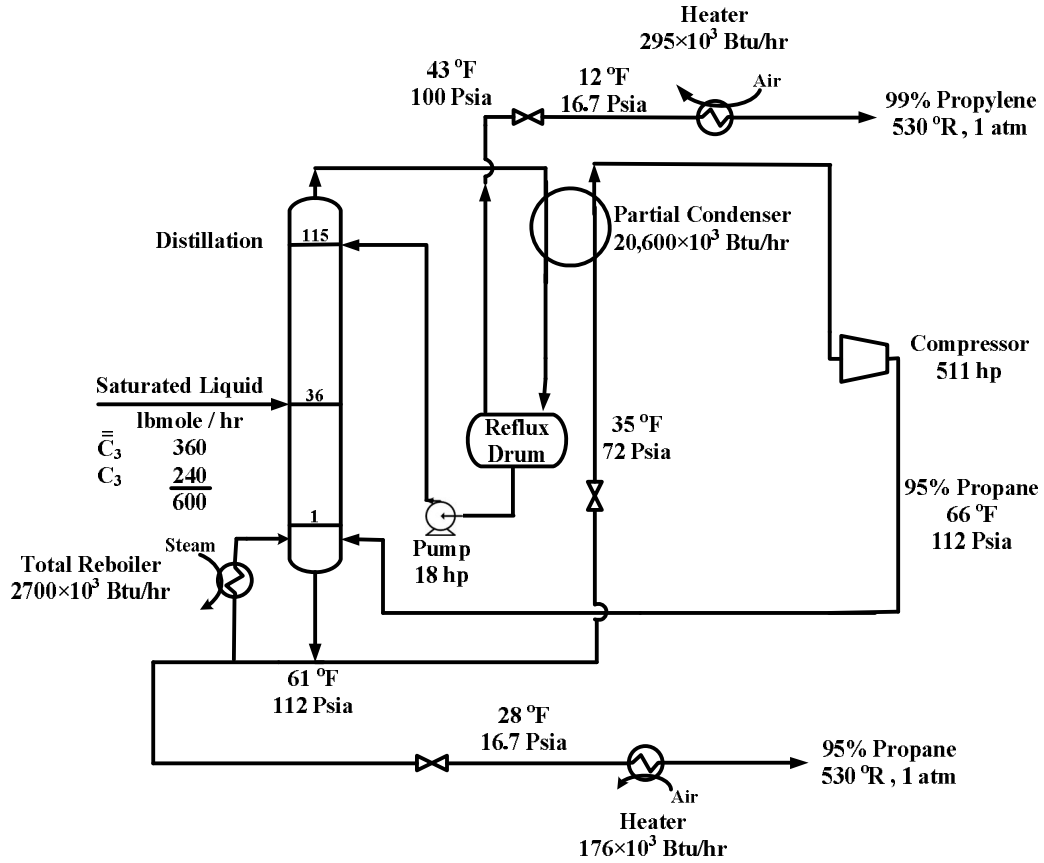
وقتی که محصول پایین برج را بتوان به عنوان یک ماده سردساز استفاده کرد می‌توان از آرایش قسمت C شکل ۱۸-۱۰ جهت کاهش انرژی مصرف شده در سیستم جداسازی استفاده نمود. در این آرایش بخشی از محصول پایین برج پس از عبور از شیر فشار شکن تبخیر می‌شود. در ضمن این تبخیر، حرارت کندانسور نیز

گرفته می‌شود سپس بخار توسط کمپرسور تا فشار برج فشرده شده و به پایین برج هدایت می‌شود در صورتی که بار حرارتی کندانسور و جوش‌آور با هم توافق نداشته باشند از کندانسور یا جوش‌آور کمکی استفاده می‌شود. در شکل ۱۸-۱۳ کاربرد این آرایش جهت جداسازی پروپان و پروپیلن نشان داده شده است. در این آرایش بخشی از محصول پایین برج پس از عبور از شیر فشار شکن به فشار 72 Psia رسیده و حرارت را از کندانسور خارج می‌نماید از آنجا که این آرایش قادر نیست بار حرارتی جوش‌آور را تامین نماید از جوش‌آور کمکی نیز استفاده شده است.

مقایسه راندمان ترمودینامیکی و هزینه عملیاتی روزانه برای جداسازی پروپان و پروپیلن با استفاده از فرآیند شکل‌های ۱۸-۸ تا ۱۸-۱۳ در جدول ۱۸-۵ ارائه شده است. در محاسبات اقتصادی هزینه عملیاتی، قیمت آب - برق و بخار مشابه با جدول ۱۸-۳ در نظر گرفته شده است. در جوش‌آورها از بخار 220°F استفاده شده است و از هزینه هوای مصرف شده در گرم کننده‌ها و ماده سردساز شکل ۱۸-۱۴ که در کندانسور شکل ۱۸-۹ استفاده شده صرف‌نظر شده است. بیشترین راندمان ترمودینامیکی برای آرایش شکل ۱۸-۱۳ به میزان $1/8$ بدست آمده است که با راندمان ترمودینامیکی شکل ۱۸-۵ که $3/65$ است قابل مقایسه می‌باشد. همانطور که از نتایج مشهود است هر سه آرایش با پمپ گرمایی دارای راندمان بیشتری نسبت به تقطیر معمولی در دمای پایین (شکل ۱۸-۸) می‌باشند، همچنین دارای هزینه روزانه عملیاتی کمتری هستند. توافق میان بار حرارتی کندانسور و جوش‌آور باعث شده که در آرایش‌های شکل ۱۸-۱۲ و شکل ۱۸-۱۳ کمتر از بخار استفاده شود و این آرایش‌ها دارای راندمان ترمودینامیکی بیشتر و هزینه کمتری نسبت به آرایش شکل ۱۸-۷ باشند.

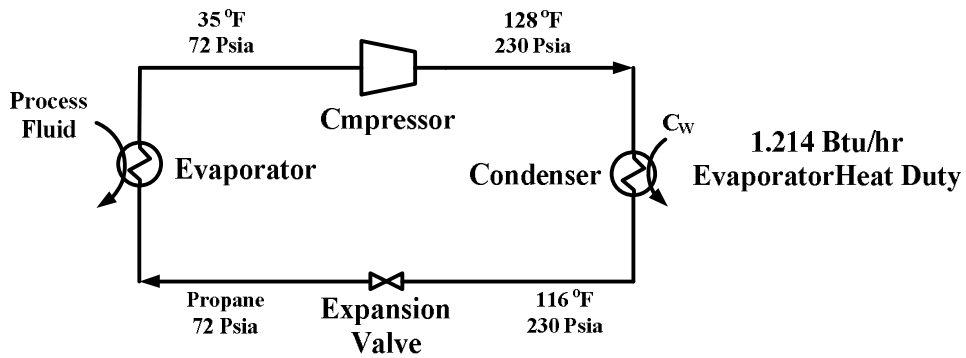


شکل ۱۸-۱۲: تقطیر در دمای پایین با استفاده از پمپ گرمایی همراه با افزایش فشار بخار بالای برج جهت جداسازی پروپان و پروپیلن



شکل ۱۸-۱۳: تقطیر در دمای پایین با استفاده از پمپ گرمایی همراه با تبخیر بخشی از محصول پایین برج

Compressor
 84 hp for $1 \times 10^3 \text{ Btu/hr}$ Evaporator Heat Duty



شکل ۱۸-۱۴: سیکل سردساز خارجی

جدول ۱۸-۵: راندمان ترمودینامیکی و هزینه روزانه عملیاتی برای جداسازی پروپان و پروپیلن با استفاده از تقطیر در دمای پایین

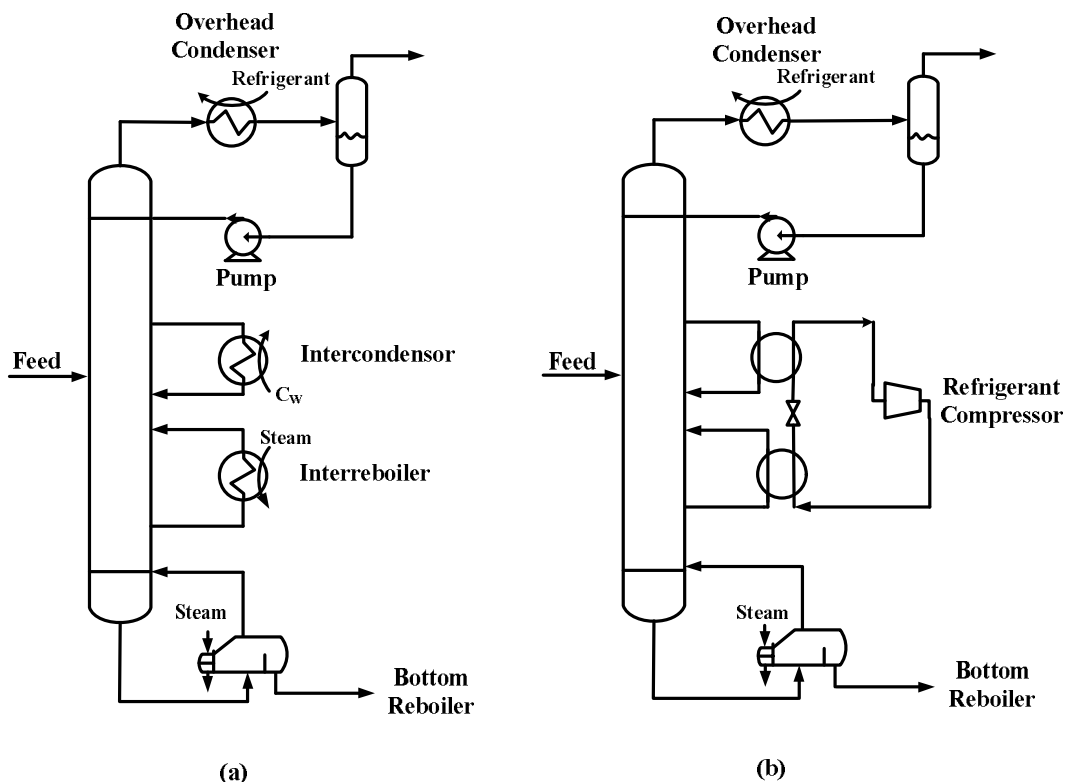
	Conventional (Fig 18-8)	Heat Pump with External Refrigerant, (Fig 18-11)	Heat Pump with Compression of Overhead Vapor (Fig 18-12)	Heat Pump With Reboiler Liquid Flashing (Fig 18-13)
Thermodynamic efficiency				
Percent	2.87	5.46	6.21	8.10
Utilities, S/day				
Steam	980	0	40	108
Cooling water	184	40	40	40
Electricity	1928	1815	1535	1056
TOTAL	3092	1855	1615	1204

* Includes feed preparation in Fig 18-9 and refrigerant cycle in Fig 18-14

تقطیر همراه با تبخیر و میعان ثانویه

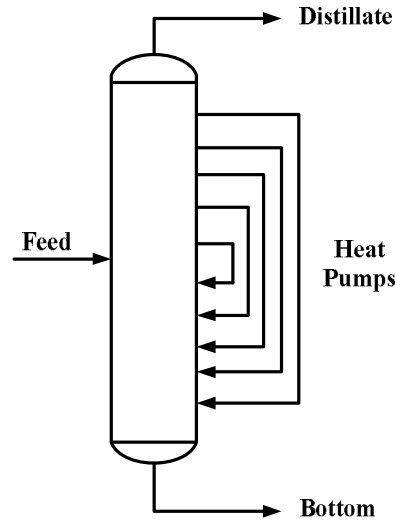
در تقطیر معمولی حرارت در دمای بالا به جوش آور داده می شود و حرارت در دمای پایین از کندانسور گرفته می شود. در این برج ها همانطور که نشان داده شد راندمان ترمودینامیکی پایین است و هر چه در جوش آور دما بالاتر باشد و هر چه در کندانسور دما پایین تر باشد هزینه ها بیشتر خواهد بود. یک راه دیگر برای رفع این مشکل استفاده از کندانسور داخلی یا جوش آور داخلی است. این مورد در قسمت a شکل ۱۸-۱۵ نشان داده شده است. زمانی که اختلاف دما بین بالا و پایین برج زیاد باشد از کندانسور داخلی و جوش آور داخلی استفاده می شود. تحقیقات پترسون و ولز^۱ [۹] نشان داد با قرار دادن کندانسور داخلی یا جوش آور داخلی می توان انرژی داده شده به سیستم را کاهش داد، اما این کار مستلزم سرمایه گذاری اولیه بیشتری است. تحقیقات فرشاتر [۱۰] نشان داد که با قرار دادن پمپ گرمایی بین کندانسور داخلی و جوش آور داخلی می توان سیستم را بهبود بخشید این مورد در قسمت b شکل ۱۸-۱۵ نشان داده شده است. تحقیقات فلوور و

جکسون^۱ [۱۱] نشان داد که با در نظر گرفتن چندین کندانسور داخلی و جوش‌آور داخلی همراه با پمپ گرمایی بین آنها می‌توان راندمای ترمودینامیکی سیستم را افزایش داد. این سیستم در شکل ۱۶-۱۸ نشان داده شده است. یک مشکل که در این سیستم‌ها وجود دارد این است که بین برخی کندانسورهای داخلی و جوش‌آورهای داخلی اختلاف دمای کمی جهت انتقال حرارت وجود دارد. برای رفع این مشکل از یک نوع تقطیر تحت عنوان تقطیر SRV^۲ استفاده می‌شود. این روش توسط ماح، نیکولاس و ودنیک^۳ [۱۲] گسترش داده شده و توسط هاسلدن^۴ [۱۳] عملی شد. تقطیر SRV در شکل ۱۷-۱۸ نشان داده شده است. در این روش فشار بالای برج بیشتر از فشار پایین برج است. این اختلاف فشار باعث می‌شود که حرارت به طور خودبخودی از بالای برج به پایین برج انتقال یابد. از آنجا که منابع حرارت بین بالا و پایین برج توزیع می‌شود، بار حرارتی کندانسور و جوش‌آور به طور قابل توجهی کاهش می‌یابد. ضمناً انتقال حرارت بین بالا و پایین برج باعث می‌شود که جریان مایع در بالای برج از بالا به پایین افزایش یابد و همچنین جریان بخار در پایین برج از پایین به بالا افزایش یابد. علاوه بر اینکه در تقطیر SRV آب مصرفی برای کندانسور و بخار مصرفی برای جوش‌آور کم است، جهت جداسازی مخلوط‌هایی که نقطه جوش نزدیک به هم دارند و لازم است مواد با غلظت بسیار بالایی از هم جدا شوند نیز از این روش استفاده می‌شود.



شکل ۱۸-۱۵: استفاده از کندانسور داخلی و جوش‌آور داخلی (a) بدون پمپ گرمایی (b) با پمپ گرمایی

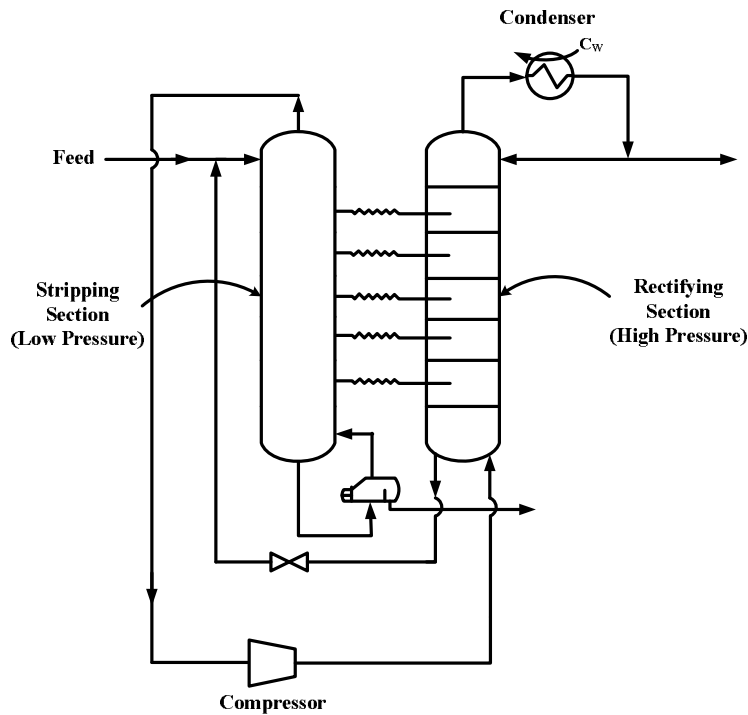
- 1- Flower and Jackson
- 2- Secondary Reflux and builup
- 3- Mah , Nicholas and Wodnik
- 4- Haselden



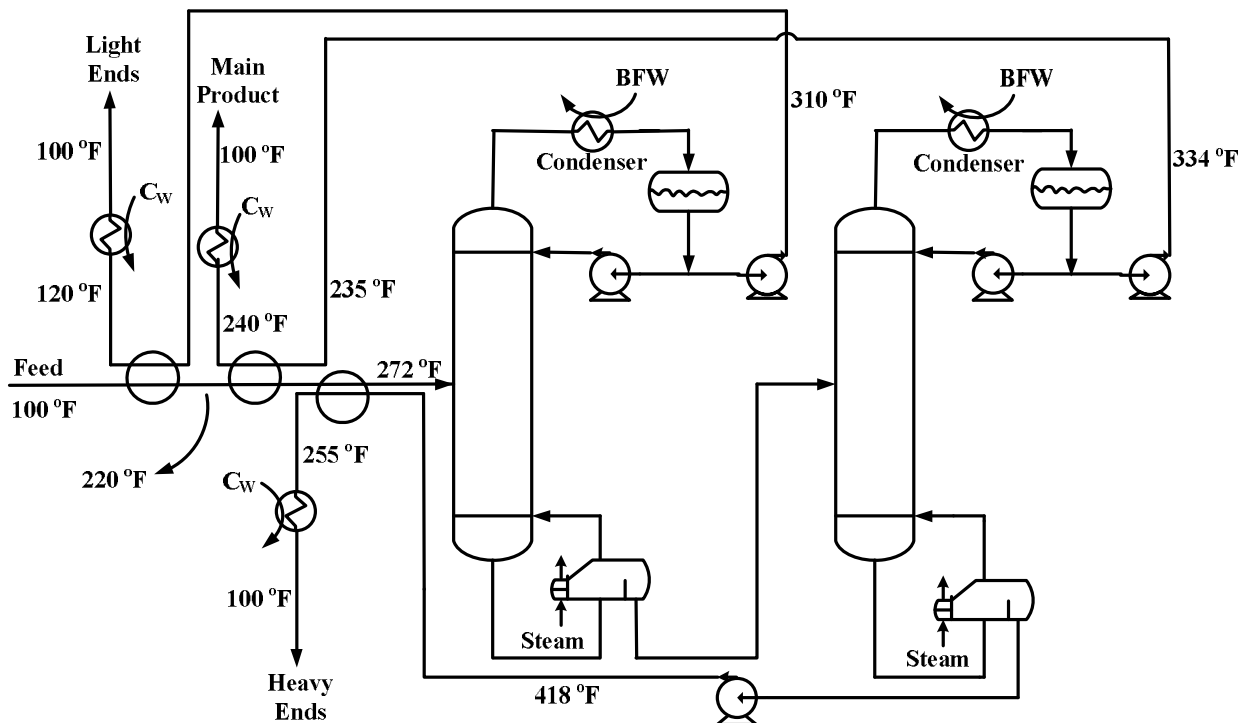
شکل ۱۸-۱۶: استفاده از چندین کندانسور داخلی و جوش آور داخلی در برج تقطیر

ادغام مبدل‌های حرارتی

وقتی که خوراک ورودی به برج مایع زیر نقطه اشباع باشد یا اینکه اختلاف دما بین بالا و پایین برج زیاد باشد می‌توان از محصولات برای پیش گرم کردن خوراک استفاده کرد. با اعمال این کار بار حرارتی کندانسور و جوش آور کاهش خواهد یافت. یک مثال از این روش در شکل ۱۸-۱۷ نشان داده شده است. در این مثال از سه محصول برای پیش گرم کردن خوراک استفاده شده است.



شکل ۱۸-۱۷: شمایی از برج تقطیر SRV



BFW = Boiler Feed Water

شکل ۱۸-۱۸: ادغام مبدل‌های حرارتی برای پیش گرم کردن خوراک ورودی به برج تقطیر

با اعمال این آرایش این فرصت ایجاد می‌شود که کندانسور یک برج به جوش آور برج دیگر کمک کند. مثال- هایی برای این روش و بهینه‌سازی این آرایش برای تقطیر دوجزئی در تحقیقات راتور، ون ورمر و پاورز^۱ [۱۴] و یومدا، نیدا و شیروکو^۲ [۱۵] ذکر شده است.

منابع

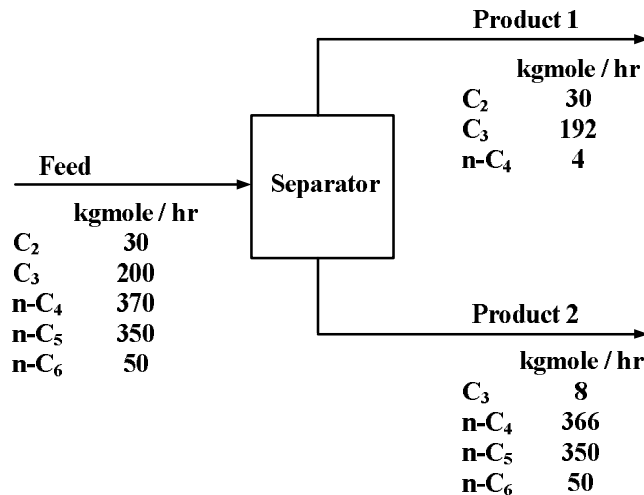
- 1- Dodge, B. F., and C. Housum, *Trans. AIChE*, 19, 117-151 (1927).
- 2- Robinson, C. S., and E. R. Gilliland, *Elements of Fractional Distillation*, 4th ed, McGraw-Hill Book Co., New York, 1950, 162-174.
- 3- Denbigh, K. G., *Chem. Eng. Sci*, 6, 1-9 (1956).
- 4- de Nevers, N., and J. D. Seader, "Mechanical Lost Work, Thermodynamic Lost Work, and thermodynamic Efficiencies of Processes," paper presented at the AIChE 86th National Meeting, Houston, Texas, April 1-5, 1979.
- 5- Tyreus, B. D., and W. L. Luyben, *Hydrocarbon Processing*, 54 (7), 93-96 (1975).
- 6- King, C. J., *Separation Processes*, McGraw-Hill Book co., New York, 1971, Chapter 13.
- 7- Freshwater, D. C., *Trans. Instn. Chem. Eng.*, 29, 149-160 (1951).
- 8- Null, H. R., *Chem. Eng. Prog.*, 72 (7), 58-67 (1976).
- 9- Petterson, W. C., and T. A. Wells, *Chem. Eng.*, 84 (20), 78-86 (1977).
- 10- Freshwater, D. C., *Brit. Chem. Eng.*, 6, 388-391 (1961).

-
- 1- Rathore, Van Wormer and Powers
 - 2- Umeda, Niida and Shioko

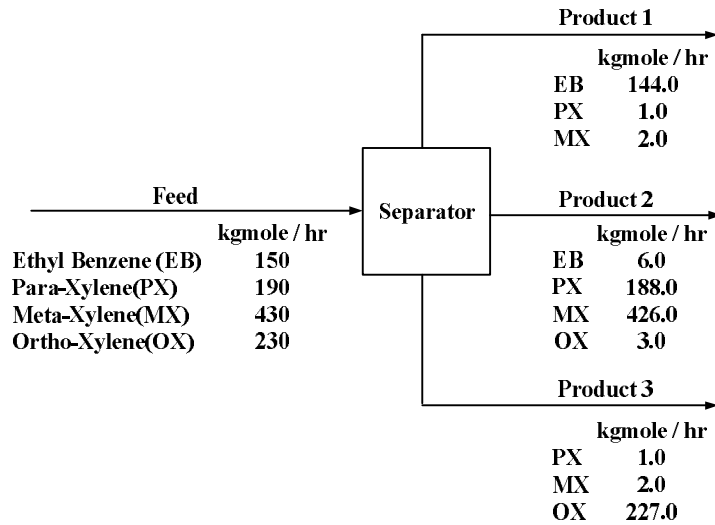
- 11- Flower, J. R., and R. Jackson, *Trans. Instn. Chem. Eng.*, 42, T249-T258 (1964).
 12- Mah, R. S. H., J. J. Nicholas, and R. B. Wodnik, *AIChE J.*, 23, 651-658 (1977).
 13- Haselden, G. G., U.S. Patent 4, 025,398; May 24, 1977.
 14- Rathore, R. N. S., K. A. Van Wormer, and G. J. Powers, *AIChE J.*, 20, 940-950 (1974).
 15- Umeda, T., K. Niida, and K. Shiroko, "A Thermodynamic Approach to Heat Integrated in Distillation System," paper presented at the 85th National Meeting of AIChE, June 4-8, 1978, Philadelphia, pa.
 16- Tadder, D. W., and D. R. Rudd, *AIChE J.*, 24, 303-315 (1978).

مسائل

- ۱- یک مخلوط گازی دو جزئی در دمای T موجود است حداقل کار لازم بدون بعد را بر حسب غلظت خوراک برای موارد زیر بدست آورده و رسم نمایید.
 الف : جداسازی کامل
 ب : جداسازی اجزاء با غلظت ۹۸٪
 ج : جداسازی اجزاء با غلظت ۹۰٪
 آیا حداقل کار لازم به غلظت محصولات حساس است؟
- ۲- ماکزیمم مقدار را برای حداقل کار لازم بدون بعد برای جداسازی یک گاز ایده آل دو جزئی هم مولار در دمای T بدست آورید.
- ۳- حداقل میزان کار لازم برای جداسازی زیر را بر حسب وات بدست آورید. همه جریانها به صورت گاز و در شرایط جوی می باشند.



- ۴- یک خوراک گازی مطابق شکل زیر به سه محصول جداسازی می شود و همه جریانها در شرایط جوی هستند. حداقل کار لازم جهت این جداسازی را بدست آورید.

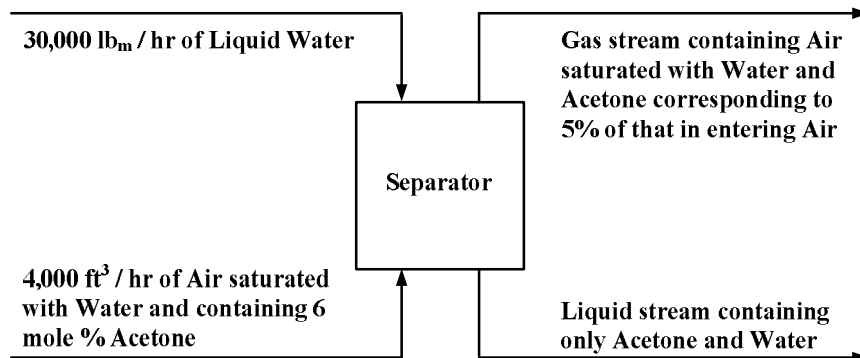


۵- خوراک مایعی شامل ۳۵٪ استن و ۶۵٪ آب در شرایط جوی وارد یک فرآیند جداسازی می‌شود. یکی از محصولات خروجی شامل ۹۹٪ استن و محصول دیگر شامل ۹۸٪ آب می‌باشد. اکتیویته فاز مایع را می‌توان از معادله ون لار بدست آورد. ثابت‌های این معادله به صورت زیر می‌باشد.

$$A_{21} = 1.7 \quad , \quad A_{12} = 2.0$$

حداقل کار لازم جهت این جداسازی را بدست آورید. در صورتی که فاز مایع ایده‌آل باشد، حداقل کار لازم چقدر است؟

۶- جداسازی زیر در شرایط جو ($1 \text{ atm}, 25^\circ \text{C}$) انجام می‌شود. ثابت‌های معادله Van Laar جهت محاسبه ضرایب اکتیویته فاز مایع در مسئله ۵ داده شده است. حداقل کار لازم برای جداسازی را بدست آورید.



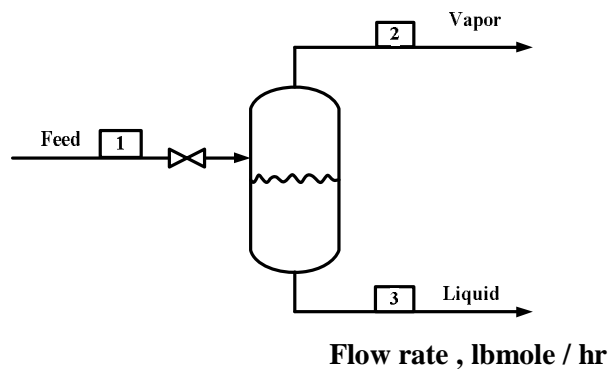
۷- برای فرآیند تبخیر ناگهانی زیر مطلوبست :

الف : تغییرات تابع امکان‌پذیری فرآیند (ΔB)

ب : کار خالص انجام شده

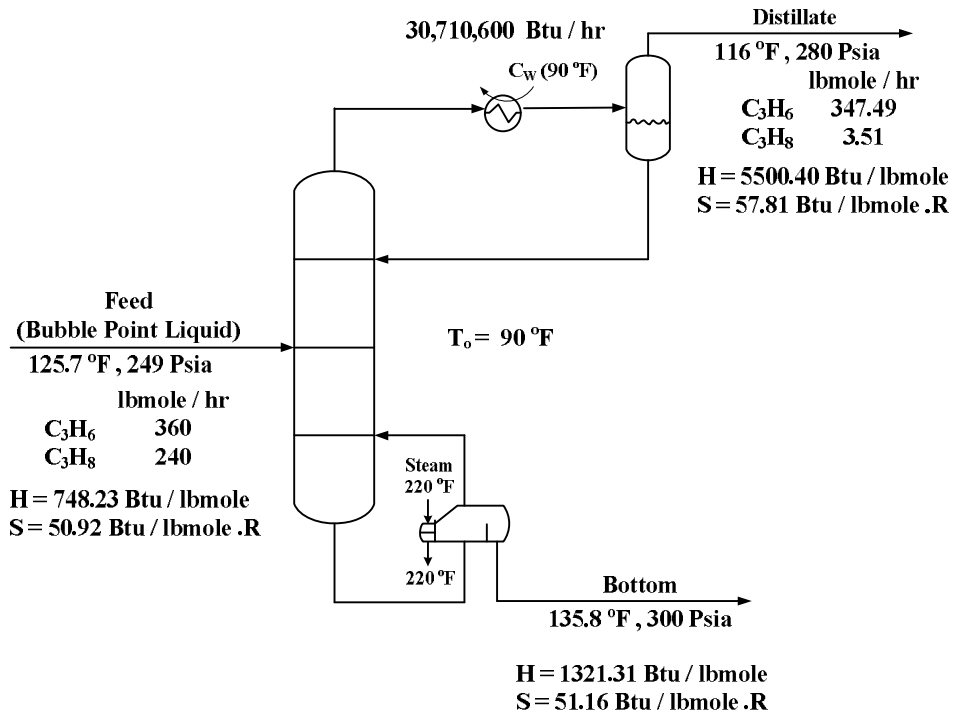
ج : کار تلف شده

د : راندمان ترمودینامیکی



	Stream 1	Stream 2	Stream 3
H ₂	0.98	0.95	0.03
N ₂	0.22	0.21	0.01
Benzene	0.08	0	0.08
Cyclohexane	91.92	0.69	91.23
	Stream 1	Stream 2	Stream 3
Temperature , °F	120	119.9	119.9
Pressure , Psia	300	15	15
Enthalpy , 1000 Btu / hr	-3642.05	-14.27	-3627.78
R.Entropy , 1000 Btu / hr	4.920	0.094	4.860

- ۸- برای سیستم جداسازی پروپان و پروپیلن که در زیر نشان داده شده است موارد زیر را بدست آورید.
- الف : بار حرارتی جوش آور (بار حرارتی کندانسور داده شده است)
- ب : تغییرات تابع امکان پذیری فرآیند (ΔB)
- ج : کار خالص انجام شده
- د : کار تلف شده
- ه : راندمان ترمودینامیکی



۹- یک کندانسور جزئی در شرایط زیر کار می‌کند با فرض $T_o = 70^\circ F$ موارد زیر را محاسبه نمایید.

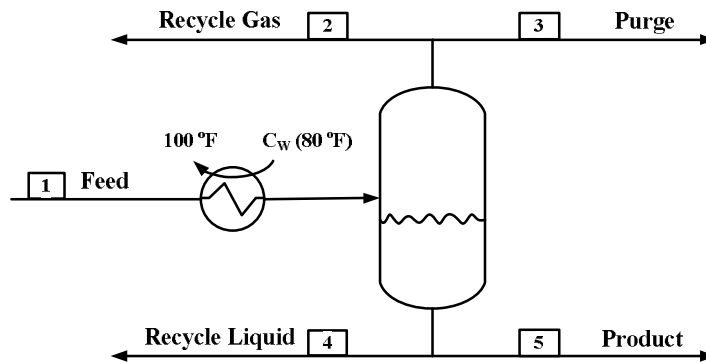
الف : بار حرارتی کندانسور

ب : تغییرات تابع امکان‌پذیری فرآیند (ΔB)

ج : کار خالص انجام شده

د : کار تلف شده

ه : راندمان ترمودینامیکی



Flow rate , lbmole / hr					
	Stream 1	Stream 2	Stream 3	Stream 4	Stream 5
H ₂	72.53	65.15	5.80	0.60	0.98
N ₂	7.98	7.01	0.62	0.13	0.22
Benzene	0.13	0	0	0.05	0.08
Cyclohexane	150.00	1.61	0.14	56.33	91.92

	Stream 1	Stream 2	Stream 3	Stream 4	Stream 5
Temperature , °F	392	120	120	120	120
Pressure , Psia	315	300	300	300	300
Enthalpy , 1000 Btu / hr	-2303.29	241.76	21.61	-2231.84	-3642.05
Entropy , 1000 Btu / hr.R	14.68	2.13	0.19	3.02	4.92

۱۰- غلظت جریان‌های خروجی در مثال ۱۳-۲ که در شکل ۱۳-۱۰ نشان داده شده است به صورت زیر می‌باشد.

	Feed	Vapor Distillate	Liquid Bottoms
Temperature , °F	150	17.03	171.73
Enthalpy , 1000 Btu / hr	4054.36	1849.78	563.06
Entropy , 1000 Btu / hr	41.61	23.42	14.54

بار حرارتی کندانسور $5 \times 10^6 \text{ Btu/hr}$ است که توسط یک چرخه سردساز در دمای 0°F خنک می‌شود. حرارت تلف شده از برج 10^5 Btu/hr می‌باشد جوش‌آور توسط بخار با دمای 250°F گرم می‌شود. در صورتی که دمای محیط $T_0 = 80^\circ \text{F}$ باشد موارد زیر را بدست آورید.

الف : بار حرارتی جوش‌آور

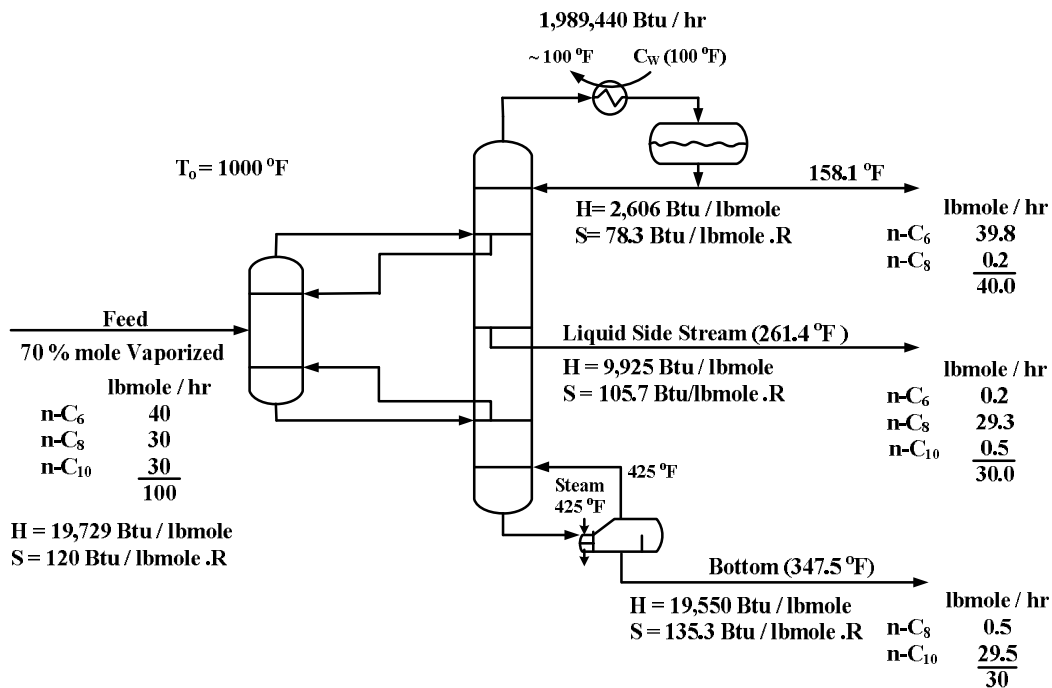
ب : تغییرات تابع امکان‌پذیری فرآیند (ΔB)

ج : کار خالص انجام شده

د : کار تلف شده

ه : راندمان ترمودینامیکی

- ۱۱- یک خوراک سه جزئی شامل nC_6 ، nC_8 و nC_{10} توسط سیستم زیر مورد جداسازی قرار می‌گیرد. موارد زیر را محاسبه نمایید.
- الف: بار حرارتی جوش‌آور
- ب: تغییرات تابع امکان‌پذیری فرآیند (ΔB)
- ج: کار خالص انجام شده
- د: کار تلف شده
- ه: راندمان ترمودینامیکی

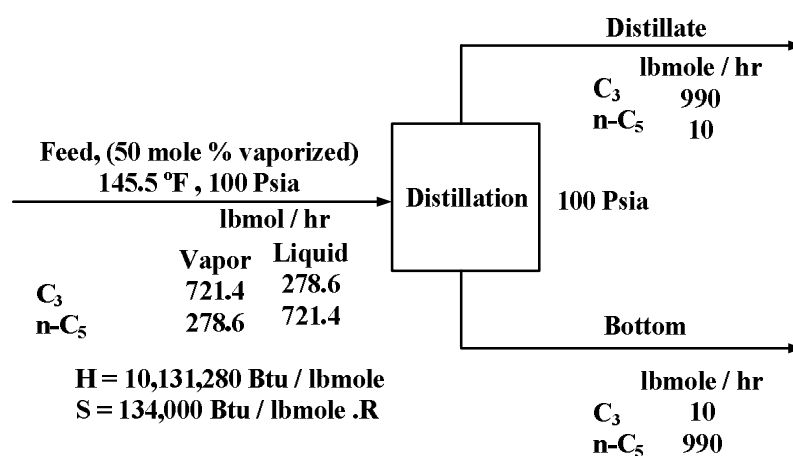


۱۲- همانطور که در شکل زیر نشان داده شده است مخلوطی شامل پروپان، نرمال پنتان در 100 Psia مورد جداسازی قرار می‌گیرد. با استفاده از روش پانچوان و ساواریت^۱ دو نوع طراحی برای این جداسازی در نظر گرفته شده است. در طراحی اول از کندانسور کلی و جوش‌آور جزئی استفاده شده و جریان برگشتی به برج به صورت مایع اشباع و دو برابر حداقل جریان برگشتی است. در طراحی دوم علاوه بر کندانسور کلی و جوش‌آور جزئی از کندانسور داخلی و جوش‌آور داخلی استفاده شده است. آرایش این برج شبیه به قسمت a شکل ۱۸-۱۵ است. مجموع بار حرارتی کندانسور بالای برج و کندانسور داخلی برج دوم برابر با کندانسور بالای برج اول است. کندانسور در دمای 10°F و جوش‌آور در دمای 80°F تبادل حرارت می‌کند. در صورتی که دمای محیط $T_0 = 100^\circ \text{F}$ باشد برای هر دو طراحی موارد زیر را محاسبه نمایید.

الف: تغییرات تابع امکان‌پذیری فرآیند (ΔB)

ب: کار خالص انجام شده

ج : کار تلف شده
د : راندمان ترمودینامیکی



داده‌های تعادلی ترمودینامیکی در 100 Psia به صورت زیر است.

x_{C_3}	y_{C_3}	$T, ^\circ F$	Enthalpy, 1000 Btu/lbmole		Entropy 1000 Btu/lbmole . R	
			Vapor	Liquid	Vapor	Liquid
0.9900	0.9990	59.2	5.652	-1.140	0.060	0.047
0.9500	0.9946	62.1	5.722	-1.074	0.060	0.048
0.9000	0.9885	65.9	5.815	-0.983	0.060	0.049
0.7000	0.9542	83.6	6.280	-0.515	0.062	0.054
0.5000	0.8890	107.2	7.005	0.213	0.064	0.059
0.3000	0.7456	141.0	8.337	1.414	0.069	0.064
0.1000	0.3775	192.2	11.362	3.515	0.079	0.070
0.0500	0.2116	208.6	12.691	4.258	0.083	0.072
0.100	0.0464	223.0	14.021	4.933	0.086	0.073

۱۳- در تحقیقات ماح، نیکولاس و ویندیک^۱ جداسازی ترانس ۲-بوتن از سیس ۲-بوتن توسط تقطیر معمولی و تقطیر SRV مورد بررسی قرار گرفته است. مشخصات این جداسازی در زیر نشان داده شده است. تقطیر SRV مطابق شکل ۱۷-۱۸ می‌باشد با این تفاوت که بعد از شیر فشارشکن یک مبدل خنک کننده قرار

1- Mah , Nicholas and Wodnik [AIChE j.,23,651,658(1977)]

داده می‌شود تا مخلوط دوفازی ایجاد شود. نتیجه محاسبات با استفاده از روش ونگ و هنک برای تقطیر معمولی و تقطیر SRV به صورت زیر است.

	Conventional Distillation	SRV Distillation
Rectifier pressure, kPa	121.6	293.8
Distillate temperature, K	279.9	306.0
Condenser duty, W	2.9392×10^7	1.6905×10^7
Stripper pressure, kPa	121.6	121.6
Bottom temperature, K	281.5	281.5
Reboiler duty, W	3.0023×10^7	1.9484×10^7
Compressor duty, W	--	2.864×10^6
Valve cooler duty, W	--	4.684×10^6
Valve outlet temperature, K	--	280.7

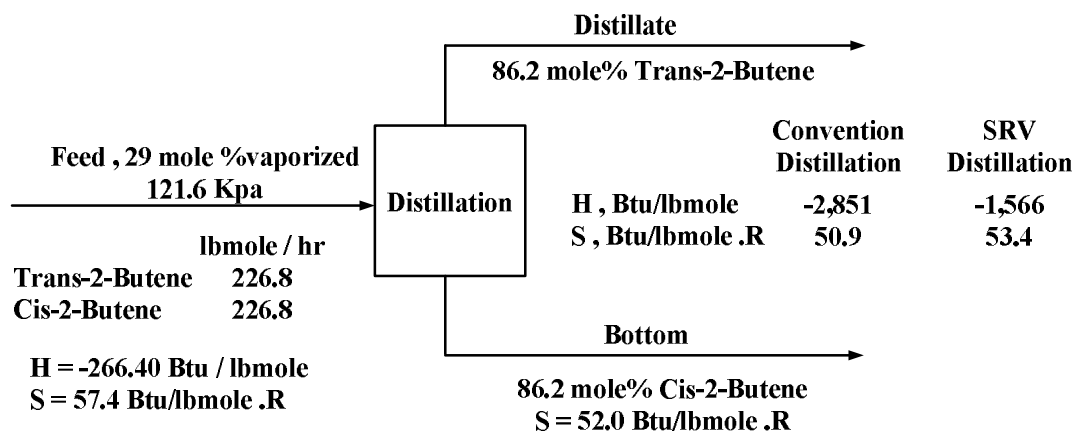
کندانسور با اختلاف دمایی $5.6 K$ و جوش‌آور در دمایی $331.5 K$ تبادل حرارت می‌کند. در صورتی که دمایی محیط $T_0 = 299.8 K$ باشد موارد زیر را محاسبه نمایید.

الف: تغییرات تابع امکان‌پذیری فرآیند (ΔB)

ب: کار خالص انجام شده

ج: کار تلف شده

د: راندمان ترمودینامیکی



۱۴- جداسازی فرضی مخلوط اتان و اتیلن به محصولات خالص را که در زیر نشان داده شده در نظر بگیرید. دو آرایش برای این جداسازی در نظر گرفته شده است یکی از آرایش‌ها تقطیر ساده است و آرایش دیگر استفاده از تقطیر در دمای پایین توسط پمپ گرمایی با تبخیر بخشی از محصول پایین برج می‌باشد. در هر دو آرایش فشار برج 200 Psia ، ضریب فرار $\alpha = 1.55$ و نسبت جریان برگشتی $1/1$ برابر حداقل جریان برگشتی می‌باشد. حداقل جریان برگشتی توسط معادله آندروود محاسبه شده و بقیه جزئیات روی شکل نشان داده شده است. در صورتی که دمای محیط $T_0 = 100^\circ \text{F}$ باشد موارد زیر را محاسبه نمایید.

الف: تغییرات تابع امکان‌پذیری فرآیند (ΔB)

ب: کار خالص انجام شده

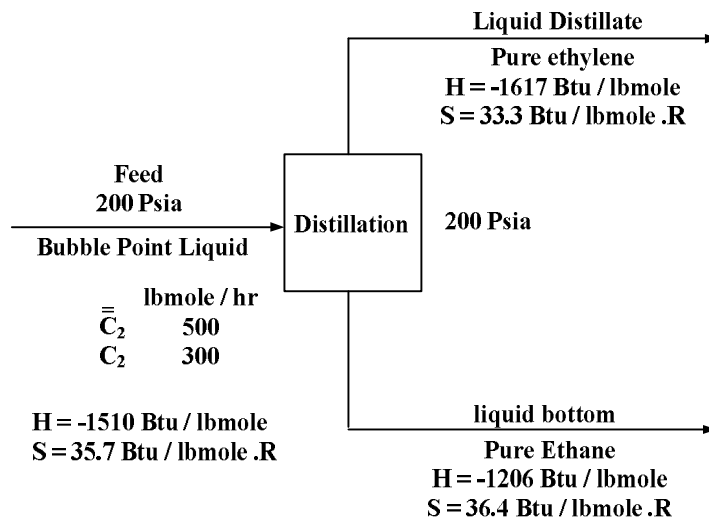
ج: کار تلف شده

د: راندمان ترمودینامیکی

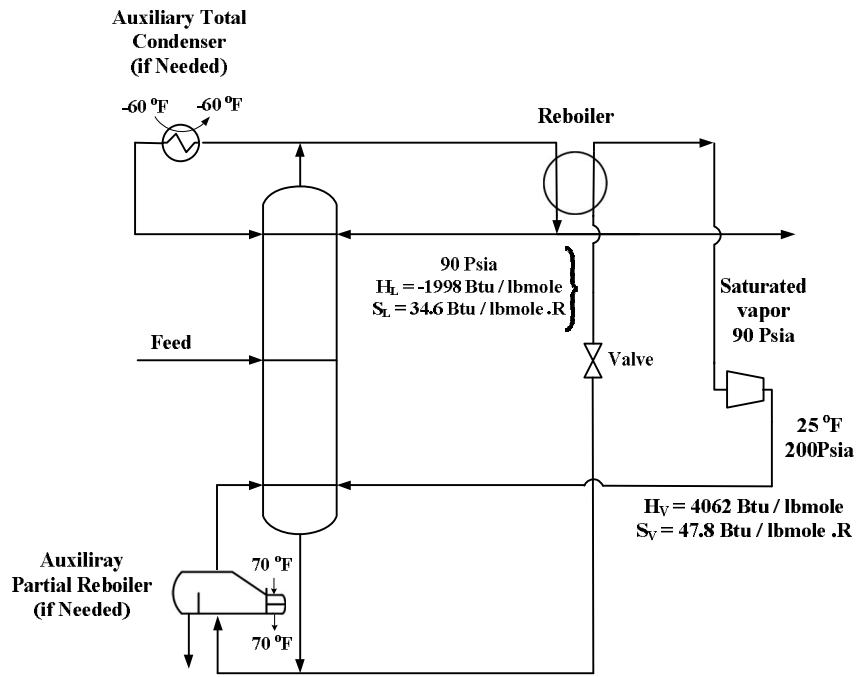
داده‌های ترمودینامیکی به صورت زیر می‌باشد.

**Latent heat of
vaporization, Btu/lbmole**

Ethylene at 200 psia	4348
Ethane at 200 psia	4751
Ethane at 90 psia	5473



(a) Distillation



(b) Scheme with Reboiler
 Liquid flashing

ضمائم

ضمیمه A

ثابت‌ها و ضرایب

این ضمیمه شامل خواص فیزیکی مربوط به ۱۷۶ ماده است که در دو گروه آلی و معدنی ارائه شده است. در هر گروه نام مواد بر حسب حروف الفبای لاتین چیده شده و فرمول شیمیایی مواد آلی با کربن و هیدروژن شروع شده است که بر اساس استاندارد رعایت شده در کتاب Handbook of chemistry and physics می‌باشد. در قسمت I، خواص و ثابت‌های زیر ارائه شده است.

M_w : وزن ملکولی

T_b : دمای جوش نرمال، R

T_c : دمای بحرانی، R

P_c : فشار بحرانی، Psia

Z_c : ضریب تراکم‌پذیری بحرانی

w : ضریب انحراف پیترز

δ : پارامتر حلالیت Hildebrand

v_L : حجم مولی بر حسب $cm^3/grmole$ در دمای مشخص که دماها در گوشه سمت راست بر حسب سانتیگراد نوشته شده است. اعداد درون پرانتز مربوط به مایعات فرضی می‌باشد. در قسمت II، ضرایب معادله ظرفیت گرمایی گاز ایده‌آل داده شده است.

$$(C_p)_V = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4$$

C_p : ظرفیت گرمایی در فشار ثابت، $\frac{Btu}{lbmole \text{ } ^\circ F}$

T : دما، $^\circ F$

در قسمت III، ضرایب معادله آنتوان ارائه شده است.

$$\ln \left(\frac{P_i^S}{P_C} \right) = A_1 - \frac{A_2}{T + A_3}$$

P_i^S : فشار بخار

T : دما، $^\circ F$

Part I

Number	Empirical Formula	Name	M _W	T _b	T _c	P _c	Z _c	ω	δ	V _L
Inorganic Chemicals										
1	Ar	Argon	39.948	157.1	271.2	705.4	0.293	-0.0034	5.330	
2	Br ₂	Bromine	159.808	597.5	1051.5	1499.0	0.298	0.1242	11.442	51.2 ²⁰
3	CCl ₄	Carbon tetrachloride	153.823	629.5	1001.5	661.3	0.277	0.1938	9.338	97.1 ²⁵
4	CO	Carbon monoxide	28.010	147.0	239.3	507.4	0.289	0.048	3.1300	(35.2) ²⁵
5	COCl ₂	Phosgene	98.916	505.3	819.3	823.0	0.279	0.203	8.4170	71.6 ²⁰
6	CO ₂	Carbon dioxide	44.011	350.4	547.6	1070.5	0.273	0.177	7.1200	(44.0) ²⁵
7	CS ₂	Carbon disulfide	76.131	374.9	993.6	1146.3	0.285	0.115	9.8640	58.9 ⁰
8	C ₂ OCl ₄	Trichloroacetyl chloride	181.833	704.1	1061.4	594.6	0.275	0.359	12.0540	112.2 ²⁰
9	ClH	Hydrogen chloride	36.461	338.6	584.2	1198.5	0.267	0.133	7.0110	30.6 ⁻⁸⁵
10	Cl ₂	Chlorine	70.906	430.4	750.9	1116.4	0.278	0.0743	8.708	45.4 ⁻³⁴
11	HI	Hydrogen iodide	127.912	428.0	761.7	1190.4	0.305	0.0290	8.270	45.6 ⁻³⁶
12	H ₂	Hydrogen	2.016	36.7	59.7	190.8	0.321	0.0	0.0	(31.0) ²⁵
13	H ₂ O	Water	18.015	671.7	1165.1	3206.7	0.232	0.3477	18.0	18.1 ²⁰
14	H ₂ S	Hydrogen Sulfide	34.080	383.1	672.4	1306.5	0.283	0.0868	8.8	34.3 ⁶⁰
15	H ₃ N	Ammonia	17.031	431.5	730.2	1653.7	0.248	0.2582	12.408	26.7 ⁰
16	Ne	Neon	20.183	49.1	80.1	395.3	0.306	-0.0299	0.0	
17	NO	Nitric oxide	30.006	218.5	324.0	940.5	0.267	0.5877	0.0	
18	NO ₂	Nitrogen dioxide	46.006	530.1	775.8	1469.6	0.247	0.8499	16.208	31.8 ²⁰
19	N ₂	Nitrogen	28.013	139.3	227.3	492.9	0.289	0.0206	4.440	(53.0) ²⁵
20	N ₂ O	Nitrous oxide	44.013	330.7	557.5	1053.7	0.277	0.1601	5.474	35.9 ⁻⁸⁹
21	O ₂	Oxygen	31.999	162.3	278.6	736.9	0.291	0.0250	4.0	(28.4) ²⁵
22	O ₂ S	Sulfur dioxide	64.063	473.7	775.2	1144.8	0.267	0.2402	6.0	44.0 ⁻¹⁰
23	O ₃ S	Sulfur trioxide	80.058	572.2	883.6	1196.8	0.252	0.4384	15.329	45.0 ⁴⁵
Organic Chemicals										
24	CHCl ₃	Chloroform	119.378	602.8	965.8	793.6	0.277	0.2117	9.236	80.02 ²⁰
25	CHN	Hydrogen cyanide	27.026	538.0	822.0	718.6	0.172	0.3752	12.192	39.3 ²⁰
26	CH ₂ O	Formaldehyde	30.026	457.1	747.3	984.6	0.222	0.2298	10.604	36.8 ⁻²⁰
27	CH ₃ Cl	Methyl chloride	50.488	448.1	749.3	968.5	0.270	0.1530	8.585	55.2 ²⁰
28	CH ₃ I	Methyl iodide	141.939	568.2	950.7	1061.1	0.283	0.1925	9.863	62.3 ²⁰
29	CH ₄	Methane	16.043	201.0	343.9	673.1	0.289	0.0	5.680	(52.0) ²⁰
30	CH ₄ O	Methanol	32.042	607.8	923.7	1153.6	0.228	0.5556	14.510	40.5 ²⁰
31	CH ₃ N	Methylamine	31.058	480.1	774.1	1081.6	0.260	0.2852	10.479	44.2 ⁻¹³
32	C ₂ HCl ₃	Trichloroethylene	131.389	648.1	979.5	727.5	0.278	0.4281	9.263	89.9 ²⁰

Part I

Number	Empirical Formula	Name	M _w	T _b	T _c	P _c	Z _c	ω	δ	V _L
Organic Chemicals										
33	C ₂ HCl ₃ O	Dichloroacetyl chloride	147.388	685.2	1039.1	668.5	0.271	0.3645	12.679	96.2 ¹⁶
34	C ₂ H ₂	Acetylene	26.038	339.1	555.0	890.3	0.267	0.1917	5.329	42.3 ⁻⁸⁴
35	C ₂ H ₂ Cl ₂ O	Chloroacetyl chloride	112.943	687.9	1054.8	740.7	0.255	0.3194	13.856	79.5 ²⁰
36	C ₂ H ₂ Cl	Vinyl chloride	62.499	467.0	776.8	774.5	0.266	0.0929	7.717	64.5 ⁻¹⁴
37	C ₂ H ₃ ClO	Acetyl chloride	78.498	583.3	914.3	832.7	0.270	0.3238	12.485	71.0 ²⁰
38	C ₂ H ₃ Cl ₃	1,1,2-Trichloroethane	113.405	969.5	1101.9	701.2	0.267	0.2273	9.628	92.6 ²⁰
39	C ₂ H ₃ N	Acetonitrile	41.053	638.6	986.2	701.0	0.194	0.3234	12.049	52.5 ²⁰
40	C ₂ H ₄	Ethylene	28.054	305.0	509.5	742.2	0.284	0.0872	5.801	(61.0) ²⁵
41	C ₂ H ₄ Cl ₂	1,1-Dichloroethane	98.960	594.8	941.7	734.8	0.274	0.2450	8.913	84.7 ²⁵
42	C ₂ H ₄ Cl ₂	1,2-Dichloroethane	98.960	641.9	1010.8	778.9	0.267	0.3064	9.828	79.2 ¹⁶
43	C ₂ H ₄ O	Acetaldehyde	44.054	528.4	830.1	805.3	0.238	0.2882	9.844	56.6 ²⁰
44	C ₂ H ₄ O	Ethylene oxide	44.054	510.6	842.7	1043.4	0.260	0.2121	10.271	49.0 ⁰
45	C ₂ H ₄ O ₂	Acetic acid	60.052	705.0	1070.6	839.1	0.220	0.4536	10.051	57.2 ²⁰
46	C ₂ H ₄ O ₂	Methyl formate	60.052	548.9	876.9	870.7	0.259	0.2562	10.018	61.7 ²⁰
47	C ₂ H ₅ Cl	Ethyl chloride	64.515	513.8	828.7	764.2	0.268	0.1918	8.471	75.1 ²⁰
48	C ₂ H ₆	Ethane	30.070	332.2	550.0	709.8	0.282	0.1064	6.050	(68.0) ²⁵
49	C ₂ H ₆ O	Dimethyl ether	46.069	447.0	720.1	764.2	0.271	0.1960	7.608	69.1 ²⁰
50	C ₂ H ₆ O	Ethanol	46.069	632.7	929.3	925.3	0.250	0.6341	12.915	58.4 ²⁰
51	C ₂ H ₆ O ₂	Ethylene glycol	62.069	847.1	1161.4	1091.9	0.242	0.1177	16.604	55.7 ²⁰
52	C ₂ H ₆ S	Dimethyl sulfide	62.130	558.9	905.5	802.4	0.268	0.1951	9.054	73.3 ²⁰
53	C ₂ H ₆ S	Ethyl mercaptan	62.130	554.7	898.5	796.5	0.271	0.1856	8.933	74.1 ²⁰
54	C ₂ H ₇ N	Ethylamine	45.085	521.5	821.1	815.6	0.264	0.2861	9.427	66.0 ²⁰
55	C ₃ H ₃ N	Acrylonitrile	53.064	630.8	934.5	512.9	0.186	0.3853	11.029	65.8 ²⁰
56	C ₃ H ₄	Methylacetylene	40.065	449.9	724.3	816.2	0.271	0.2150	8.010	56.7 ⁻⁵⁰
57	C ₃ H ₄	Propadiene	40.065	429.6	721.7	747.2	0.284	0.0631	6.854	61.6 ²⁵
58	C ₃ H ₆	Propylene	42.081	405.8	657.2	667.0	0.279	0.1421	6.208	79.0 ²⁵
59	C ₃ H ₆ O	Acetone	58.080	592.7	917.0	693.7	0.247	0.3035	9.566	73.5 ²⁰
60	C ₃ H ₆ O ₂	Ethyl formate	74.080	589.5	915.3	680.4	0.258	0.2784	9.311	79.9 ¹⁶
61	C ₃ H ₆ O ₂	Methyl acetate	74.080	594.7	912.4	680.9	0.256	0.3269	9.014	79.3 ²⁰
62	C ₃ H ₆ O ₂	Propionic acid	74.080	745.5	1102.8	778.9	0.249	0.5322	12.385	74.6 ²⁰
63	C ₃ H ₇ NO	Dimethylformamide	73.095	767.1	1074.4	683.1	0.236	0.7458	11.775	77.0 ²⁰
64	C ₃ H ₈	Propane	44.097	416.0	665.9	617.4	0.278	0.1538	6.400	84.0 ²⁵
65	C ₃ H ₈ O	Isopropanol	60.096	639.8	915.0	691.0	0.249	0.6614	11.572	76.5 ²⁰
66	C ₃ H ₈ O	n-Propanol	60.096	666.7	966.4	737.1	0.250	0.6111	12.050	74.7 ²⁰

Part I

Number	Empirical Formula	Name	M _w	T _b	T _c	P _c	Z _c	ω	δ	V _L
Organic Chemicals										
67	C ₃ H ₉ N	Trimethylamine	59.112	496.9	779.9	590.8	0.272	0.2008	7.070	93.4 ²⁰
68	C ₄ H ₄	Vinylacetylene	52.076	501.7	821.3	704.8	0.264	0.0970	10.229	73.3 ⁰
69	C ₄ H ₄ S	Thlophene	84.136	643.3	1062.3	705.4	0.246	0.0670	9.654	78.6 ¹⁶
70	C ₄ H ₅ N	Methacrylonitrile	67.091	654.2	998.2	563.3	0.228	0.2823	8.576	83.3 ²⁰
71	C ₄ H ₆	Dimethylacetylene	54.092	540.4	879.7	737.4	0.270	0.1359	7.937	78.3 ²⁰
72	C ₄ H ₆	Ethylacetylene	54.092	506.3	834.7	683.2	0.269	0.0610	7.937	83.2 ¹⁶
73	C ₄ H ₆	1,2-Butadiene	54.092	511.2	834.7	578.1	0.276	0.0987	7.950	83.7 ²⁵
74	C ₄ H ₆	1,3-Butadiene	54.092	483.8	765.0	628.0	0.272	0.2028	6.940	88.0 ²⁵
75	C ₄ H ₈	1-Butene	56.108	480.2	755.3	583.0	0.274	0.2085	6.766	95.6 ²⁵
76	C ₄ H ₈	cis-2-Butene	56.108	498.3	779.7	610.0	0.272	0.2375	6.760	91.2 ²⁵
77	C ₄ H ₈	Isobutene	56.108	479.3	752.2	580.0	0.274	0.1975	6.760	95.4 ²⁵
78	C ₄ H ₈	Trans-2-Butene	56.108	493.3	770.7	595.0	0.273	0.2230	6.760	93.8 ²⁵
79	C ₄ H ₈ O	Isobutyraldehyde	72.107	606.9	909.7	609.0	0.261	0.3800	9.199	91.4 ²⁰
80	C ₄ H ₈ O	Methyl ethyl ketone	72.107	635.0	964.2	603.0	0.251	0.3188	9.199	89.6 ²⁰
81	C ₄ H ₈ O ₂	n-Butyric acid	88.107	785.6	1130.7	648.1	0.249	0.6030	11.861	92.0 ²⁰
82	C ₄ H ₈ O ₂	Ethyl acetate	88.107	630.5	941.9	556.0	0.254	0.3718	8.974	97.8 ²⁰
83	C ₄ H ₈ O ₂	Methyl propionate	88.107	635.6	955.1	578.0	0.256	0.3500	9.046	96.3 ²⁰
84	C ₄ H ₈ O ₂	Propyl formate	88.107	638.1	968.6	589.3	0.260	0.3154	9.024	96.7 ¹⁶
85	C ₄ H ₉ NO	Dimethyl acetamide	87.120	792.3	1182.0	583.7	0.230	0.3762	10.788	93.0 ²⁵
86	C ₄ H ₁₀	Isobutane	58.124	470.6	734.7	529.1	0.276	0.1825	6.730	105.5 ²⁵
87	C ₄ H ₁₀	n-Butane	58.124	490.8	765.3	550.7	0.274	0.1954	6.634	101.4 ²⁵
88	C ₄ H ₁₀ O	Isobutanol	74.123	686.9	985.9	623.0	0.256	0.5917	10.949	92.4 ²⁰
89	C ₄ H ₁₀ O	n-Butanol	74.123	703.6	1013.2	640.5	0.256	0.5903	11.440	91.5 ²⁰
90	C ₄ H ₁₀ O	t-Butyl alcohol	74.123	640.0	912.0	576.1	0.255	0.6071	10.316	94.2 ²⁰
91	C ₄ H ₁₀ O	Diethyl ether	74.123	553.9	840.2	523.2	0.264	0.2800	7.544	104.0 ²⁰
92	C ₄ H ₁₀ O ₃	Diethylene glycol	106.122	933.8	1225.9	668.0	0.244	1.1747	13.551	95.1 ²⁰
93	C ₅ H ₄ O ₂	Furfural	96.085	782.8	1182.8	714.2	0.243	0.4239	11.986	82.8 ²⁰
94	C ₅ H ₁₀	2-Methyl-1-butene	70.135	547.8	850.0	514.4	0.274	0.2000	7.055	108.7 ²⁵
95	C ₅ H ₁₀	2-Methyl-2-butene	70.135	561.1	870.0	527.6	0.273	0.2120	7.055	106.7 ²⁵
96	C ₅ H ₁₀	3-Methyl-1-butene	70.135	327.8	831.0	507.0	0.278	0.1490	7.055	112.8 ²⁵
97	C ₅ H ₁₀	Cyclopentane	70.135	580.4	921.2	655.0	0.274	0.1966	8.010	94.7 ²⁵
98	C ₅ H ₁₀	1-Pentene	70.135	545.6	853.0	586.0	0.273	0.2198	7.055	110.4 ²⁵
99	C ₅ H ₁₀	Cis-2-Pentene	70.135	558.2	860.6	512.0	0.272	0.2060	7.055	107.8 ²⁵

Part I

Number	Empirical Formula	Name	M _w	T _b	T _c	P _c	Z _c	Ω	δ	V _L
Organic Chemicals										
100	C ₅ H ₁₀	Trans-2-Pentene	70.135	557.1	857.0	508.4	0.272	0.2090	7.055	109.0 ²⁵
101	C ₅ H ₁₀ O	Diethyl ketone	86.134	674.9	1009.7	542.3	0.256	0.3407	8.898	105.8 ²⁰
102	C ₅ H ₁₀ O ₂	n-Propyl acetate	102.134	674.5	988.9	483.6	0.253	0.3936	8.729	115.1 ²⁰
103	C ₅ H ₁₂	Isopentane	72.151	541.8	829.8	483.0	0.270	0.2104	7.020	117.4 ²⁵
104	C ₅ H ₁₂	n-Pentane	72.151	556.6	845.6	489.5	0.269	0.2387	7.020	116.1 ²⁵
105	C ₅ H ₁₂	Neopentane	72.151	508.8	780.8	464.0	0.276	0.1950	7.020	123.3 ²⁵
106	C ₆ H ₃ Cl ₃	1,2,4-Trichlorobenzene	181.449	876.0	1322.9	578.2	0.262	0.3358	9.956	124.8 ²⁰
107	C ₆ H ₄ Cl ₂	m-Dichlorobenzene	147.004	803.1	1231.1	562.9	0.252	0.3073	9.554	114.1 ²⁰
108	C ₆ H ₄ Cl ₂	o-Dichlorobenzene	147.004	813.9	1255.1	595.3	0.256	0.2720	9.815	112.6 ²⁰
109	C ₆ H ₄ Cl ₂	p-Dichlorobenzene	147.004	804.7	1232.6	566.5	0.253	0.2822	9.645	117.8 ⁵⁵
110	C ₆ H ₅ Br	Bromobenzene	157.010	772.9	1206.3	655.4	0.245	0.2508	9.753	105.0 ²⁰
111	C ₆ H ₅ Cl	Chlorobenzene	112.559	729.7	1138.3	656.0	0.266	0.2545	9.623	101.0 ²⁰
112	C ₆ H ₅ I	Iodobenzene	204.011	830.7	1298.1	655.8	0.266	0.2470	9.782	110.0 ⁴
113	C ₆ H ₆	Benzene	78.114	635.9	1012.7	714.2	0.272	0.2116	9.158	89.4 ²⁵
114	C ₆ H ₆ O	Phenol	94.113	819.0	1251.1	889.1	0.279	0.4201	12.106	88.9 ⁴⁰
115	C ₆ H ₇ N	Aniline	93.129	823.1	1257.8	768.6	0.261	0.3830	11.461	91.1 ²⁰
116	C ₆ H ₁₂	Cychohexane	84.162	637.0	995.3	591.5	0.272	0.2149	8.193	108.7 ²⁵
117	C ₆ H ₁₂	Methylcyclopentane	84.162	621.0	959.0	549.0	0.271	0.2316	7.847	113.1 ²⁵
118	C ₆ H ₁₂	1-Hexane	84.162	606.0	920.0	471.7	0.269	0.2463	7.400	125.8 ²⁵
119	C ₆ H ₁₄	2,2-Dimethylbutane	86.178	581.2	880.9	450.5	0.275	0.2312	6.712	122.7 ²⁵
120	C ₆ H ₁₄	2,3-Dimethylbutane	86.178	596.1	900.5	455.4	0.272	0.2447	6.967	131.2 ²⁵
121	C ₆ H ₁₄	n-Hexane	86.178	615.4	914.2	440.0	0.266	0.2972	7.266	131.6 ²⁵
122	C ₆ H ₁₄	2-Methylpentane	86.178	600.2	896.5	440.1	0.269	0.2771	7.018	132.0 ²⁵
123	C ₆ H ₁₄	3-Methylpentane	86.178	605.6	907.8	453.1	0.270	0.2745	7.132	129.8 ²⁵
124	C ₆ H ₁₄ O ₄	Triethylene glyool	150.176	1008.7	1282.2	481.0	0.243	1.2715	12.677	133.2 ¹⁵
125	C ₇ H ₈	Toluene	92.141	690.8	1069.1	587.8	0.263	0.2415	8.914	106.8 ²⁵
126	C ₇ H ₈ O	o-Cresol	108.140	835.5	1255.6	726.0	0.272	0.4299	11.139	105.2 ⁴⁰
127	C ₇ H ₁₄	Methylcyclohexane	98.189	673.4	1030.2	504.4	0.271	0.2362	7.825	128.3 ²⁵
128	C ₇ H ₁₄	Ethylcyclopentane	98.189	677.9	1025.0	492.8	0.268	0.2712	7.739	128.8 ²⁵
129	C ₇ H ₁₄	1-Heptane	98.189	660.3	963.9	412.2	0.262	0.3467	7.168	140.9 ²⁰
130	C ₇ H ₁₆	n-Heptane	100.205	668.9	972.3	396.9	0.261	0.3403	7.430	147.5 ²⁵
131	C ₈ H ₈	Styrene	104.152	752.9	1146.4	559.0	0.261	0.2885	9.211	115.0 ²⁰
132	C ₈ H ₁₀	Ethylbenzene	106.168	736.8	1115.5	540.0	0.265	0.2981	8.783	123.1 ²⁵

Part I

Number	Empirical Formula	Name	M _w	T _b	T _c	P _c	Z _c	Ω	δ	V _L
Organic Chemicals										
133	C ₈ H ₁₀	m-Xylene	106.168	742.1	1114.6	510.0	0.264	0.3086	8.818	123.5 ²⁵
134	C ₈ H ₁₀	o-Xylene	106.168	751.6	1138.0	530.0	0.266	0.2904	8.987	121.2 ²⁵
135	C ₈ H ₁₀	p-Xylene	106.168	740.7	1112.8	500.0	0.265	0.3304	8.769	124.0 ²⁵
136	C ₈ H ₁₆	Ethylcyclohexane	112.216	728.9	1084.7	453.9	0.265	0.3041	7.739	143.1 ²⁵
137	C ₈ H ₁₆	n-Propylcyclopentane	112.216	727.4	1062.5	406.5	0.253	0.3386	7.894	143.7 ¹⁶
138	C ₈ H ₁₈	n-Octane	114.232	717.9	1024.9	362.1	0.258	0.3992	7.551	163.5 ²⁵
139	C ₈ H ₁₈ O ₅	Tetraethylene glycol	194.229	1065.8	1432.4	304.4	0.205	0.8162	12.113	172.1 ¹⁵
140	C ₉ H ₈	Indene	116.163	819.2	1245.5	553.6	0.250	0.3064	9.647	116.6 ²⁰
141	C ₉ H ₁₀	Indan	118.179	810.3	1225.9	526.6	0.251	0.2912	9.334	122.6 ²⁰
142	C ₉ H ₁₀	Methylstyrene	118.179	797.7	1192.6	500.0	0.255	0.3191	9.002	129.7 ²⁰
143	C ₉ H ₁₂	1-Ethyl-2-methylbenzene	120.195	788.7	1172.0	441.0	0.247	0.2970	8.839	136.4 ²⁰
144	C ₉ H ₁₂	n-Propylbenzene	120.195	778.3	1149.0	464.1	0.261	0.3446	8.661	139.4 ²⁰
145	C ₉ H ₁₈	n-Propylcyclohexane	126.243	773.8	1114.5	369.2	0.248	0.3617	7.886	159.2 ²⁰
146	C ₉ H ₂₀	n-Nonane	128.259	763.1	1071.0	331.0	0.254	0.4439	7.649	179.6 ²⁵
147	C ₁₀ H ₈	Naphthalene	128.174	884.0	1347.0	576.1	0.258	0.2934	9.738	132.0 ²⁰
148	C ₁₀ H ₁₀	1-Methylindene	130.190	851.7	1266.2	483.0	0.247	0.3291	9.323	
149	C ₁₀ H ₁₀	2-Methylindene	130.190	866.1	1286.2	486.5	0.246	0.3367	9.485	144.1 ³⁰
150	C ₁₀ H ₁₂	Dicyclopentadiene	132.206	797.7	1188.7	773.9	0.254	0.2767	8.398	142.1 ³⁵
151	C ₁₀ H ₁₄	n-Butylbenzene	134.222	821.6	1188.8	418.7	0.258	0.3929	8.425	156.1 ²⁰
152	C ₁₀ H ₁₄	1,2-Dimethyl-3-ethylbenzene	134.222	840.8	1224.1	453.6	0.262	0.3968	8.916	
153	C ₁₀ H ₂₀	n-Butylcyclohexane	140.27	817.4	1162.4	353.9	0.252	0.4035	7.90	175.5 ²⁰
154	C ₁₀ H ₂₂	n-Decane	142.286	805.1	1114.0	306.0	0.251	0.4869	7.722	196.0 ³⁵
155	C ₁₁ H ₁₀	1-Methylnaphthalene	142.201	932.0	1384.5	517.6	0.254	0.3607	9.770	139.4 ²⁰
156	C ₁₁ H ₁₀	2-Methylnaphthalene	142.201	925.6	1371.4	508.1	0.256	0.3647	9.660	
157	C ₁₁ H ₂₄	n-Undecane	156.313	844.3	1152.0	282.0	0.248	0.521	7.790	212.2 ²⁵
158	C ₁₂ H ₈	Acenaphthalene	152.196	977.7	1434.5	467.2	0.237	0.3733	10.018	169.3 ¹⁶
159	C ₁₂ H ₁₀	Diphenyl	154.212	951.1	1420.0	557.0	0.276	0.3638	9.891	155.8 ⁷⁴
160	C ₁₂ H ₁₂	2,7-Dimethylnaphthalene	156.228	965.1	1400.7	467.4	0.257	0.4232	9.760	
161	C ₁₂ H ₁₄	1,2,3-Trimethylindene	158.244	909.3	1296.4	384.1	0.242	0.4271	8.955	
162	C ₁₂ H ₂₆	n-Dodecane	170.328	881.0	1188.3	261.6	0.245	0.561	7.840	228.6 ²⁵
163	C ₁₃ H ₁₀	Fluorene	166.223	1027.9	1480.1	434.2	0.234	0.4512	10.136	
164	C ₁₃ H ₁₄	1-Methylethyl-naphthalene	170.255	986.7	1393.4	408.6	0.233	0.5044	10.03	
165	C ₁₃ H ₁₄	2,3,5- Trimethylnaphthalene	170.255	1004.7	1418.9	408.6	0.232	0.5044	10.121	

Part I

Number	Empirical Formula	Name	M _w	T _b	T _c	P _c	Z _c	Ω	δ	V _L
Organic Chemicals										
166	C ₁₃ H ₂₈	n-Tridecane	184.367	915.5	1219.0	250.0	0.242	0.6002	7.890	244.9 ²⁵
167	C ₁₄ H ₁₀	Phenanthrene	178.234	1103.0	1581.8	420.4	0.228	0.4396	10.524	
168	C ₁₄ H ₃₀	n-Tetradecane	198.394	948.1	1251.0	230.0	0.240	0.640	7.920	261.3 ²⁵
169	C ₁₅ H ₁₂	1-Phenylindene	192.261	1071.3	1518.6	391.0	0.230	0.4644	9.933	
170	C ₁₅ H ₁₄	2-Ethylfluorene	194.277	1047.9	1459.9	357.5	0.230	0.5175	9.636	
171	C ₁₅ H ₃₂	n-Pentadecane	212.421	978.8	1278.0	220.0	0.237	0.6743	7.960	227.8 ²⁵
172	C ₁₆ H ₁₀	Fluoranthene	202.256	1199.1	1685.9	378.1	0.221	0.4930	10.426	
173	C ₁₆ H ₁₀	Pyrene	202.256	1143.3	1605.7	378.1	0.224	0.4988	10.222	
174	C ₁₆ H ₁₂	1-Phenylnaphthalene	204.272	1076.7	1512.2	381.8	0.228	0.5034	10.283	
175	C ₁₆ H ₃₄	n-Hexadecane	226.448	1007.9	1305.0	206.0	0.236	0.7078	7.990	294.1 ²⁵
176	C ₁₈ H ₁₂	Chrysene	228.294	1298.1	1788.5	346.4	0.213	0.5676	10.691	

Part II

Number	Empirical Formula	Name	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅
Inorganic Chemicals							
1	Ar	Argon	4.9647	0.0	0.0	0.0	0.0
2	Br ₂	Bromine	8.552	0.8334 E-3	-0.5053 E-06	0.1098 E-09	0.0
3	CCl ₄	Carbon tetrachloride	18.36077	0.1932811 E-01	-0.2576049 E-04	0.173446 E-07	-0.4549234 E-11
4	CO	Carbon monoxide	6.956012	0.591124 E-04	0.5075809 E-06	0.7641183 E-09	-0.6540363 E-12
5	COCl ₂	Phosgene	13.76767	0.1093655E-1	0.1226482E-04	0.7900403 E-08	-0.2079814 E-11
6	CO ₂	Carbon dioxide	8.398605	-0.6475766 E-02	-0.3555025 E-05	0.1194595 E-08	-0.1851702 E-12
7	CS ₂	Carbon disulfide	11.63044	0.123864 E-01	0.4778188 E-05	-0.8568489 E-08	0.2966357 E-11
8	C ₂ OCl ₄	Trichloroacetyl chloride	23.70705	0.2731643 E-01	-0.3266946 E-04	0.2107581 E-07	-0.5450088 E-11
9	ClH	Hydrogen chloride	6.969	0.2236 E-03	0.7333 E-06	-0.1776 E-09	0.0
10	Cl ₂	Chlorine	7.973	0.18901 E-02	-0.12101 E-05	0.26526 E-09	0.0
11	HI	Hydrogen iodide	6.948176	0.1457827 E-05	0.1104365 E-05	-0.5203962 E-09	0.7254255 E-13
12	H ₂	Hydrogen	6.647816	0.2472647 E-02	-0.4557635 E-05	0.3117701 E-08	-0.6643678 E-12
13	H ₂ O	Water	7.985742	0.4633191 E-03	0.1402841 E-05	-0.6578387 E-09	0.9795288 E-13
14	H ₂ S	Hydrogen Sulfide	8.031194	0.9868632E-03	0.2388543 E-05	-0.159311 E-08	0.320329 E-12
15	H ₃ N	Ammonia	8.2765	0.39006 E-02	0.35245 E-06	-0.27402 E-09	0.0
16	Ne	Neon	4.9647	0.0	0.0	0.0	0.0
17	NO	Nitric oxide	7.255110	0.4551648 E-03	0.2640019 E-06	-0.1225439 E-09	0.133261 E-13
18	NO ₂	Nitrogen dioxide	8.495494	0.4921745 E-02	-0.1239651 E-05	-0.2704296 E-09	0.1240708 E-12
19	N ₂	Nitrogen	6.947158	0.6609477 E-04	0.5693395 E-06	0.3226862 E-10	-0.9683259 E-13
20	N ₂ O	Nitrous oxide	8.767171	0.6369103 E-02	-0.3621806 E-05	0.1572094 E-08	-0.2566121 E-12
21	O ₂	Oxygen	6.986501	0.5581101 E-03	0.1399925 E-05	-0.1093827 E-08	0.2299662 E-12
22	O ₂ S	Sulfur dioxide	9.134	0.532 E-02	-0.2323 E-05	0.3527 E-09	0.0
23	O ₃ S	Sulfur trioxide	10.964	0.1251 E-01	-0.6523 E-05	0.1328 E-08	0.0
Organic Chemicals							
24	CHCl ₃	Chloroform	14.84	0.1245 E-01	-0.6495 E-05	0.1259 E-08	0.0
25	CHN	Hydrogen cyanide	8.194594	0.526853 E-02	-0.3123949 E-05	0.1256972 E-08	-0.2109817 E-12
26	CH ₂ O	Formaldehyde	8.209533	0.1838523 E-02	0.1697531 E-05	-0.1107293 E-08	0.2015218 E-12
27	CH ₃ Cl	Methyl chloride	8.964398	0.1006818 E-01	-0.8251344 E-07	-0.2858358 E-08	0.1064404 E-11
28	CH ₃ I	Methyl Iodide	9.71643	0.1105462 E-01	-0.3302857 E-05	-0.173936 E-09	0.3161217 E-12
29	CH ₄	Methane	8.245223	0.3806333 E-02	0.8864745 E-05	-0.7461153 E-08	0.182959 E-11
30	CH ₄ O	Methanol	9.801084	0.8430642 E-02	0.6669185 E-05	-0.8206981 E-08	0.2500638 E-11
31	CH ₅ N	Methylamine	11.192	0.1571 E-01	-0.43782 E-05	0.50592 E-09	0.0
32	C ₂ HCl ₃	Trichloroethylene	17.8198	0.1891162 E-01	-0.1588157 E-04	0.7817208 E-08	-0.1645299 E-11
33	C ₂ HCl ₃ O	Dichloroacetyl chloride	21.08973	0.2396316 E-01	-0.2415185 E-04	0.1440388 E-07	-0.3583915 E-11

Part II

Number	Empirical Formula	Name	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅
Organic Chemicals							
34	C ₂ H ₂	Acetylene	9.89	0.8273 E-02	-0.3783 E-05	0.7457 E-09	0.0
35	C ₂ H ₂ Cl ₂ O	Chloroacetyl chloride	18.47242	0.2060988 E-02	-0.1563425 E-04	0.7731953 E-08	-0.1717742 E-11
36	C ₂ H ₃ Cl	Vinyl chloride	11.52336	0.1776248 E-01	-0.9084331 E-05	0.2459001 E-08	-0.1792789 E-11
37	C ₂ H ₃ ClO	Acetyl chloride	15.8551	0.1725661 E-01	-0.7116638 E-05	0.1060025 E-08	0.1484303 E-12
38	C ₂ H ₃ Cl ₃	1,1,2-Trichloroethane	19.37069	0.2598217 E-01	-0.1790523 E-04	0.7161791 E-08	-0.1193551 E-11
39	C ₂ H ₃ N	Acetonitrile	11.5361	0.1232096 E-01	-0.1200452 E-05	-0.2031388 E-08	0.7743102 E-12
40	C ₂ H ₄	Ethylene	9.326018	0.1393934 E-01	0.1010831 E-05	-0.7516552 E-08	0.3615367 E-11
41	C ₂ H ₄ Cl ₂	1,1-Dichloroethane	16.548	0.22237 E-01	-0.92549 E-05	0.15564E-08	0.0
42	C ₂ H ₄ Cl ₂	1,2-Dichloroethane	17.38636	0.1985922 E-01	-0.8175161 E-05	0.1405784 E-08	0.9333614 E-13
43	C ₂ H ₄	Acetaldehyde	11.90924	0.1481123 E-01	0.9439146 E-06	-0.501431 E-08	0.172932 E-11
44	C ₂ H ₄ O	Ethylene oxide	10.14899	0.1762188 E-01	0.4347253 E-05	-0.1164914 E-07	0.4326094 E-11
45	C ₂ H ₄ O ₂	Acetic acid	14.63924	0.229877 E-01	-0.1021997 E-04	0.2589452 E-08	-0.2804407 E-12
46	C ₂ H ₄ O ₂	Methyl formate	14.31964	0.2105721 E-01	-0.3231842 E-05	-0.5463847 E-08	0.2608819 E-11
47	C ₂ H ₅ Cl	Ethyl chloride	13.436	0.21267 E-01	-0.64893 E-05	0.6832 E-09	0.0
48	C ₂ H ₆	Ethane	11.51606	0.140309 E-01	0.854034 E-05	-0.1106078 E-07	0.3162199 E-11
49	C ₂ H ₆ O	Dimethyl ether	15.91995	0.1599677 E-01	0.7899362 E-05	-0.1293051 E-07	0.4398304 E-11
50	C ₂ H ₆ O	Ethanol	14.04853	0.2153149 E-01	-0.2153442 E-05	-0.4607259 E-08	0.1893692 E-11
51	C ₂ H ₆ O ₂	Ethylene glycol	18.11978	0.2404298 E-01	0.1265575 E-05	-0.1072173 E-07	0.4248091 E-11
52	C ₂ H ₆ S	Dimethyl sulfide	16.23989	0.1919445 E-01	-0.3534516 E-06	-0.5604401 E-08	0.2328362 E-11
53	C ₂ H ₆ S	Ethyl mercaptan	15.73943	0.2175969 E-01	-0.4178643 E-05	-0.2550827 E-08	0.1279568 E-11
54	C ₂ H ₇ N	Ethylamine	14.61884	0.2301337 E-01	0.5042536 E-05	-0.1298503 E-07	0.470142 E-11
55	C ₃ H ₃ N	Acrylonitrile	13.77061	0.1984967 E-01	-0.8937427 E-05	0.193298 E-08	-0.2797383 E-13
56	C ₃ H ₄	Methylacetylene	13.17061	0.1775777 E-01	-0.7296423 E-05	0.1921976 E-08	-0.242782 E-12
57	C ₃ H ₄	Propadiene	12.6505	0.1928835 E-01	-0.6452827 E-05	-0.1674653 E-08	0.1813724 E-11
58	C ₃ H ₆	Propylene	13.63267	0.2108998E-01	0.249643E-05	0.1146863E-07	0.5247386 E-11
59	C ₃ H ₆ O	Acetone	16.13621	0.2340064 E-01	-0.1479392 E-05	-0.4143552 E-08	0.1323724 E-11
60	C ₃ H ₆ O ₂	Ethyl formate	20.94868	0.273312 E-01	-0.146055 E-05	-0.8906131 E-08	0.3692011 E-11
61	C ₃ H ₆ O ₂	Methyl acetate	21.04651	0.2395065 E-01	0.154732 E-05	-0.9770737 E-08	0.3676818 E-11
62	C ₃ H ₆ O ₂	Propionic acid	20.17881	0.2781613 E-01	-0.2700043 E-05	-0.7554358 E-08	0.323127 E-11
63	C ₃ H ₇ NO	Dimethylformamide	20.8472	0.3068996 E-01	-0.4238415 E-05	-0.6471348 E-08	0.287579 E-11
64	C ₃ H ₈	Propane	15.58683	0.2504953 E-01	0.1404258 E-04	-0.3526261 E-07	0.1864467 E-10
65	C ₃ H ₈ O	Isopropanol	18.703	0.3374798 E-01	-0.8097677 E-05	-0.4324869 E-08	0.2586334 E-11
66	C ₃ H ₈ O	n-Propanol	18.71145	0.2788756 E-01	0.8585266 E-06	-0.9785116 E-08	0.3679178 E-11

Part II

Number	Empirical Formula	Name	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅
Organic Chemicals							
67	C ₃ H ₉ N	Trimethylamine	19.09535	0.3856445 E-01	-0.136958 E-04	0.2035707 E-08	-0.1282133 E-13
68	C ₄ H ₄	Vinylacetylene	5.297392	0.171349 E-01	-0.11423 E-05	-0.3775036 E-08	0.1440128 E-11
69	C ₄ H ₄ S	Thiophene	5.520119	0.3754804 E-01	-0.2222312 E-04	0.6967842 E-08	-0.709689 E-12
70	C ₄ H ₅ N	Methacrylonitrile	19.23704	0.2314625 E-01	-0.2793527 E-05	-0.45453 E-08	0.1908719 E-11
71	C ₄ H ₆	Dimethylacetylene	16.76823	0.2517102 E-01	-0.8454522 E-05	0.2326427 E-08	-0.4824367 E-12
72	C ₄ H ₆	Ethylacetylene	17.38834	0.2778978 E-01	-0.116434 E-04	0.3040097 E-08	-0.3742009 E-12
73	C ₄ H ₆	1,2-Butadiene	17.15982	0.26213 E-01	-0.5937819 E-05	-0.2361299 E-08	0.1011447 E-11
74	C ₄ H ₆	1,3-Butadiene	16.47292	0.3392027 E-01	-0.1392511 E-04	-0.4786315 E-08	0.5611304 E-11
75	C ₄ H ₈	1-Butene	17.96141	0.3297022 E-01	-0.605339E-05	-0.569809E-08	0.2826942 E-11
76	C ₄ H ₈	Cis-2-Butene	16.54537	0.2966393 E-01	0.5471621 E-05	-0.1883127 E-07	0.8437562 E-11
77	C ₄ H ₈	Isobutene	18.93086	0.3101008 E-01	-0.4930015 E-05	-0.6036954 E-08	0.3200886 E-11
78	C ₄ H ₈	Trans-2-Butane	18.84267	0.2761239 E-01	0.3097447 E-05	-0.1337556 E-07	0.5631517 E-11
79	C ₄ H ₈ O	Isobutyraldehyde	20.73125	0.3264207 E-01	-0.3152369 E-06	-0.1104319 E-07	0.4330567 E-11
80	C ₄ H ₈ O	Methyl ethyl ketone	22.30644	0.2959044 E-01	-0.3506391 E-06	-0.8248579 E-08	0.3038054 E-11
81	C ₄ H ₈ O ₂	n-Butyric acid	23.98619	0.3727046 E-01	-0.3625636 E-05	-0.1019473 E-07	0.4365542 E-11
82	C ₄ H ₈ O ₂	Ethyl acetate	24.90819	0.3329732 E-01	0.7316711 E-06	-0.1247032 E-07	0.4824152E-11
83	C ₄ H ₈ O ₂	Methyl propionate	24.90819	0.3329732 E-01	0.7316711 E-06	-0.1247032 E-07	0.4824152 E-11
84	C ₄ H ₈ O ₂	Propyl formate	24.90819	0.3329732 E-01	0.7316711 E-06	-0.1247032 E-07	0.4824152 E-11
85	C ₄ H ₉ NO	Dimethyl acetamide	24.63017	0.4015238 E-01	-0.5139106 E-05	-0.913829 E-08	0.4017948 E-11
86	C ₄ H ₁₀	Isobutane	20.41853	0.3462286 E-01	0.1415619 E-04	-0.4266126E-07	0.3296993 E-10
87	C ₄ H ₁₀	n-Butane	20.79783	0.3143287 E-01	0.1928511 E-04	-0.4588652 E-07	0.2380972 E-10
88	C ₄ H ₁₀ O	Isobutanol	17.908	0.3086043 E-01	0.2615677 E-04	-0.3727992 E-07	0.1247926 E-10
89	C ₄ H ₁₀ O	n-Butanol	22.86768	0.4421951 E-01	-0.1487031 E-04	-0.4488266 E-09	0.139999 E-11
90	C ₄ H ₁₀ O	t-Butyl alcohol	23.80689	0.4376233 E-01	-0.1467142 E-04	-0.8051186 E-09	0.1541653 E-11
91	C ₄ H ₁₀ O	Diethyl ether	23.43495	0.3456899 E-01	0.6985382 E-05	-0.1902477 E-07	0.6906888 E-11
92	C ₄ H ₁₀ O ₃	Diethylene glycol	26.63047	0.4356575 E-01	0.6483778 E-05	-0.2359434 E-07	0.8904581 E-11
93	C ₅ H ₄ O ₂	Furfural	20.38649	0.3085299 E-01	-0.4999507 E-05	-0.7442546 E-08	0.3466989 E-11
94	C ₅ H ₁₀	2-Methyl-1-butene	23.51432	0.416841 E-01	-0.6797959 E-05	-0.1216479 E-07	0.7590583 E-11
95	C ₅ H ₁₀	2-Methyl-2-butene	22.06308	0.3932158 E-01	-0.3039504 E-05	-0.1105363 E-07	0.5111218 E-11
96	C ₅ H ₁₀	3-Methyl-1-butene	24.98621	0.4546002 E-01	-0.2709002 E-04	0.1719799 E-07	-0.6539064 E-11
97	C ₅ H ₁₀	Cyclopentane	16.21714	0.4643893 E-01	0.5947453 E-05	-0.2901838 E-07	0.1338546 E-10
98	C ₅ H ₁₀	1-Pentene	23.09041	0.4065747 E-01	-0.7117898 E-05	-0.5289083 E-08	0.1708107 E-11
99	C ₅ H ₁₀	Cis-2-Pentene	21.12406	0.4169782 E-01	-0.3053253 E-05	-0.1195115 E-07	0.4474386 E-11

Part II

Number	Empirical Formula	Name	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅
Organic Chemicals							
100	C ₅ H ₁₀	Trans-2-Pentene	22.95406	0.3853433 E-01	-0.1306019 E-05	-0.1368152 E-07	0.6325655 E-11
101	C ₅ H ₁₀ O	Diethyl ketone	24.50798	0.4231144 E-01	-0.117334 E-05	-0.1375883 E-07	0.5488549 E-11
102	C ₅ H ₁₀ O ₂	n-Propyl acetate	28.73052	0.4269 E-01	-0.9989801 E-07	-0.1517592 E-07	0.5975479 E-11
103	C ₅ H ₁₂	Isopentane	24.94637	0.4446726 E-01	0.7054883 E-05	-0.3364167 E-07	0.1774503 E-10
104	C ₅ H ₁₂	n-Pentane	25.64627	0.389176 E-01	0.2397294 E-04	-0.5842615 E-07	0.3079918 E-10
105	C ₅ H ₁₂	Neopentane	25.46761	0.461177 E-01	0.1147232 E-04	-0.4605143 E-04	0.2506343 E-10
106	C ₆ H ₃ Cl ₃	1,2,4-Trichlorobenzene	25.75694	0.4831912 E-01	-0.3089766 E-04	0.1057239 E-07	-0.1390436 E-11
107	C ₆ H ₄ Cl ₂	m-Dichlorobenzene	22.87009	0.4456102 E-01	-0.2128264 E-04	0.2990747 E-08	0.7361333 E-12
108	C ₆ H ₄ Cl ₂	o-Dichlorobenzene	22.87009	0.4456102 E-01	-0.2128264 E-04	0.2990787 E-08	0.7361333 E-12
109	C ₆ H ₄ Cl ₂	p-Dichlorobenzene	22.87009	0.4456102 E-01	-0.2128264 E-04	0.2990787 E-08	0.7361333 E-12
110	C ₆ H ₅ Br	Bromobenzene	20.36329	0.4011145 E-01	-0.1108768 E-04	-0.4813553 E-08	0.2980795 E-11
111	C ₆ H ₅ Cl	Chlorobenzene	19.98323	0.4080291 E-01	-0.1166762 E-04	-0.4590812 E-08	0.2862703 E-11
112	C ₆ H ₅ I	Iodobenzene	20.57765	0.3968462 E-01	-0.1067708 E-04	-0.50094 E-08	0.2927215 E-11
113	C ₆ H ₆	Benzene	16.39282	0.4020369 E-01	0.6925399 E-05	-0.4114202 E-07	0.2398098 E-10
114	C ₆ H ₆ O	Phenol	19.91816	0.4992518 E-01	-0.2451622 E-04	0.460471 E-08	0.4113815 E-12
115	C ₆ H ₇ N	Aniline	20.11747	0.4538924 E-01	-0.5743054 E-05	-0.1216273 E-07	0.5366204 E-11
116	C ₆ H ₁₂	Cychohexane	21.00016	0.5627391 E-01	0.1129438 E-04	-0.3606168 E-07	0.1482606 E-10
117	C ₆ H ₁₂	Methylcyclopentane	22.02735	0.5465972 E-01	0.5935187 E-05	-0.3442294 E-07	0.164543 E-10
118	C ₆ H ₁₂	1-Hexane	27.87277	0.4926029 E-01	-0.7512748 E-05	-0.9298869 E-08	0.3952236 E-11
119	C ₆ H ₁₄	2,2-Dimethylbutane	29.64918	0.550671 E-01	0.1806208 E-05	-0.2478314 E-07	0.9570332 E-11
120	C ₆ H ₁₄	2,3-Dimethylbutane	29.27018	0.5595826 E-01	-0.2028283 E-05	-0.2494276 E-07	0.1323425 E-10
121	C ₆ H ₁₄	n-Hexane	30.17847	0.5199263 E-01	0.3048799 E-05	-0.2763996 E-07	0.1346731 E-10
122	C ₆ H ₁₄	2-Methylpentane	30.30218	0.5351181 E-01	0.5716877 E-05	-0.3870868 E-07	0.2132741 E-10
123	C ₆ H ₁₄	3-Methylpentane	30.17174	0.5189874 E-01	0.366338 E-05	-0.2860809 E-07	0.1391842 E-10
124	C ₆ H ₁₄ O ₄	Triethylene glycol	38.88318	0.6252653 E-01	0.5449502 E-05	-0.2983416 E-07	0.1149462 E-10
125	C ₇ H ₈	Toluene	21.17722	0.4639546 E-01	0.9961368 E-05	-0.4628264 E-07	0.2585787 E-10
126	C ₇ H ₈ O	o-Cresol	24.15791	0.5181666 E-01	-0.7496517 E-05	-0.1323952 E-07	0.5990957 E-11
127	C ₇ H ₁₄	Methylcyclohexane	27.06952	0.6729289 E-01	0.5750553 E-05	-0.3885885 E-07	0.1837708 E-10
128	C ₇ H ₁₄	Ethylcyclopentane	24.63008	0.9883192 E-01	-0.1351091 E-03	0.1674966 E-06	-0.8292246 E-10
129	C ₇ H ₁₄	1-Heptane	32.68419	0.5769426 E-01	-0.724699 E-05	-0.1448889 E-07	0.6897952 E-11
130	C ₇ H ₁₆	n-Heptane	34.96845	0.608752 E-01	0.1213345 E-05	-0.293693 E-07	0.1454746 E-10
131	C ₈ H ₈	Styrene	24.82866	0.5843 E-01	-0.25693 E-04	0.3432486 E-08	0.8297016 E-12
132	C ₈ H ₁₀	Ethylbenzene	26.37827	0.5326271 E-01	0.1239678 E-04	-0.5839197 E-07	0.3331962 E-10

Part II

Number	Empirical Formula	Name	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅
Organic Chemicals							
133	C ₈ H ₁₀	m-Xylene	26.42788	0.5188146 E-01	0.122123 E-04	-0.4900955 E-07	0.2628339 E-10
134	C ₈ H ₁₀	o-Xylene	27.89247	0.5103585 E-01	0.5908631 E-05	-0.3659655 E-07	0.1949676 E-10
135	C ₈ H ₁₀	p-Xylene	26.39862	0.4982215E-01	0.1658367 E-04	-0.5289838 E-07	0.276508 E-10
136	C ₈ H ₁₆	Ethylcyclohexane	32.07366	0.7610546 E-01	-0.7343807 E-05	-0.4881198 E-07	0.2469959 E-10
137	C ₈ H ₁₆	n-Propylcyclopentane	30.7991	0.8393195 E-01	0.7343807 E-05	0.9086445 E-08	-0.10736 E-11
138	C ₈ H ₁₈	n-Octane	39.77987	0.6930903 E-01	-0.3567344 E-04	-0.3456095 E-07	0.1749419 E-10
139	C ₈ H ₁₈ O ₅	Tetraethylene glycol	5093845	0.8139435 E-01	0.1479927 E-05	-0.3636293 E-07	0.141849 E-10
140	C ₉ H ₈	Indene	26.11577	0.6007207 E-01	-0.1628819 E-04	-0.7372481 E-08	0.4361004 E-11
141	C ₉ H ₁₀	Indan	27.27218	0.6712433 E-01	-0.1535148 E-04	-0.1126863 E-07	0.5886033 E-11
142	C ₉ H ₁₀	Methylstyrene	40.40845	0.5092828 E-01	0.1423367 E-04	-0.204508 E-07	0.9784106 E-11
143	C ₉ H ₁₂	1-Ethyl-2-methylbenzene	32.7457	0.6787234 E-01	-0.2692206 E-04	0.5325566E-08	-0.3666534E-12
144	C ₉ H ₁₂	n-Propylbenzene	3085809	0.7397426 E-01	-0.333376 E-04	0.8236172 E-08	-0.8488248 E-12
145	C ₉ H ₁₈	n-Propylcyclohexane	36.93022	0.9596314 E-01	-0.3752096 E-04	0.6920047 E-08	-0.3686077 E-11
146	C ₉ H ₂₀	n-Nonane	44.6198	0.7738344 E-01	0.2963375 E-05	-0.4134716 E-07	0.2114216 E-10
147	C ₁₀ H ₈	Naphthalene	26.38315	0.7107626 E-01	-0.303242 E-04	0.2599732 E-08	0.1536979 E-11
148	C ₁₀ H ₁₀	1-Methylindene	29.92083	0.696464 E-01	-0.1746832 E-04	-0.9807097 E-08	0.5436545 E-11
149	C ₁₀ H ₁₀	2-Methylindene	29.5297	0.7131178 E-01	-0.181527 E-04	-0.990292 E-08	0.5540522 E-11
150	C ₁₀ H ₁₂	Dicyclopentadiene	35.24185	0.8077631 E-01	-0.3064237 E-04	-0.1037675 E-08	0.317173 E-11
151	C ₁₀ H ₁₄	n-Butylbenzene	35.57803	0.8354658 E-01	-0.3733832 E-04	0.919402 E-08	-0.951656 E-12
152	C ₁₀ H ₁₄	1,2-Dimethyl-3-ethylbenzene	32.18688	0.7623887 E-01	-0.7317236 E-05	-0.2192313 E-07	0.9362406E-11
153	C ₁₀ H ₂₀	n-Butylcyclohexane	41.74714	0.1046007 E-01	-0.3964926 E-04	0.6648178 E-08	-0.214681 E-12
154	C ₁₀ H ₂₂	n-Decane	49.42138	0.8602711 E-01	0.2049705 E-05	-0.4415409 E-07	0.2256651 E-10
155	C ₁₁ H ₁₀	1-Methylnaphthalene	29.3571	0.7475587 E-01	-0.1560299 E-04	-0.1428024 E-07	0.7089941 E-11
156	C ₁₁ H ₁₀	2-Methylnaphthalene	29.3571	0.7475587 E-01	-0.1560299 E-04	-0.1428024 E-07	0.7089941 E-11
157	C ₁₁ H ₂₄	n-Undecane	54.25211	0.9427374 E-01	0.2727295 E-05	-0.4957262 E-07	0.2544979 E-10
158	C ₁₂ H ₈	Acenaphthalene	30.48077	0.7758508 E-01	-0.2664829 E-04	-0.5063562 E-08	0.4429521 E-11
159	C ₁₂ H ₁₀	Diphenyl	32.02568	0.9116691 E-01	-0.4408667 E-04	0.7505404 E-08	0.9059193 E-12
160	C ₁₂ H ₁₂	2,7-Dimethylnaphthalene	33.16177	0.8467461 E-01	-0.1714886 E-04	-0.1655051 E-07	0.8138765 E-11
161	C ₁₂ H ₁₄	1,2,3-Trimethylindene	37.49874	0.8872509 E-01	-0.1961391 E-04	-0.1486368 E-07	0.7642588 E-11
162	C ₁₂ H ₂₆	n-Dodecane	59.0528	0.1029143	0.2243202 E-05	-0.5378563 E-07	0.279613 E-10
163	C ₁₃ H ₁₀	Fluorene	34.75668	0.8111078 E-01	-0.2232686 E-04	-0.1036036 E-07	0.6152866 E-11
164	C ₁₃ H ₁₄	1-Methylethylnaphthalene	36.92984	0.9421013 E-01	-0.1816491 E-04	-0.1913785 E-07	0.9260544 E-11
165	C ₁₃ H ₁₄	2,3,5- Trimethylnaphthalene	36.96391	0.9458171 E-01	-0.1866141 E-04	-0.188505 E-07	0.9196502 E-11

Part II

Number	Empirical Formula	Name	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅
Organic Chemicals							
166	C ₁₃ H ₂₈	n-Tridecane	63.85792	0.111595	0.1116408 E-05	-0.5633991 E-07	0.2630431 E-10
167	C ₁₄ H ₁₀	Phenanthrene	34.43893	0.9086123 E-01	-0.2523548 E-04	-0.1184692 E-07	0.7013306 E-11
168	C ₁₄ H ₃₀	n-Tetradecane	68.69802	0.1196599	0.269646 E-05	-0.6341006 E-07	0.3319885 E-10
169	C ₁₅ H ₁₂	1-Phenylindene	39.22844	0.101567	-0.2937448 E-04	-0.1146747 E-07	0.7190597 E-11
170	C ₁₅ H ₁₄	2-Ethylfluorene	40.82861	0.1076498	-0.286231 E-04	-0.1479421 E-07	0.8512086 E-11
171	C ₁₅ H ₃₂	n-Pentadecane	73.51018	0.1281686	0.2315556 E-05	-0.6703845 E-07	0.3505542 E-10
172	C ₁₆ H ₁₀	Fluoranthene	40.95336	0.1036185	-0.4006217 E-04	-0.2144235 E-08	0.4437308 E-11
173	C ₁₆ H ₁₀	Pyrene	38.96862	0.1053988	-0.3875499 E-04	-0.4808038 E-08	0.5453756 E-11
174	C ₁₆ H ₁₂	1-Phenyl-naphthalene	37.71548	0.1059667	-0.2424246 E-04	-0.189117 E-07	0.9723825 E-11
175	C ₁₆ H ₃₄	n-Hexadecane	78.32123	0.1367191	0.1674373 E-05	-0.7030701 E-07	0.3676587 E-10
176	C ₁₈ H ₁₂	Chrysene	42.55082	0.1204639	-0.3831014 E-04	-0.1145987 E-07	0.8077914 E-11

Part III

Number	Empirical Formula	Name	A ₁	A ₂	A ₃
Inorganic Chemicals					
1	Ar	Argon	5.42578	1499.0	463.9195
2	Br ₂	Bromine	5.53786	5563.552	409.318
3	CCl ₄	Carbon tetrachloride	6.199663	6110.034	441.2806
4	CO	Carbon monoxide	5.712089	1385.883	462.6165
5	COCl ₂	Phosgene	5.870425	4545.777	412.5742
6	CO ₂	Carbon dioxide	6.470232	3521.259	455.869
7	CS ₂	Carbon disulfide	6.263774	6389.82	486.9933
8	C ₂ OCl ₄	Trichloroacetyl chloride	5.752994	5751.971	363.6816
9	ClH	Hydrogen chloride	5.688540	3244.028	442.2680
10	Cl ₂	Chlorine	5.186832	3699.272	417.709
11	HI	Hydrogen iodide	5.362089	3840.331	424.3549
12	H ₂	Hydrogen	5.602657	418.1773	474.214
13	H ₂ O	Water	6.53247	7173.79	389.4747
14	H ₂ S	Hydrogen Sulfide	5.445487	3535.867	432.235
15	H ₃ N	Ammonia	6.152480	4253.826	418.9528
16	Ne	Neon	5.560555	476.5174	464.7596
17	NO	Nitric oxide	8.142411	2374.39	434.2132
18	NO ₂	Nitrogen dioxide	12.76017	11907.65	616.0504
19	N ₂	Nitrogen	5.316656	1184.797	454.5328
20	N ₂ O	Nitrous oxide	5.353828	2785.606	416.6338
21	O ₂	Oxygen	5.15038	1404.466	452.1336
22	O ₂ S	Sulfur dioxide	5.966623	4293.005	401.685
23	O ₃ S	Sulfur trioxide	4.828507	3199.785	234.315
Organic Chemicals					
24	CHCl ₃	Chloroform	5.894057	5289.385	393.075
25	CHN	Hydrogen cyanide	6.97745	5672.753	443.761
26	CH ₂ O	Formaldehyde	5.525307	3890.399	402.114
27	CH ₃ Cl	Methyl chloride	5.504941	3906.036	414.1839
28	CH ₃ I	Methyl Iodide	5.235173	4840.0	399.9808
29	CH ₄	Methane	5.14135	1742.638	452.974
30	CH ₄ O	Methanol	7.513334	6468.101	396.2652
31	CH ₅ N	Methylamine	5.973955	4216.777	389.9955
32	C ₂ HCl ₃	Trichloroethylene	5.814331	5636.178	391.6901
33	C ₂ HCl ₃ O	Dichloroacetyl chloride	6.437229	6108.109	369.1736

Part III

Number	Empirical Formula	Name	A ₁	A ₂	A ₃
Organic Chemicals					
34	C ₂ H ₂	Acetylene	6.109766	3305.991	444.4562
35	C ₂ H ₂ Cl ₂ O	Chloroacetyl chloride	5.875686	5522.555	341.0137
36	C ₂ H ₃ Cl	Vinyl chloride	5.033325	3650.037	399.3080
37	C ₂ H ₃ ClO	Acetyl chloride	5.090718	4413.716	360.1358
38	C ₂ H ₃ Cl ₃	1,1,2-Trichloroethane	6.877873	6958.502	411.7562
39	C ₂ H ₃ N	Acetonitrile	6.393303	6059.675	411.6977
40	C ₂ H ₄	Ethylene	5.27791	2568.994	433.9156
41	C ₂ H ₄ Cl ₂	1,1-Dichloroethane	5.34928	4694.056	371.3705
42	C ₂ H ₄ Cl ₂	1,2-Dichloroethane	5.768529	5524.353	383.4458
43	C ₂ H ₄	Acetaldehyde	6.49856	5121.453	419.9494
44	C ₂ H ₄ O	Ethylene oxide	5.630604	4460.616	399.9853
45	C ₂ H ₄ O ₂	Acetic acid	7.203594	7376.157	410.1814
46	C ₂ H ₄ O ₂	Methyl formate	6.023216	4906.897	396.03
47	C ₂ H ₅ Cl	Ethyl chloride	5.696013	4424.781	404.411
48	C ₂ H ₆	Ethane	5.383894	2847.921	434.898
49	C ₂ H ₆ O	Dimethyl ether	5.77524	3918.305	415.2581
50	C ₂ H ₆ O	Ethanol	7.43437	6162.36	359.3826
51	C ₂ H ₆ O ₂	Ethylene glycol	7.258288	8088.817	311.8854
52	C ₂ H ₆ S	Dimethyl sulfide	5.610757	4769.088	396.909
53	C ₂ H ₆ S	Ethyl mercaptan	5.631324	4709.722	394.2954
54	C ₂ H ₇ N	Ethylamine	5.841118	4333.688	377.3129
55	C ₃ H ₃ N	Acrylonitrile	6.038654	5459.573	396.7914
56	C ₃ H ₄	Methylacetylene	5.179851	3470.383	387.1001
57	C ₃ H ₄	Propadiene	2.443058	1832.002	317.5695
58	C ₃ H ₆	Propylene	5.44467	3375.447	418.4319
59	C ₃ H ₆ O	Acetone	6.244412	5356.715	397.5290
60	C ₃ H ₆ O ₂	Ethyl formate	5.94826	4965.502	377.2637
61	C ₃ H ₆ O ₂	Methyl acetate	6.253272	5251.863	385.1996
62	C ₃ H ₆ O ₂	Propionic acid	6.838962	6770.055	340.8683
63	C ₃ H ₇ NO	Dimethylformamide	5.298043	5665.834	313.254
64	C ₃ H ₈	Propane	5.353418	3371.084	414.488
65	C ₃ H ₈ O	Isopropanol	7.180215	5596.813	327.2873
66	C ₃ H ₈ O	n-Propanol	6.683944	5414.961	303.9864

Part III

Number	Empirical Formula	Name	A ₁	A ₂	A ₃
Organic Chemicals					
67	C ₃ H ₉ N	Trimethylamine	5.552747	4030.388	398.7676
68	C ₄ H ₄	Vinylacetylene	5.297392	3879.835	381.4085
69	C ₄ H ₄ S	Thiophene	5.520119	5164.732	366.4536
70	C ₄ H ₅ N	Methacrylonitrile	5.824528	5313.429	366.5642
71	C ₄ H ₆	Dimethylacetylene	5.637212	4482.741	388.6972
72	C ₄ H ₆	Ethylacetylene	5.606554	4103.138	387.8234
73	C ₄ H ₆	1,2-Butadiene	6.184923	4644.865	419.7079
74	C ₄ H ₆	1,3-Butadiene	5.69864	4105.731	409.9979
75	C ₄ H ₈	1-Butene	5.58272	3941.014	404.741
76	C ₄ H ₈	Cis-2-Butene	5.456285	3977.563	394.4956
77	C ₄ H ₈	Isobutene	5.616762	3953.678	405.9166
78	C ₄ H ₈	Trans-2-Butane	5.487073	3984.406	400.0703
79	C ₄ H ₈ O	Isobutyraldehyde	6.508438	3396.492	379.294
80	C ₄ H ₈ O	Methyl ethyl ketone	5.885353	5097.27	356.3804
81	C ₄ H ₈ O ₂	n-Butyric acid	7.444973	7372.927	330.4845
82	C ₄ H ₈ O ₂	Ethyl acetate	6.3307	5440.049	373.48
83	C ₄ H ₈ O ₂	Methyl propionate	6.280916	5462.483	372.7137
84	C ₄ H ₈ O ₂	Propyl formate	5.956599	5225.881	363.3314
85	C ₄ H ₉ NO	Dimethyl acetamide	4.812879	5194.59	279.0869
86	C ₄ H ₁₀	Isobutane	5.611805	3870.419	409.949
87	C ₄ H ₁₀	n-Butane	5.741624	4126.385	409.5179
88	C ₄ H ₁₀ O	Isobutanol	7.134107	5843.713	310.811
89	C ₄ H ₁₀ O	n-Butanol	6.303186	5225.324	274.4291
90	C ₄ H ₁₀ O	t-Butyl alcohol	6.180797	4482.792	274.7841
91	C ₄ H ₁₀ O	Diethyl ether	5.976844	4614.723	388.8028
92	C ₄ H ₁₀ O ₃	Diethylene glycol	9.238843	10861.34	363.888
93	C ₅ H ₄ O ₂	Furfural	8.278279	9658.592	469.7835
94	C ₅ H ₁₀	2-Methyl-1-butene	5.655016	4383.237	387.8014
95	C ₅ H ₁₀	2-Methyl-2-butene	5.701977	4531.679	386.7617
96	C ₅ H ₁₀	3-Methyl-1-butene	5.554918	4210.159	394.7537
97	C ₅ H ₁₀	Cyclopentane	5.429031	4662.062	384.6612
98	C ₅ H ₁₀	1-Pentene	5.452355	4336.393	388.5999
99	C ₅ H ₁₀	Cis-2-Pentene	5.625241	4412.304	362.3599

Part III

Number	Empirical Formula	Name	A ₁	A ₂	A ₃
Organic Chemicals					
100	C ₅ H ₁₀	Trans-2-Pentene	5.722727	4491.719	387.2968
101	C ₅ H ₁₀ O	Diethyl ketone	6.159896	5631.04	361.7281
102	C ₅ H ₁₀ O ₂	n-Propyl acetate	6.302585	5596.313	355.8455
103	C ₅ H ₁₂	Isopentane	5.49978	4221.154	387.287
104	C ₅ H ₁₂	n-Pentane	5.853654	4598.287	394.4148
105	C ₅ H ₁₂	Neopentane	5.692011	4148.025	404.42
106	C ₆ H ₃ Cl ₃	1,2,4-Trichlorobenzene	6.592514	8014.486	364.6567
107	C ₆ H ₄ Cl ₂	m-Dichlorobenzene	11.37776	15451.49	682.6164
108	C ₆ H ₄ Cl ₂	o-Dichlorobenzene	5.981208	6798.548	345.1776
109	C ₆ H ₄ Cl ₂	p-Dichlorobenzene	6.813621	7773.248	396.0557
110	C ₆ H ₅ Br	Bromobenzene	5.881747	6571.377	365.2812
111	C ₆ H ₅ Cl	Chlorobenzene	5.88808	6222.905	372.2756
112	C ₆ H ₅ I	Iodobenzene	5.72827	6854.36	348.1382
113	C ₆ H ₆	Benzene	5.658375	5307.813	379.456
114	C ₆ H ₆ O	Phenol	6.555719	7250.359	321.6074
115	C ₆ H ₇ N	Aniline	6.44519	7386.331	346.6331
116	C ₆ H ₁₂	Cyclohexane	5.473055	5030.253	371.2755
117	C ₆ H ₁₂	Methylcyclopentane	5.567563	4936.44	375.9433
118	C ₆ H ₁₂	1-Hexane	5.711574	4783.217	374.7552
119	C ₆ H ₁₄	2,2-Dimethylbutane	5.50245	4486.167	381.1012
120	C ₆ H ₁₄	2,3-Dimethylbutane	5.61351	4672.79	380.1172
121	C ₆ H ₁₄	n-Hexane	6.039243	5085.758	382.794
122	C ₆ H ₁₄	2-Methylpentane	5.7088	4700.639	375.5984
123	C ₆ H ₁₄	3-Methylpentane	5.7023	4700.526	376.5611
124	C ₆ H ₁₄ O ₄	Triethylene glycol	9.707385	11860.26	356.928
125	C ₇ H ₈	Toluene	5.944251	5836.287	374.745
126	C ₇ H ₈ O	o-Cresol	5.749559	6394.925	286.9147
127	C ₇ H ₁₄	Methylcyclohexane	5.608872	5338.374	370.0705
128	C ₇ H ₁₄	Ethylcyclopentane	5.698096	5369.766	364.7743
129	C ₇ H ₁₄	1-Heptane	5.922457	5212.626	362.5801
130	C ₇ H ₁₆	n-Heptane	5.98627	5278.902	359.5259
131	C ₈ H ₈	Styrene	6.071326	6329.575	358.5947
132	C ₈ H ₁₀	Ethylbenzene	5.747492	5862.905	349.8527

Part III

Number	Empirical Formula	Name	A ₁	A ₂	A ₃
Organic Chemicals					
133	C ₈ H ₁₀	m-Xylene	5.949452	6049.457	354.6467
134	C ₈ H ₁₀	o-Xylene	5.922098	6141.641	354.0417
135	C ₈ H ₁₀	p-Xylene	5.94371	6033.046	355.99
136	C ₈ H ₁₆	Ethylcyclohexane	5.769319	5751.059	355.93
137	C ₈ H ₁₆	n-Propylcyclopentane	5.957854	5754.086	352.481
138	C ₈ H ₁₈	n-Octane	6.4141	5947.491	360.26
139	C ₈ H ₁₈ O ₅	Tetraethylene glycol	10.89268	14787.51	439.2803
140	C ₉ H ₈	Indene	6.176081	7190.945	371.053
141	C ₉ H ₁₀	Indan	6.049535	6821.739	357.368
142	C ₉ H ₁₀	Methylstyrene	6.087191	6638.097	352.369
143	C ₉ H ₁₂	1-Ethyl-2-methylbenzene	6.702647	6541.084	351.7732
144	C ₉ H ₁₂	n-Propylbenzene	5.919976	6180.232	340.82
145	C ₉ H ₁₈	n-Propylcyclohexane	6.022487	6079.604	343.4018
146	C ₉ H ₂₀	n-Nonane	6.22189	6662.655	330.96
147	C ₁₀ H ₈	Naphthalene	5.464939	7090.598	305.1725
148	C ₁₀ H ₁₀	1-Methylindene	6.139705	7223.491	343.832
149	C ₁₀ H ₁₀	2-Methylindene	6.165742	6479.445	340.573
150	C ₁₀ H ₁₂	Dicyclopentadiene	5.97896	6534.868	353.37
151	C ₁₀ H ₁₄	n-Butylbenzene	6.089988	6534.868	330.3357
152	C ₁₀ H ₁₄	1,2-Dimethyl-3-ethylbenzene	6.180938	6838.277	330.4982
153	C ₁₀ H ₂₀	n-Butylcyclohexane	6.094088	6369.972	329.0528
154	C ₁₀ H ₂₂	n-Decane	6.33557	6213.998	317.6512
155	C ₁₁ H ₁₀	1-Methylnaphthalene	6.080512	7676.997	323.8246
156	C ₁₁ H ₁₀	2-Methylnaphthalene	6.101162	7630.143	325.2701
157	C ₁₁ H ₂₄	n-Undecane	7.21247	7475.258	350.7821
158	C ₁₂ H ₈	Acenaphthalene	6.216864	8047.648	313.565
159	C ₁₂ H ₁₀	Diphenyl	6.194778	7947.647	317.1246
160	C ₁₂ H ₁₂	2,7-Dimethylnaphthalene	6.707037	8521.498	331.2805
161	C ₁₂ H ₁₄	1,2,3-Trimethylindene	6.452743	7497.763	321.886
162	C ₁₂ H ₂₆	n-Dodecane	6.561135	6739.22	292.574
163	C ₁₃ H ₁₀	Fluorene	8.197664	11632.66	435.9648
164	C ₁₃ H ₁₄	1-Methylethylnaphthalene	6.678618	8234.079	295.939
165	C ₁₃ H ₁₄	2,3,5-Trimethylnaphthalene	6.667748	8366.407	292.104

Part III

Number	Empirical Formula	Name	A ₁	A ₂	A ₃
Organic Chemicals					
166	C ₁₃ H ₂₈	n-Tridecane	6.65466	6995.694	281.4988
167	C ₁₄ H ₁₀	Phenanthrene	5.543959	7914.989	244.9414
168	C ₁₄ H ₃₀	n-Tetradecane	6.75784	7203.471	269.269
169	C ₁₅ H ₁₂	1-Phenylindene	6.502465	8771.184	284.878
170	C ₁₅ H ₁₄	2-Ethylfluorene	6.695303	8621.0	283.702
171	C ₁₅ H ₃₂	n-Pentadecane	6.82225	7400.305	257.5534
172	C ₁₆ H ₁₀	Fluoranthene	6.571647	9789.787	257.606
173	C ₁₆ H ₁₀	Pyrene	6.603641	9365.547	267.09
174	C ₁₆ H ₁₂	1-Phenylnaphthalene	7.078733	9631.87	312.9423
175	C ₁₆ H ₃₄	n-Hexadecane	6.92955	7569.57	245.2032
176	C ₁₈ H ₁₂	Chrysene	6.810698	10647.46	229.481

ضمیمه B

کل معادلات این بخش برای همه اجزاء نوشته می‌شوند و برای سادگی، اندیس اجزاء نوشته نشده است. فهرست متغیرها مانند فصل هفتم می‌باشد.

موازنه جرم برای اجزاء حول مرحله $n+1$ به صورت زیر می‌باشد.

$$L_{n+2} x_{n+2} + V_n y_n = L_{n+1} x_{n+1} + V_{n+1} y_{n+1}$$

با استفاده از رابطه تعادل می‌توان $y_{n+1} = k_{n+1} x_{n+1}$ ، $y_n = k_n x_n$ را نوشت که رابطه اخیر به صورت زیر خواهد شد.

$$L_{n+2} x_{n+2} + V_n k_n x_n = L_{n+1} x_{n+1} + V_{n+1} k_{n+1} x_{n+1}$$

رابطه زیر با مرتب کردن رابطه اخیر بدست می‌آید.

$$x_{n+2} - \left(\frac{k_{n+1} V_{n+1}}{L_{n+2}} + \frac{L_{n+1}}{L_{n+2}} \right) x_{n+1} + \frac{k_n V_n}{L_{n+2}} x_n = 0$$

از آنجا که مقدار k و دبی مایع و بخار در هر قسمت از برج ثابت است ضرایب معادله اخیر نیز ثابت خواهد بود و معادله اجزاء محدود¹ را می‌توان بر حسب اپراتورها به صورت زیر مرتب نمود.

$$\left[E^2 - \left(\frac{kV}{L} + 1 \right) E + \frac{kV}{L} \right] x_n = 0$$

یا

$$\left(E - \frac{kV}{L} \right) (E - 1) x_n = 0$$

اپراتور بالا دارای دو ریشه خواهد بود.

$$S_1 = \frac{kV}{L}, \quad S_2 = 1.0$$

با توجه به ریشه‌های بدست آمده حل معادله اخیر به صورت زیر خواهد بود.

$$x_n = c_1 (S_1)^n + c_2$$

n شماره سینی است که از پایین برج به سمت بالا شماره‌گذاری شده است. از آنجا که مقادیر k و دبی مایع و بخار در هر قسمت ثابت است می‌توان به جای S_1 مقدار S_n را جایگزین کرد.

$$x_n = c_1 (S_n)^n + c_2 \quad \text{B-1}$$

رابطه زیر با انجام عملیات مشابه برای پایین برج حاصل خواهد شد.

$$x_m = c_3 (S_m)^m + c_4 \quad \text{B-2}$$

m شماره سینی است که از پایین به سمت بالای برج شماره‌گذاری شده است. حال سعی می‌کنیم ثابت‌های c_1 و c_2 را در معادله B-1 حذف کنیم که این کار به صورت زیر انجام می‌شود. مقدار کل هر جزء در همه ورودی‌های برج با A نشان داده می‌شود و به صورت زیر می‌باشد.

$$A = F y_F + F' y_{F'} + S x_S$$

حال یک ضریب بازیابی (f) تعریف می‌شود که نشان می‌دهد چه کسری از ماده i در محصول پایین برج بازیابی شده است که به صورت زیر نوشته می‌شود.

$$D y_N = (1-f)A$$

موازنه جرم حول سیستم ۱ به صورت زیر است.

$$V_N y_N = D y_N + R D y_N = (1+R)D y_N$$

با ترکیب دو رابطه اخیر می‌توان y_N و x_N را بدست آورد.

$$y_N = \frac{(1+R)(1-f)A}{V_N} \quad \text{B-3}$$

$$x_N = \frac{(1+R)(1-f)A}{k_N V_N} \quad \text{B-4}$$

با جایگزاری x_N در معادله B-1 خواهیم داشت.

$$\frac{(1+R)(1-f)A}{k_N V_N} = c_1 (S_n)^N + c_2 \quad \text{B-5}$$

برای بدست آوردن ثابت‌های c_1 و c_2 لازم است یک معادله دیگر داشته باشیم. برای این منظور حول مرحله N موازنه جزئی می‌نویسیم.

$$y_{N-1} = \frac{L_N x_N}{V_{N-1}} + \frac{V_N y_N}{V_{N-1}} - \frac{L_{N+1} x_{N+1}}{V_{N-1}} \quad \text{B-6}$$

ضمناً موازنه حول سیستم ۲ به صورت زیر است.

$$L_{N+1} x_{N+1} = S x_S + R D y_N \quad \text{B-7}$$

میزان ورودی هر جزء توسط حلال ورودی به صورت زیر است.

$$q_S A = S x_S \quad \text{B-8}$$

q_S کسری از جزء i ورودی است که توسط حلال وارد می‌شود.

با نوشتن موازنه کلی حول سیستم ۱ خواهیم داشت.

$$D = \frac{V_N}{1+R} \quad \text{B-9}$$

با جایگزاری رابطه B-8 و B-9 در رابطه B-7 خواهیم داشت.

$$L_{N+1} x_{N+1} = q_S A + \frac{R}{1+R} V_N y_N \quad \text{B-10}$$

رابطه زیر با جایگزاری B-10، B-3 و B-4 در رابطه B-6 بدست می‌آید.

$$y_{N-1} = \frac{(1-f)A}{V^2} \left[V(1+R) + \frac{L}{k}(1+R) - R V - \frac{V q_S}{1-f} \right]$$

با استفاده از رابطه بالا و رابطه تعادل $y_{n+1} = k_{n+1} x_{n+1}$ می‌توان x_{N-1} را بدست آورد و در رابطه B-1 جایگزین کرد.

$$x_{N-1} = \frac{(1-f)A}{kV^2} \left[V(1+R) + \frac{L}{k}(1+R) - RV - \frac{Vq_s}{1-f} \right] = c_1(S_n)^{N-1} + c_2 \quad \text{B-11}$$

با حل همزمان B-5 و B-11 می‌توان ثابت‌های c_1 و c_2 را بدست آورد.

$$c_1 = \frac{(1-f)A \left[\frac{L}{k}(1+R) - RV - \frac{Vq_s}{1-f} \right]}{kV^2(S_n^{N-1} - S_n^N)}$$

$$c_2 = \frac{(1+R)(1-f)A}{kV} - c_1 S_n^N$$

با جایگزاری c_1 و c_2 در معادله B-1 رابطه زیر حاصل می‌شود.

$$x_n = \frac{(1-f)A \left[\frac{L}{k}(1+R) - RV - \frac{Vq_s}{1-f} \right]}{kV^2(S_n^N - S_n^{N-1})} (S_n^N - S_n^n) + \frac{(1+R)(1-f)A}{kV} \quad \text{B-12}$$

با استفاده از روش مشابهی می‌توان c_3 و c_4 را از معادله B-2 حذف نمود.

موازنه جرم حول سیستم ۳ به صورت زیر می‌باشد.

$$L_1 x_1 = R' B x_B + S_E x_{S_E} + B x_B$$

طبق تعریف ضریب بازیابی خواهیم داشت.

$$f A = S_E x_{S_E} + B x_B$$

با ترکیب کردن دو رابطه اخیر داریم.

$$L_1 x_1 = R' B x_B + f A$$

از طرفی ضریب بازیابی حلال در دستگاه بازیابی پایین برج (g) به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$g = \frac{S_E x_{S_E}}{L_1 x_1}$$

با ترکیب کردن روابط اخیر خواهیم داشت.

$$B x_B = \frac{1-g}{1+R'} L_1 x_1$$

با مرتب کردن رابطه اخیر بر حسب x_1 ، رابطه زیر حاصل می‌شود.

$$x_1 = \frac{(1+R') f A}{(1+g R') L_1}$$

B-13

با جایگذاری x_1 بدست آمده در رابطه B-2 و با ثابت فرض کردن دبی مایع (L')، معادله زیر را خواهیم داشت.

$$\frac{(1+R') f A}{(1+g R') L'} = c_3 S_m + c_4 \quad \text{B-14}$$

برای بدست آوردن ثابت‌های c_3 و c_4 لازم است یک معادله دیگر نیز داشته باشیم. برای این منظور حول مرحله

اول از پایین برج موازنه جرم می‌نویسیم.

$$x_2 = \frac{V_1 y_1}{L_2} + \frac{L_1 x_1}{L_2} - \frac{V_0 y_0}{L_2} \quad \text{B-15}$$

سپس با نوشتن موازنه جرم حول سیستم ۴ خواهیم داشت.

$$V_0 y_0 = F' y_{F'} + R' B x_B = q_{F'} A + \frac{R'(1-g)L_1 x_1}{1+R'} \quad \text{B-16}$$

ضمناً با استفاده از رابطه تعادل می‌توان y_1 را نیز بدست آورد.

$$y_1 = k_1 x_1 = \frac{k_1(1+R')fA}{(1+gR')L_1} \quad \text{B-17}$$

با جایگزین کردن روابطه B-13 ، B-16 و B-17 در رابطه B-15 داریم.

$$x_2 = \frac{fA}{(L')^2(1+gR')} \left[k'V'(1+R') + L'(1+R') - \frac{L'(1+gR')q_{F'}}{f} - L'R'(1-g) \right]$$

با جایگذاری مقدار x_2 در رابطه B-2 خواهیم داشت.

$$\frac{fA}{(L')^2(1+gR')} \left[k'V'(1+R) + L'(1+R') - L'R'(1-g) - \frac{L'(1+gR')q_{F'}}{f} \right] = c_3(S_m)^2 + c_4 \quad \text{B-18}$$

با حل همزمان B-14 و B-18 می‌توان ثابت‌های c_3 و c_4 را بدست آورد.

$$c_3 = \frac{fA [K'V'(1+R') - L'R'(1-g) - L'(1+gR')q_{F'}/f]}{(L')^2(1+gR')(S_m^2 - S_m)}$$

$$c_4 = \frac{(1+R')fA}{(1+gR')L'} - c_3 S_m$$

با جایگذاری مقدار c_4 در معادله B-2 رابطه زیر بدست می‌آید.

$$x_m = c_3 (S_m^m - S_m) + \frac{(1+R')fA}{(1+gR')L'}$$

سپس با جایگذاری مقدار c_3 در رابطه اخیر خواهیم داشت.

$$x_m = \frac{fA [k'V'(1+R') - L'R'(1-g) - L'(1+gR')q_{F'}/f]}{(L')^2(1+gR')(S_m - 1)} (S_m^{m-1} - 1) + \frac{(1+R')fA}{(1+gR')L'} \quad \text{B-19}$$

حال معادله B-12 برای بالای برج و معادله B-19 برای پایین برج بدست آمده است با نوشتن موازنه جرم حول

سینی خوراک می‌توان این دو معادله را با یکدیگر ترکیب نمود.

$$V_M y_M + L_{M+2} x_{M+2} + F y_F = V_{M+1} y_{M+1} + L_{M+1} x_{M+1} \quad \text{B-20}$$

از آنجا که دبی در هر قسمت از برج ثابت است و رابطه تعادل $x_{M+1} = \frac{y_{M+1}}{k_{M+1}}$ برقرار است خواهیم داشت.

$$V' y_M + L x_{M+2} + F y_F = V_{M+1} y_{M+1} + \frac{L' y_{M+1}}{k_{M+1}}$$

مقدار k در رابطه اخیر به شرایط خوراک بستگی دارد که ممکن است k یا k' جایگزین شود.

مقدار y_{M+1} را می‌توان با نوشتن موازنه جرم حول سیستم ۵ بدست آورد.

$$L_{N+1} x_{N+1} + V y_{M+1} = V y_N + L x_{M+2}$$

مقدار y_N و $L_{N+1} x_{N+1}$ به صورت زیر می‌باشند.

$$L_{N+1} x_{N+1} = q_S A + \frac{R}{R+1} V_N y_N$$

$$y_N = \frac{(1+R)(1-f)A}{V_N}$$

با جایگزاری دو رابطه اخیر در موازنه جرم خواهیم داشت.

$$y_{M+1} = \frac{(1-f)A}{V} + \frac{L}{V} x_{M+2} - \frac{q_S A}{V}$$

با جایگزاری y_{M+1} بدست آمده در رابطه B-20 و جایگزاری $q_F A$ به جای $F y_F$ داریم:

$$V' y_M + q_F A = (1-f)A - q_S A + \frac{L'(1-f)A}{k_{M+1} V} + \frac{LL' x_{M+2}}{k_{M+1} V} - \frac{L' q_S A}{k_{M+1} V}$$

با استفاده از رابطه تعادل $y_M = k'_M x_M$ خواهیم داشت.

$$\frac{k' V' f A [k' V' (1+R') - L' R' (1-g) - q_{F'} L' (1+g R')/f]}{(L')^2 (1+gR')(S_m - 1)} (S_m^{M-1} - 1)$$

$$+ \frac{k' V' (1+R') f A}{L' (1+gR')} + q_F A = (1-f)A - q_S A + \frac{L'(1-f)A}{k_{M+1} V} - \frac{L' q_S A}{k_{M+1} V}$$

$$\frac{LL'(1-f)A [(L/k)(1+R) - R V - V q_S/(1-f)]}{k_{M+1} k V^3 (S_n^{N-1} - S_n^N)} (S_n^N - S_n^{M+2})$$

$$+ \frac{LL' (1+R)(1-f)A}{k_{M+1} k V^2}$$

که در رابطه اخیر x_M از رابطه B-19 و سپس مقدار x_{M+2} از معادله B-12 جایگزین شده است.

را ساده کرده رابطه اخیر می‌توان رابطه زیر را بدست آورد.

B-21

$$f = \frac{(1 - S_n^{N-M}) + q_S (S_n^{N-M} - S_n) + R (1 - S_n) + h q_{F'} S_n^{N-M} (1 - S_n^M)}{(1 - S_n^{N-M}) + h S_n^{N-M} (1 - S_m^M) + R (1 - S_n) + h [(1+R')/(1+gR')] S_m^M S_n^{N-M} (1 - S_m)}$$

$$\text{If } k_{M+1} = k : \quad h = \frac{L - k V}{L' - k' V'} = \frac{L (1 - S_n)}{L' (1 - S_m)}$$

$$\text{If } k_{M+1} = k' : \quad h = \frac{L/k - V}{L'/k' - V'} = \frac{k' L (1 - S_n)}{k L' (1 - S_m)}$$

عبارت بدست آمده برای h به شرایط خوراک ورودی بستگی دارد. برای حالتی که خوراک مشابه با شرایط جریان V باشد، $k_{M+1} = k$ و در صورتی که شرایط خوراک مشابه شرایط جریان L باشند، $k_{M+1} = k'$ است. برای مثال در استخراج مایع-مایع وقتی خوراک مانند جریان پسماند عبوری از برج (جریان V) باشد و در تقطیر وقتی شرایط خوراک مانند بخار عبوری از برج باشد، $k_{M+1} = k$ است و در صورتی که در استخراج شرایط خوراک مانند جریان استخراج شده عبوری از برج و در تقطیر شرایط خوراک مانند مایع عبوری از برج باشد، $k_{M+1} = k'$ خواهد بود.

References :

- 1- Hougen, O.A and K. M. Watson, "Chemical Process Principles" part III, Kinetics and catalysis, 1st ed., pp. 938-940, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1947

- 2- Mickley, H. S., T. K. Sherwood and C. E. Reed, "Applied Mathematics in Chemical Engineering" pp. 95-99, 2nd ed., McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, 1957
- 3- Wylie, Jr., C.R, "Advanced Engineering Mathematics" 1st ed., pp. 502-503, McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, 1951

ضمیمه C

رابطه ۸-۶ را به صورت زیر مرتب می‌کنیم.

$$\frac{v_N}{k_N} = \frac{V}{L} l_n$$

طرفین را در مقدار k مربوط به جزء کلیدی سنگین (k_{hk}) ضرب و تقسیم می‌کنیم.

$$\frac{1}{k_{hk}} \frac{v_n}{k_N/k_{hk}} = \frac{V}{L} l_n$$

از آنجا که $\alpha_N = \frac{k_N}{k_{hk}}$ است رابطه اخیر به صورت زیر خواهد بود.

$$\frac{1}{k_{hk}} \frac{v_n}{\alpha_N} = \frac{V}{L} l_n$$

رابطه اخیر را برای همه اجزاء با هم جمع می‌کنیم (از طرفین معادله \sum می‌گیریم)

$$\frac{1}{k_{hk}} \sum \frac{v_n}{\alpha_N} = \frac{V}{L} \sum l_n \quad \text{C-1}$$

نسبت $\frac{V}{L}$ با استفاده از معادله ۸-۶ به صورت زیر خواهد بود.

$$\frac{V}{L} = \frac{v_n}{k_N} \frac{1}{l_n} \quad \text{C-2}$$

با جایگزاری C-2 در C-1 خواهیم داشت.

$$\frac{1}{k_{hk}} \sum \frac{v_n}{\alpha_N} = \frac{v_n}{k_N} \frac{1}{l_n} \sum l_n \quad \text{C-3}$$

طرفین رابطه C-3 را در k_{hk} ضرب می‌کنیم تا رابطه زیر بدست آید.

$$\sum \frac{v_n}{\alpha_N} = \frac{v_n}{\alpha_N} \frac{\sum l_n}{l_n} \quad \text{C-4}$$

از آنجا که طبق رابطه ۷-۸ رابطه $\sum l_n = L$ برقرار است این رابطه را در C-4 جایگزین می‌کنیم.

$$\sum \frac{v_n}{\alpha_N} = \frac{v_n}{\alpha_N} \frac{L}{l_n} \quad \text{C-5}$$

با مرتب کردن رابطه C-5 خواهیم داشت.

$$l_n = \frac{L}{\sum \left(\frac{v_n}{\alpha_N} \right)_i} \left(\frac{v_n}{\alpha_N} \right)_i$$

ضمیمه D

طرفین معادله ۸-۱۱ را بر مقدار k مربوط به جزء کلیدی سنگین (k_{hk}) تقسیم می‌کنیم.

$$\frac{v_N}{k_{hk}} = \frac{V'}{L'} (\alpha_N l'_N)$$

رابطه اخیر را برای همه اجزاء جمع می‌کنیم (از طرفین معادله \sum می‌گیریم)

$$\frac{\sum v'_n}{k_{hk}} = \frac{V'}{L'} \sum \alpha_N l'_N \quad \text{D-1}$$

نسبت $\frac{V'}{L'}$ با استفاده از معادله ۸-۱۱ به صورت زیر خواهد بود.

$$\frac{V'}{L'} = \frac{v'_N}{k_N l'_N} \quad \text{D-2}$$

رابطه D-2 را در D-1 جایگزین می‌کنیم.

$$\frac{\sum v'_N}{k_{hk}} = \frac{v'_N}{k_N l'_N} \sum \alpha_N l'_N$$

طرفین معادله اخیر را در k_{hk} ضرب می‌کنیم تا رابطه زیر بدست آید.

$$\sum v'_N = \frac{v'_N}{\alpha_N l'_N} \sum \alpha_N l'_N$$

از آنجا که با استفاده از رابطه ۸-۱۲ میزان $\sum v'_N = V'$ است، رابطه اخیر به صورت زیر درمی‌آید.

$$V' = \frac{v'_N}{\alpha_N l'_N} \sum \alpha_N l'_N$$

با مرتب کردن رابطه اخیر، معادله زیر حاصل می‌شود.

$$v'_N = \frac{V'}{\sum \alpha_N l'_N} \alpha_N l'_N$$

ضمیمه E

محاسبات نقطه حساب و محاسبات نقطه شبلم با استفاده از روش ثابت تعادل (k_b) برای اینکه بتوانیم محاسبات نقطه حساب را انجام دهیم باید رابطه تعادلی را داشته باشیم که به صورت زیر می باشد.

$$y_i = k_i x_i$$

سمت راست معادله اخیر را بر ثابت تعادل ماده مینا (k_b) ضرب و تقسیم می کنیم.

$$y_i = k_b \frac{k_i}{k_b} x_i \quad \text{E-1}$$

از طرفی می دانیم که فراریت نسبی به صورت زیر تعریف می شود.

$$\alpha_i = \frac{k_i}{k_b} \quad \text{E-2}$$

با جایگزاری رابطه E-2 در E-1 خواهیم داشت.

$$y_i = k_b \alpha_i x_i \quad \text{E-3}$$

حال از طرفین معادله اخیر \sum می گیریم.

$$\sum y_i = \sum k_b \alpha_i x_i$$

از آنجا که مقدار k_b ثابت و $\sum y_i = 1.0$ است خواهیم داشت.

$$k_b = \frac{1}{\sum \alpha_i x_i}$$

برای محاسبه نقطه شبلم نیز از رابطه E-3 استفاده شده که به صورت زیر مرتب می شود.

$$\frac{y_i}{\alpha_i} = k_b x_i$$

از طرفین معادله اخیر \sum می گیریم.

$$\sum \frac{y_i}{\alpha_i} = \sum k_b x_i$$

از آنجا که مقدار k_b ثابت و $\sum x_i = 1.0$ است خواهیم داشت.

$$k_b = \sum \frac{y_i}{\alpha_i}$$