

دانشگاه علم و صنعت ایران

دانشکده مهندسی شیمی

بررسی روشهای حل عددی معادلات منتج از شبیه سازی پایا و پویای برج تقطیر

شهلا حسنی مهام

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته مهندسی شیمی

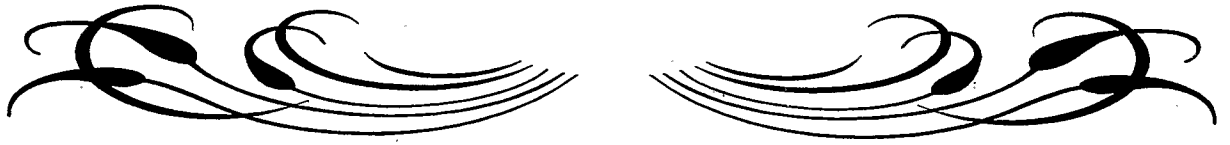
۴۰ ۶۵،۲

استاد راهنما:

دکتر نوراله کثیری

دی ۱۳۷۷

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



تقدیم به :

پدر و مادر بزرگوارم

چکیده

در میان روشهایی که برای جداسازی مواد بکار می‌رود تقطیر یکی از پیچیده‌ترین روش‌ها است که کاربرد وسیعی را در صنایع شیمیایی داراست. این پروژه با هدف بررسی روشهای حل عددی معادلات و پاسخ پایا و پویای برج تقطیر و مطالعه رفتار هیدرولیکی سینی‌ها در طول مدت زمان کارکرد برج تعریف گردید. در این رابطه مدل‌های ریاضی برای حالت‌های پایا و پویای برج تقطیر توسعه داده شد. مدل پایای برج تقطیر دربرگیرنده معادلات موازنه جرم، انرژی و معادلات تعادلی برای هر سینی می‌باشد. بدین ترتیب برای محاسبه پارامترهای دما، دبی و غلظت اجزاء هر فاز در سینی‌ها، سیستم معادلات جبری غیرخطی تشکیل گردید. مدل پویا تاحدی پیچیده‌تر از حالت پایا و شامل دو گروه معادلات می‌باشد. یک گروه معادلات دیفرانسیل غیرخطی مربوط به موازنه جرم و انرژی حول سینی‌ها، جوش‌آور و خنک‌کننده، و گروه دیگر معادلات جبری مربوط به پیش‌بینی خواص فیزیکی و تعادلی، هیدرولیک سینی، انتقال حرارت و جرم است. معادلات دیفرانسیل بدست آمده از نوع معادلات سخت می‌باشند. در شبیه‌سازی مدل‌ها، از نقطه نظر روشهای حل عددی معادلات دیفرانسیل دقت، سرعت و پایداری اهمیت بالایی دارد. لذا سعی شده ضمن شناخت ماهیت معادلات روشهای گوناگون حل عددی، بعنوان یک پارامتر انتخاب آورده شود.

پس از ارائه جزئیات در مورد شبیه‌سازی مدل برج تقطیر، نتایج شبیه‌سازی حالت پایا و پویا با داده‌های حاصل از عملیات یک برج در اشل آزمایشگاهی مورد مقایسه قرار گرفته است. در این مقایسه میزان دقت و پیش‌بینی مدل از متغیرهای ورودی و همچنین تأثیر روشهای حل عددی بر میزان دقت و سرعت اجرا مورد بررسی قرار گرفت. نتایج حاصل از شبیه‌سازی برج تقطیر توسط نرم‌افزار موجود در حالت پایا، با نتایج نرم‌افزار Hysys مقایسه شد. علاوه بر این نتایج حاصل از شبیه‌سازی یک مدل تئوری در حالت پایا توسط نرم‌افزار با نتایج نرم‌افزار Hysys و PROII مقایسه گردید که نتایج ارائه شده حاکی از قابلیت نرم‌افزار در پیش‌بینی قابل قبول حالت پایا و پویا می‌باشد.

تقدیر و تشکر :

از جناب آقای دکتر کثیری که راهنماییهای ارزنده ایشان همواره
راهگشایی در حل مشکلات بوده، از نظریات ارزشمند
آقای دکتر اشرفی زاده و کلیه عزیزانی که مرا در تهیه این
پایان نامه یاری دادند، همچنین از دوست بزرگوارم
خانم مهندس یزدانمهر برای کمکهای پیدریغشان
صمیمانه تشکر و قدردانی می نمایم.

۱ مقدمه
	فصل اول : بررسی مدل‌های پویای برج تقطیر
۴ ۱-۱- اساس کار برج تقطیر
۶ ۲-۱- دسته بندی اهداف مورد نظر برای شبیه سازی برج تقطیر
۷ ۳-۱- تاریخچه ای از مدل‌های پویای برج تقطیر
۱۱ ۴-۱- روش های گوناگون مدلسازی پویای برج تقطیر
۱۱ ۱-۴-۱- مدل های ساده (تانک اختلاط)
۱۲ ۲-۴-۱- مدل ارائه شده توسط هلند با روش ضمنی و روش همگرایی تتا
۱۳ ۱-۲-۴-۱- موازنه جزء به جزء مواد
۱۳ ۲-۲-۴-۱- موازنه کلی مواد و موازنه انرژی
۱۴ ۳-۲-۴-۱- روابط تعادلی
۱۴ ۴-۲-۴-۱- کاربرد روش ضمنی در معادلات موازنه جزء به جزء مواد و روابط تعادلی
۱۶ ۵-۲-۴-۱- روش همگرایی تتا
۲۲ ۶-۲-۴-۱- روش همگرایی تتا اصلاح یافته
۲۲ ۷-۲-۴-۱- روش ضمنی و روش همگرایی تتا در مورد ستونهای پیچیده
۲۶ ۳-۴-۱- روش ارائه شده توسط اکونوموپلاس
۲۷ ۱-۳-۴-۱- مدل ریاضی
۲۸ ۲-۳-۴-۱- فرم عددی مدل ریاضی
۲۹ ۴-۴-۱- مدل ارائه شده توسط "هلند" و "گالوم" با استفاده از روش "گیر"
۳۰ ۱-۴-۴-۱- معادلات، موازنه جزء به جزء مواد
۳۰ ۲-۴-۴-۱- معادلات موازنه انرژی
۳۰ ۳-۴-۴-۱- روابط تعادل
۳۱ ۴-۴-۴-۱- افت فشار
۳۱ ۵-۴-۴-۱- ارتفاع مایع در ناودان
۳۲ ۵-۴-۱- مدل ارائه شده توسط "بارامبیللا" و "کاراداز"
۳۲ ۶-۴-۱- مدل ارائه شده توسط "بربر"
۳۳ ۷-۴-۱- مدل ارائه شده توسط "بربر" و "کاراداز"
۳۳ ۵-۱- کار حاضر

فصل دوم: ویژگی های حاکم بر روابط پویای برج تقطیر

۳۶ ۱-۲-۱ مقدمه
۳۷ ۲-۲-۲ معادلات مدلسازی پویای برج تقطیر
۳۸ ۱-۲-۲ موازنه جرم و انرژی برای سینی
۳۹ ۲-۲-۲ موازنه های جرم و انرژی برای ظرف نگهدارنده
۳۹ ۳-۲-۲ موازنه های جرم و انرژی برای جوش آور
۴۰ ۴-۲-۲ معادلات جبری مربوط به محاسبه خواص ترمودینامیکی و فیزیکی
۴۱ ۳-۲-۳ بررسی معادلات پویای برج تقطیر
۴۳ ۴-۲-۴ روشهای حل عددی معادلات دیفرانسیل معمولی
۴۴ ۵-۲-۵ خطای روشهای حل عددی
۴۴ ۱-۵-۲ خطای برشی
۴۵ ۲-۵-۲ سازگاری
۴۵ ۳-۵-۲ همگرایی
۴۵ ۴-۵-۲ خطای گرد کردن
۴۶ ۶-۲-۶ پایداری
۴۶ ۱-۶-۲ پایداری روش های تک گامی
۵۰ ۲-۶-۲ پایداری روش های چند گامی
۵۲ ۳-۶-۲ پایداری روش های حل عددی در مورد معادلات دیفرانسیل غیر خطی
۵۲ ۷-۲-۷ دستگاه معادلات دیفرانسیل معمولی

فصل سوم - روشهای حل عددی مورد استفاده در این پروژه

۵۵	۱-۳-۱- مدلسازی پایای برج تقطیر
۵۵	۱-۳-۱-۱- مقدمه
۵۵	۱-۳-۲- بررسی مدل پایای برج تقطیر
۵۶	۱-۳-۳- معادلات ریاضی
۵۸	۱-۳-۴- معادلات MESH
۵۹	۱-۳-۵- روش کامپیوتری
۶۰	۱-۳-۶- روش حل ریاضی
۶۲	۲-۳-۲- مقادیر ویژه ماتریس ژاکوبین
۶۲	۲-۳-۱- تبدیل به ماتریس "هسنبرگ"
۶۳	۲-۳-۲- BALANCING
۶۴	۳-۳- معادلات غیر خطی
۶۴	۳-۳-۱- روش جستجوی خطی و مسیر برگشتی
۶۶	۳-۴-۴- روشهای عددی حل پویای برج تقطیر
۶۹	۳-۴-۱- تئوری عمومی فرایند رانجا - کاتا
۷۲	۳-۴-۲- روشهای صریح رانجا-کاتا
۷۲	۳-۴-۳- کنترل اندازه گام برای روشهای رانجا-کاتا
۷۶	۳-۴-۴- معایب روش صریح رانجا-کاتا
۷۶	۳-۴-۵- روش ضمنی و نیمه ضمنی
۷۶	۳-۴-۵-۱- روشهای ضمنی رانجا-کاتا
۷۷	۳-۴-۵-۲- روشهای نیمه ضمنی رانجا-کاتا
۸۰	۳-۴-۶- روش "گیر"
۸۴	۳-۴-۷- روش با پایداری نوع I

فصل چهارم : معرفی نرم افزار و قابلیت‌های آن

۸۶	۱-۴- مقدمه
۸۷	۲-۴- زبان برنامه نویسی کامپیوتر
۸۷	۳-۴- معرفی بخشهای نرم افزار کامپیوتری
۸۷	الف) فایل
۸۷	ب) مشخصات برج تقطیر
۸۸	ج) مدل ریاضی
۹۰	د) اطلاعات خروجی
۹۲	۴-۴- سایر قابلیت‌های نرم افزار

فصل پنجم : مقایسه برنامه ها و بررسی اثر پارامترها

۹۵	۱-۵- مقدمه
۹۵	۲-۵- مشخصات برج تقطیر آزمایشگاهی
۹۶	۳-۵- مشخصات خوراک برج تقطیر آزمایشگاهی
۹۷	۴-۵- نتایج بدست آمده از نرم افزار موجود
۹۸	۱-۴-۵- اجرای شماره ۱
۱۰۴	۲-۴-۵- اجرای شماره ۲
۱۰۶	۳-۴-۵- اجرای شماره ۳
۱۱۱	۴-۴-۵- اجرای شماره ۴
۱۱۷	۵-۴-۵- اجرای شماره ۵
۱۲۲	۶-۴-۵- اجرای شماره ۶
۱۲۷	۷-۴-۵- اجرای شماره ۷
۱۳۲	۵-۵- جمع بندی و نتیجه گیری
۱۳۴	۶-۵- پیشنهادات

مراجعضمیمه الفضمیمه ب

فصل اول :

شکل (۱-۱): شمایی از برج تقطیر متداول

فصل دوم :

شکل (۱-۲): شمایی از سینی های برج به همراه کلیه جریانهای ورودی و خروجی

شکل (۲-۲): پایداری نوع $A(\theta)$

شکل (۳-۲): پایداری نوع $A(a)$

شکل (۴-۲): پایداری سخت

فصل سوم :

شکل (۱-۳): نمایی از شماره گذاری جریانهای برج تقطیر

شکل (۲-۳): نمایی از جریانهای سینی تعادلی

شکل (۳-۳): روند نمای شبیه سازی برج تقطیر

شکل (۴-۳): الگوریتم حل معادلات دیفرانسیل معمولی با استفاده از روش رانجا-کاتا

شکل (۵-۳): الگوریتم حل معادلات دیفرانسیل معمولی با استفاده از روش ضمنی و نیمه ضمنی رانجا-کاتا

فصل چهارم :

شکل (۱-۴): تصویری از پنجره اصلی نرم افزار

فصل پنجم :

شکل (۱-۵): محاسبه تغییرات ترکیب مولی بخار سیکلو هگزان بر حسب سینی در حالت پایا

شکل (۲-۵): محاسبه تغییرات ترکیب مولی بخار هگزان بر حسب سینی در حالت پایا

شکل (۳-۵): محاسبه تغییرات ترکیب مولی بخار هپتان بر حسب سینی در حالت پایا

شکل (۴-۵): محاسبه تغییرات ترکیب مولی مایع سیکلو هگزان بر حسب سینی در حالت پایا

شکل (۵-۵): محاسبه تغییرات ترکیب مولی مایع هگزان بر حسب سینی در حالت پایا

شکل (۶-۵): محاسبه تغییرات ترکیب مولی مایع هپتان بر حسب سینی در حالت پایا

شکل (۷-۵): محاسبه تغییرات دما بر حسب سینی در حالت پایا

شکل (۸-۵): محاسبه تغییرات دبی بخار بر حسب سینی در حالت پایا

شکل (۹-۵): محاسبه تغییرات دبی مایع بر حسب سینی در حالت پایا

شکل (۱۰-۵): منحنی تغییرات ترکیب مایع سینی پنجم بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر ترکیب

شکل (۱۱-۵): منحنی تغییرات ترکیب مایع ریپویلر بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر ترکیب

شکل (۱۲-۵): منحنی تغییرات ترکیب بخار سینی پنجم بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر ترکیب

شکل (۱۳-۵): منحنی تغییرات ترکیب بخار سینی هشتم بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر ترکیب

شکل (۱۴-۵): منحنی تغییرات ترکیب بخار کندانسور بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر ترکیب

شکل (۱۵-۵): منحنی تغییرات دما سینی ۲، ۷ و ریپویلر بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر ترکیب

شکل (۱۶-۵): منحنی تغییرات دبی بخار سینی ۵، کندانسور و ریپویلر بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر ترکیب

- شکل (۵-۱۷): منحنی تغییرات دبی مایع سینی ۵، کندانسور و ریپولر بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر ترکیب
- شکل (۵-۱۸): منحنی مقایسه جوابهای بدست آمده از روشهای عددی IRK3، RK4، SDIRK برای تغییرات جزء مولی سیکلو هگزان در فاز مایع سینی ۵، بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر ترکیب
- شکل (۵-۱۹): منحنی مقایسه جوابهای بدست آمده از روشهای عددی IRK3، RK4، SDIRK برای تغییرات جزء مولی سیکلو هگزان در فاز بخار سینی ۵، بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر ترکیب
- شکل (۵-۲۰): منحنی مقایسه جوابهای بدست آمده از روشهای عددی GRK، RoS، BaEu برای تغییرات جزء مولی سیکلو هگزان در فاز مایع ریپولر، بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر ترکیب
- شکل (۵-۲۱): منحنی مقایسه جوابهای بدست آمده از روشهای عددی IRK3، RK4، BaEu برای تغییرات جزء مولی سیکلو هگزان در فاز بخار کندانسور، بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر ترکیب
- شکل (۵-۲۲): منحنی مقایسه جوابهای بدست آمده از روشهای عددی SDIRK، RK برای تغییرات دبی مایع ریپولر، بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر ترکیب
- شکل (۵-۲۳): منحنی مقایسه جوابهای بدست آمده از روشهای عددی GRK، RK4، BaEu برای تغییرات دما، بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر ترکیب
- شکل (۵-۲۴): منحنی مقایسه جوابهای بدست آمده از روشهای عددی GRK، RK4 برای تغییرات دبی بخار سینی ۵، بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر ترکیب
- شکل (۵-۲۵): منحنی مقایسه جوابهای بدست آمده از روشهای عددی RK4 با اندازه گامهای متفاوت برای تغییرات جزء مولی سیکلو هگزان در فاز مایع سینی ۵، بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر ترکیب
- شکل (۵-۲۶): منحنی مقایسه جوابهای بدست آمده از روشهای عددی RoS با اندازه گامهای متفاوت برای تغییرات جزء مولی سیکلو هگزان در فاز مایع ریپولر، بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر ترکیب
- شکل (۵-۲۷): منحنی مقایسه جوابهای بدست آمده از روشهای عددی SDIRK با اندازه گامهای متفاوت برای تغییرات جزء مولی سیکلو هگزان در فاز مایع سینی ۵، بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر ترکیب
- شکل (۵-۲۸): منحنی تغییرات ترکیب مولی بخار سینی پنجم بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر دبی
- شکل (۵-۲۹): منحنی تغییرات ترکیب مولی مایع ریپولر بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر دبی
- شکل (۵-۳۰): منحنی تغییرات ترکیب مولی بخار سینی پنجم بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر دبی
- شکل (۵-۳۱): منحنی تغییرات ترکیب مولی بخار سینی هشتم بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر دبی
- شکل (۵-۳۲): منحنی تغییرات ترکیب مولی بخار کندانسور بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر دبی
- شکل (۵-۳۳): منحنی تغییرات ترکیب مولی بخار سینی پنجم بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر دبی
- شکل (۵-۳۴): منحنی تغییرات دبی بخار سینی ۵، کندانسور و ریپولر بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر دبی
- شکل (۵-۳۵): منحنی تغییرات ترکیب مولی بخار سینی پنجم بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر دبی
- شکل (۵-۳۶): منحنی تغییرات ترکیب مولی مایع سینی پنجم بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر دما
- شکل (۵-۳۷): منحنی تغییرات ترکیب مولی مایع ریپولر بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر دما
- شکل (۵-۳۸): منحنی تغییرات ترکیب مولی بخار سینی پنجم بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر دما
- شکل (۵-۳۹): منحنی تغییرات ترکیب مولی بخار سینی هشتم بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر دما

- شکل (۴۰-۵) : منحنی تغییرات ترکیب مولی بخار کندانسور بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر دما
- شکل (۴۱-۵) : منحنی تغییرات دما سینی ۷،۲ و ریویلر بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر دما
- شکل (۴۲-۵) : منحنی تغییرات دبی بخار سینی ۵، ریویلر و کندانسور بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر دما
- شکل (۴۳-۵) : منحنی تغییرات ترکیب دبی مایع سینی ۵ و ریویلر بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر دما
- شکل (۴۴-۵) : منحنی تغییرات ترکیب مولی مایع سینی پنجم بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر مایع برگشتی
- شکل (۴۵-۵) : منحنی تغییرات ترکیب مولی ریویلر بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر مایع برگشتی
- شکل (۴۶-۵) : منحنی تغییرات ترکیب مولی بخار سینی پنجم بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر مایع برگشتی
- شکل (۴۷-۵) : منحنی تغییرات ترکیب مولی بخار سینی هشتم بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر مایع برگشتی
- شکل (۴۸-۵) : منحنی تغییرات ترکیب مولی بخار کندانسور بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر مایع برگشتی
- شکل (۴۹-۵) : منحنی تغییرات دما سینی ۲، ۷ و ریویلر بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر مایع برگشتی
- شکل (۵۰-۵) : منحنی تغییرات دبی بخار سینی ۵، کندانسور و ریویلر بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر مایع برگشتی
- شکل (۵۱-۵) : منحنی تغییرات دبی مایع سینی ۵ و ریویلر بر حسب زمان در حالت پویا، اثر تغییر مایع برگشتی

- جدول ۱-۱- مقایسه بین روشهای گوناگون مدلسازی پویای برج تقطیر
- جدول ۱-۲- فرمولهای مربوط به محاسبات جوش آور
- جدول ۱-۳- مشخصات روشهای مختلف رانجا-کاتا
- جدول ۱-۵- مقایسه نتایج حاصل از نرم افزار DDS با دیگر نرم افزارها
- جدول ۱-۶- مقایسه بین زمان اجرای روشهای مختلف حل عددی معادلات دیفرانسیل

$$V_{ji} = \text{ماتریس سه قطری مربع شامل ضرایب } V_{ji}$$

$$A_s = \text{سطح روزنه (ft}^2\text{)}$$

$$A_r = \text{سطح کل مجرا در هر سینی (ft}^2\text{)}$$

$$a_r = \text{سطح مقطع داخلی مجرا (in}^2\text{)}$$

$$a'_r = \text{سطح برگشتی به ازای هر کلاهک (in}^2\text{)}$$

$$a_{er} = \text{سطح annulus به ازای هر کلاهک (in}^2\text{)}$$

$$a_c = \text{سطح مقطع داخلی کلاهک (in}^2\text{)}$$

$$a_s = \text{سطح روزنه به ازاء هر کلاهک (in}^2\text{)}$$

$$a_a = \text{سطح annulus به ازاء هر کلاهک (in}^2\text{)}$$

$$A_{da} = \text{مینیمم سطح مایع در ناودان (in}^2\text{)}$$

$$A_d = \text{سطح ناودان (ft}^2\text{)}$$

$$A_s = \text{سطح Slot (ft}^2\text{)}$$

$$A_{so} = \text{سطح Slot مربوط به دریچه باز (ft}^2\text{)}$$

$$A_{sc} = \text{سطح Slot مربوط به دریچه بسته (ft}^2\text{)}$$

$$A_h = \text{سطح سوراخهای سینی (ft}^2\text{)}$$

$$A_p = \text{سطح فعال سینی (ft}^2\text{)}$$

$$AD_1 = \text{سطح مقطع ناودان (ft}^2\text{)}$$

$$AD_2 = \text{سطح مقطع گذر مایع از زیر ناودان (ft}^2\text{)}$$

$$C = \text{بردار ستونی بیانگر } P_{ji}\text{ها}$$

$$C_s = \text{ضریب تصحیح روزنه}$$

$$C_{vw} = \text{ضریب برای وزن دریچه}$$

$$d_r = \text{قطر داخلی مجرا (in)}$$

$$d_c = \text{قطر داخلی سرپوش (in)}$$

$$d_h = \text{قطر منفذ دریچه‌ای و غربالی (ft)}$$

$$d_w = \text{قطر سرریز دایره‌ای (in)}$$