دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز

پایان‌نامه کارشناسی ارشد در رشته مهندسی شیمی

(شبیه‌سازی و کنترل فرآیند)

شبیه سازی و بهینه سازی راکتور تولید الکل سنگین

به کوشش

مرتضی پورصادق

اساتید راهنما:

دکتر عبدالحسین جهانمیری

دکتر محمدرضا رحیم پور

شهریور ۱۳۹۱

بسم الله الرحمن الرحیم

به نام خدا

اظهارنامه

اینجانب **مرتضی پورصادق (۸۸۰۷۱۸)** دانشجوی رشته‌ی **مهندسی شیمی** گرایش **شبیه-سازی و کنترل فرآیند** دانشکده‌ی **مهندسی شیمی، نفت و گاز** اظهار می‌کنم که این پایان‌نامه حاصل پژوهش خودم بوده و در جاهایی که از منابع دیگران استفاده کرده‌ام، نشانی دقیق و مشخصات کامل آن را نوشته‌ام. همچنین اظهار می‌کنم که تحقیق و موضوع پایان‌نامه-ام تکراری نیست و تعهد می‌نمایم که بدون مجوز دانشگاه دستاوردهای آن را منتشر ننموده و یا در اختیار غیر قرار ندهم. کلیه حقوق این اثر مطابق با آیین‌نامه مالکیت فکری و معنوی متعلق به محقق و دانشگاه شیراز است.

نام و نام خانوادگی : مرتضی پورصادق

تاریخ و امضا:

به نام خدا

شبیه‌سازی و بهینه سازی راکتور تولید الکل سنگین

به کوشش

مرتضی پورصادق

پایان نامه
ارائه شده به تحصیلات تکمیلی دانشگاه بعنوان بخشی از فعالیتهای تحصیلی لازم برای اخذ درجه کارشناسی ارشد

در رشته‌ی:

مهندسی شیمی (گرایش شبیه‌سازی و کنترل فرآیند)

از دانشگاه شیراز

شیراز

جمهوری اسلامی ایران

ارزیابی‌شده توسط کمیته پایان‌نامه با درجه: عالی

دکتر عبدالحسین جهانمیری ، استاد دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز (رئیس کمیته) .....
دکتر محمدرضا رحیم پور، استاد دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز.....
دکتر رضا اسلاملوئیان، دانشیار دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز.....
دکتر نصیر مهران بد، استادیار دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز.....

شهریور ۱۳۹۱

تقدیم به:

پدرم که راه و رسم زندگی را از او آموختم و همواره در کنار او بودم و

مادرم که همیشه با دعای خیر و محبت بی‌پایانش همراه من بود.

سپاسگزاری

اکنون که به یاری خداوند این رساله به پایان رسیده است بر خود لازم می‌دانم از استاد گرامی جناب آقای دکتر رحیم پور که راهنمایی های ایشان همواره راهگشای من بوده، سپاسگزاری کنم. سپاس بی‌دریغ خود را نثار استاد با فضیلت دکتر جهانمیری می‌نمایم که در کلیه مراحل تحصیل، با فضل و دانش خود راهنمای اینجانب بوده‌اند. برای ایشان و خانواده محترمشان آرزوی سلامتی و موفقیت دارم. همچنین از زحمات اساتید ارجمند جناب آقای دکتر اسلاملوئیان و جناب آقای دکتر مهران بد که زحمت مشاوره این پایان نامه بر عهده ایشان بوده است کمال تشکر را دارم. همچنین از زحمات بی دریغ دوست عزیزم فرشاد آزاد که در تمام مراحل این کار در کنارم بودند، نهایت سپاسگزاری را دارم. سلامتی و شادی او را از درگاه خداوند بزرگ خواستارم. در پایان از آقایان امیر رمضان زاده مقدم، پیام ستوده، محمد فارسی، بهزاد وافری، مسعود ستوده بحرینی و همه دوستانی که مرا در این راه یاری کرده‌اند، تشکر می‌کنم.

چکیده

شبیه‌سازی و بهینه سازی راکتور تولید الکل سنگین

به کوشش

مرتضی پورصادق

به جهت اینکه تولید الکل‌های سنگین مثل بوتانول امروزه بسیار مورد توجه است و به منظور افزایش ظرفیت تولید بوتانول، طراحی و بهینه‌سازی فرآیند تولید این الکل از گاز سنتز و پروپیلن از اهداف این تحقیق می‌باشند. بدین منظور، از قوانین طراحی متداول در راکتورهای صنعتی مشابه همراه با روش‌های بهینه‌سازی DE و MOPSO برای کسب بهترین شرایط عملیاتی راکتور استفاده شد. در ابتدا یک راکتور همزن دار گاز-مایع که ظرفیت تولیدش برابر راکتور صنعتی طراحی شده به وسیله شرکت دیوی مکی می‌باشد، برای تولید بوتیرآلدهید از گاز سنتز و پروپیلن طراحی می‌شود و سپس در ادامه یک راکتور بستر ثابت هیدروژناسیون برای تولید الکل نرمال بوتانول شبیه سازی می‌شود. برای راکتور هیدروفرمیلاسیون پنج متغیر تصمیم گیری از قبیل: دمای واکنش، غلظت رودیم، غلظت TPP، شدت جریان مولی هیدروژن و شدت جریان مولی کربن مونوکسید در خوراک جهت ماکزیمم کردن تولید نرمال بوتیرآلدهید و برای راکتور بستر ثابت دو متغیر تصمیم گیری دمای خوراک و دمای آب خنک کننده جهت مینیمم کردن کاتالیست مصرفی در طول راکتور فرآیند بهینه‌سازی تنظیم می شوند. راکتور اشاره شده براساس یک مدل ناهمگن یک بعدی در حالت پایا شبیه‌سازی می شود. در نهایت جهت بهتر کنترل دما از کنترل کننده‌های مرتبه کسری که پارامترهای کنترل کننده با استفاده از الگوریتم DE آن بهینه شده است، استفاده کردیم و عملکرد آن را با کنترل کننده-های مرتبه صحیح بهینه شده مقایسه کردیم که کنترل کننده مرتبه کسری نتایج بهتری را نشان داد.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

۱- مقدمه ۲

۱-۱- معرفی اگزوالکل‌ها ۲

۱-۲- تولید اگزو الکل‌ها ۳

۱–۳- ویژگی های اگزو الکل‌ها ۳

۱-۳-۱- ۲-اتیل هگزانول ۳

۱ -۳-۲- بوتانول‌ها ۴

۱-۴- مواد اولیه جهت تولید اگزو الکل‌ها ۵

۱-۴-۱- پروپیلن ۵

۱-۴-۲- گاز طبیعی ۵

۱-۴-۳- کربن مونوکسید ۶

۱-۴-۴- هیدروژن ۶

۱-۵- کاربرد های اگزو الکل‌ها ۶

۱-۵-۱- کاربردهای ۲- اتیل هگزانول ۷

۱-۵-۱-۱- نرم کننده‌های فتالات ۷

۱-۵-۱-۲- استرهای اکریلات یا متاکریلات ۷

۱-۵-۱-۳- سایر کاربردها ۸

۱-۵-۲- کاربردهای نرمال بوتانول ۸

عنوان **صفحه**

۱-۵-۲-۱- تولید بوتیل استات و گلیکول اترها ۸
۱-۵-۲-۳- حلال ۹
۱-۵-۲-۴- سایر کاربرد ها ۹
۱-۵-۳- کاربردهای ایزو بوتانول ۹
۱-۶- روش های مختلف تولید اگزو الکل‌ها ۱۰
۱-۷- فرآیند تولید ۱۲
۱-۷-۱- ریفرمینگ ۱۲
۱-۷-۲- هیدروفرمیلاسیون ۱۳
۱-۷-۳- آلدولیزاسیون ۱۵
۱-۷-۴- هیدروژناسیون ۱۶

۲- الگوریتم‌های بهینه سازی ۱۸

۲-۱- روش‌های شمارشی ۱۸
۲-۲- روش‌های محاسباتی ۱۹
۲-۳- روش‌های تصادفی ۲۰
۲-۴- الگوریتم تفاضل تکاملی ۲۰
۲-۵- الگوریتم‌های هوش جمعی ۲۳
۲-۵-۱- الگوریتم PSO ۲۴
۲-۵-۱-۱- یک مثال ساده از عملکرد PSO ۲۵
۲-۵-۱-۲- کاربردهای الگوریتم بهینه سازی گروه ذرات ۲۷
۲-۶- مروری بر روش‌های بهینه سازی چند هدفه ۲۷
۲-۶-۱- صورت کلی مسئله بهینه سازی ۲۷
۲-۶-۲- مفهوم غلبه یا Dominance ۲۸
۲-۶-۳- الگوریتم‌های بهینه سازی هوشمند ۳۰

عنوان **صفحه**

۲-۶-۴- الگوریتم چند هدفه PSO یا MOPSO ۳۱

۲-۶-۴-۱- نحوه انتخاب رهبر برای هر ذره ۳۲

۲-۶-۴-۲- نمونه برداری به روش رولت ویل ۳۳

۲-۶-۴-۳- نحوه به روز شدن بهترین خاطره شخصی هر ذره ۳۳

۲-۶-۴-۴- نحوه حذف اعضای اضافی آرشیو ۳۴

۲-۶-۴-۵- استفاده از اپراتور جهش ۳۴

۳- مروری بر تحقیقات گذشته ۳۶

۳-۱- هیدروفرمیلاسیون ۳۶

۳-۲- بوتانول ۳۸

۳-۳- حساب کسری ۳۹

۴- مدل سازی و شبیه سازی ۴۳

۴-۱- راکتور همزن دار گاز – مایع در حالت پایا ۴۳

۴-۱-۱- نفوذ و واکنش همزمان در فیلم ساکن ۴۴

۴-۱-۲- موازنه فاز بالک راکتور ۴۶

۴-۲- راکتور همزن دار گاز – مایع در حالت ناپایا ۴۶

۴-۲-۱- موازنه جرم ۴۶

۴-۲-۲- موازنه انرژی درحالت ناپایا برای راکتور CSTR ۴۸

۴-۲-۳- تخمین ضریب نفوذ مایع دو جزئی در رقت بی نهایت ۴۸

۴-۱-۳-۱- روش تخمین Wilke-Chang ۴۸

۴-۲-۴- محاسبه ضریب انتقال جرم در راکتورهای مخزن همزن دار ۴۹

۴-۲-۵- محاسبه ضریب انتقال حرارت کلی برای کویل هلیکا راکتور ۵۰

۴-۲-۶- حلالیت مواد واکنش دهنده در حلال واکنش ۵۱

۴-۲-۷- سینتیک تولید بوتیرآلدهید از گاز سنتز و پروپیلن ۵۱

عنوان **صفحه**

۴-۲-۸- بهینه سازی راکتور ۵۳

۴-۳-۱- مدل شبه همگن یک بعدی ۵۶

۴-۳-۲- مدل ناهمگن یک بعدی..... ۵۷

۴-۳-۶- طراحی و بهینه سازی راکتور بستر ثابت ۶۱

۴-۳-۶-۱- طراحی اولیه ۶۲

۴-۳-۶-۲- تعیین قطر کلی راکتور ۶۳

۴-۳-۷- بهینه سازی راکتور ۶۳

۵- کنترل مرتبه کسری ۶۶

۵-۱- مقدمه ۶۶

۵- ۲- توابع ویژه ۶۸

۵-۳- تعریف‌های مشتق و انتگرال کسری..... ۷۰

۵- ۳- ۱- مشتق و انتگرال کسری گرانوالد- لتنیکف ۷۰

۵- ۳- ۲- مشتق و انتگرال کسری ریمان- لیوویل ۷۲

۵- ۳- ۳- مشتق کسری کاپوتو ۷۳

۵- ۴- بعضی از ویژگی‌های انتگرال و مشتق کسری ۷۴

۵-۵- کنترل مرتبه کسری ۷۵

۵-۵-۱- کنترل کننده $PI^{\lambda}D^{\mu}$ ۷۵

۵-۵-۲- سیستمهای کنترل مرتبه کسری ۷۷

۵-۵-۳- پیاده سازی پیوسته زمانی اپراتورهای مرتبه-کسری..... ۷۸

۶- نتایج، بحث و پیشنهادات ۸۰

۶-۱- نتایج حاصل از طراحی و شبیه سازی راکتور همزن دار گاز-مایع ۸۰

۶-۱-۱- اثبات صحت مدل..... ۸۰

۶-۲- نتایج حاصل از بهینه سازی راکتور همزن دار گاز-مایع..... ۸۴

عنوان **صفحه**

۶-۳- نتایج حاصل از طراحی و شبیه‌سازی راکتور بستر ثابت ۸۷
۶-۳-۱- اثبات صحت مدل ۸۷
۶-۴- نتایج حاصل از بهینه سازی راکتور بستر ثابت ۹۲
۶-۵- نتایج حاصل از طراحی و بهینه سازی ضرایب کنترل کننده PID و FOPID ۹۶
۶-۵-۱- تغییر پله‌ای در مقدار مقرر ۹۷
۶-۵-۲- تغییر پله‌ای در دمای ورودی خوراک ۹۸
۶-۶- نتیجه گیری و پیشنهادات ۹۹
فهرست مراجع ۱۰۱

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

جدول ۱-۱: اگزوالکل‌ها و سهم آن‌ها در بازارهای جهانی در سال ۲۰۰۰ میلادی [۱].. ۲

جدول ۴-۱: پارامترهای حلالیت مواد واکنش دهنده در حلال [۱۶]. ۵۱

جدول ۴-۲: انواع مدل‌های ناهمگن براساس مقاومت‌های داخلی و خارجی ۵۶

جدول ۴-۳: روابط مربوط به خواص فیزیکی سیال درون راکتور ۶۱

جدول ۶-۲: مشخصات و شرایط عملیاتی راکتور همزن دار گاز-مایع ۸۱

جدول ۶-۳: استراتژی و پارامترهای الگوریتم MOPSO ۸۴

جدول ۶-۴: تعدادی از جواب های عملیاتی بهینه شده برای راکتور همزن دار گاز-مایع ۸۴

جدول ۶-۵: مقایسه بین نتایج شبیه سازی و داده‌های صنعتی. ۸۸

جدول ۶-۶: مشخصات و شرایط عملیاتی راکتور پوسته-لوله بستر ثابت ۸۸

جدول ۶-۷: استراتژی و پارامترهای الگوریتم DE ۹۳

جدول ۶-۸: مشخصات و شرایط عملیاتی بهینه شده برای راکتور بستر ثابت ۹۳

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

شکل ۱-۱- شماتیکی از مولکول ۲-اتیل هگزانول[۱]. ۳

شکل ۱-۲- شماتیکی از مولکول نرمال بوتانول[۱]. ۴

شکل ۱-۳- شماتیکی از مولکول ایزوبوتانول[۱]. ۴

شکل ۱-۴- شماتیکی از واحد ریفرمینگ[۱]. ۱۳

شکل ۱-۵- شماتیکی از واحدهیدروفرمیلاسیون[۱]. ۱۴

شکل ۱-۶- شماتیکی از واحد آلدولیزاسیون[۱]. ۱۵

شکل ۱-۷- شماتیکی از واحد هیدروژناسیون[۱]. ۱۶

شکل ۲-۱- استراتژی اصلی الگوریتم DE ۲۲

شکل ۲-۲- روابط حاکم بر الگوریتم های هوش جمعی. ۲۴

شکل ۲-۳- مثالی برای الگوریتم PSO. ۲۵

شکل ۲-۴- نحوه حرکت ذرات در الگوریتم PSO . ۲۶

شکل ۲-۵- مفهوم غلبه برای مسئله با دو تابع هدفه. ۲۹

شکل ۲-۶- دو حالت مختلف برای روش ترکیب خطی توابع هدف. ۳۰

شکل ۴-۱- نمایی از تماس گاز-مایع مطابق با تئوری فیلم را نشان می‌دهد. ۴۵

عنوان **صفحه**

شکل ۴-۲- نمایی از مقاومت داخلی و خارجی موجود در ذرات کاتالیست ۵۵

شکل ۴-۳- نمایی از یک المان حجمی در راکتور پوسته-لوله بستر ثابت ۵۹

شکل ۵-۱- تابع میتاگ لفلر برای پارامترهای $\mathbf{E_{1,1}(z)}$ ۶۹

شکل ۵-۲- تابع میتاگ لفلر برای پارامترهای $\mathbf{E_{2,1}(-z^2)}$ ۶۹

شکل ۵-۳- کنترل PID کلاسیک در مقابل کنترل $\mathbf{PI^{\lambda}D^{\mu}}$..... ۷۶

شکل ۶-۱- پروفایل غلظت هیدروژن و کربن مونوکسید در طول فیلم مایع..... ۸۳

شکل ۶-۲- پروفایل غلظت پروپیلن در طول فیلم مایع..... ۸۳

شکل ۶-۳- پروفایل غلظت نرمال بوتیرآلدهید و ایزوبوتیرآلدهید در طول فیلم مایع..... ۸۳

شکل ۶-۴- نمایی از سطح جواب های بهینه تابع هدف اول نسبت به تابع هدف دوم..... ۸۷

شکل ۶-۵- نمایی از سطح جواب های بهینه تابع هدف دوم نسبت به تابع هدف سوم..... ۸۷

شکل ۶-۶- نمایی از سطح جواب های بهینه تابع هدف دوم نسبت به تابع هدف سوم..... ۸۶

شکل ۶-۷- نمایی از سطح جواب های بهینه سه تابع هدف..... ۸۷

شکل ۶-۸- افت فشار در طول راکتور بستر ثابت..... ۸۹

شکل ۶-۹- پروفایل دمای راکتور بستر ثابت..... ۹۰

شکل ۶-۱۰- پروفایل شدت جریان مولی نرمال بوتانول در طول راکتور. ۹۱

شکل ۶-۱۱- پروفایل شدت جریان مولی نرمال بوتیرآلدهید در طول راکتور..... ۹۱

شکل ۶-۱۲- پروفایل شدت جریان مولی هیدروژن در طول راکتور. ۹۲

شکل ۶-۱۳- شدت جریان مولی بوتیرآلدهید برای راکتور های بهینه و غیر بهینه ۹۳

شکل ۶-۱۴- شدت جریان مولی هیدروژن در طول راکتورهای بهینه و غیر بهینه. ۹۵

عنوان **صفحه**

شکل ۶-۱۵- شدت جریان مولی نرمال بوتانول در طول راکتورهای بهینه و غیر بهینه..... ۹۵

شکل۶-۱۶- پروفایل دمایی برای راکتورهای بهینه و غیر بهینه ۹۶

شکل۶-۱۷- تغییرات دما نسبت به ۲درجه تغییر در مقدار مقرر..... ۹۷

شکل۶-۱۸- تغییرات دما نسبت به ۳ درجه تغییر دمای خوراک بدون کنترل کننده. ۹۸

شکل۶-۱۹- تغییرات دما نسبت به ۳ درجه تغییر در دمای خوراک با کنترل کننده. ۹۹

فهرست نشانه‌های اختصاری

توضیح	نشانه
مساحت سطح	A
فاز بالک	b
غلظت	C
ظرفیت گرمایی ویژه گاز	C_P
قطر ذرات کاتالیست	d_P
قطر لوله	D
شدت جریان در مخلوط گازی	F
ضریب انتقال حرارت	h
آنتالپی تشکیل	ΔH_f
ضریب انتقال جرم	k
ضریب انتقال حرارت هدایتی	K
ثابت تعادل گاز-مایع	
دبی جرمی گاز	$\dot{m}$
جرم مولکولی	MW
تعداد کل جزء ها در جریان	N
جریان مولی	$\dot{n}$
تعداد لوله های راکتور	NOT
تابع هدف	OF
فشار	P
دبی حجمی جریان گاز	Q
سطح مشترک گاز-مایع	s
سرعت تشکیل	r

ثابت جهانی گازها	R
دما	T
سرعت ظاهری گاز	u
ضریب کلی انتقال حرارت	U
کسر مولی	y
محور مختصات	z

فهرست علائم یونانی

ویسکوزیته جریان	μ
دانسیته	ρ
ضخامت فیلم	δ
تخلخل	ε
ماندگی	

فهرست زیرنویس‌ها

اتمسفر	a
بستر کاتالسیتی	B
سطح مقطع لوله	c
تعادل	eq
خوراک	f
گاز	G
داخلی یا درونی	i
جزء i ام	
ایزوبوتیرآلدهید	
مایع	L
ماکزیمم	max
نرمال بوتیرآلدهید	n
بیرونی یا خارجی	o
محصول	p
سطح مشترک در راکتور	r
راکتور	R
پوسته	shell
کل	t

فصل اول

۱- مقدمه

۱-۱- معرفی اگزوالکل‌ها[1]

اگزوالکل‌ها مایعات بی رنگی هستند که شامل ۲ اتیل هگزانول[2]، نرمال بوتانول[3]، ایزو بوتانول[4] و ایزو دسیل الکل[5] و ... می‌باشند. سهم اگزوالکل‌های نام برده شده در بازار جهانی در سال ۲۰۰۰ بترتیب اولویت مطابق جدول (۱-۱) بوده است :

جدول ۱-۱- اگزوالکل ها و سهم آن ها در بازار های جهانی در سال ۲۰۰۰ میلادی [۱].

ردیف	نام اگزو الکل	سهم بازار های جهانی از انواع اگزو الکل ها (درصد)
۱	۲ - اتیل هگزانول	۴۸
۲	نرمال بوتانول	۴۳
۳	ایزو بوتانول	۶
۴	سایر اگزو الکل‌ها	۳

[1] Oxo-alcohols
[2] 2-ethylhexanol
[3] N-butanol
[4] Isobutanol
[5] Isodecyl alcohol