

## ارزیابی کارایی جداسازی یک ستون تقطیر چندجزئی صنعتی توسط مدل تعادلی بهبودیافته بر اساس محاسبات بازدهی‌های چندجزئی

هادی پورتالاری<sup>1</sup>، فرشاد ورامینیان<sup>2\*</sup>، جواد کریمی ثابت<sup>3</sup>

<sup>1</sup> دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز، دانشگاه سمنان، ایران

<sup>2</sup> دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز دانشگاه سمنان، ایران

<sup>3</sup> پژوهشکده چرخه سوخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، تهران

نوع مقاله: ترویجی

دریافت: 1398/04/22 پذیرش: 1398/11/02

### چکیده

در کار حاضر یک ستون تقطیر چندجزئی صنعتی برای جداسازی ایزوبوتان و نرمال بوتان توسط مدل مرحله‌ی تعادلی بهبودیافته بر اساس بازدهی‌های چندجزئی شبیه‌سازی شده است. شبیه‌سازی در شرایط پایا با محاسبه‌ی بازدهی‌های مورف‌ری نقطه‌ای و مرحله‌ای اجزا انجام می‌شود. ابتدا بازدهی‌های نقطه‌ای بر مبنای نظریه‌ی دوفیلمی و انتقال جرم چندجزئی محاسبه می‌شوند. بعد به کمک یک مدل مناسب اختلاط مایع، بازدهی‌های مرحله‌ای تعیین و در قالب روابط تعادلی بخار-مایع وارد روند شبیه‌سازی می‌شوند. از آنجایی که توصیف اختلاط مایع روی سینی‌ها در تعیین بازدهی‌های مرحله‌ای مؤثر است، در کار حاضر چندین مدل مختلف برای اختلاط مایع بررسی و نتایج حاصل شامل روند تغییرات دما و غلظت محصولات با مقادیر آزمایشگاهی مقایسه شده‌اند. مقایسه‌ها نشان می‌دهند که مدل‌های جریان قالبی و اختلاط جزئی توانسته‌اند به خوبی روند تغییرات را پیش‌بینی کنند، به طوری که دماها و ترکیب محصولات به ترتیب اختلاف متوسط 0/5٪ و 21٪ نسبت به داده‌های اندازه‌گیری دارند.

**کلمات کلیدی:** مدل‌سازی تعادلی بهبودیافته، بازدهی مورف‌ری، بازدهی مرحله‌ای، مدل اختلاط مایع، نظریه‌ی دوفیلمی، انتقال جرم چندجزئی

## 1- مقدمه

در میان تجهیزات جداسازی، ستون‌های تقطیر سینی‌دار کاربردهای وسیعی در صنایع شیمیایی و پتروشیمی دارند. به دلیل هزینه‌های سرمایه‌گذاری و عملیاتی عظیم مربوط به ستون‌های تقطیر صنعتی، داشتن دانش دقیق از تئوری فرآیند برای اهداف طراحی از اهمیت فوق‌العاده‌ای برخوردار است. به‌طور طبیعی هزینه‌ی انجام آزمایش برای درک بهتر شرایط حاکم بر فرآیند و تعیین پارامترهای بهینه بسیار زیاد است، از همین رو بهره‌گیری از ابزار شبیه‌سازی و مدل‌سازی می‌تواند به مهندسان طراح برای توصیف این عملیات واحد با صرف هزینه‌های ناچیز کمک کند [1-4].

اساساً دو الگوی برای مدل کردن انتقال جرم بخار-مایع روی یک سینی تقطیر مورد استفاده قرار می‌گیرد: الگوی مرحله‌ی تعادلی و الگوی مبتنی بر نرخ انتقال<sup>1</sup>. متداول‌ترین روش مدل‌سازی فرآیند تقطیر، روش مرحله‌ی تعادلی است. مهندسان شیمی بیش از یک قرن است که ستون‌های تقطیر را با روش مرحله‌ی تعادلی مدل می‌کنند [5]. در این روش فرض می‌شود که فازهای بخار و مایع خروجی از یک سینی در تعادل ترمودینامیکی باشند. از آنجایی که اطلاعات جزئی از طراحی تجهیزات در روش تعادلی نیاز نیست، به‌کارگیری آن در مدل‌سازی تقطیر با دشواری چندانی همراه نیست. از طرف دیگر این روش مدل‌سازی نیازمند حداقل اطلاعات ورودی شامل ثابت تعادل بخار-مایع (K-value) و آنتالپی جریان‌ها است. سرعت محاسبات نیز در این روش بسیار زیاد است.

اما رفتار سینی‌های واقعی هیچ‌گاه کاملاً ایده‌آل نیست و در عمل از شرایط تعادلی فاصله دارد، هرچند همواره تلاش می‌شود که با طراحی مناسب و تنظیم شرایط عملیاتی به این شرایط نزدیک شد. تماس ناقص بخار-مایع، زمان ماند ناکافی، ماندگی بخار و مایع و توزیع ضعیف بخار و مایع در ستون از جمله دلایل انحراف یک عملیات تقطیر واقعی از حالت تعادل هستند [6]. مهندسان طراح همواره علاقه‌مند به در نظر گرفتن مراحل جداسازی واقعی به جای مراحل تعادلی ایده‌آل هستند. بنابراین برای مدل‌سازی یک ستون واقعی لازم است فرض مرحله‌ی تعادلی به نحوی اصلاح شود. مشخص شده که انحراف از شرایط تعادلی در طراحی و عملیات ستون‌های تقطیر اثرات قابل توجهی دارد، به‌طوری که این امر می‌تواند کارایی ستون را تا 50% عملیات ایده‌آل کاهش دهد [7]. بنابراین لازم است انحراف از حالت تعادل در شبیه‌سازی ستون‌های تقطیر به نوعی در نظر گرفته شود. به‌طور کلی دو روش متداول برای توصیف انحراف از حالت تعادل در سینی‌ها و غلبه بر فاصله‌ی میان مدل و واقعیت پیشنهاد می‌شود: روش بازدهی‌های مرحله‌ای و روش مبتنی بر نرخ انتقال.

در روش اول با وارد کردن مفهوم بازدهی در روند شبیه‌سازی تعادلی تقطیر می‌توان با در نظر گرفتن فاصله از شرایط تعادل در هر مرحله، نتایج حاصل از روش تعادلی را بهبود بخشید. اشراف به نظریه‌ی بازدهی‌های مرحله‌ای و توانایی تخمین بازدهی‌ها در طراحی یک ستون تقطیر صنعتی از اهمیت بسیاری برخوردار است، زیرا با در نظر گرفتن بازدهی‌ها در روند طراحی می‌توان تعداد مراحل واقعی موردنیاز را تخمین زد. در مقابل از روش مبتنی بر نرخ انتقال هم برای توصیف انحراف از حالت تعادل در مراحل تقطیر استفاده می‌شود. در روش دوم موسوم به روش مبتنی بر نرخ انتقال، نرخ‌های انتقال جرم بین فاز برای یک سینی واقعی به صورت مستقیم محاسبه و وارد معادلات موازنه‌ی جرم می‌شوند. اگرچه توصیف فرآیند تقطیر به کمک این روش همراه با دقت بسیار بالایی است و اطلاعات جزئی‌تری از این عملیات واحد در اختیار قرار می‌دهد، اما این امر نیازمند در اختیار داشتن بسیاری از جزئیات طراحی و اطلاعات

1- rate-based

مربوط به اجزای مختلف ستون تقطیر است. علاوه بر این پیش‌بینی ضرایب انتقال جرم چندجزئی و محاسبه‌ی نرخ‌های انتقال جرم بین فاز و نهایتاً حل مجموعه‌ی معادلات در این روش، هزینه‌ی محاسباتی سنگین‌تری را می‌طلبد. از آنجایی که ممکن است تمام اطلاعات موردنیاز برای مدل‌سازی یک ستون تقطیر صنعتی به روش مبتنی بر نرخ انتقال در اختیار نباشد و از طرفی نیاز به توصیف دقیق‌تری نسبت به روش تعادلی باشد تا بتوان یک تحلیل مطمئن از این عملیات واحد انجام داد، بنابراین روش مدل‌سازی تعادلی بهبودیافته مبتنی بر بازدهی‌های مرحله‌ای تقطیر می‌تواند یک انتخاب مناسب باشد تا بتوان با صرف هزینه‌های محاسباتی قابل قبول، اطلاعات دقیقی از ستون تقطیر مورد نظر به دست آورد.

به‌رغم تحقیقات انجام شده طی دهه‌های مختلف پیرامون موضوع تقطیر هنوز نقاط ابهامی در به‌کارگیری و انتخاب مدل بازدهی مناسب در مدل‌سازی ستون‌های تقطیر وجود دارد [8] و از همین رو همچنان محققان روی مدل‌سازی تقطیر بر مبنای مفهوم بازدهی کار می‌کنند. در روش تعادلی بهبودیافته بر اساس مفهوم بازدهی، نزدیکی به شرایط تعادل برای هر جزء یا هر مرحله و یا به طور متوسط برای کل ستون تخمین زده می‌شود. در روش مدل‌سازی مبتنی بر بازدهی‌های تقطیر ابتدا تعداد مراحل تئوری (ایده‌آل) موردنیاز برای فرآیند تقطیر مدنظر تعیین و سپس مفهوم بازدهی وارد محاسبات می‌شود تا تعداد مراحل واقعی لازم برای رسیدن به سطح جداسازی مطلوب به دست آید. بسته به دقت و ضریب اطمینان بازدهی‌های محاسبه شده، عملاً تعداد مشخصی مرحله به مراحل تئوری اضافه می‌شود. غالباً این کار توسط نرم‌افزارهای تجاری شبیه‌سازی مثل Aspen plus، Prosim و Hysys انجام می‌گیرد، اما بیش‌تر این نرم‌افزارها با مراحل ایده‌آل سروکار دارند و کاربر باید بر اساس دید خود نسبت به بازدهی ستون تقطیر، تعداد مراحل ایده‌آل را به‌عنوان ورودی شبیه‌سازی مشخص کند. هرچند برخی شبیه‌سازها امکان تعریف بازدهی‌های مرحله‌ای ثابت را به‌عنوان ورودی به کاربر می‌دهند، اما هیچ‌یک از برنامه‌های شبیه‌ساز تجاری امکان بهره‌گیری از محاسبات بازدهی طی روند مدل‌سازی تعادلی ستون تقطیر و اصلاح معادلات مدل بر این اساس را ندارند [8]. شبیه‌سازهای غیرتعادلی مثل Ratefrac در Aspen Plus [9] و Chemsep [10, 11] می‌توانند از نتایج شبیه‌سازی‌های غیرتعادلی، بازدهی‌های نقطه‌ای را محاسبه کنند، اما مقادیر بازدهی‌ها حین حل معادلات مدل به کار نمی‌روند. با وجود این که تئوری تقطیر کاملاً شناخته شده است، اما روش‌های تخمین بازدهی‌های تقطیر هنوز از دقت بالایی برخوردار نیستند [12]. معمولاً بازدهی‌ها از آزمایش یا روش‌های تجربی به‌دست می‌آیند و از بازدهی‌های یکسانی برای تمام مراحل در ستون تقطیر استفاده می‌شود، اما به صورت تجربی نشان داده شده است که در مخلوط‌های چندجزئی بازدهی‌های مورفوری در هر سینی نسبت به سینی بعدی و حتی برای هر جزء نسبت به جزء دیگر متفاوت هستند. حتی در مخلوط‌های ایده‌آل که بازدهی‌های نقطه‌ای تمام اجزای یکسان است، نشان داده شده که بازدهی‌های مراحل متفاوت از هم هستند [13]. بنابراین اگر بتوان بازدهی‌های مراحل را در طول روند شبیه‌سازی تخمین زد، می‌توان با اجتناب از طراحی غیرضروری بزرگ‌تر از اندازه<sup>2</sup>، روند طراحی ستون را بهبود بخشید و در نتیجه در هزینه‌های عملیاتی و هزینه‌های سرمایه‌گذاری اولیه صرفه‌جویی قابل توجهی کرد.

عموماً در کارهای تحقیقاتی مختلف از روش مدل‌سازی مبتنی بر بازدهی برای شبیه‌سازی فرآیندهای تقطیر دوجزئی استفاده می‌شود [14] و کم‌تر مشاهده شده که از محاسبات بازدهی چندجزئی بر اساس نظریه‌ی انتقال جرم چندجزئی

برای شبیه‌سازی فرآیندهای تقطیر چندجزئی استفاده شود. علاوه بر این تمرکز روی انتخاب مدل مناسب توصیف اختلاط مایع روی سینی‌ها برای تبدیل بازدهی‌های نقطه‌ای به بازدهی‌های مرحله‌ای در کارهای تحقیقاتی پیشین مورد توجه قرار نگرفته است. بر این اساس هدف اصلی کار حاضر استفاده از روش تعادلی بهبودیافته بر اساس بازدهی‌های چندجزئی برای شبیه‌سازی یک ستون تقطیر چندجزئی در مقیاس صنعتی است. در کنار این هدف روش‌های مختلف توصیف اختلاط مایع روی سینی‌ها هم مورد ارزیابی قرار گرفته و نتایج آن‌ها با هم مقایسه شده‌اند. مدل ارائه شده از روابط تعداد مراحل انتقال (NTUs) برای تخمین تعداد واحدهای انتقال دوجزئی برای تمام اجزا استفاده می‌کند. با استفاده از این مقادیر، بازدهی‌های نقطه‌ای چندجزئی بر اساس نظریه‌ی انتقال جرم چندجزئی و نظریه‌ی دوفیلمی محاسبه می‌شوند. سپس به کمک یک مدل مناسب برای توصیف اختلاط مایع روی سینی‌ها، بازدهی‌های نقطه‌ای تبدیل به بازدهی‌های مرحله‌ای می‌شوند. بازدهی‌های مرحله‌ای به دست آمده به‌طور مستقیم وارد روند شبیه‌سازی می‌شوند تا الگوی تغییرات دما و ترکیب اجزا در راستای ستون پیش‌بینی شوند. در نهایت نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌ها با داده‌های گزارش شده برای ستون تقطیر موردنظر مقایسه می‌شوند. در این کار شبیه‌سازی با استفاده از یک برنامه‌ی محاسباتی نوشته شده با نرم‌افزار متلب انجام شده است.

## 2- مبانی مدل بازدهی‌های تقطیر

بازدهی مورفری بخار معروف‌ترین تعریف برای بازدهی مرحله‌ای محسوب می‌شود، چرا که به راحتی می‌توان آن را وارد روابط تعادلی کرد. به‌طور معمول سه تعریف اساسی برای بازدهی مورفری در فرآیند تقطیر مطرح می‌شود:

\* **بازدهی مورفری مرحله‌ای:** که عبارت است از نسبت جداسازی واقعی به دست آمده به جداسازی حاصله در شرایط تعادلی. معمولاً بازدهی مورفری برحسب ترکیب متوسط اجزای بخار به صورت زیر تعریف می‌شود [15]:

$$E_{MV} = \frac{y_{i,n+1} - \bar{y}_{i,n}}{y_{i,n+1} - y_{i,n}^*} \quad (1)$$

که  $y_{i,n}^*$  ترکیب بخار در تعادل با مایع خروجی از سینی  $i$  و  $\bar{y}_{i,n}$  مقدار متوسط ترکیب بخار جزء  $i$  در سینی  $n$  هستند.

\* **بازدهی نقطه‌ای:** مفهوم بازدهی نقطه‌ای برای حالت عمومی‌تر تعریف می‌شود، وقتی که ترکیب مایع در عرض سینی تغییر می‌کند اما در راستای عمودی یکنواخت است. بنابراین برای جزء  $i$  در سینی  $n$  در هر فاصله‌ی افقی از نودان در هر نقطه از سینی بازدهی برابر است با [15]:

$$E_{OV} = \frac{y_{i,n+1} - y_{i,n}}{y_{i,n+1} - y_{i,n}^*} \quad (2)$$

در اینجا  $y_{i,n}$  معرف ترکیب جزء  $i$  در هر نقطه‌ی مشخص از سینی  $n$  است.

\* **بازدهی کلی ستون:** که عبارت است از نسبت تعداد مراحل تئوری ایده‌آل به تعداد مراحل واقعی لازم:

$$E_{OC} = \frac{N_t}{N_a} \quad (3)$$

## 2-1- پیش‌بینی بازدهی‌ها در مخلوط‌های چندجزئی

تخمین بازدهی‌ها بر اساس نظریه‌ی انتقال جرم چندجزئی و نظریه‌ی دوفیلمی انجام می‌شود. الگوی تخمین بازدهی‌های تقطیر مشتمل بر سلسله‌ای از مراحل است که برای هر مرحله در ستون تقطیر تا زمان همگرایی مدل

ریاضی پیاده می‌شود. محاسبه‌ی بازدهی‌های چندجزئی بر پایه‌ی روش ماتریسی انجام می‌شود. شکل 1 توالی مراحل مورد استفاده در روش ماتریسی را برای محاسبه‌ی بازدهی‌ها نشان می‌دهد. مطابق با روند ارائه شده در شکل 1، ابتدا خواص فیزیکی فازهای بخار و مایع روی سینی در دما، فشار و غلظت اجزای مربوط به آن سینی پیش‌بینی می‌شوند. این خواص برای تمام سینی‌ها در هر گام محاسباتی طی روند شبیه‌سازی محاسبه می‌شوند. در مرحله‌ی بعد تعداد واحدهای انتقال جرم (NTU) بخار و مایع برای تمام جفت‌های دوجزئی موجود در مخلوط چندجزئی محاسبه می‌شوند.



شکل 1. روند کلی پیش‌بینی بازدهی‌های چندجزئی.

روش‌های متعددی برای محاسبه‌ی NTUها وجود دارد که پرکاربردترین آن‌ها روش AICHE [16] است. بر این اساس تعداد واحدهای انتقال فازهای بخار و مایع به ترتیب توسط روابط (4) و (5) به دست آمده می‌آیند:

$$N_{ij}^V = (0.776 + 4.57 h_w - 0.238 F + 104.8 Q_L/W) / \sqrt{Sc_{ij}^V} \quad (4)$$

$$N_{ij}^L = 1.97 \times 10^4 \sqrt{D_{ij}^L} (0.40 F + 0.17) t_L \quad (5)$$

که در این روابط  $h_w$  ارتفاع بند خروجی،  $F$  فاکتور  $F$ ،  $Q_L$  دبی حجمی مایع،  $W$  طول مسیر جریان مایع،  $Sc_{ij}^V$  عدد اشمیت فاز بخار،  $D_{ij}^L$  ضریب نفوذ فیک فاز مایع و  $t_L$  زمان ماند ماند فاز مایع هستند. در گام بعد ماتریس‌های چندجزئی تعداد واحدهای انتقال به دست آمده می‌آیند. این ماتریس‌ها از درایه‌های ماتریس‌های وارون  $[N^V]^{-1}$  و  $[N^L]^{-1}$  برحسب تعداد واحدهای انتقال دوجزئی به صورت زیر محاسبه می‌شوند:

$$N_{ii}^{-1} = \frac{z_i}{N_{ic}} + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^c \frac{z_k}{N_{ik}} \quad (6)$$

$$N_{ij}^{-1} = -z_i + \left( \frac{1}{N_{ij}} - \frac{1}{N_{ic}} \right) \quad (7)$$

که  $N_{ij}$  همان تعداد واحدهای انتقال دوجزئی فاز مورد نظر است.  $N_{ii}^{-1}$  و  $N_{ij}^{-1}$  مؤلفه‌های ماتریس‌های وارون و  $Z$  غلظت روی سینی هستند. بر اساس ماتریس‌های به دست آمده برای تعداد واحدهای انتقال چندجزئی در مرحله‌ی بعدی ماتریس تعداد کلی واحدهای انتقال فاز بخار به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$[N^{OV}]^{-1} = [N^V]^{-1} + \frac{V}{L} [K][N^L]^{-1} \quad (8)$$

که  $[K]$  یک ماتریس قطری شامل ثوابت تعادلی (K-values) مربوط به c-1 جزء اول و  $[N^V]$  و  $[N^L]$  ماتریس‌های تعداد واحدهای انتقال چندجزئی بخار و مایع هستند. ماتریس بازدهی‌های مورفوری نقطه‌ای از ماتریس تعداد کلی واحدهای انتقال بخار توسط رابطه‌ی زیر تعیین می‌شود:

$$[E^{OV}] = [I] - \exp([N^{OV}]) \quad (9)$$

در این رابطه  $[I]$  معرف ماتریس یگه است. در نهایت ماتریس بازدهی‌های مورفوری مرحله‌ای بر اساس ماتریس بازدهی‌های نقطه‌ای محاسبه می‌شود. اما برای این کار نیاز به در نظر گرفتن پدیده‌های اختلاط مایع و بخار در سینی‌ها است. انواع ملاحظات اختلاط مایع و بخار در جدول 1 ارائه شده‌اند. معمولاً فاز بخار میان سینی‌ها با اختلاط کامل در نظر گرفته می‌شود. بررسی‌ها نشان می‌دهند که این فرض در ستون‌های صنعتی با توجه به مقادیر کم طول مسیر جریان مایع و فواصل سینی‌ها فرض مناسبی است و اختلاط فاز بخار تأثیر ناچیزی روی بازدهی‌های مرحله‌ای دارد [13].

جدول 1. مدل‌های اختلاط مایع و بخار برای یک سینی

اختلاط مایع روی سینی	اختلاط بخار میان سینی‌ها
اختلاط کامل	اختلاط کامل
جریان قالبی	جریان قالبی
اختلاط جزئی	

وقتی قطر ستون کوچک باشد، می‌توان مایع روی سینی‌ها را کاملاً مختلط<sup>3</sup> در نظر گرفت. در این شرایط هیچ تفاوت غلظتی در نقاط مختلف روی سینی وجود ندارد و بازدهی‌های مرحله‌ای با بازدهی‌های نقطه‌ای برابر می‌شوند. این مدل ساده‌ترین مدل اختلاط مایع محسوب می‌شود. زمانی که قطر ستون افزایش پیدا می‌کند، اختلاف غلظت روی سینی‌ها ایجاد می‌شود. حالت حدی زمانی است که مایع در مسیر جریان کاملاً نامختلط اما در راستای عمودی کاملاً مختلط باشد. این مدل اختلاط موسوم به مدل جریان قالبی<sup>4</sup> است. بر اساس این مدل بازدهی‌های مرحله‌ای به صورت زیر به بازدهی‌های نقطه‌ای تبدیل می‌شوند [17]:

$$E^{MV} = \frac{\exp(\lambda E^{OV}) - 1}{\lambda E^{OV}}, \quad \lambda = m \frac{V}{L} \quad (10)$$

3- Totally mixed

4- Plug flow

که در این رابطه  $m$  شیب خط تعادلی است. مدل سوم مربوط به شرایطی است که مایع روی سینی نه کاملاً مختلط باشد و نه به صورت قالبی جریان یابد، بلکه دارای اختلاط جزئی<sup>5</sup> باشد. در این شرایط باید به نحوی درجه‌ی اختلاط روی سینی مشخص شود. درجه‌ی اختلاط در یک سیستم توسط عدد بدون بعد پکلت مشخص می‌شود:

$$Pe = \frac{Z^2}{t_L D_e} \quad (11)$$

در شرایط اختلاط کامل پکلت برابر با صفر و برای جریان قالبی پکلت معادل با بی‌نهایت است. در معادله‌ی 11 ضریب نفوذ گردابه<sup>6</sup> ( $D_e$ ) با رابطه‌ی زیر، ارائه شده از طرف ولج و همکاران [18] تخمین زده می‌شود:

$$D_e = 0.088 \frac{Q_L}{W h_{cl}} \quad (12)$$

که در این معادله ارتفاع شفاف مایع ( $h_{cl}$ ) از رابطه‌ی ارائه شده از طرف بیت و همکاران [19] تعیین می‌شود:

$$h_{cl} = \alpha_e \left\{ h_w + C \left( \frac{Q_L}{W \alpha_e} \right)^{0.67} \right\} \quad (13)$$

$$\alpha_e = \exp \left\{ -12.55 \left( u_s \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L - \rho_L}} \right)^{0.91} \right\}$$

$$C = 0.50 + 0.438 \exp(-137.8 h_w)$$

تاکنون مدل‌های مختلفی برای در نظر گرفتن اختلاط روی سینی معرفی شده‌اند که در میان آن‌ها معمولاً از مدل حوضچه‌های اختلاط<sup>7</sup>، پیشنهاد شده توسط آسلی و هاسلدن [20] استفاده می‌شود. بر این اساس تعداد حوضچه‌های با اختلاط کامل روی یک سینی به صورت زیر تعیین می‌شود:

$$n = \frac{Pe + 2}{2} \quad (14)$$

پس از تعیین تعداد حوضچه‌های با اختلاط کامل می‌توان بازدهی نقطه‌ای را به صورت زیر به بازدهی مرحله‌ای تبدیل کرد:

$$E^{MV} = \frac{\left[ 1 + \frac{\lambda E^{OV}}{N} \right]^N - 1}{\lambda}, \quad \lambda = m \frac{V}{L} \quad (15)$$

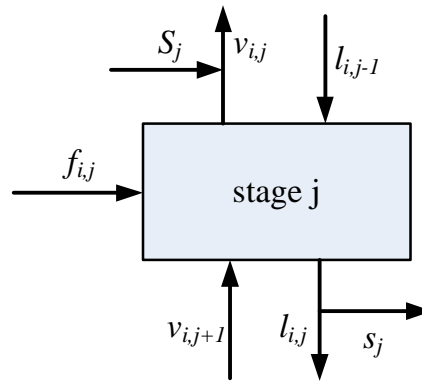
### 3- جزئیات مدل‌سازی

یک ستون تقطیر به صورت مجموعه‌ای از  $N$  مرحله‌ی جداسازی با چگالنده در بالا به عنوان مرحله‌ی 1 و جوش‌آور در پایین به عنوان مرحله‌ی  $N$  در نظر گرفته می‌شود. نمایی از یک مرحله‌ی جداسازی منفرد در شکل 2 ارائه شده است.

5- Partially mixed

6- eddy diffusion coefficient

7- mixed pools model



شکل 2. نمایی از یک مرحله‌ی جداسازی منفرد.

که در این شکل دبی مولی اجزا و نسبت جریان‌های جانبی به ترتیب عبارت‌اند از:

$$v_{i,j} = V_j y_{i,j} \quad , \quad l_{i,j} = L_j x_{i,j} \quad , \quad f_{i,j} = F_j z_{i,j} \quad , \quad S_j = SV_j/V_j \quad , \quad s_j = SL_j/L_j$$

مجموعه‌ی معادلات مدل‌سازی ستون تقطیر یک دستگاه معادلات جبری غیرخطی وابسته به هم ایجاد می‌کنند که باید با روش‌های عددی تکراری حل شوند. روش‌های مختلفی برای حل مجموعه معادلات ارائه شده است که یکی از متداول‌ترین آن‌ها روش نیوتن-رافسون بهبودیافته [22,21] است و معمولاً از آن برای حل مسائل متنوع بدون هیچ محدودیتی استفاده می‌شود. روند همگرایی در این روش بسیار سریع است، علاوه بر این می‌توان از آن برای مدل‌سازی فرآیندهای جداسازی محلول‌های غیرآیده‌آل هم استفاده کرد. بر اساس روش نیوتن-رافسون مجموعه‌ی معادلات مدل برای هر مرحله به صورت زیر نوشته می‌شوند [23]:

\* معادله‌ی موازنه‌ی انرژی (یک معادله)

$$H_j: (1 + S_j) H_j^V \sum_{k=1}^c v_{k,j} + (1 + s_j) H_j^L \sum_{k=1}^c l_{k,j} - H_{j+1}^V \sum_{k=1}^c v_{k,j+1} \quad (16)$$

$$- H_{j-1}^L \sum_{k=1}^c l_{k,j-1} - H_{j+1}^V \sum_{k=1}^c v_{k,j+1} - H_{j-1}^L \sum_{k=1}^c l_{k,j-1} - H_j^F \sum_{k=1}^c f_{k,j} - Q_j = 0$$

\* معادلات موازنه‌ی جرم اجزا (c معادله)

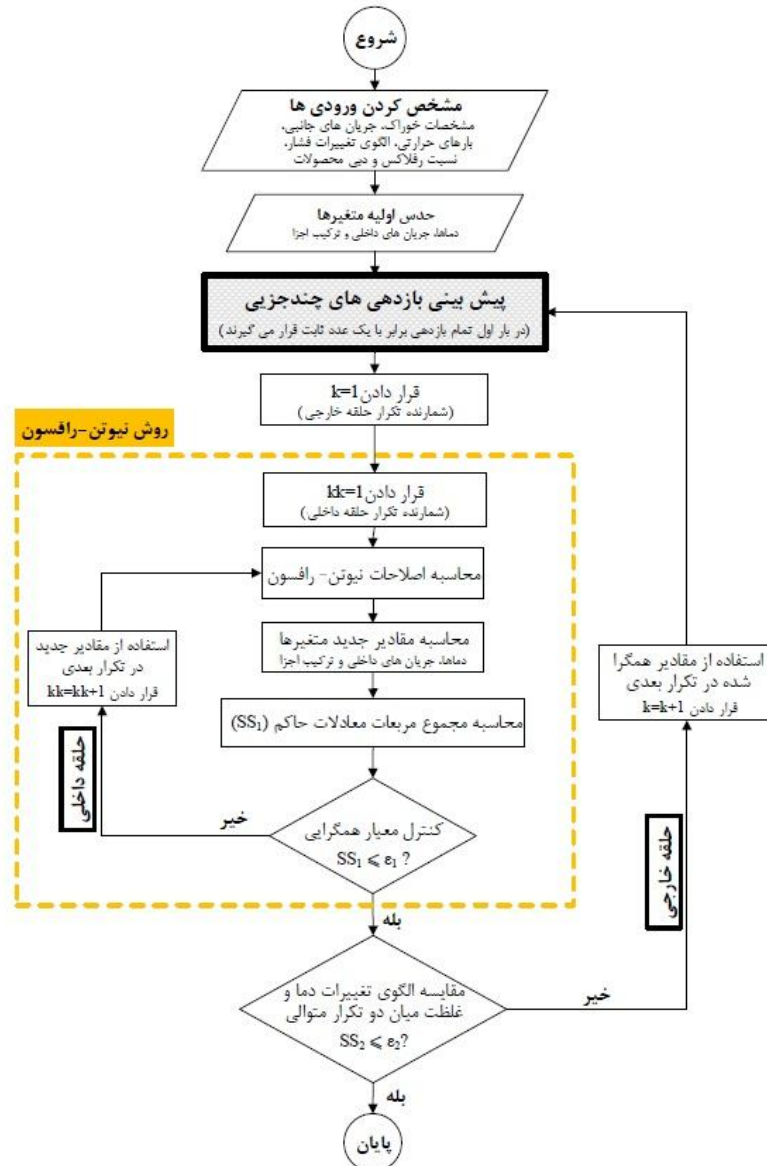
$$M_{i,j}: (1 + S_j) v_{i,j} + (1 + s_j) l_{i,j} - v_{i,j+1} - l_{i,j-1} - f_{i,j} = 0 \quad (17)$$

\* روابط تعادلی اجزا (c معادله)

$$E_{i,j}: E_j^{MV} K_{i,j} l_{i,j} \left( \sum_{k=1}^c v_{k,j} / \sum_{k=1}^c l_{k,j} \right) - v_{i,j} + (1 - E_j^{MV}) v_{i,j+1} \left( \sum_{k=1}^c v_{k,j} / \sum_{k=1}^c v_{k,j+1} \right) = 0 \quad (18)$$

این مجموعه معادلات باید برای تک تک مراحل نوشته شوند که در این صورت برای یک ستون N مرحله‌ای مجموعاً باید  $N(2c+1)$  معادله را حل کرد. تمام معادلات مدل به صورت هم زمان توسط روش نیوتن-رافسون بهبودیافته حل می‌شوند. روند حل معادلات در فلوچارت ارائه شده در شکل 3 تشریح شده است.



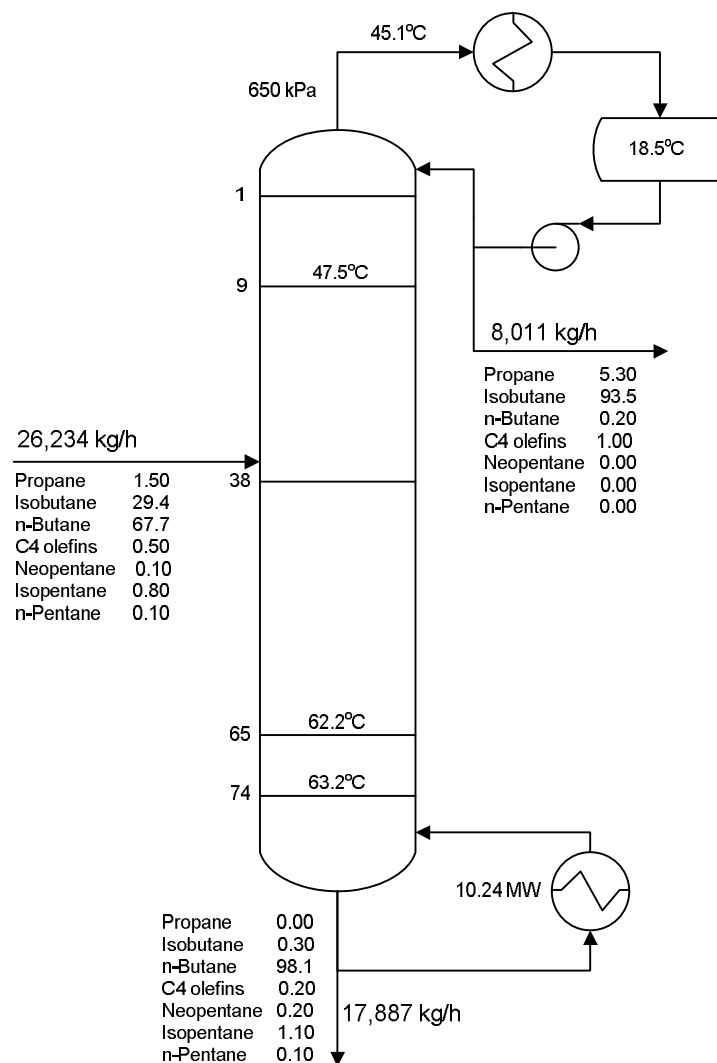


شکل 3. روند حل مجموعه معادلات مدل به روش نیوتن-رافسون.

همان‌طور که مشخص است، روند حل شامل دو حلقه‌ی محاسباتی است؛ حلقه‌ی خارجی و حلقه‌ی داخلی. در هر گام محاسباتی ابتدا در حلقه‌ی خارجی مقادیر بازدهی‌های چندجزئی پیش‌بینی می‌شوند و سپس از این مقادیر برای تعیین الگوی تغییرات دما و غلظت‌ها در راستای ستون درون حلقه‌ی داخلی استفاده می‌شود. همگرایی نهایی زمانی حاصل می‌شود که نتایج حاصل از دو تکرار متوالی یکسان شوند. بازدهی‌های نقطه‌ای در هر گام محاسباتی با استفاده از رابطه‌ی AICHE برای تعداد واحدهای انتقال دوجزئی به دست آمده می‌آیند و بعد با استفاده از مدل اختلاط موردنظر، این مقادیر تبدیل به بازدهی‌های مورفوری مرحله‌ای می‌شوند. روند محاسبه‌ی بازدهی‌های چندجزئی در هر مرحله پیش‌تر در شکل 1 ارائه شده بود.

در کار حاضر یک ستون تقطیر چندجزئی صنعتی برای جداسازی مخلوطی از هیدروکربن‌ها شبیه‌سازی شده است. کلمولا و ایلیم [12] آزمایش‌هایی با این ستون تقطیر چندجزئی انجام دادند و داده‌های تجربی موردنیاز را از آن استخراج کردند. ستون موردنظر یک ستون تقطیر صنعتی است که ایزوبوتان و نرمال‌بوتان را از یک خوراک مایع با ترکیب درصد جرمی 29/4% ایزوبوتان، 67/7% نرمال‌بوتان، 1/5% پروپان، 1% پنتان و 0/5% باقیمانده هم اولفین‌های  $C_4$  جدا می‌کند. شکل 4 نمای ساده‌ای از ستون تقطیر مورد بحث را نشان می‌دهد.

ستون تقطیر موردنظر با قطر 2/9 متر و ارتفاع 51/8 متر دارای 74 سینی است. مشخصات ستون تقطیر همراه با جزئیات مربوط به سینی‌ها در شکل 4 ارائه شده است. داده‌های آزمایشگاهی موردنیاز شامل دبی جریان‌ها، دماها و فشارهای مراحل مختلف از طریق سیستم اتوماسیون جمع‌آوری شده‌اند. شرایط عملیاتی ستون طی چندین روز رصد شده تا از عملیات ستون در حالت پایا اطمینان حاصل شود.



شکل 4. نمودار جریان ستون جداسازی ایزوبوتان - نرمال‌بوتان همراه با داده‌های اندازه‌گیری شده.

آنالیز جریان‌ها و داده‌های جمع‌آوری شده در شکل 4 ارائه شده‌اند. شبیه‌سازی ستون تقطیر موردنظر با مشخص کردن ترمودینامیک سیستم، دبی خوراک، شرایط و ترکیب خوراک و هندسه‌ی ستون و سینی‌ها به عنوان ورودی‌های برنامه‌ی محاسباتی نوشته شده انجام شده است. از آن جایی که مخلوط خوراک یک مخلوط هیدروکربنی ایده‌آل است از معادله‌ی حالت SRK [24] برای محاسبات تعادل فازی استفاده شده است. مشخصات کامل مورد استفاده در برنامه‌ی شبیه‌سازی در جدول 2 ارائه شده‌اند. طی روند شبیه‌سازی نیاز به تخمین مجموعه‌ای از خواص فیزیکی در هر گام محاسباتی است. روش‌های مورد استفاده در کار حاضر برای تخمین خواص فیزیکی موردنیاز در جدول 3 ارائه شده‌اند.

جدول 2. مشخصات ورودی برای شبیه‌سازی ستون تقطیر.

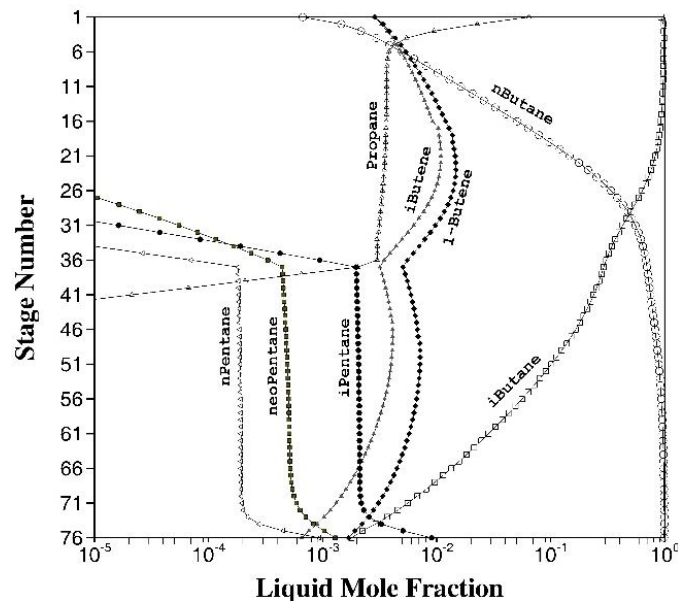
مشخصات ستون تقطیر	داده‌های عملیاتی	مشخصات ترمودینامیکی سیستم
2/9 قطر ستون (m)	26122 دبی خوراک؛ kg/h	<u>محاسبات تعادل فازی</u>
4/9 سطح فعال سینی (m <sup>2</sup> )	<u>ترکیب خوراک (درصد وزنی)</u>	
0/967 طول مسیر جریان (m)	1/54 پروپان	SRK ضرایب فوگاسیته‌ی مایع
two-pass Ballast V-1 valve نوع سینی‌ها	29/5 ایزوبوتان	SRK ضرایب فوگاسیته‌ی بخار
1/859 طول بند؛ کناری (m)	67/7 نرمال بوتان	<u>محاسبات آنتالپی اجزا</u>
2/885 طول بند؛ وسطی (m)	0/2 ایزوبوتن	
51 ارتفاع بند در خروجی (mm)	0/13 1-بوتن	SRK آنتالپی مایع
	0/11 نئوپنتان	SRK آنتالپی بخار
	0/77 ایزوپنتان	
	0/08 نرمال پنتان	
	تعداد مراحل	
	76 (با کندانسور و ریویلر)	
	38 مرحله‌ی خوراک	
	76 و 1 مراحل محصولات فاز محصولات	
	مایع	
	8123 دبی محصول بالایی؛ kg/h	
	17999 دبی محصول پایینی؛ kg/h	
	11/43 نسبت جریان برگشتی	
	292 دمای جریان برگشتی؛ K	
	0/47 افت فشار هر سینی؛ kPa	

### جدول 3. تخمین خواص فیزیکی موردنیاز برای شبیه‌سازی [25].

روش	خاصیت
معادله‌ی آنتوان	فشار بخار
روش Wilke-Lee	ضریب نفوذ دوجزئی فاز بخار
	ضریب نفوذ دوجزئی فاز مایع
روش Reddy-Doraisway	در رقت بی‌نهایت
روش Vignes	در رقت محدود
روش Chung	ویسکوزیته‌ی خالص بخار
روش Wilke	ویسکوزیته‌ی مخلوط بخار
روابط مبتنی بر داده‌های تجربی ویسکوزیته‌ی مایع	ویسکوزیته‌ی خالص مایع
معادله‌ی حالت SRK	فوگاسیته

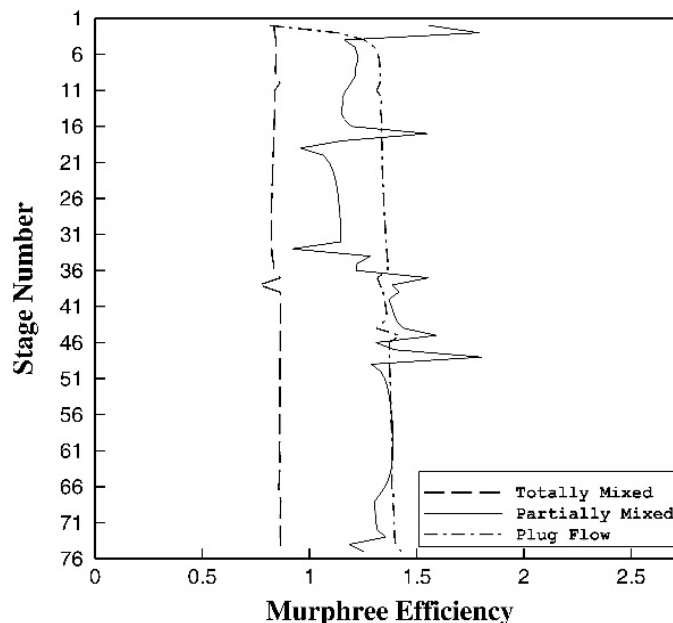
#### 4- نتایج و تحلیل

در ابتدا ستون تقطیر مورد نظر بر اساس مدل اختلاط جزئی مایع به عنوان مدل پایه برای شبیه‌سازی‌ها مدل شده است تا روند تغییر غلظت‌های تمام اجزا در راستای ستون مشخص شود. شکل 5 الگوی تغییرات غلظت اجزای حاضر در مخلوط خوراک مربوط به فاز مایع را در طول ستون نشان می‌دهد. برای نمایش مطلوب تغییرات غلظت تمام اجزا در شکل، محور غلظت (محور افقی) به صورت لگاریتمی رسم شده است. همان‌طور که مشخص است در تمام طول ستون تنها غلظت دو جزء نرمال بوتان و ایزوبوتان قابل توجه است و غلظت سایر اجزا در مقایسه با این دو جزء ناچیز است. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که عملیات تقطیر چندجزئی مدنظر بسیار شبیه به یک فرآیند جداسازی دوجزئی میان ایزوبوتان و نرمال بوتان است. در حقیقت می‌توان ایزوبوتان را جزء کلیدی سبک و نرمال بوتان را جزء کلیدی سنگین در نظر گرفت. بنابراین نتایج ارائه شده در ادامه همگی مربوط به دو جزء کلیدی حاضر در ستون هستند و از ارائه‌ی نتایج سایر اجزا برای پرهیز از شلوغی نمودارها خودداری می‌شود.



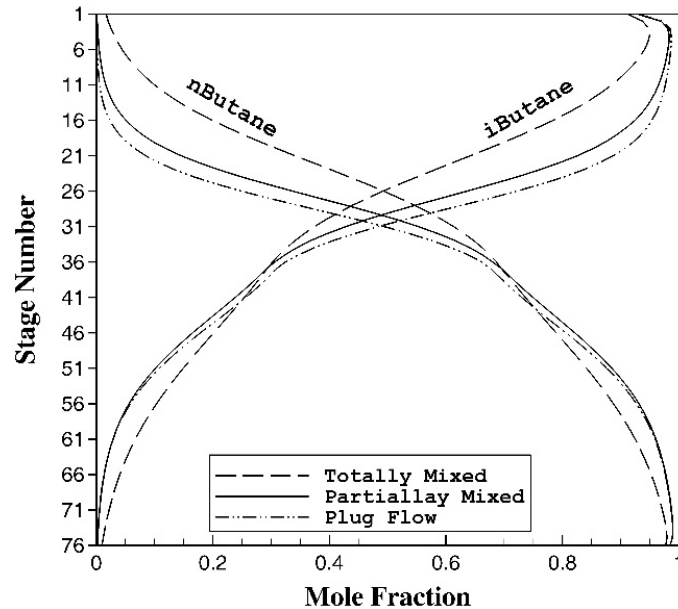
شکل 5. روند تغییرات کسر مولی تمام اجزای در فاز مایع.

برای مقایسه‌ی مدل‌های مختلف اختلاط مایع، روند تغییرات متغیرهای عملیاتی مختلف در راستای ستون، حاصل از مجموعه‌ای از شبیه‌سازی‌ها مبتنی بر روش بازدهی‌های چندجزئی تقطیر در شکل 6 تا شکل 8 ارائه شده‌اند. در شکل 6 مقادیر بازدهی‌های مورفری مرحله‌ای در طول ستون به تفکیک برای هر یک از مدل‌های اختلاط مایع نشان داده شده‌اند. می‌توان دید که مدل‌های اختلاط کامل و جریان قالبی روند تقریباً ثابتی در طول ستون از خود نشان می‌دهند. مقدار متوسط بازدهی‌های مرحله‌ای در مدل اختلاط کامل حدود 0/85 است که بنا بر تعریف ارائه شده این مقدار معادل با همان بازدهی‌های نقطه‌ای در راستای ستون است. بازدهی‌ها در مدل جریان قالبی مقدار میانگینی برابر با 1/35 دارند. همان‌طور که دیده می‌شود بازدهی‌های پیش‌بینی‌شده بر اساس مدل اختلاط جزئی مایع در راستای ستون تا حدی نوسان می‌کنند. این امر نشان می‌دهد که بازدهی‌ها در هر مرحله نسبت به مرحله‌ی دیگر متفاوت هستند. به‌علاوه می‌توان دید که بازدهی‌های مرحله‌ای اختلاف قابل ملاحظه‌ای با بازدهی‌های نقطه‌ای به‌خصوص در بخش تهی‌سازی ستون (پایین خوراک) دارند.



شکل 6. تعداد واحدهای انتقال پیش‌بینی‌شده برای فاز بخار.

در شکل 7 الگوی تغییرات غلظت فاز مایع مربوط به اجزای کلیدی سبک (ایزوبوتان) و سنگین (نرمال بوتان) حاصل از شبیه‌سازی‌های انجام شده بر اساس هر یک از مدل‌های اختلاط مایع نشان داده شده است. آنچه که بر اساس روند تغییرات به دست آمده می‌توان گفت این که نتایج مدل جریان قالبی تا حدود زیادی به نتایج مدل اختلاط جزئی نزدیک است، درحالی که در نتایج حاصل از مدل اختلاط کامل نسبت به دو مدل دیگر تفاوت قابل ملاحظه‌ای مشاهده می‌شود.



شکل 7. بازدهی‌های نقطه‌ای پیش‌بینی شده برای مراحل مختلف.

بر اساس محاسبات انجام شده مطابق با رابطه‌ی 11، عدد بدون بعد پکلت در راستای ستون برابر با 22 می‌شود. بنا به تعریف، عدد پکلت معادل با نسبت انتقال محوری مایع به اختلاط طولی آن است [26]. بر این اساس بزرگ بودن عدد پکلت نشان دهنده‌ی نزدیک بودن الگوی جریان مایع روی سینی‌ها به الگوی جریان قالبی است. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که در ستون مورد بررسی، جریان مایع روی سینی‌ها تا حدود بسیار زیادی مطابق با مدل جریان قالبی است. مقایسه‌ی کمی غلظت‌های محصولات بالا و پایین، حاصل از هر یک از مدل‌های اختلاط مایع با نتایج آزمایشگاهی متناظر این موضوع را تأیید می‌کند. در جدول 4 نتایج مربوط به غلظت اجزا در محصول بالا و محصول پایین به همراه نتایج اندازه‌گیری‌های گزارش شده است.

جدول 4. مقایسه‌ی کمی نتایج شبیه‌سازی و اندازه‌گیری؛

(الف) مربوط به محصول بالا.

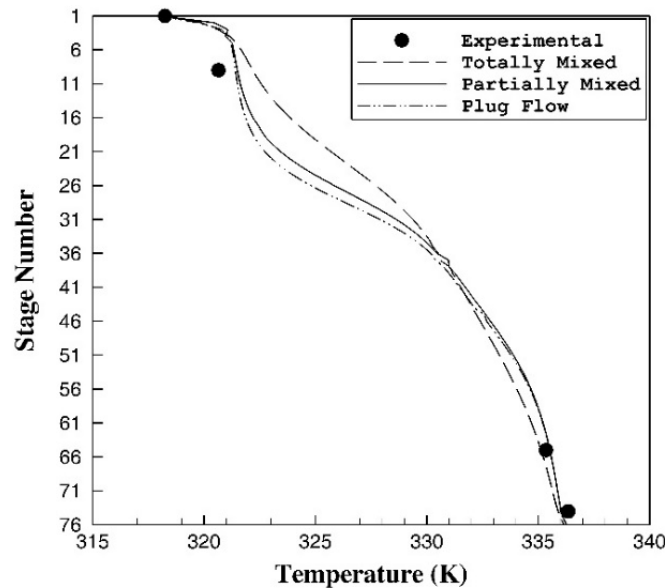
	اندازه گیری	اختلاط کامل	خطای نسبی	اختلاط جزئی	خطای نسبی	جریان قالبی	خطای نسبی
پروپان	0.064109	0.064223	<b>0.18</b>	0.0642228	<b>0.18</b>	0.064223	<b>0.18</b>
ایزوبوتان	0.927395	0.912788	<b>1.58</b>	0.9293996	<b>0.22</b>	0.929791	<b>0.26</b>
نرمال بوتان	0.001969	0.016763	<b>751.35</b>	0.0006691	<b>66.02</b>	0.000993	<b>49.58</b>
ایزوبوتن	0.002346	0.002849	<b>21.47</b>	0.0028341	<b>20.82</b>	0.002623	<b>11.81</b>
1-بوتن	0.004181	0.003376	<b>19.26</b>	0.0028743	<b>31.26</b>	0.002371	<b>43.30</b>
نئوپنتان	0	2.57E-09		8.67E-12		3.80E-12	
ایزوپنتان	0	2.44E-14		5.846E-18		2.21E-18	
نرمال پنتان	0	6.71E-18		9E-22		3.57E-22	
		درصد خطای میانگین	<b>158.77</b>		<b>23.70</b>		<b>21.03</b>

## (ب) مربوط به محصول پایین.

	اندازه گیری	اختلاط کامل	خطای نسبی	اختلاط جزئی	خطای نسبی	جریان قالبی	خطای نسبی
پروپان	0	1.13E-14		1.801E-23		3.36E-25	
ایزوبوتان	0.003009	0.0094259	<b>213.30</b>	0.0017872	<b>40.60</b>	0.001607	<b>46.57</b>
نرمال بوتان	0.983811	0.9772124	<b>0.67</b>	0.9846133	<b>0.08</b>	0.984464	<b>0.07</b>
ایزوبوتن	0.000831	0.0006489	<b>21.92</b>	0.000656	<b>21.07</b>	0.000753	<b>9.38</b>
1- بوتن	0.001039	0.0014616	<b>40.69</b>	0.0016924	<b>62.91</b>	0.001924	<b>85.19</b>
نئوپنتان	0.001373	0.0012892	<b>6.13</b>	0.0012892	<b>6.13</b>	0.001289	<b>6.13</b>
ایزوپنتان	0.009048	0.0090244	<b>0.27</b>	0.0090244	<b>0.27</b>	0.009024	<b>0.27</b>
نرمال پنتان	0.000889	0.0009376	<b>5.50</b>	0.0009376	<b>5.50</b>	0.000938	<b>5.50</b>
		درصد خطای میانگین	<b>41.21</b>		<b>19.51</b>		<b>21.87</b>

آنچه که مشخص است نتایج به دست آمده مبتنی بر مدل اختلاط جزئی و مدل جریان قالبی به مراتب دقیق تر از نتایج حاصل از مدل اختلاط کامل مایع هستند، به طوری که می توان گفت به طور کلی میانگین اختلاف نتایج حاصل از این دو مدل اختلاط مایع نسبت به داده های اندازه گیری مربوط به ستون مورد نظر حدود 21% است. موضوع شایان توجه در مقایسه های کمی میان نتایج شبیه سازی ها و داده های آزمایشگاهی اینک خطاها به صورت نسبی گزارش شده اند و در این حالت وقتی مقادیر غلظت های آزمایشگاهی کوچک هستند (مثل میزان غلظت نرمال بوتان یا 1- بوتن در محصول بالا و غلظت ایزو بوتان یا 1- بوتن در محصول پایین)، اختلاف بسیار اندک در اعداد باعث بزرگ شدن مقادیر خطای نسبی خواهد شد که این امر به خودی خود نشان دهنده پایین بودن دقت مدل نخواهد بود، چون مقدار خطای مطلق بسیار کوچک است و مدل توانسته با دقت خوبی داده آزمایشگاهی را پیش بینی کند. بنابراین برای ارزیابی دقت مدل باید میانگین خطای نسبی برای تمام اجزا را مدنظر داشت.

نتایج به دست آمده برای الگوی تغییرات دما در راستای ستون برای هر سه مدل اختلاط مایع روی سینی ها در شکل 8 ارائه شده است. برای ارزیابی دقت نتایج به دست آمده، مقادیر اندازه گیری شده برای سینی های 1، 9، 65 و 74 هم در شکل مشخص شده اند. همان طور که می توان دید الگوی دمایی حاکم در ستون تقطیر با دقت بسیار خوبی (کم تر از 0/5 درصد اختلاف) توسط شبیه سازی های مبتنی بر مدل اختلاط جزئی و مدل جریان قالبی مایع پیش بینی شده است. الگوی جریان مایع از مدل اختلاط کامل فاصله دارد. از همین رو نتایج شبیه سازی بر این مبنا نتوانسته روند تغییرات دما در طول ستون را به خوبی پیش بینی کند، هرچند در دو انتهای ستون نتایج قابل قبولی حاصل شده است.



شکل 8. الگوی تغییرات دمایی در راستای ستون، نتایج حاصل از شبیه‌سازی همراه با مقادیر اندازه‌گیری شده.

## 5- جمع‌بندی

در کار حاضر با استفاده از روش تعادلی بهبودیافته بر اساس محاسبات بازدهی‌های چندجزئی، یک ستون تقطیر چندجزئی در مقیاس صنعتی برای جداسازی ایزوبوتان و نرمال بوتان مدل شده است. شبیه‌سازی توسط یک برنامه‌ی محاسباتی نوشته شده به زبان متلب انجام شده است. پیش‌بینی بازدهی‌های نقطه‌ای و مرحله‌ای اجزا در طول ستون این امکان را فراهم می‌کند که بتوان ستون تقطیر صنعتی موردنظر را ضمن در نظر گرفتن شرایط واقعی با دقتی خوبی مدل کرد. بازدهی‌های مورفوری مرحله‌ای طی روند مدل‌سازی از بازدهی‌های نقطه‌ای با مشخص شدن مدل اختلاط مایع روی سینی‌ها به دست آمده می‌آیند. نظر به اهمیت انتخاب مناسب مدل اختلاط مایع روی سینی‌ها، در کار حاضر سه مدل اختلاط کامل، اختلاط جزئی و جریان قالبی در کنار هم بررسی و نتایج آن‌ها با هم مقایسه شدند. بررسی‌ها نشان دادند که مدل اختلاط جزئی و مدل جریان قالبی منتج به نتایج مطلوبی شدند، به طوری که میانگین اختلاف نتایج شبیه‌سازی‌ها نسبت به داده‌های تجربی گزارش شده برای غلظت محصولات و دماها به ترتیب معادل با 21% و 0/5% بوده است. به این ترتیب می‌توان گفت که روش مدل‌سازی تعادلی مبتنی بر بازدهی‌های تقطیر با وجود پیچیدگی‌ها و هزینه‌های محاسباتی کم‌تر نسبت به روش مبتنی بر نرخ انتقال، توانسته نتایج تجربی را تا حد مطلوبی پیش‌بینی کند. این نشانگر آن است که این روش شبیه‌سازی می‌تواند به‌عنوان روشی کارآمد حتی برای تحلیل ستون‌های صنعتی محسوب شود.



## 6- علائم اختصاری

تعداد واحدهای انتقال مایع	$N_L$	دبی جریان بخار در مرحله ی ز	$mol/s$	$V_j$
تعداد کلی واحدهای انتقال بخار	$N_{OV}$	دبی جزء i در مرحله ی ز در فاز بخار	$mol/s$	$v_{i,j}$
شیب منحنی تعادلی	$m$	دبی جریان مایع در مرحله ی ز	$mol/s$	$L_j$
فاکتور استرپینگ	$\lambda$	دبی جزء i در مرحله ی ز در فاز مایع	$mol/s$	$l_{i,j}$
عدد بی بعد پکلت	$Pe$	دبی جریان خوراک در مرحله ی ز	$mol/s$	$F_j$
عدد بی بعد اشمیت	$Sc$	دبی جزء i در مرحله ی ز در خوراک	$mol/s$	$f_{i,j}$
ضریب نفوذ گردابه	$m^2/s$	$D_e$	$mol/s$	$SV_j$
ضریب نفوذ فاز p	$m^2/s$	$D_p$		$S_j$
دبی حجمی مایع	$m^3/s$	$Q_L$	$mol/s$	$SL_j$
زمان ماند فاز p	$s$	$t_p$		$S_j$
طول مسیر جریان مایع	$m$	$Z$		$y_{i,j}$
تعداد حوضچه های با اختلاط کامل		$n$		$x_{i,j}$
طول بند سینی	$m$	$W$		$z_{i,j}$
ارتفاع بند در خروجی سینی	$m$	$h_w$	$J/mol$	$H_j^p$
ارتفاع شفاف مایع	$m$	$h_{cl}$	$J/mol$	$Q_j$
فاکتور F ظاهری		$F_s$		$K_{i,j}$
سرعت ظاهری بخار	$m/s$	$u_s$		$t$
سرعت ظاهری بخار در شرایط طغیان	$m/s$	$u_{sf}$		$E_{MV}$
فاکتور طغیان		$F_f$		$E_{OV}$
مساحت سطح فعال سینی	$m^2$	$A_b$		$E_{OC}$
غلظت بخار	$mol/m^3$	$c_v$		$N_t$
چگالی	$kg/m^3$	$\rho$		$N_a$
ویسکوزیته	$Pa.s$	$\mu$		$N_v$



- [1] Pudjiastuti, L., Widjaja, T., Iskandar, K. K., Sahid, F., Nurkhamidah, S., Altway, A., "Modelling and simulation of multicomponent acetone-butanol-ethanol distillation process in a sieve tray column," *Heliyon Journal*, vol. 7, 2021.
- [2] Čmelíková, T., Valenz, L., Vachková, E. L., & Rejl, F. J., "Basic separation efficiency and hydraulic data of MellapakPlus 452. Y structured packing under distillation conditions," *Chemical Engineering Research and Design*, 2021.
- [3] Bolenz, L., T. Ehlert, C. Dechert, R. Bertling, and E. Y. Kenig., "Modelling of a continuous distillation process with finite reflux ratio using the hydrodynamic analogy approach," *Chemical Engineering Research and Design*, 2021.
- [4] Singh, A.K., Tyagi, B. and Kumar, V. "First principle modeling and neural network-based empirical modeling with experimental validation of binary distillation column," *Chemical Product and Process Modeling*, vol. 8, no. 1, 2013, pp. 53–70.
- [5] R. Taylor, R. Krishna, and H. Kooijman, "Real-world modeling of distillation," *CEP Magazine*, 2003pp. 28–39.
- [6] F. M. Houry, *Multistage separation processes*: CRC Press, 2004.
- [7] R. C. Waggoner and G. D. Loud, "Algorithms for the solution of material balance equations for non-conventional multi-stage operations," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 1, no. 1, 1977, pp. 49–56.
- [8] J. ILME, K. KLEMOLA, J. AITTAMAA, and L. NYSTROM, "CALCULATING DISTILLATION EFFICIENCIES OF MULTICOMPONENT i -BUTANE/ n -BUTANE COLUMN," *Chemical Engineering Communications*, vol. 184, no. 1, 2001, pp. 1–21.
- [9] K. J. McNulty, and S. G. Chatterjee, Ed., *Simulation of Atmospheric Crude Towers Including Packed Bed Pump-Around Zones Using a Rate-Based Simulator*, 1992.
- [10] *Industrial applications of a nonequilibrium model of distillation and absorption operations*: HEMISPHERE PUBLISHING CORPORATION, 1992.
- [11] *The development of a nonequilibrium model for computer simulation of multicomponent distillation and absorption operations*, 1987.
- [12] K. T. Klemola and J. K. Ilme, "Distillation Efficiencies of an Industrial-Scale i -Butane/ n -Butane Fractionator," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 35, no. 12, 1996, pp. 4579–4586.
- [13] M. W. Biddulph and N. Ashton, "Deducing multicomponent distillation efficiencies from industrial data," *The Chemical Engineering Journal*, vol. 14, no. 1, 1977, pp. 7–15.
- [14] H. Z. Kister, *Distillation design*: McGraw-Hill New York, 1992.
- [15] J. D. Seader, E. J. Henley, and D. K. Roper, *Separation Process Principles-Chemical and Biochemical Operations*: New York: John Wiley and Sons Google Scholar.
- [16] A. I. o. C. E. R. Committee, *Bubble-Tray: Design Manual Prediction of Fractionation Efficiency*: American institute of chemical engineers, 1958.
- [17] R. Taylor and R. Krishna, *Multicomponent mass transfer*: John Wiley & Sons, 1993.
- [18] N. E. Welch, L. D. Durbin, and C. D. Holland, "Mixing on valve trays and in downcomers of a distillation column," *AIChE Journal*, vol. 10, no. 3, 1964, pp. 373–379.
- [19] D. L. Bennett, R. Agrawal, and P. J. Cook, "New pressure drop correlation for sieve tray distillation columns," *AIChE Journal*, vol. 29, no. 3, 1983, pp. 434–442.

- [20] M. J. Ashley and G. G. Haselden, "The calculation of plate efficiency under conditions of finite mixing in both phases in multiplate columns, and the potential advantage of parallel flow," *Chemical Engineering Science*, vol. 25, no. 11, 1970, pp. 1665–1672.
- [21] K. Fujiwara, T. Nakata, N. Okamoto, and K. Muramatsu, "Method for determining relaxation factor for modified Newton-Raphson method," *IEEE transactions on magnetics*, vol. 29, no. 2, 1993, pp. 1962–1965.
- [22] E. J. Henley and J. D. Seader, *Equilibrium-stage separation operations in chemical engineering*: Wiley, 1981.
- [23] L. M. Naphtali and D. P. Sandholm, "Multicomponent separation calculations by linearization," *AIChE Journal*, vol. 17, no. 1, 1971, pp. 148–153.
- [24] A. Danesh, *PVT and phase behaviour of petroleum reservoir fluids*: Elsevier, 1998.
- [25] R. C. Reid, J. M. Prausnitz, and B. E. Poling, *The properties of gases and liquids*, 1987.
- [26] K. T. Klemola, *Efficiencies in distillation and reactive distillation*: Finnish Academy of Technology, 1998.