

مدل سازی و بهینه سازی مصرف حلال در استخراج هیدروکربن های آروماتیکی از مخلوط نفتا در استخراج مایع - مایع

علیرضا فضلعلی^{۱*}، محمد عسکری مهرآبادی^۲، مهدی طالب بیگی^۳

۱. دانشیار گروه مهندسی شیمی، دانشگاه اراک، اراک، ایران

۲. دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی شیمی، دانشگاه اراک، اراک، ایران

۳. کارشناس ارشد اداره مهندسی پالایش، شرکت پالایش نفت امام خمینی شازند، شازند، ایران

دریافت: ۹۲/۱۲/۲۰ پذیرش: ۹۳/۵/۷

چکیده

با توجه به اهمیت کاهش ترکیبات آروماتیکی در سوخت های هیدروکربنی، در تحقیق حاضر استخراج هیدروکربن های آروماتیکی از برش نفتا به وسیله حلال شامل ۶۵ درصد وزنی اتیلن کربنات و ۳۵ درصد وزنی ۱- سیکلوهگزیل-۲- پیرولیدون با استفاده از مدل UNIFAC مدل سازی شده و ظرفیت حلال، گزینش پذیری، توان حلال و درصد تخلیص به دست آمد و نتایج حاصل با نتایج آزمایشگاهی مقایسه گردید. میزان خطای مدل سازی به صورت درصد مجذور میانگین محاسبه شد. متوسط خطای محاسبات نشان دهنده پوشش مناسب داده های آزمایشگاهی به وسیله مدل ارائه شده می باشد. در نهایت با تعریف شاخص عملکرد حلال، میزان حلال مصرفی برای این فرآیند در دماهای مختلف بهینه سازی شد.

کلمات کلیدی: استخراج مایع - مایع، مدل سازی با UNIFAC، شاخص عملکرد حلال، بهینه سازی مصرف حلال

مقدمه

به طور کلی در طراحی و بهینه سازی هر فرآیند شیمیایی از یک طرف دسترسی به داده های آزمایشگاهی امری ضروری و مهم بوده از طرف دیگر دستیابی به این داده ها فرآیندی زمان بر بوده و مستلزم صرف هزینه های بسیار می باشد. این موضوع ضرورت ایجاد مدل های با دقت بالا را دو چندان می کند تا بتوان با سرعت بالا و بدون صرف هزینه های لازم جهت انجام آزمایشات به داده های با دقت بالا دست یافت. [۱] استخراج ترکیبات آروماتیکی به خصوص بنزن، زایلن و تولوئن از ترکیبات سوختی فرآیندی پراهمیت می باشد؛ زیرا از یک طرف این ترکیبات، ماده اولیه بسیاری از فرآیندهای پتروشیمیایی جهت تولید مواد

* A-fazlali@araku.ac.ir

دیگر بوده و به عنوان حلال دارای کاربردهای زیادی می باشند که باعث ایجاد ارزش افزوده بالایی می گردد و از طرف دیگر این ترکیبات بسیار سمی و خطرناک بوده و موجب تولید ترکیبات سرطان زا در گازهای حاصل از احتراق می گردند. لذا قوانین زیست محیطی سخت گیرانه ای برای کاهش میزان این ترکیبات در سوخت ها وضع گردیده است. [۳ و ۲]

از مهم ترین فرآیندهایی که در جهت کاهش ترکیبات آروماتیکی از برش های سوختی مورد استفاده قرار می گیرند می توان به استخراج مایع - مایع در محدوده ۲۰ تا ۶۵ درصد وزنی آروماتیک، تقطیر استخراجی در محدوده ۶۵ تا ۹۰ درصد وزنی آروماتیک و تقطیر آزنوتروپی در محدوده بالای ۹۰ درصد وزنی آروماتیک اشاره کرد. [۴]

از فرآیندهای تجاری معمول در استخراج این مواد می توان به فرآیند Volex که در آن از حلال های با پایه گلیکولی، فرآیند Union Carbide که از حلال تترا اتیلن گلیکول و فرآیند Arosolvan که از حلال نرمال مرفیل پیرولیدون استفاده می کنند اشاره کرد. [۵]

به علت پایین بودن راندمان این فرآیندها و نیز ارضا نشدن محدودیت های زیست محیطی موجود، محققان در پی دست یابی به فرآیندهایی با استفاده از حلال های جدید برآمدند. به طور کلی حلال هایی که در این راستا توسط محققان مورد استفاده قرار می گیرند را می توان به دو دسته کلی:

۱- حلال های یونی

۲- حلال های غیر یونی

تقسیم بندی کرد.

حلال های یونی حلال هایی بسیار جدید می باشند که از یک طرف از کیفیت جداسازی بالایی برخوردار بوده ولی از طرف دیگر به علت دشوار بودن تولید این حلال ها هزینه تهیه آنها بسیار بالا می باشد به همین علت استفاده از این حلال ها در فرآیندهای صنعتی مقرون به صرفه نمی باشد. [۶]

جدول (۱) تعدادی از مهم ترین حلال های یونی مورد استفاده در این راستا را نشان می دهد.

جدول ۱. مهم ترین حلال های یونی جهت استخراج آروماتیک ها

Solvent	Separation	Ref.
[emim]I ₃	Toluene/heptane	[۷]
[bmim]I ₃	Toluene/heptane	[۷]
[mmim]Tf ₂ N	Toluene/heptane	[۸]
[emim]Tf ₂ N	Toluene/heptane	[۸]
[bmim]Tf ₂ N	Toluene/heptane	[۸]
[emim]C ₂ H ₅ SO ₄	Toluene/heptane	[۸]
[hmim]PF ₆	Benzene/heptane	[۹]
[hmim]BF ₄	Benzene/heptane	[۹]
[mmim](CH ₃) ₂ PO ₄	Toluene/heptane	[۱۰]
[mmim]CH ₃ SO ₄	Toluene/heptane	[۱۰]

حلال های غیر یونی محدوده وسیعی از حلال ها (از حلال های خالص گرفته تا حلال هایی که شامل مخلوطی از چندین حلال می باشند) را شامل می شوند. از مهم ترین این حلال ها می توان به دی متیل سولفوکسید [۱]، پروپیلن کربنات [۱۱] و اتیلن کربنات [۱] اشاره کرد.

در این مقاله استخراج ترکیبات آروماتیکی از مخلوط نفتا به وسیله حلالی شامل ۶۵ درصد وزنی اتیلن کربنات و ۳۵ درصد وزنی ۱-سیکلوهگزیل-۲-پیرولیدون به وسیله مدل UNIFAC مدل سازی شده و میزان حلال بهینه مورد استفاده تعیین گشته است و در نهایت نتایج به دست آمده با داده های آزمایشگاهی [۱۲] مورد مقایسه قرار گرفته است.

مدل سازی

برای استفاده از مدل UNIFAC جهت پیش بینی عملکرد حلال اتیلن کربنات + ۱-سیکلوهگزیل-۲-پیرولیدون در استخراج هیدروکربن های آروماتیکی نیاز به دانستن پارامترهای سطح و حجم برای هر یک از گروه های ساختاری دخیل در مدل سازی و نیز پارامترهای مربوط به برهم کنش متقابل هر یک از این گروه ها بر یک دیگر می باشد. در مدل سازی حاضر به علت ماهیت قطبی اتیلن کربنات و ۱-سیکلوهگزیل-۲-پیرولیدون هر یک از این مواد را به عنوان یک گروه ساختاری در نظر گرفته و سایر هیدروکربن ها را به گروه های ساختاری تجزیه کرده ایم. در جدول (۲) می توان این تقسیمات را مشاهده کرد.

جدول ۲. ترکیب درصد اجزای موجود در نفتای مورد بررسی و اجزای ساختاری دخیل در مدل سازی

No	Component	Mass%	No. of UNIFAC groups in each component					
			CH ₃	CH ₂	CH	ACH	ACCH ₃	ACCH ₂
۱	n-hexane	۱/۸۹	۲	۴	۰	۰	۰	۰
۲	cyclohexane	۵/۰۵	۰	۶	۰	۰	۰	۰
۳	benzene	۳/۹۸	۰	۰	۰	۶	۰	۰
۴	2,3-dimethyl pentane	۶/۹۶	۴	۱	۲	۰	۰	۰
۵	n-heptane	۷/۰۵	۲	۵	۰	۰	۰	۰
۶	toluene	۴۱/۷۲	۰	۰	۰	۵	۱	۰
۷	n-octane	۳/۵۶	۲	۶	۰	۰	۰	۰
۸	ethylbenzene	۶/۵۹	۱	۰	۰	۰	۰	۱
۹	xylene	۲۳/۲	۰	۰	۰	۴	۲	۰

پارامترهای سطح و حجم از مرجع [۱۲]، و پارامترهای برهم کنش میان گروه های CH₂ و ACH و ACCH₂ از مرجع [۵] و اتیلن کربنات و ۱-سیکلوهگزیل-۲-پیرولیدون از مرجع [۱۲] استخراج شده اند. و در نهایت برای تعیین میزان انحراف نتاج پیش بینی شده از داده های آزمایشگاهی از درصد مجذور مربع میانگین خطاها (%RDMS) به صورت زیر:

$$\%RMSD = (100\%) \left\{ \left[\sum (x_{exp}^E - x_{calc}^E)^2 + \sum (x_{exp}^R - x_{calc}^R)^2 \right] / (2N) \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

استفاده شده است. [۵]

جداول (۴و۳) به ترتیب داده های آزمایشگاهی و نتایج حاصل از پیش بینی و میزان خطای مدل سازی را نشان می دهند.

میزان متوسط خطای مدل سازی (۴/۶۲ درصد) بوده که نشان دهنده پوشش مناسب نتایج آزمایشگاهی به وسیله مدل ارائه شده می باشد.

جدول ۳. داده های تعادلی آزمایشگاهی مربوط به استخراج آروماتیک ها از نفتا به وسیله حلال اتیلن کربنات و

۱- سیکلوهگزیل-۲- پیرولیدون [۱۲]

Component	65% EC at 298 K								S:F=1, 65% EC					
	S:F=1		S:F=1.5		S:F=2		S:F=3		308 K		318 K		328 K	
	x_{exp}^R	x_{exp}^E	x_{exp}^R	x_{exp}^E	x_{exp}^R	x_{exp}^E	x_{exp}^R	x_{exp}^E	x_{exp}^R	x_{exp}^E	x_{exp}^R	x_{exp}^E	x_{exp}^R	x_{exp}^E
n-hexane	۰/۰۱۵	۰/۰۰۱	۰/۰۲۵	۰/۰۰۰	۰/۰۲۱	۰/۰۰۱	۰/۰۳۱	۰/۰۰۲	۰/۰۲۲	۰/۰۰۱	۰/۰۲۰	۰/۰۰۲	۰/۰۲۰	۰/۰۰۲
Cyclohexane	۰/۰۵۳	۰/۰۰۴	۰/۰۷۳	۰/۰۰۳	۰/۰۸۳	۰/۰۰۵	۰/۱۰۶	۰/۰۰۵	۰/۰۶۲	۰/۰۰۴	۰/۰۵۸	۰/۰۰۶	۰/۰۵۸	۰/۰۰۶
Benzene	۰/۰۲۵	۰/۰۱۷	۰/۰۲۹	۰/۰۱۳	۰/۰۲۴	۰/۰۱۲	۰/۰۱۹	۰/۰۱۰	۰/۰۳۴	۰/۰۱۶	۰/۰۳۲	۰/۰۱۸	۰/۰۳۲	۰/۰۱۷
2,3-dimethyl pentane	۰/۰۶۳	۰/۰۰۵	۰/۰۸۴	۰/۰۰۳	۰/۰۹۷	۰/۰۰۵	۰/۱۲۳	۰/۰۰۵	۰/۰۶۶	۰/۰۰۴	۰/۰۶۲	۰/۰۰۶	۰/۰۶۳	۰/۰۰۶
n-heptane	۰/۰۶۸	۰/۰۰۶	۰/۰۸۸	۰/۰۰۳	۰/۱۰۸	۰/۰۰۶	۰/۱۳۰	۰/۰۰۵	۰/۰۷۱	۰/۰۰۴	۰/۰۶۹	۰/۰۰۷	۰/۰۶۹	۰/۰۰۶
Toluene	۰/۳۸۸	۰/۱۱۳	۰/۳۶۲	۰/۰۹۵	۰/۳۵۱	۰/۰۸۷	۰/۳۲۶	۰/۰۶۶	۰/۳۹۳	۰/۱۰۶	۰/۳۸۰	۰/۱۱۶	۰/۳۸۳	۰/۱۱۲
n-octane	۰/۰۳۳	۰/۰۰۲	۰/۰۴۲	۰/۰۰۲	۰/۰۵۹	۰/۰۰۳	۰/۰۶۹	۰/۰۰۲	۰/۰۳۵	۰/۰۰۲	۰/۰۳۴	۰/۰۰۳	۰/۰۳۳	۰/۰۰۳
Ethylbenzene	۰/۰۴۱	۰/۰۱۴	۰/۰۳۸	۰/۰۱۳	۰/۰۳۶	۰/۰۱۲	۰/۰۳۱	۰/۰۰۹	۰/۰۴۰	۰/۰۱۴	۰/۰۳۹	۰/۰۱۵	۰/۰۳۹	۰/۰۱۴
Xylene	۰/۱۴۴	۰/۰۵۰	۰/۱۳۲	۰/۰۴۴	۰/۱۳۱	۰/۰۴۰	۰/۱۰۹	۰/۰۳۰	۰/۱۴۲	۰/۰۴۷	۰/۱۳۸	۰/۰۵۰	۰/۱۴۱	۰/۰۵۰
EC	۰/۱۲۱	۰/۶۴۰	۰/۰۹۱	۰/۶۵۷	۰/۰۶۵	۰/۶۵۰	۰/۰۵۰	۰/۶۷۹	۰/۱۰۷	۰/۶۵۳	۰/۱۷۹	۰/۶۲۹	۰/۱۳۳	۰/۶۳۲
CHP	۰/۱۴۸	۰/۱۴۷	۰/۱۳۷	۰/۱۶۸	۰/۱۲۶	۰/۱۷۹	۰/۱۰۶	۰/۱۸۸	۰/۱۲۶	۰/۱۴۹	۰/۰۹۳	۰/۱۴۶	۰/۱۲۹	۰/۱۵۰

جدول ۴. نتایج تعادلی حاصل از مدل سازی مربوط به استخراج آروماتیک ها از نفتا به وسیله حلال اتیلن کربنات و

۱- سیکلوهگزیل-۲- پیرولیدون با استفاده از مدل UNIFAC

Component	65% EC at 298 K								S:F=1, 65% EC					
	S:F=1		S:F=1.5		S:F=2		S:F=3		308 K		318 K		328 K	
	x_{exp}^R	x_{exp}^E	x_{exp}^R	x_{exp}^E	x_{exp}^R	x_{exp}^E	x_{exp}^R	x_{exp}^E	x_{exp}^R	x_{exp}^E	x_{exp}^R	x_{exp}^E	x_{exp}^R	x_{exp}^E
n-hexane	۰/۰۱۹۴	۰/۰۰۱۳	۰/۰۲۱۵	۰/۰۰۰۱	۰/۰۲۴۱	۰/۰۰۱۲	۰/۰۲۶۰	۰/۰۰۱۷	۰/۰۲۱۲	۰/۰۰۱۰	۰/۰۲۱۰	۰/۰۰۳۱	۰/۰۱۹۴	۰/۰۰۱۹
Cyclohexane	۰/۰۴۲۲	۰/۰۰۳۳	۰/۰۴۶۳	۰/۰۰۱۹	۰/۰۵۲۶	۰/۰۰۳۲	۰/۰۶۲۴	۰/۰۰۲۹	۰/۰۴۰	۰/۰۰۲۹	۰/۰۴۶۸	۰/۰۰۴۸	۰/۰۴۳۴	۰/۰۰۴۵
Benzene	۰/۰۱۸۱	۰/۰۱۳۳	۰/۰۲۱۶	۰/۰۰۹۷	۰/۰۱۹۲	۰/۰۰۹۶	۰/۰۱۵۳	۰/۰۰۸۱	۰/۰۱۹۰	۰/۰۰۸۹	۰/۰۱۷۸	۰/۰۱۰۰	۰/۰۱۸۰	۰/۰۰۹۶
2,3-dimethyl pentane	۰/۰۶۶۵	۰/۰۰۵۳	۰/۰۷۲۰	۰/۰۰۲۶	۰/۰۷۲۸	۰/۰۰۴۳	۰/۰۹۸۹	۰/۰۰۴۰	۰/۰۷۱۵	۰/۰۰۴۳	۰/۰۷۳۳	۰/۰۰۷۱	۰/۰۶۷۹	۰/۰۰۶۵
n-heptane	۰/۰۶۷۷	۰/۰۰۶۰	۰/۰۷۴۴	۰/۰۰۲۵	۰/۰۸۴۵	۰/۰۰۴۷	۰/۱۰۲۷	۰/۰۰۳۹	۰/۰۷۴۱	۰/۰۰۴۲	۰/۰۷۴۸	۰/۰۰۷۶	۰/۰۷۰۸	۰/۰۰۶۲
Toluene	۰/۲۱۸۶	۰/۱۰۸۳	۰/۲۴۶۹	۰/۰۸۹۵	۰/۲۴۴۳	۰/۰۸۴۷	۰/۳۳۷۹	۰/۰۶۹۵	۰/۲۲۴۱	۰/۰۸۹۰	۰/۲۲۱۸	۰/۰۹۱۹	۰/۲۱۹۰	۰/۰۸۶۷
n-octane	۰/۰۳۳۳	۰/۰۰۲۱	۰/۰۳۵۹	۰/۰۰۱۷	۰/۰۴۱۹	۰/۰۰۲۱	۰/۰۵۲۵	۰/۰۰۱۵	۰/۰۳۶۴	۰/۰۰۲۱	۰/۰۳۷۶	۰/۰۰۳۳	۰/۰۳۴۶	۰/۰۰۳۱
Ethylbenzene	۰/۰۳۹۱	۰/۰۱۳۳	۰/۰۳۹۶	۰/۰۱۲۶	۰/۰۳۹۳	۰/۰۱۳۱	۰/۰۳۷۷	۰/۰۰۹	۰/۰۳۶۳	۰/۰۱۲۷	۰/۰۳۶۳	۰/۰۱۳۹	۰/۰۳۶۰	۰/۰۱۲۹
Xylene	۰/۱۳۳۳	۰/۰۴۷۷	۰/۱۴۱۲	۰/۰۴۷۱	۰/۱۴۲۰	۰/۰۴۴۰	۰/۱۳۷۲	۰/۰۳۷۶	۰/۱۳۱۰	۰/۰۴۳۴	۰/۱۳۱۶	۰/۰۴۷۷	۰/۱۲۷۸	۰/۰۴۳۵
EC	۰/۱۰۴۱	۰/۵۵۰۸	۰/۰۷۷۴	۰/۵۵۹۱	۰/۰۵۲۸	۰/۵۲۸۹	۰/۰۳۴۴	۰/۵۲۰۹	۰/۰۸۹۲	۰/۵۴۴۶	۰/۱۳۹۵	۰/۴۹۸۴	۰/۱۱۱۸	۰/۵۳۱۱
CHP	۰/۲۵۱۴	۰/۲۴۹۹	۰/۲۲۲۰	۰/۲۷۲۲	۰/۲۱۴۶	۰/۳۰۴۹	۰/۱۹۱۰	۰/۳۳۸۵	۰/۲۴۵۵	۰/۲۹۳۸	۰/۱۹۹۵	۰/۳۱۳۱	۰/۲۵۱۳	۰/۲۹۲۲
%RMSD	۴/۰۸۲		۳/۶۵۴		۴/۳۱۱		۵/۲۰۹		۴/۹۴۲		۵/۳۱۹		۴/۸۲۶	

محاسبه پارامترهای مهم در انتخاب حلال

پارامترهای متعددی در انتخاب حلال مناسب جهت انجام فرآیند استخراج مایع - مایع دخیل می باشند که در این مقاله به بررسی ظرفیت حلال، گزینش پذیری، توان و درصد تخلیص حلال پرداخته شده است. تمام پارامترهای ذکر شده از دمای استخراج (T) و نسبت حلال به خوراک مصرفی (S/F) جهت انجام فرآیند متاثر می شوند. لذا جهت بررسی آنها کمیتی بی بعد، که تلفیقی از دما و نسبت حلال به خوراک به صورت $((T_m/T)(S/F))$ می باشد را تعریف کرده و تغییرات پارامترهای ذکر شده نسبت به آن بررسی می شود. لازم به ذکر است در این کمیت، T_m دمای بحرانی انحلال بوده که تابعی از نسبت خوراک به حلال می باشد. جدول (۵) دمای بحرانی انحلال را برای نسبت های (S/F) موجود نشان می دهد.

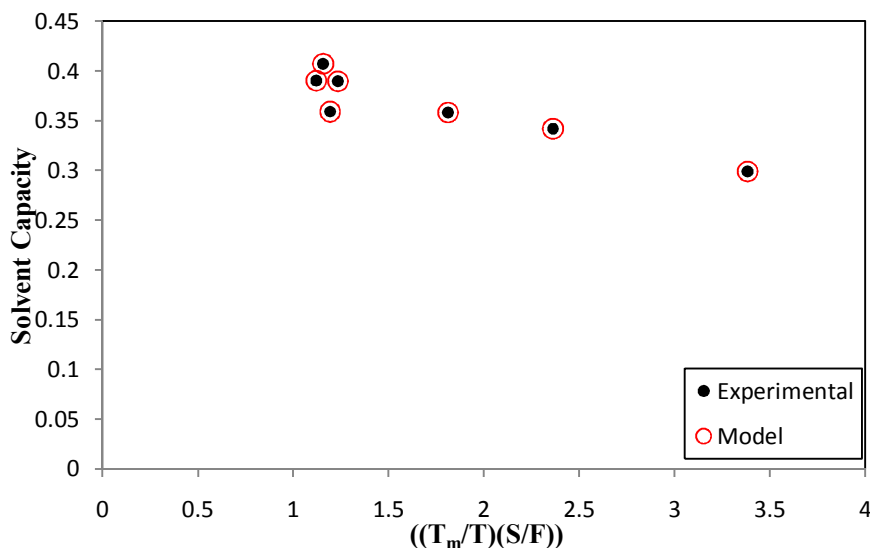
جدول ۵: دمای بحرانی انحلال در (S/F) های مختلف مورد بررسی

S/F	۱	۱/۵	۲	۳
$T_m(K)$	۳۶۸	۳۶۰	۳۵۲	۳۳۶

ظرفیت حلال: ظرفیت حلال به صورت نسبت مجموع کسرهای مولی کل آروماتیک های موجود در فاز استخراج شده به همین کمیت در فاز پسماند تعریف می شود.

$$C = \frac{x_A^E}{x_A^R} \quad (۲)$$

شکل (۱) مقادیر ظرفیت حلال محاسبه شده به وسیله داده های آزمایشگاهی و نتایج مدل سازی را برحسب کمیت بدون بعد $((T_m/T)(S/F))$ نشان می دهد.

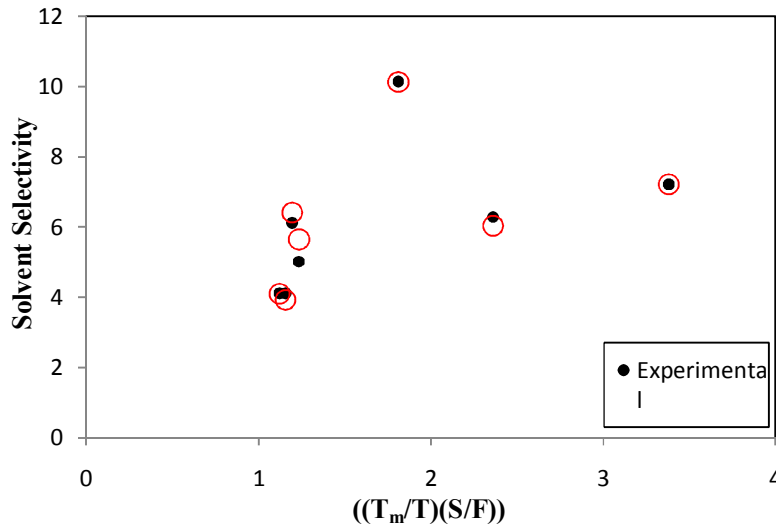


شکل ۱. ظرفیت حلال محاسبه شده به وسیله داده های آزمایشگاهی و نتایج مدل سازی برحسب کمیت بدون بعد $((T_m/T)(S/F))$

گزینش پذیری حلال: گزینش پذیری حلال به میزان تمایل حلال برای جداسازی اجزای مورد نظر اطلاق می شود و به صورت زیر تعریف می گردد: [۱۰]

$$S = \frac{\left(\frac{x_A^E}{x_A^R}\right)}{\left(\frac{x_P^E}{x_P^R}\right)} \quad (3)$$

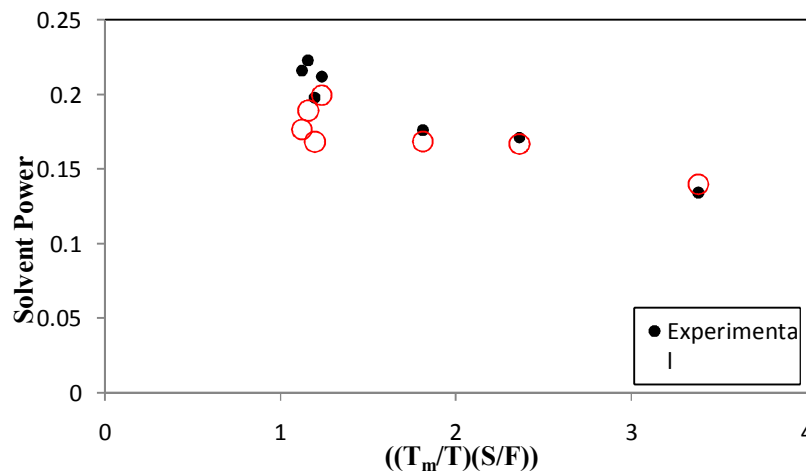
در شکل (۲) می توان این مقادیر را برای داده های آزمایشگاهی و نتایج مدل سازی به خوبی مشاهده کرد.



شکل ۲. گزینش پذیری حلال محاسبه شده به وسیله داده های آزمایشگاهی و نتایج مدل سازی

توان حلال: توان حلال مجموع کسرهای مولی هیدروکربن های موجود در فاز استخراج شده می باشد و به صورت زیر تعریف می شود:

$$P = x_A^E + x_P^E \quad (4)$$

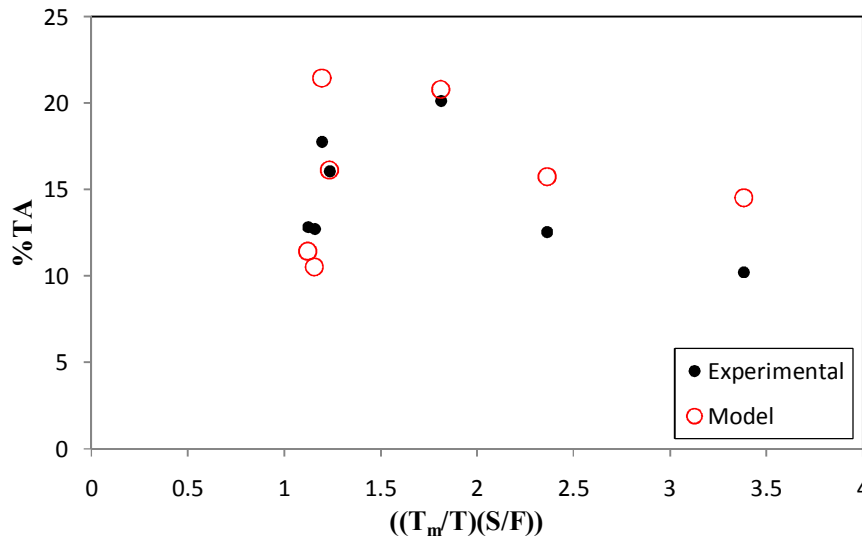


شکل ۳. توان حلال محاسبه شده به وسیله داده های آزمایشگاهی و نتایج مدل سازی

درصد تخلیص: این پارامتر میزان کیفیت جداسازی انجام شده به وسیله حلال را نشان می دهد و به صورت زیر تعریف می شود:

$$\%TA = \frac{(x_A^E / (1 - x_S^E)) - x_S^F}{x_A^F} \times 100 \quad (5)$$

در شکل ۴ درصد تخلیص محاسبه شده به وسیله داده های آزمایشگاهی و نتایج مدل سازی آورده شده است.



شکل ۴. درصد تخلیص محاسبه شده به وسیله داده های آزمایشگاهی و نتایج مدل سازی

با بررسی شکل های ارائه شده می توان دریافت که مدل استفاده شده به خوبی ظرفیت حلال، گزینش پذیری و توان حلال را پیش بینی کرده و فقط در پیش بینی درصد تخلیص دارای مقداری انحراف می باشد و با افزایش $((T_m/T)(S/F))$ میزان خطا بیش تر می شود.

بهینه سازی میزان حلال مصرفی

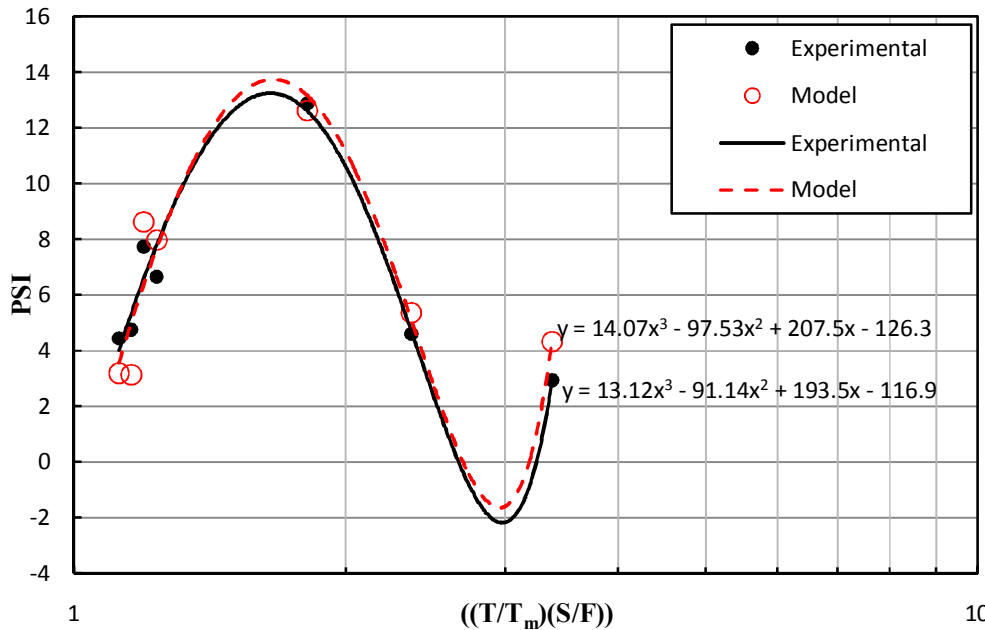
با بررسی پارامترهای ذکر شده در قسمت قبل مشاهده می شود برخی از پارامترها دارای روندی نزولی بوده (ظرفیت و توان حلال) و برخی دیگر در ابتدا صعودی بوده و در ادامه روندی نزولی پیدا می کنند (گزینش پذیری و درصد تخلیص). لذا جهت بهینه سازی میزان مصرف حلال نمی توان یکی از این پارامترها را به تنهایی به عنوان مرجع قرار داد و نیاز به پارامتری جدید می باشد که بتواند تک تک پارامترهای ذکر شده را در بر گیرد؛ لذا شاخص عملکرد حلال به صورت زیر تعریف می شود:

$$PSI = (S)(P)(C)(\%TA) \quad (6)$$

شکل (۵) مقادیر مختلف شاخص عملکرد حلال، محاسبه شده به وسیله داده های آزمایشگاهی و نتایج حاصل از مدل سازی را نشان می دهد. معادلات این دو نمودار را می توان به صورت زیر بیان کرد.

$$PSI_{exp} = 13.12 \left(\left(\frac{T_m}{T} \right) \left(\frac{S}{F} \right) \right)^3 - 91.14 \left(\left(\frac{T_m}{T} \right) \left(\frac{S}{F} \right) \right)^2 + 193.5 \left(\left(\frac{T_m}{T} \right) \left(\frac{S}{F} \right) \right) - 116 \quad (7)$$

$$PSI_{pred.} = 14.07 \left(\left(\frac{T_m}{T} \right) \left(\frac{S}{F} \right) \right)^3 - 97.53 \left(\left(\frac{T_m}{T} \right) \left(\frac{S}{F} \right) \right)^2 + 207.5 \left(\left(\frac{T_m}{T} \right) \left(\frac{S}{F} \right) \right) - 126.3 \quad (8)$$



شکل ۵. شاخص عملکرد حلال محاسبه شده به وسیله داده های آزمایشگاهی و نتایج مدل سازی

همان طور که مشاهده می کنیم در یک نقطه از نمودار، قدرت جداسازی حلال به حداکثر خود می رسد که این نقطه را می توان با مشتق گیری از معادلات (۷) و (۸) به دست آورد.

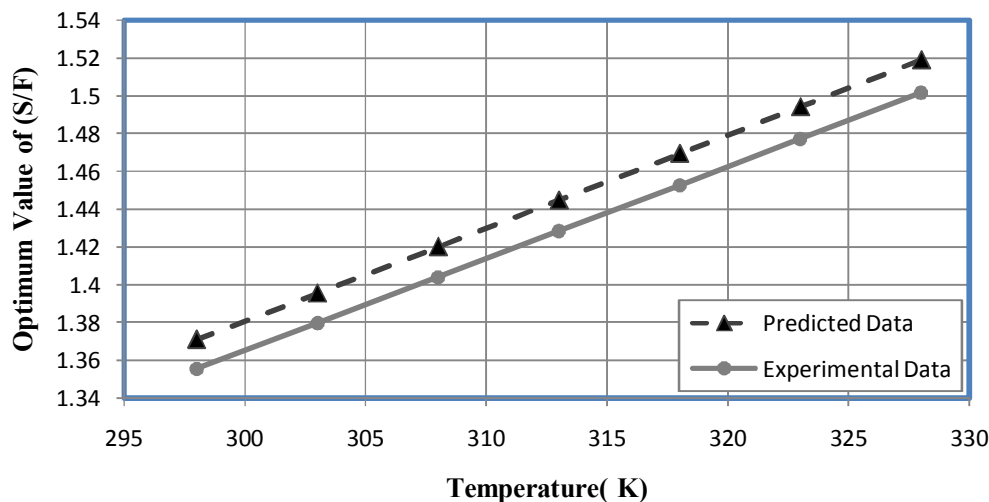
$$\left(\left(\frac{T_m}{T} \right) \left(\frac{S}{F} \right) \right)_{PSI,Max}^{exp} = 1.6480 \quad (9)$$

$$\left(\left(\frac{T_m}{T} \right) \left(\frac{S}{F} \right) \right)_{PSI,Max}^{pred.} = 1.6657 \quad (10)$$

و از طرفی دمای بحرانی فقط تابع نسبت حلال به خوراک بوده و می توان معادله تغییرات آن را به صورت زیر بیان کرد.

$$T_m = -16 \left(\frac{S}{F} \right) + 384 \quad (11)$$

با حل معادلات (۹) و (۱۱) و معادلات (۱۰) و (۱۱) می توان میزان (S/F) بهینه را در دماهای مختلف به دست آورد. شکل (۶) نمودار تغییرات (S/F) بهینه حلال را برای دماهای مختلف در محدوده دمای جداسازی نشان می دهد.



شکل ۶. نسبت (S/F) بهینه سازی شده به وسیله داده های آزمایشگاهی و نتایج مدل سازی

نتیجه گیری

در این مقاله جداسازی ترکیبات آروماتیکی از مخلوط نفتا به وسیله مدل UNIFAC مدل سازی شد. نتایج به دست آمده نشان می دهد که این مدل می تواند به خوبی رفتار سیستم های چند جزئی را پیش گوئی کرده، ظرفیت، گزینش پذیری و توان حلال را به خوبی پیش بینی کند. از طرف دیگر با تعریف شاخص عملکرد حلال میزان حلال بهینه در دماهای مختلف تعیین شد که می توان از آن برای عملکرد صنعتی در شرایط بهینه عملیاتی در جداسازی آروماتیک ها از مخلوط نفتا به وسیله حلال مخلوط اتیلن کربنات و ۱-سیکلوهگزیل-۲-پیرولیدون استفاده کرد.

منابع

1. M. Mohsen-Nia, H. Modarress, F. Doulabi, H. Bagheri, Liquid + liquid equilibria for ternary mixtures of (solvent + aromatic hydrocarbon + alkane). J. Chem. Thermodynamics, 37, 1111-1118, 2005.
2. Isamu Uemasu, Satoshi Kushiya, Selective separation of benzene from hydrocarbon mixtures via liquid-liquid extraction method using aqueous solutions of substituted cyclodextrins. Fuel Processing Technology, 85, 2004, pp. 1519-1526.
3. Khaled H.A.E. Alkhalidi, Mohamed S. Fandary, Adel S. Al-Jimaz, Mohammad S. Al-Tuwaim, Mohamed A. Fahim, Liquid-liquid equilibria of aromatics removal from middle distillate using NMP. Fluid Phase Equilibria 286, 2009, pp. 190-195.



4. G. W. Meindersma, Anita Podt, Andre Haan, Selection of ionic liquids for the extraction of aromatic hydrocarbons from aromatic/aliphatic mixtures. *Fuel Processing Technology*, 87, 2005, pp. 59-70.
5. G. M. Radwan, S. Al-Muhtaseb, M. A. Fahim, Liquid-Liquid equilibria for the extraction of aromatics from naphtha reformat by dimethylformamide/ethylene glycol mixed solvent. *Fluid Phase Equilibria*, 129, 1997, pp. 175-186.
6. G.W. Meindersma, A.B. Haan, Conceptual process design for aromatic /aliphatic separation with ionic liquids. *chemical engineering research and design*, 86, 2008, pp. 745-752.
7. M.S. Selvan, M.D. McKinley, R.H. Dubois, J.L. Atwood, Liquid-liquid equilibria for toluene+heptane+1-ethyl-3-methylimidazolium triiodide and toluene+heptane+1-butyl-3-methylimidazolium triiodide., *J. Chem. Eng. Data*, 45, 2000, pp. 841– 845.
8. M. Krummen, P. Wasserscheid, J. Gmehling, Measurement of activity coefficients at infinite dilution in ionic liquids using the dilutor technique., *J. Chem. Eng. Data*, 47, 1411–1417, 2002.
9. T.M. Letcher, P. Reddy, Ternary (liquid+liquid) equilibria for mixtures of 1-hexyl-3-methylimidazolium (tetrafluoroborate or hexafluoroborate) + benzene + an alkane at T =298.2 K and p =0.1 Mpa., *J. Chem. Thermodyn.* 37, 2005, pp. 415– 421.
10. R. Kato, J. Gmehling, Activity coefficients at infinite dilution of various solutes in the ionic liquids [MMIM]+[CH₃SO₄], [MMIM]+[CH₃OC₂H₄SO₄], [MMIM]+[(CH₃)₂PO₄], [C₂H₅NC₂H₅]+[(CF₃SO₂)₂N] and [C₂H₅NH]+[C₂H₅OC₂H₄OSO₃], *Fluid Phase Equilib.* 226, 2004, pp. 37–44.
11. S. H. Ali, Haitham M.S. Lababidi, Sabiha Q. Merchant, M. A. Fahim, Extraction of aromatics from naphtha reformat using propylene carbonate. *Fluid Phase Equilibria*, 214, 2003, pp. 25-38.
12. G. M. Radwan, S. Al-Muhtaseb, A. M. Dowaidar, M. A. Fahim, Extraction of Aromatics from Petroleum Naphtha Reformat by a 1-Cyclohexyl-2-pyrrolidone / Ethylene Carbonate Mixed Solvent. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 36, 1997, pp. 414-418.