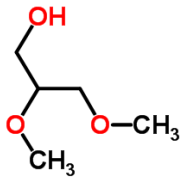


## بنام خدا

### فرآیندهای پتروشیمی - تکلیف دوم

#### محاسبات تعادلی VLE و LLE

**مسئله اول:** در سالهای اخیر تولید بیودیزل مورد توجه محققین قرار گرفته است. یکی از مواد جانبی تولیدی در فرآیند مذکور، glycerol می باشد (حدود 10٪ جرمی در بیودیزل تولیدی). روشهای مختلفی برای تبدیل glycerol به مواد مطلوب از قبیل 2,3-Dimethoxy-1-) glycerol dimethyl ether (propanol) که باعث بهبود کیفیت احتراقی بیودیزل (عدد ستان) می شوند، ارائه شده است. در فرآیند تبدیل glycerol به GDE (glycerol dimethyl ether) به محاسبات تعادل بخار-مایع برای سه جزء GDE، Methanol و Epichlorohydrin (ECH) نیاز می باشد. در مقاله Ding et al-2015 که به پیوست می باشد، داده های تعادلی آزمایشگاهی برای دو جزئی GDE -Methanol ارائه شده است. ولی با توجه به اینکه داده های GDE در بانک نرم افزار Aspen plus ناقص می باشد، ابتدا باید داده های مورد نیاز ماده مذکور تکمیل شود. بدین منظور می توان از ساختار ملکولی آن که بصورت زیر است استفاده نمود:



الف) داده های آزمایشگاهی تعادل GDE - Methanol را با استفاده از مدل NRTL برازش کرده و پارامترهای حاصله برای مدل NRTL را همراه با خصوصیات آماری آن گزارش کنید ( $C_{ij}$  را برابر با 0.3 در نظر بگیرید).

ب) نمودار  $T-x,y$  پیش بینی شده توسط مدل NRTL را همراه با داده های آزمایشگاهی رسم کنید.

**مسئله دوم:** داده های آزمایشگاهی تعادلی (LLE) برای مخلوط سه جزئی Water، Ethanol و Benzene در سه دمای 30، 40 و 55 درجه سانتیگراد در جدول (1) مقاله Brandani et al, 1985 ارائه شده است (به پیوست می باشد).

الف) پارامترهای مدل NRTL را بر اساس داده های تعادلی LLE مخلوط فوق از طریق رگرسیون محاسبه و گزارش کنید. نمودارهای مثلثی LLE حاصله پس از تنظیم مدل را نیز در سه دمای 30، 40 و 55 درجه سانتیگراد همراه با داده های آزمایشگاهی گزارش کنید.

ب) همانند مثال شرح داده شده در کلاس، یک واحد تقطیر آژئوتروپیک به گونه ای طراحی کنید تا با استفاده از Benzene بتوان آب و اتانل را با خلوص بیش از 99 درصد مولی از هم جدا نمود. مشخصات خوراک را همانند مثال شرح داده شده در کلاس در نظر بگیرید. در تکلیف تحویلی موارد زیر گزارش شود: PFD واحد، موازنه جرم اولیه واحد همراه با نمودار مثلثی آن، جدول نهایی موازنه جرم و انرژی واحد، مشخصات برج اول و دوم (تعداد مراحل، مرحله ورود خوراک، انرژی کندانسور و ریویلر، نسبت جریان برگشتی و یا نسبت بخار برگشتی). توجه: جهت محاسبات تعادلی LLE و VLE از مدل NRTL موجود در نرم افزار اسپن بدون تغییر استفاده کنید.