مجله آموزش مهندسی ایران، شماره ۲۵، سال هفتم، ص. ۴۴-۲۷

شبیه‌سازی فرایند به کمک کامپیوتر برای مهندسان شیمی و ضرورت آموزش آن

رحمت ستوده قره‌باغ

دانشکده فنی دانشگاه تهران

محمدعلی ظریفی

گروه مهندسی کوثر فرایند

چکیده: شبیه‌سازهای فرایند در واقع ابزاری هستند که با استفاده از آن، این امکان برای مهندسان فراهم می‌شود که بتوانند به مدلسازی هر نوع فرایندی که در آن یک جریان پیوسته جرم و انرژی از یک واحد عملیاتی به واحد دیگر برقرار است، بپردازند. امروزه، این نرم‌افزارها به‌طور گسترده درصنایع شیمیایی، پتروشیمی، پالایش نفت و گاز، سوخت‌ها، نیروگاه‌های برق، صنایع معدنی، چوب و کاغذ، صنایع غذایی، صنایع داروسازی و بیوتکنولوژی به‌منظور افزایش سرعت عمل و دقت و افزایش بهره‌وری و کاهش ضایعات و بهینه‌سازی استفاده از منابع شامل مواد اولیه و نهاده‌های انرژی مورد استفاده قرار می‌گیرند. با ایجاد مدل شبیه‌سازی یک دستگاه یا یک خط تولید در شرایط مختلف، رفتار فرایند یا میزان و تغییرات تولید و نیز نقاط بحرانی برای بهینه‌سازی طرح‌های موجود یا طراحی پیش‌بینی می‌شود. در حال حاضر، شبیه‌سازهای فرایند برای انجام‌دادن بسیاری از محاسبات در یک طراحی مورد استفاده قرار می‌گیرد. حتی در ایجاد ایده اولیه فرایند نیز می‌توان به مقدار زیادی از آنها بهره‌گیری کرد. شبیه‌سازهای عمده صنعتی که در مقیاس وسیع در مهندسی، طراحی و شبیه‌سازی فرایند مورد استفاده قرار می‌گیرند، عبارت‌اند از: ASPEN PLUS، HYSYS، PRO II و CHEMCAD. این نرم‌افزارها برای شبیه‌سازی فرایند در حالت استاتیک و دینامیک مورد استفاده قرار می‌گیرند. با توجه به شباهت بسیار زیاد این شبیه‌سازها به یکدیگر، در صورت تبیین درست مفاهیم کاربردی مربوط به یکی از آنها به‌راحتی می‌توان آنها را جایگزین یکدیگر کرد. لذا آموزش این موضوع برای مهندسان شیمی از اهمیت زیادی برخوردار است. در این مقاله ضرورت و نحوه توجه به این زمینه و اهمیت آموزش‌های مرتبط با شبیه‌سازی فرایند مورد بررسی قرار گرفته و در نهایت، پیشنهادی برای ایجاد این درس در برنامه مهندسی شیمی ارائه شده است.

واژه‌های کلیدی: شبیه‌سازی فرایند، آموزش مهندسی شیمی، شبیه‌سازهای صنعتی، طراحی فرایند، طرح توجیه فنی و اقتصادی و طراحی تجهیزات فرایندی.

۱. مقدمه

بسیاری از فرایندهای صنایع شیمیایی به دلیل استفاده از تعداد معادلات و مراحل زیاد و پیچیدگی روابط و الگوریتم باید به کمک کامپیوتر طراحی، آنالیز و شبیه‌سازی شوند. در ابتدای طراحی یک فرایند لازم است با استفاده از داده‌های تقریبی و انجام‌دادن محاسبات سریع کامپیوتری، به یک توجیه فنی و اقتصادی در مورد آن دست یافت تا بتوان در مورد توجیه‌پذیر بودن طرح تصمیم‌گیری کرد. در طی توسعه یک فرایند با دسترسی به مجموعه اطلاعات بیشتر و بررسی جزئیات، فرایند شکل پیچیده‌تری به خود می‌گیرد، لذا لازم است طراحان و مهندسان از مجموعه منابع و برنامه‌های مختلف کامپیوتری کمک بگیرند. نرم‌افزارهایی که امروزه به‌طور مستقیم در خدمت مهندسی فرایند قرار می‌گیرند، عبارت‌اند از: صفحه گسترده‌ها[۱]، نرم‌افزارهای ریاضی[۲] و شبیه‌سازهای فرایند[۳] در حالت استاتیک و دینامیک. گفتنی است که استفاده از زبان‌های برنامه‌نویسی FORTRAN، C و غیره نیز در مهندسی فرایند در شرایط خاص که استفاده از این نرم‌افزارها به‌راحتی ممکن نباشد کم و بیش معمول است. ولی امروزه، بیش از ۹۰٪ محاسبات در مهندسی فرایند با نرم‌افزارهای مذکور انجام می‌پذیرد. جدول ۱ نمونه برنامه‌های کامپیوتری مورد استفاده در شبیه‌سازی فرایند را با آدرس‌های الکترونیکی مربوط نشان می‌دهد. فهرست کاملی از نرم‌افزارهای مهندسی شیمی که شامل بیش از ۱۷۰۰ عنوان است، در سایت انجمن مهندسان شیمی آمریکا (http://www.aiche.org) قابل دسترسی است.

---

۱. Spreadsheet

۲. Mathematical Packages

۳. Process simulators

جدول ۱. نمونه برنامه‌های کامپیوتری مورد استفاده در طراحی و شبیه‌سازی فرایندها صنایع شیمیایی

نوع برنامه	نام برنامه	آدرس اینترنت (URL)[۱]	ملاحظات
صفحه گسترده	COREL QUATTRO PRO	http://www.corel.com	
	LOTUS 123	http://www.lotus.com	
	MICROSOFT EXCEL	http://www.microsoft.com	
ریاضی	DERIVE	http://www.derive.com	تحلیلی
	MACSYMA	http://www.macsyma.com	تحلیلی - عددی
	MAPLE	http://www.maplesoft.com	تحلیلی
	MATHCAD	http://www.mathsoft.com	تحلیلی - عددی
	MATHEMATICA	http://www.mathematica.com	تحلیلی - عددی
	MATLAB	http://www.mathworks.com	عددی - تحلیلی
	POLYMATH	http://www.che.utexas.edu/cache	عددی
	GAMS	http://www.gams.com	بهینه‌سازی
شبیه‌سازهای فرایند	ASPEN PLUS, SPEED UP	http://www.aspentec.com	استاتیک و دینامیک
	CHEMCAD	E-mail:chemstat@phoenix.net	
	HYSIM, HYSIS	http://www.hyprotech.com	استاتیک و دینامیک
	PRO II, PROVISION	http://www.simsci.com	

۲. نرم‌افزارهای مهندسی فرایند

۱.۲. صحفه گسترده‌ها

در دنیای کامپیوترهای شخصی، صفحه گسترده‌های ذکر شده در جدول ۱ از اهمیت ویژه‌ای برای مهندسان شیمی برخوردار است که دلیل عمده استفاده از این نرم‌افزارها، سادگی استفاده از آنها در کنار نرم‌افزارهای پردازشگر متن و همچنین، نرم‌افزارهای اینترنتی است. بسیاری از مهندسان می‌توانند ضمن وارد کردن داده‌های خود به این نرم‌افزارها، با حداقل آموزش به

---

۱. Uniform Resource Locator

استفاده از آنها برای انجام‌دادن محاسبات ریاضی بپردازند. این صفحه گسترده‌ها ساختار ماتریسی دارند و داده‌ها در سطر و ستون‌ها ذخیره و به‌راحتی به حالت شکل و منحنی قابل ارائه هستند. نتایج محاسبات در این نرم‌افزارها در مقایسه با زبان‌های برنامه‌نویسی به‌راحتی قابل پردازش و باکمترین مهارت قابل تجزیه و تحلیل است. با توجه به دلایل مذکور، امروزه مهندسان ترجیح می‌دهند حتی برای حل سیستم معادلات پیچیده غیرخطی به جای استفاده از زبان‌های برنامه‌نویسی مانند FORTRAN از این نرم‌افزارها استفاده کنند. امروزه، صفحه گسترده‌ها کاربرد بسیار وسیعی را در زمینه تهیه طرح توجیه فنی و اقتصادی پروژه‌ها پیدا کرده‌اند. با تعیین شاخص‌های هزینه تجهیزات، مواد اولیه، محصولات نهایی و سیستم تأسیسات با استفاده از این صفحه گسترده‌ها می‌توان میزان سرمایه گذاری، نرخ برگشت سرمایه و بقیه پارامترهای مهم در تهیه طرح توجیه فنی و اقتصادی یک فرایند را به‌راحتی محاسبه و نتایج را در هر قسمت صفحه گسترده به‌دلخواه ثبت کرد. در صورت نیاز به انجام‌دادن محاسبات طولانی و بسیار پیچیده این امکان وجود دارد که بتوان صفحه گسترده‌ها را با زبان‌های برنامه‌نویسی ارتباط داد. به عنوان مثال، می‌توان در EXCEL از VISUAL BASIC برای انجام‌دادن محاسبات پیچیده و تکراری کمک گرفت.

۲.۲. نرم‌افزارهای ریاضی

امروزه، بسیاری از محاسبات مهندسی را می‌توان به‌سرعت و با دقت فوق‌العاده با نرم‌افزارهای ریاضیات تحلیلی و عددی انجام داد. آنالیز سیستم‌های خطی، جبر خطی و ریاضی تحلیلی، حل معادلات دیفرانسیل معمولی و پاره‌ای، سیستم‌های غیرخطی و بهینه‌سازی نمونه‌هایی از محاسبات در مهندسی شیمی‌اند که با این نرم‌افزارها قابل اجرا هستند. البته، از میان این نرم‌افزارها، MATLAB کاربرد بسیار وسیعی را در طراحی فرایند و سیستم‌های کنترل فرایندهای مهندسی شیمی به‌خود اختصاص داده است.

۳.۲. شبیه‌سازهای فرایند

برنامه‌های مرتبط با طراحی فرایند به کمک کامپیوتر که به‌طور وسیع مورد استفاده قرار

می‌گیرند، با عناوین شبیه‌سازهای فرایند[۱]، شبیه‌ساز جریان مواد[۲] یا نرم‌افزارهای مدل‌سازی جریان مواد[۳] موجودند. امکاناتی که یک شبیه‌ساز فرایند می‌تواند در اختیار بگذارد، فقط به انجام‌دادن موازنه جرم و انرژی برای یک دیاگرام جریان (فلوشیت) با جریان برگشتی و اعمال محدودیت طراحی به یک واحد عملیاتی یا جریان محدود نمی‌شود، بلکه شامل بانک‌های داده‌ها، مدل‌های پیش‌بینی خواص فیزیکی، مدل‌های تجهیزات فرایندی، تعیین اندازه و قیمت تجهیزات نیز می‌شوند. بانک‌های داده‌ها شامل اطلاعات خواص فیزیکی، شیمیایی، ترمودینامیکی و انتقالی و اطلاعات مرتبط با تعیین اندازه و محاسبات تجهیزات فرایندی، سرمایه‌گذاری ثابت و در گردش طرح‌ها و توجیه فنی و اقتصادی و غیره‌اند. شبیه‌سازها شامل مدل‌های مختلفی از راکتورها، برج‌ها و تجهیزات فرایندی هستند که در انجام‌دادن محاسبات جرم و انرژی مورد استفاده قرار می‌گیرند. داده‌ها و مدل‌های ترمودینامیکی مخلوط‌ها، روابط و اطلاعات مربوط به اندازه و قیمت تجهیزات فرایندی و محاسبات اقتصادی نیز در شبیه‌سازها قابل دسترسی هستند. امروزه، شبیه‌سازهای فرایند برای انجام‌دادن بسیاری از محاسبات در یک طراحی مورد استفاده قرار می‌گیرند، حتی در ایجاد ایده اولیه فرایند نیز می‌توان به مقدار قابل توجهی از آنها بهره‌گیری کرد. شبیه‌سازهای عمده صنعتی که امروزه در مقیاس وسیع در مهندسی، طراحی و شبیه‌سازی فرایند مورد استفاده قرار می‌گیرند، عبارت‌اند از: ASPEN PLUS، PRO II، HYSYS و CHEMCAD. این نرم‌افزارها برای شبیه‌سازی فرایند در حالت استاتیک و دینامیک مورد استفاده قرار می‌گیرند. با توجه به شباهت بسیار زیاد این شبیه‌سازها به یکدیگر در صورت تبیین درست مفاهیم کاربردی مربوط به یکی از آنها به‌راحتی می‌توان آنها را جایگزین یکدیگر کرد.

۳. دلایل استفاده از شبیه‌سازهای فرایند

شبیه‌سازهای فرایند در واقع ابزاری هستند که با استفاده از آن، این امکان برای مهندسان

---

۱. Process Simulators

۲. Flowsheet Simulators

۳. Flowsheeting Packages

فراهم می‌شود که بتوانند به مدلسازی هر نوع فرایندی که در آن یک جریان پیوسته جرم و انرژی از یک واحد عملیاتی به واحد دیگر برقرار است، بپردازند. امروزه، استفاده از این نرم‌افزارها در صنایع شیمیایی، پتروشیمی، پالایش نفت و گاز، سوخت‌ها، نیروگاه‌های برق، صنایع معدنی، چوب و کاغذ، صنایع غذایی، صنایع داروسازی و بیوتکنولوژی اهمیت ویژه‌ای یافته است. در شبیه‌سازی کامپیوتری، رفتار یک فرایند با استفاده از روابط پایه مهندسی مانند موازنه انرژی و مواد، تعادل فازها و تعادل شیمیایی پیش‌بینی می‌شود؛ به‌عبارت دیگر، با استفاده از داده‌های ترمودینامیکی معتبر، شرایط عملیاتی واقعی و تجهیزات فرایندی مطلوب، می‌توان رفتار واقعی یک کارخانه را شبیه‌سازی و به بهترین الگوی بهینه طراحی دسترسی پیدا کرد. همچنین، می‌توان با ایجاد مدل کامپیوتری یک دستگاه یا یک خط تولید در شرایط مختلف، رفتار فرایند یا میزان و تغییرات تولید را پیش‌بینی کرد و نقاط بحرانی را برای بهینه‌سازی طرح‌های موجود یا طراحی‌های بهینه به‌دست آورد. شبیه‌سازی فرایند در تمام مراحل ایجاد، طراحی و راه‌اندازی هر خط تولیدی دارای فواید فوق‌العاده زیادی است که از جمله آنها می‌توان به موارد زیر اشاره کرد:

الف. شبیه‌سازی فرایند برای مهندسان تحقیق و توسعه این امکان را فراهم می‌کند که بتوانند با حداقل آزمایش‌های تجربی و نیمه‌صنعتی به تغییر ظرفیت خط تولید بپردازند و همچنین، مقایسه مقدماتی فرایندهای مختلف نیز با این ابزار ممکن می‌شود. شبیه‌سازی فرایند در تفسیر داده‌های تجربی واحد نیمه‌صنعتی و آزمایشگاهی نقش کلیدی را ایفا می‌کند.

ب. شبیه‌سازی فرایند به مهندسان طراح این امکان را می‌دهد که بتوانند با سرعت و دقت به طراحی پایه بپردازند و گزینه‌های مختلف را در مورد یک فرایند مورد ارزیابی قرار دهند. به‌طور کلی، شبیه‌سازی در طراحی فرایند در موارد زیر کاربرد دارد:

- مقایسه گزینه‌های مختلف در مورد یک فرایند
- موازنه انرژی و مواد
- طراحی تجهیزات
- ارزیابی کارکرد در شرایط مختلف عملیاتی فرضی و واقعی
- تجزیه و تحلیل مسائل مالی و تهیه طرح توجیه فنی و اقتصادی

ج. مهندسان تولید با استفاده از از شبیه‌سازها می‌توانند رفتار فرایند را در اثر تغییر شرایط عملیاتی پیش‌بینی و به‌راحتی تغییرات و اصلاحات لازم را در حین راهبری آن اعمال کنند. در حالت کلی، شبیه‌سازی فرایند در موارد زیر به مهندسان تولید کمک می‌کند:

- پیش‌بینی نحوه انجام‌دادن تغییرات با توجه به مشخصات منابع و مواد اولیه؛
- ارزیابی اصلاحات لازم برای یک فرایند شامل توسعه کارخانه یا تغییر بخشی از آن؛
- تخمین کارکرد و راندمان تجهیزات فرایندی به صورت جزء به جزء و یکپارچه؛
- کاهش هزینه‌های تولید مانند هزینه‌های آزمایشگاه، تغییر مواد اولیه و... .

در طراحی، شبیه‌سازی و آنالیز یک فرایند، دو نوع دیاگرام به نام‌های دیاگرام فرایند و دیاگرام شبیه‌سازی شده به کار گرفته می‌شود. دیاگرام شبیه‌سازی شده در قالب یک مدل، برای ایجاد یک فرایند از ابتدایی‌ترین مرحله پرورش یک ایده تا آخرین مرحله آن به کار گرفته می‌شود. در توسعه یک فرایند یا راهبری کارخانه، ورودی مدل معمولاً شامل اطلاعات موجود در دیاگرام فرایند و خروجی معمولاً بیان کامل عملکرد یک کارخانه شامل ترکیب مواد سازنده، دبی جریان‌ها، خواص جریان‌های میانی و نهایی و کارکرد واحدهای عملیاتی است. در طرح توسعه به محض آماده شدن یک دیاگرام جریان اولیه می‌توان مدل شبیه‌سازی شده آن را بر روی یک شبیه‌ساز پیاده کرد و در صورت حصول اطلاعات جدید، این مدل به‌راحتی قابلیت روزآمد شدن را دارد. به‌علاوه، در مراحل ابتدایی طرح می‌توان با استفاده از این مدل، طرح توجیه فنی و اقتصادی اولیه را تهیه و اثرهای تغییر تکنولوژی را روی فرایند مورد بررسی قرار داد. مدل مذکور قادر است در تفسیر داده‌های نیمه‌صنعتی کمک شایانی کند و امکان مطالعه گزینه‌های مختلف را فراهم سازد. در مرحله طراحی، پس از تصمیم در خصوص ساخت یک کارخانه جدید یا مدرن کردن آن، می‌توان با مدل کامپیوتری در مورد مطالعه امکان‌پذیری استفاده از مواد اولیه گوناگون و همچنین، رفتار فرایند در شرایط خارج از طراحی اولیه اقدام کرد. مشخصاً شبیه‌سازی در طراحی فرایند این امکان را نیز فراهم می‌کند که بتوان در مرحله عملیات و راهبری فرایند از اشتباهات پرهزینه و خطرناک جلوگیری کرد و نیز مهندسان فرایند بتوانند با استفاده از مدل شبیه‌سازی شده در زمینه

بهینه‌سازی آن با انجام‌دادن مطالعات موردی[1] که عبارت از نحوه کارکرد کارخانه در شرایط مختلف عملیات است، اقدام کنند. مدل کامپیوتری برای یک کارخانه موجود می‌تواند به‌عنوان ابزاری قوی برای بهبود کارکرد، افزایش راندمان و ظرفیت و بهینه‌سازی مصرف انرژی به کار گرفته شود. به‌علاوه، این مدل قادر خواهد بود تغییرات لازم را در شرایط عملیاتی به‌منظور استفاده کارخانه از یک ماده اولیه مشخص تا رسیدن به یک مشخصات معین از محصولات و با شرایط زیست‌محیطی حاکم پیش‌بینی و مهندسان تولید را در کاهش هزینه‌ها و افزایش بهره‌وری راهنمایی کند. با این شبیه‌سازی همچنین، راهکارهای لازم برای رفع موانع موجود در استفاده از تکنولوژی جدید در قسمت‌های مختلف کارخانه مانند استفاده از کاتالیست، حلال یا واحد عملیاتی جدید قابل دستیابی است.

۴. عملیات مهم در طراحی فرایند به کمک کامپیوتر

در مهندسی شیمی برای طراحی فرایند، تجهیزات زیادی با عنوان واحدهای عملیاتی مانند برج‌های تقطیر، جذب، دفع، تبخیرکننده‌ها، دکانتورها، مبدل‌های حرارتی، انواع فیلترها، پمپ‌ها و راکتورها استفاده می‌شود. این تجهیزات فرایندی برای اجرای عملیاتی شامل واکنش‌های شیمیایی، جداسازی عناصر، جداسازی فازها، تغییر درجه حرارت، تغییر فشار، تغییر فازها و اختلاط و تقسیم جریان‌ها بر روی مواد اولیه مورد استفاده قرار می‌گیرند. برای ایجاد یک فرایند به منظور تبدیل مواد اولیه به محصولات نهایی از ترکیب این مراحل استفاده می‌شود و اولین قدم در ایجاد یک فرایند، شناسایی مراحل عملیاتی مورد نیاز و در گام بعدی، ترکیب منطقی این مراحل با توجه به محدودیت‌های منابع و انتخاب بهترین روش برای سازماندهی طرح مورد نظر است که با توجه به اهمیت این مراحل در قسمت بعد به هر یک از آنها اشاره می‌شود.

عملیات مرتبط با واکنش‌های شیمیایی اساسی‌ترین عملیات در یک فرایند تلقی می‌شوند که غالباً در راکتورهای شیمیایی انجام می‌شوند. در قراردادن یک راکتور در داخل یک فرایند ملاحظات زیادی باید مد نظر قرار گیرد که از جمله آنها می‌توان به درصد تبدیل،

---

۱. Case Study

واکنش‌های جانبی و سرعت واکنش‌ها اشاره کرد. البته، این پارامترها به شرایط عملیاتی مانند درجه حرارت و فشار بستگی دارد. از طرفی، تأمین انرژی مورد نیاز برای انجام‌شدن واکنش برای رسیدن به درصد تبدیل و گزینش‌پذیری مطلوب باید مدنظر قرار گیرد. در صورت وجود واکنش‌های خیلی گرمازا در فرایند، روش‌های کنترل شرایط عملیاتی و حذف انرژی مدنظر قرار می‌گیرد.

عملیات مرتبط با جداسازی در اکثر فرایندهای صنایع شیمیایی وجود دارد. این عملیات برای حذف اختلاف در ترکیب عناصر سازنده جریان میانی (خروجی از یک واحد عملیاتی) با ترکیب محصولات نهایی و همچنین، در واحدهای جداسازی در شرایطی که ماده اولیه دارای ناخالصی باشد یا مواد اولیه واکنش نکرده در خروجی یک راکتور وجود داشته باشد، مورد استفاده قرار می‌گیرد. انتخاب نوع عملیات جداسازی با اختلاف خواص فیزیکی اجزای سازنده یک مخلوط ارتباط دارد. به عنوان مثال، وقتی اختلاف در فراریت زیاد باشد، از واحدهای جداسازی گاز ـ مایع و در بعضی مخلوط‌ها که اختلاف در نقطه ذوب عناصر سازنده آنها قابل توجه است، از سیستم‌های جداسازی مایع ـ جامد استفاده می‌شود. حتی در مواقعی که اختلاف در فراریت کم باشد نیز می‌توان از سیستم‌های استخراج کمک گرفت. در بسیاری از عملیات جداسازی، عملیات جداسازی فازها نیز اهمیت پیدا می‌کند که برای این منظور می‌توان از جداکننده‌های گاز ـ مایع یا رسوب‌دهنده‌ها استفاده کرد.

یکی دیگر از تصمیمات بسیار مهمی که در طی یک فرایند اتفاق می‌افتد، نیاز به تغییر درجه حرارت یا کاهش اختلاف آنها در بین جریان‌های میانی با محصولات نهایی است. لذا برای این منظور باید سیستم‌های تبادل حرارتی به فرایند اضافه شود. معمولاً از قراردادن عملیات مربوط به تغییر فشار در فرایند نظیر توربین و کمپرسور گاز، پمپ مایع و شیرهای افت فشار در مراحل ابتدایی ایجاد یک فرایند صرف‌نظر می‌شود. در خیلی از موارد اختلاف چشمگیری در مورد نوع فاز جریان خروجی از یک واحد عملیاتی و جریان ورودی به واحد بعدی وجود دارد. برای مثال، بخارات خروجی از یک راکتور در یک کندانسور مایع می‌تواند مایع و سپس وارد یک سیستم جداسازی مانند برج تقطیر شود. در این شرایط، در طراحی یک فرایند استفاده از عملیات تغییر فاز معمول است. برای این منظور می‌توان از تجهیزات فرایندی مانند مبدل‌های حرارتی و شیرهای فشارشکن برای کاهش درجه حرارت

یا فشار استفاده کرد. یکی دیگر از عملیاتی که در طراحی فرایند مورد استفاده قرار می‌گیرد، فرایند اختلاط است که معمولاً برای اختلاط دو یا چند جریان برای رسیدن به مشخصات یکسان به کار می‌رود. در طراحی یک فرایند از مخلوط کننده‌ها برای حذف اختلاف اجزا بین جریان‌ها استفاده می‌شود. از آنجایی که اثر اختلاط روی راندمان ترمودینامیکی و مصرف انرژی چندان قابل توجه نیست، در خیلی از موارد نیاز به معرفی این عملیات در فرایند اولیه نخواهد بود، مگر اینکه ضرورت خاصی احساس شود.

۵. مراحل مورد نیاز در طراحی یک فرایند با کمک کامپیوتر

با در نظر گرفتن شرایط مربوط به مواد اولیه و محصولات نهایی، وظیفه یک مدل کامپیوتری عبارت است از: انتخاب یک روش عملیاتی برای تبدیل مواد اولیه به محصولات نهایی. بنابراین، هر عملیات به عنوان ابزاری برای تغییر یک یا چند خاصیت در خواص فیزیکی مورد استفاده قرار می‌گیرد. به محض استقرار یک واحد عملیاتی در داخل یک فرایند محصول خروجی در این مرحله از نظر خواص فیزیکی به محصولات نهایی نزدیک‌تر می‌شود. به عنوان مثال، در صورتی که یک راکتور در مسیر جریان مواد اولیه قرار گیرد، در این صورت جریان خروجی از نظر نوع مواد تشکیل‌دهنده به محصولات نهایی نزدیک‌تر ولی از نظر ترکیب مواد سازنده، فشار، درجه حرارت و نوع فازها دستخوش تغییراتی می‌شود. برای از بین بردن بقیه تفاوت‌ها لازم است که از تجهیزات فرایندی دیگری استفاده شود. چنانچه در این مرحله از یک فرایند جداسازی و پس از آن از عملیات تغییر فشار، درجه حرارت و فاز در مسیر فرایند استفاده شود، در این صورت اختلاف باقی مانده بسیار کم خواهد بود. در حالت کلی می‌توان گفت که واحدهای عملیاتی به این منظور در فرایند مورد استفاده قرار می‌گیرند که اختلاف مربوط به خواص فیزیکی، شرایط عملیاتی، نوع و ترکیب مواد سازنده بین مواد اولیه و محصولات نهایی از بین برود. بنابراین، خواص مربوط به جریان خروجی از آخرین واحد عملیاتی به خواص محصولات نزدیک‌تر است. در جدول ۲ عوامل مؤثر در آنالیز یک فرایند برای حذف تفاوت بین مواد اولیه و محصولات نهایی نشان داده شده است.

جدول ۲. عوامل مؤثر در آنالیز و طراحی فرایند به کمک کامپیوتر

مرحله آنالیز فرایند	نوع عملیات
حذف اختلاف مربوط به نوع مولکول‌ها	واکنش شیمیایی
توزیع مواد شیمیایی بین جریان‌های مختلف	اختلاط
حذف اختلاف در ترکیب مواد سازنده	جداسازی
حذف اختلاف فشار، درجه حرارت و فازها	تغییر شرایط عملیاتی
ترکیب مراحل در قالب یک فرایند	استفاده از شبیه‌سازها

۶. کاربرد شبیه‌سازهای فرایند در آنالیز، طراحی و شبیه‌سازی فرایند

در این قسمت، نحوه استفاده از شبیه‌سازهای صنعتی برای آنالیز، طراحی، شبیه‌سازی و ایجاد بهترین فرایند مورد بررسی قرار می‌گیرد. با داشتن اطلاعات مقدماتی در مورد یک فرایند می‌توان با استفاده از شبیه‌سازها به مجهولاتی مانند درجه حرارت، فشار و دبی جریان‌ها دسترسی پیدا کرد. در هر فرایند موجود، شبیه‌سازی به کمک کامپیوتر این امکان را فراهم می‌سازد تا بتوان با استفاده از تغییر شرایط عملیاتی به رفتار آن پی برد و همچنین، شرایط بهینه را برای کاهش ضایعات همزمان با افزایش بهره‌وری پیدا کرد.

۱.۶. شبیه‌سازی فرایند

برای اجرای شبیه‌سازی یک فرایند، قدم اول ایجاد و شناسایی دیاگرام جریان مواد است. دیاگرام جریان مواد در واقع زبان یک فرایند شیمیایی است. با استفاده از دیاگرام جریان مواد می‌توان یک فرایند را شناسایی یا یک دیاگرام فرضی را با اطلاعات کافی برای اجرای شبیه‌سازی به تصویر کشید. با استفاده از آنالیز و شبیه‌سازی فرایند، مهندسان شیمی قادرند تا ضمن تفسیر عملکرد و راندمان یک فرایند، نقاط کور را در آن شناسایی و راندمان را در شرایط مختلف عملیاتی، بدون نیاز به صرف هزنیه زیاد و راهبری واحد عملیاتی، پیش‌بینی کنند. قلب شبیه‌سازی، مدل ریاضی فرایند است که متغیرهای عملیاتی را مانند درجه حرارت، فشار، دبی، ترکیب جریان‌ها و... به یکدیگر ارتباط می‌دهد. با شبیه‌سازها در حالت پایا می‌توان با معلوم‌بودن تعدادی از متغیرها، با حل مدل ریاضی به مجهولات دسترسی پیدا کرد.

۲.۶. سطوح مختلف شبیه‌سازی فرایند

سطوح مختلف شبیه‌سازی فرایند با توجه به سطح پیچیدگی آن به انواع زیر تقسیم می‌شود:

- سطح اول: موازنه مواد
- سطح دوم: موازنه مواد و انرژی
- سطح سوم: تعیین اندازه دستگاه‌ها
- سطح چهارم: مطالعه حساسیت، بهینه‌سازی و مطالعه موردی
- سطح پنجم: توجیه فنی و اقتصادی

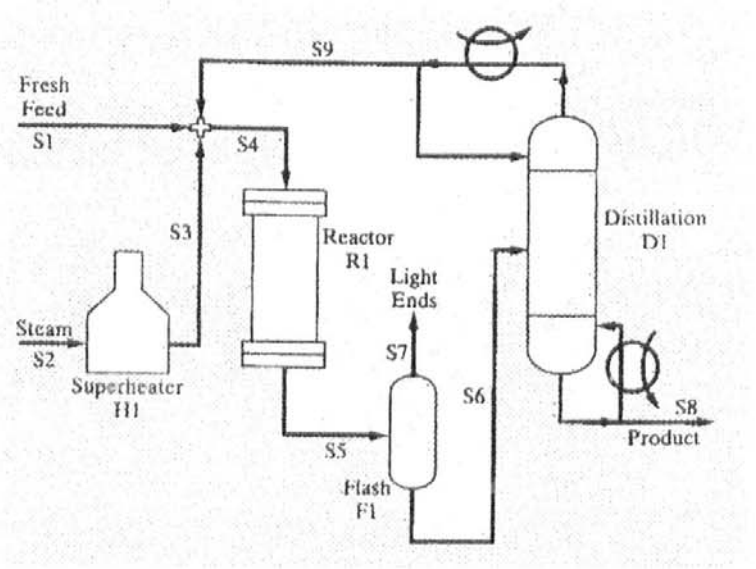
با افزایش سطح پیچیدگی، دسته معادلات بیشتری به مدل ریاضی اضافه می‌شود که در صورت افزایش متغیرهای جدید، حل معادلات شکل پیچیده‌تری به خود می‌گیرد. خوشبختانه، در فرایندهای شیمیایی تجهیزات فرایندی کم و بیش مشترک‌اند که مبدل‌های حرارتی، پمپ‌ها و برج‌های جداسازی از این قبیل به‌شمار می‌روند. همچنین، علی‌رغم اینکه برای واحدهای عملیاتی خواص فیزیکی، ترمودینامیکی و ثابت‌های مربوط به سرعت واکنش‌ها متفاوت است، ولی معادلات مورد استفاده در فرایندهای مختلف تفاوتی نمی‌کند. لذا با این فرض، می‌توان مدلی را برای یک عملیات خاص تعریف و در کتابخانه مدل‌های عملیاتی یک شبیه‌ساز قرار داد تا در موقع لزوم مورد استفاده قرار گیرد. این مدل‌های کتابخانه‌ای[۱] در انجام‌دادن موازنه جرم و انرژی، محاسبات اندازه و هزینه تجهیزات مورد استفاده قرار می‌گیرند. البته، این امکان در داخل شبیه‌سازها پیش‌بینی شده است که در صورت لزوم بتوان به‌غیر از مدل‌های استاندارد موجود در شبیه‌سازها، مدل‌های جدیدی را نیز به فرم همین مدل‌ها تعریف کرد و به‌راحتی مورد استفاده قرار داد که این مهم با استفاده از زبان‌های برنامه‌نویسی مانند FORTRAN یا C ممکن می‌شود. بدین ترتیب، با ترکیب واحدهای عملیاتی استاندارد موجود در کتابخانه یک شبیه‌ساز و احیاناً مدل‌های جدید می‌توان با جریان‌های رابط به ایجاد دیاگرام شبیه‌سازی[۲] اقدام کرد. با ایجاد دیاگرام در کامپیوتر با

---

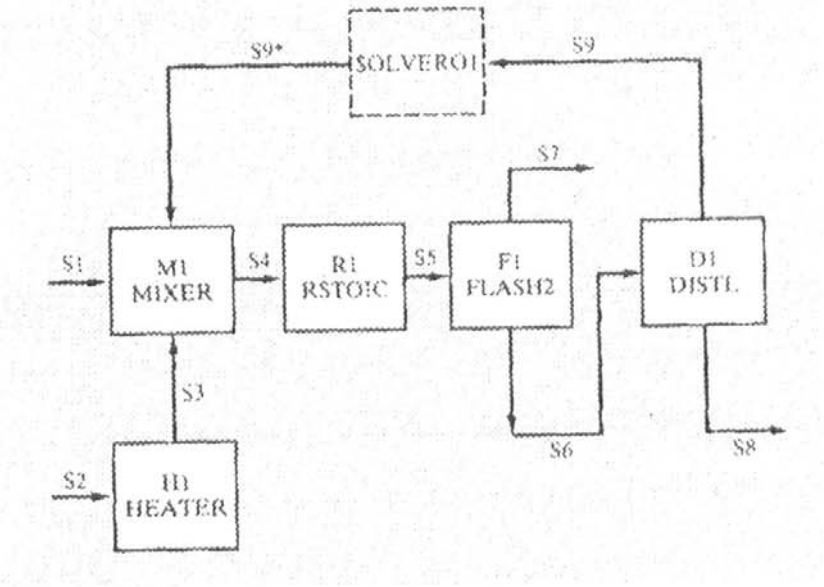
۱. Modules, or Block

۲. Simulation Flowsheet

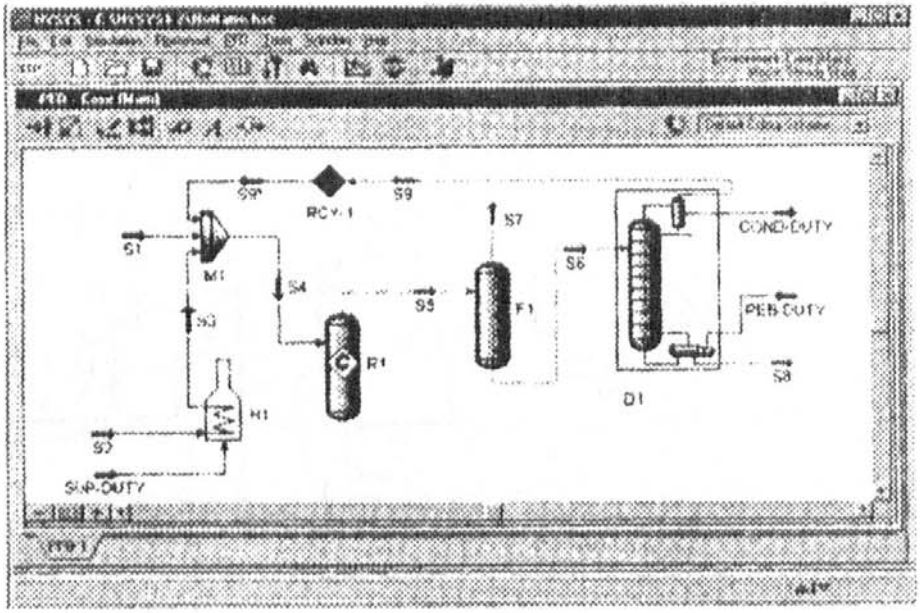
استفاده از واحدهای عملیاتی، مدل کامپیوتری ایجاد شده و معادلات لازم را نوشته و با استفاده از یک روش حل عددی مانند روش نیوتن - رافسون، می‌توان آنها را به‌طور همزمان حل کرد و مجهولات را به‌دست آورد. البته، توضیح این نکته ضروری است که بین دیاگرام جریان مواد و شبیه‌ساز تفاوت وجود دارد، به‌طوری که در شبیه‌سازی هدف نشان دادن دیاگرام جریان اطلاعات است، ولی در دیاگرام جریان مواد هدف نشان دادن جریان جرم و انرژی در سیستم است. در شکل ۱ تفاوت بین دیاگرام فرایند، دیاگرام جعبه‌ای شبیه‌سازی شده و دیاگرام ایجاد شده با یک شبیه‌ساز مانند HYSIS برای یک فرایند ساده و در جدول ۳ مدل‌های عملیاتی موجود در کتابخانه شبیه‌ساز HYSIS ارائه شده است.



الف. دیاگرام فرایند



ب. دیاگرام جعبه‌ای شبیه‌سازی شده



ج. دیاگرام ایجادشده توسط HYSIS

شکل ۱. مقایسه بین دیاگرام فرایند با دیاگرام جعبه‌ای و دیاگرام ایجاد شده با HYSIS برای یک فرایند ساده

جدول ۳. مدل‌های عملیاتی استاندارد موجود در کتابخانه شبیه‌ساز HYSIS

نوع عملیات	نام مدل کتابخانه‌ای	توضیحات
اختلاط و تقسیم جریان	Mixer	اختلاط جریان‌ها
	Tee	تقسیم جریان
جداکننده‌ها	Component Splitter	تقسیم اجزای سازنده با دو جریان خروجی
فلش	Separator 3-Phase	بیش از یک جریان ورودی، یک جریان خروجی بخار و یک جریان مایع
	Separator Tank	بیش از یک جریان ورودی، یک جریان خروجی بخار و دو جریان مایع
تقطیر به روش میانبر	Shortcut Column	روش Fenske - Underwood
جداسازی چندمرحله‌ای	Column	جداسازی چندمرحله‌ای شامل تقطیر، جذب، دفع، تصفیه‌کننده سیستم‌های استخراج، تمام مدل‌های به همراه محاسبات برای ۲ یا ۳ فاز با واکنش‌های شیمیایی و استفاده از مدل‌های موجود در خصوص خواص فیزیکی برای فرایندهای نفت، گاز و پتروشیمی
مبدل‌های حرارتی	Cooler/Heater	برای شبیه‌سازی سیستم گرمایشی و سرمایشی
	Heat Exchanger	مبدل حرارتی با دو جریان
	Lng	مبدل حرارتی با چند جریان
راکتور	Conversion Reactor	مشخص کردن درصد یا مقدار تبدیل جزء اصلی
	Equilibrium Reactor	واکنش‌های تعادلی با استفاده از استوکیومتری
	Gibbs Reactor	تعادل شیمیایی چندفازی بدون نیاز به استوکیومتری واکنش‌ها
	CSTR	راکتور کاملاً به همزده
	PER	راکتور پیستونی
تجهیزات انتقال سیال	Pump	شبیه‌سازی پمپ یا توربین‌های هیدرولیکی
	Compressor	شبیه‌سازی کمپرسور
	Expander	شبیه‌سازی توربین
	Valve	شبیه‌سازی شیر آدیاباتیک
	Pipe Segment	شبیه‌سازی خطوط لوله یک یا چند فازی

۳.۶. مراحل شبیه‌سازی کامپیوتری یک فرایند

شبیه‌سازی برای ایجاد یک مدل کامپیوتری شامل مراحل زیر است:

مرحله ۱: ایجاد دیاگرام شبیه‌سازی (شکل ۱) بر روی شبیه‌ساز با استفاده از مدل‌های استاندارد واحدهای عملیاتی موجود در کتابخانه شبیه‌ساز (جدول ۳) یا مدل‌های تعریف شده توسط کاربر و اتصال مدل‌های کوچک به هم برای ایجاد مدلی کامل از کل فرایند؛

مرحله ۲: استفاده از بانک‌های داده‌ها برای تعریف خواص مورد استفاده در فرایند [شبیه‌سازها معمولاً دارای بانک داده‌های فیزیکی و شیمیایی برای مواد خالص، مواد آلی، معدنی، الکترولیت‌ها و داده‌های احتراق هستند و امکان وارد کردن داده‌های خاص و جدید نیز توسط کاربر به بانک وجود دارد]؛

مرحله ۳: تعیین مدل‌های لازم برای پیش‌بینی خواص فیزیکی و ترمودینامیکی برای گازها، مایعات و مخلوط‌ها [امکان معرفی مدل‌های جدید به شبیه ساز وجود دارد]؛

مرحله ۴: واردکردن اطلاعات مربوط به جریان‌های ورودی و شرایط عملیاتی واحدها [پس از اینکه تمام مشخصات مربوط به جریان‌های ورودی و واحدهای عملیاتی تعیین شد، در این صورت مدل آماده اجرا توسط کامپیوتر می‌شود]؛

مرحله ۵: اجرای شبیه‌سازی اولیه برای به‌دست آوردن بیلان جرم و انرژی؛

مرحله ۶: استفاده از توابع جانبی برای به‌دست آوردن اطلاعات تکمیلی و کاربردی از مدل کامپیوتری [به عنوان مثال با انتخاب یک تابع هدف بهینه‌سازی می‌توان شرایط عملیاتی بهینه برای افزایش ظرفیت و کاهش ضایعات با محدودیت‌های خاص را به‌دست آورد. به‌علاوه، با قابلیت Case Study می‌توان برای حالت‌های مختلف مدل ریاضی را حل و رفتار مدل را برای تصمیم‌گیری‌های بعدی پیش‌بینی کرد]؛

مرحله ۷: همگرایی جریان‌های برگشتی در محاسبات واحدهای عملیاتی از مشکلات اساسی

در شبیه‌سازی است. نظر به اینکه مبنای محاسبات مربوط به همگرایی، استفاده از بهترین روش و بهترین مقدار اولیه است، با مقادیر از پیش تعریف شده برای مدل همگرایی، شبیه‌سازها این امکان را فراهم می‌کنند که در موارد بسیاری نیاز به تغییر پارامترها نباشد، هرچند در صورت لزوم اعمال تغییرات برای رسیدن به یک همگرایی با دقت مطلوب انجام‌شدنی است؛

مرحله ۸: در مواردی می‌توان از الگوریتم‌های تکمیلی برای محاسبات واحدهای عملیاتی مانند ایجاد یک مدل خاص برای واحد عملیاتی غیراستاندارد در محیط شبیه‌ساز با استفاده از زبان‌های معمول مانند FORTRAN یا C اقدام کرد؛

مرحله ۹: در مواقعی که قسمتی از فرایند با مشخصات یا محدودیت خاصی مواجه است، اعمال آن شرایط با فعال‌کردن گزینه مربوط و با افزایش درجه آزادی در یکی از جریان‌های ورودی یا داده‌های مربوط به شرایط عملیاتی به سیستم انجام می‌شود و مدل با شرایط جدید قابل حل است؛

مرحله ۱۰: آنالیز حساسیت نیز یکی از آنالیزهای بسیار قوی است که در عمده شبیه‌سازها پیش‌بینی شده است که با این گزینه حساسیت پارامترهای مختلف و رفتار سیستم به تغییرات برای افزایش یا کاهش ظرفیت یا تغییرات شرایط عملیاتی مورد مطالعه قرار می‌گیرد.

۷. پیشنهاد ایجاد درس شبیه‌سازی فرایند به کمک کامپیوتر

با توجه به موارد مذکور در مقاله، ایجاد یک درس شبیه‌سازی فرایند با مشخصات زیر برای دانشجویان مقطع کارشناسی پیشنهاد می‌شود. با توجه به کاربردی بودن محتویات درس در صنعت، امید است که این مهم بتواند قابلیت‌های شغلی فارغ‌التحصیلان را ارتقا بخشد و موجب توسعه و تعالی صنعت شود.

تعداد واحد:	۳ واحد
نوع واحد:	۲ واحد نظری و ۱ واحد عملی
هدف:	آموزش مباحث طراحی و شبیه‌سازی فرایند به کمک کامپیوتر
پیشنیاز:	عملیات واحد I و طراحی راکتور

سرفصل دروس:

۱. مقدمه‌ای بر شبیه‌سازی فرایند

۲. مبانی شبیه‌سازی فرایند

۳. کاربرد نرم‌افزارهای صنعتی در شبیه‌سازی

۴. انتخاب مدل‌های فیزیکی و ترمودینامیکی مناسب برای شبیه‌سازی

۵. آنالیز درجه آزادی در واحدهای عملیاتی و فرایند

۶. شبیه‌سازی واحدهای عملیاتی استاندارد (مبدل‌های حرارتی، سیستم‌های جداسازی و واکنش‌های شیمیایی در سیستم‌های ایده‌آل)

۷. بررسی و آنالیز فرایند

۸. شبیه‌سازی فرایند با واحدهای عملیاتی استاندارد

۹. سنتز تفصیلی فرایند و جریان‌های برگشتی و حلقه‌ها و محدودیت‌ها

۱۰. روش‌های آنالیز دیاگرام‌های جریان مواد با محدودیت (Constraint) و جریان برگشتی

۱۱. مطالعات موردی

۱۲. آنالیز حساسیت فرایند به شرایط غیرطراحی (Off-design operating conditions)

۱۳. روش‌های پردازش اطلاعات تولید شده در کامپیوتر

۱۴. اجرای یک پروژه شبیه‌سازی

(تاریخ دریافت مقاله: ۸۳/۹/۲)

مراجع

1. Process Simulation Using HYSIS by R. Sotudeh - Gharebagh and N. Mostoufi, Boshra Publishing Co., 2005.

2. Process Design Principles: Synthesis, Analysis, and Evaluation by Warren D. Seider, J.D. Seader, Daniel R. Lewin, John Wiley and Sons, 1999.