



Research Article



DOI: 10.22034/farayandno.2024.2034309.1965



This journal is an open access journal licensed under an Attribution-Non Commercial 4.0 International Licenses (CC BY-NC 4.0).

Study of the Polypropylene Production Via the Hierarchical Analysis Process: Simulation and Optimization of the Process

Asadollah Karimi^{1*}, Alireza Kaviani²

¹ Associate Professor, University of Maragheh

² B. Sc student of Chemical Engineering, University of Maragheh

Received: 31 May 2024

Accepted: 13 Aug 2024

Abstract

This work employed the Analytical Hierarchy Process (AHP) to investigate the advantages and disadvantages of polypropylene production reactors. Five criteria were considered for this process, and three alternatives were evaluated based on the AHP method. Then, the polypropylene production process was simulated and, ultimately, the operational conditions were optimized. The tubular reactor was identified as the highest priority alternative, and cost was the highest priority criterion in the process, with 38% and 25%, respectively. The percentage of polymer yield from the reactor and the reduction of operational costs were chosen as the objective functions of this process. The optimization results showed that the best feed gas temperature and mass flow rates were 78 degrees Celsius and 5000 Kilograms per hour, respectively. Additionally, by reducing operational costs as an objective function at the optimal point, energy savings of up to 78102 dollars per year can be achieved.

Keyword: Tublar Reactor, Expert Choice Software, Aspen Plus Software, Analytical Hierarchy process.

* a.karimi@maragheh.ac.ir

Please Cite This Article Using:

Karimi, A., Kaviani, A., "Study of the Polypropylene Production Via the Hierarchical Analysis Process: Simulation and Optimization of the Process", Journal of Farayandno – Vol. 19 – No. 86, pp. 27-38, In Persian, (2024).



DOI: 10.22034/farayandno.2024.2034309.1965



This journal is an open access journal licensed under an Attribution-Non Commercial 4.0 International Licenses (CC BY-NC 4.0).

مطالعه فرایندی تولید پلی پروپیلن با به کارگیری فرایند تحلیل سلسله‌مراتبی: شبیه‌سازی و بهینه‌سازی فرایند

اسداله کریمی^{1*}، علیرضا کاویانی²¹ دانشیار مهندسی شیمی، دانشگاه مراغه² دانشجوی کارشناسی مهندسی شیمی، دانشگاه مراغه

دریافت: 1403/03/11 پذیرش: 1403/05/23

چکیده

در این مطالعه، از فرایند تحلیل سلسله‌مراتبی (AHP) برای بررسی مزایا و معایب راکتورهای تولید محصول پلی-پروپیلن به عنوان قلب فرایند، استفاده شد. براساس روش AHP، پنج معیار برای این فرآیند و سه گزینه در نظر گرفته شد، پس از این مرحله فرایند تولید پلی‌پروپیلن شبیه‌سازی شده و در نهایت شرایط عملیاتی بهینه‌سازی شد. راکتور لوله‌ای به عنوان گزینه با ارجحیت بالا و هزینه به عنوان معیار فرایند به ترتیب با 38 درصد و 25 درصد به عنوان بالاترین اولویت معرفی شدند. درصد خروجی پلیمر از راکتور و کاهش هزینه‌های عملیاتی به عنوان توابع هدف این فرایند انتخاب شدند. نتایج بهینه‌سازی نشان داد که بهترین دمای گاز خوراک و شدت جریان جرمی ورودی به ترتیب 78 درجه سانتی‌گراد و 5000 کیلوگرم بر ساعت است. همچنین با کاهش هزینه‌های عملیاتی به عنوان تابع هدف در نقطه بهینه می‌توان تا 78102 دلار در سال صرفه‌جویی انرژی داشت.

کلمات کلیدی: راکتور لوله‌ای، نرم‌افزار Aspen Plus Polymer، فرایند تحلیل سلسله‌مراتبی، نرم‌افزار Expert Choice.

* a.karimi@maragheh.ac.ir

1- مقدمه

پلی پروپیلن به عنوان یکی از مهم ترین پلیمرهای سنتزی توسط انسان شناخته شده است، به طوری که پس از پلی اتیلن به عنوان پر مصرف ترین پلیمر شناخته می شود. این پلیمر به دلیل شکل پذیری عالی و مقاومت شیمیایی به طور گسترده در زمینه های مختلفی از جمله خودروسازی، آرایشی، نساجی و بسته بندی استفاده می شود. لازم به ذکر است که بیش از یک چهارم تقاضای جهانی برای پلیمر پروپیلن است؛ بنابراین کنترل کیفی مناسب بر روی فرایندهای تولید پلی پروپیلن قطعاً در کیفیت و قیمت تمام شده محصول تأثیرگذار خواهد بود [1-2]. پروپیلن به کمک واکنش کاتالیستی پلیمریزه شده که از جمله این کاتالیست ها می توان به کاتالیست های زیگلر-ناتا¹ (ترکیب فلزهای مانند تیتانیوم با ترکیبات آلومینیومی)، کاتالیست های متالوسن² (شامل ترکیبات فلزی آلی) و کاتالیست های فلزهای انتقالی³ (ترکیب فلزهایی مانند نیکل (Ni) و پالادیم (Pd) با لیگاندهای⁴ مناسب) اشاره کرد [1]. اما در این میان، کاتالیست های زیگلر-ناتا از مهم ترین و معروف ترین کاتالیست های تولید پلی پروپیلن صنعتی هستند. شرایط پلیمریزاسیون به طور گسترده متغیر بوده و ترکیب های پلی پروپیلن نیز از نظر ساختار و خواص به طریق قابل توجهی متفاوت هستند. در حال حاضر، بیشترین تولید صنعتی بر اساس کاتالیست های زیگلر-ناتا از نسل چهارم به بعد انجام می شود [2]. میزان فعالیت و انتخاب پذیری کاتالیست های نسل چهارم در دماهای بالا کاهش نمی یابد و حتی با افزایش مقدار هیدروژن، کارایی بیشتری نسبت به نسل سوم دارند. همچنین افزودن تولوئن به فرایند به عنوان حلال، باعث افزایش فعالیت می گردد [2]. در کاتالیست های نسل 5، با افزودن ترکیبات ۱،۳-دی اترها و استرهای سوکسینات تغییراتی در ساختار کلی به وجود آمده که باعث بهبود فعالیت و توزیع وزن مولکولی پلی پروپیلن شده است [2]. طبیعی است که در کنار کاتالیست، راکتور و نوع آن بسیار حائز اهمیت تر از کاتالیست خواهد بود. پس بایستی در انتخاب راکتور جهت تولید با کیفیت تر پلیمر دقت کافی داشت. از این رو، توسعه و بهینه سازی راکتورهای پلیمریزاسیون به موجب کنترل دقیق فرایند تولید و بهبود خصوصیات نهایی محصولات پلیمری، از اهمیت ویژه ای برخوردار است. همچنین راکتورهای پلیمریزاسیون تأثیر بسیار زیادی در کنترل و بهبود خصوصیات پلیمرها، افزایش بهره وری و کاهش هزینه ها دارند. به عنوان مثال، از راکتورهای پیوسته برای تولید حجم بالای پلیمرهای مصرفی استفاده می شود، در حالی که از راکتورهای ناپیوسته برای تولید پلیمر با خواص خاص استفاده می کنند [3-4]. راکتورهای بستر سیال⁵، راکتور مخلوط کننده⁶، راکتور لوله ای بستر ثابت⁷ و راکتور آزمایشگاهی چندمنطقه ای⁸ چهار نوع راکتور مورد استفاده در تولید پلی پروپیلن هستند [3-5]. مدل سازی فرایند پلیمریزاسیون در مقالات موجود به طور کلی بر جنبه هایی مختلفی، مانند انتخاب به صرفه تجهیزات، مدل سازی راکتور، مکانیزم پلیمریزاسیون و توزیع وزن مولکولی اشاره دارند. همچنین بیشتر مقالات بر روی یکی از جنبه های مدل سازی راکتور یا مکانیسم های سینتیکی پلیمریزاسیون تمرکز

¹ Ziegler-Nata

² Metelson

³ Transition

⁴ ligand

⁵ Fluidized Bed Catalytic Polymerization Reactors

⁶ Continuous Stirred Tank Reactor

⁷ Tublar Reactor

⁸ Multizone Circulating Reactor

دارند، و مقالات و تحقیقات خیلی کمی در زمینه مدل سازی کل فرایند تولید پلی پروپیلن به صورت چند مقیاسه انجام شده است [6]. شین هیوک کیم⁹ و همکاران در سال 2015 نحوه سنتز پلی پروپیلن را به روش اسپروفیل¹⁰ به کمک نرم افزار جی پرومس¹¹ شبیه سازی کردند. آن ها در تحقیق انجام شده به جای استفاده از رویکرد آماری گسترده، از مدل سازی ریاضی دقیق که شامل مکانیسم پلیمریزاسیون و معادلات توازن برای تمامی گونه های شیمیایی بود، استفاده کردند. راکتور لوپ پلیمریزاسیون در فرایند اسپروفیل، که از سه راکتور (راکتور پیش پلیمریزاسیون، دو راکتور لوله ای) تشکیل شده است، به عنوان یک فرایند هدف استفاده شد [7]. لی جی سی¹² و همکاران در سال 2015 در یک تحقیق موفق به شبیه سازی تولید پلی پروپیلن با استفاده از دو نرم افزار جی پرومس و پروتو¹³ شده اند. آن ها از داده های یک مقاله به عنوان هدف استفاده کردند و داده های خروجی شبیه سازی آن ها خطای بسیار ناچیزی نسبت به منبع اصلی داشت [6]. در سال 2004 اس ام ماهور¹⁴ و همکاران از شبیه ساز اسپن پلاس استفاده کرده و در نهایت آن ها موفق شدند درصد خلوص ماده خروجی اصلی را افزایش دهند. همچنین آن ها توانستند مقدار انرژی مصرفی ریویولر رو کاهش دهند که این عمل باعث کاهش هزینه تمام شده گردید [8]. در سال 2022 تحقیقی به روش تحلیل سلسله مراتبی (AHP) توسط کریمی و همکاران صورت گرفت که در آن هدف تعیین به صرفه و کم پسماندترین جذب برای تصفیه هوا بود [9]. علیپور و همکارانش در سال 2022 در مطالعه ای با استفاده از روش تحلیل سلسله مراتبی برای انتخاب بهترین روش جداسازی فورمیک اسید از محلول آبی استفاده کردند [10]. فرامرزی و همکاران در سال 2022 تحقیقی درباره سنتز پلی پروپیلن با استفاده از کاتالیست نسل 4 زیگلر ناتا پرداختند و به این نتیجه رسیدند که هر چه تیتانیوم در ساختار کاتالیست بیشتر باشد ساختار شبکه ای سه بعدی (ایزوتاکتیسیته)، نسبت بهینه تیل (عنصری برای جذب سموم و رطوبت است که به همراه کاتالیست اصلی به راکتور تزریق می شود) بهبود خواهند یافت. هدف این مطالعه، بررسی تاثیر ترکیبات کاتالیزور (TEA و ED) بر فعالیت و ایزوتاکتیسیته پلی پروپیلن تولید شده. این نتایج نشان دهنده تاثیر مستقیم ترکیب های کاتالیزوری بر فعالیت و ایزوتاکتیسیته پلی پروپیلن در فرآیند پلیمریزاسیون فاز گازی است [11].

هاتازانتیس¹⁵ با استفاده از فرایند اسفروپیل که روش رایج و معتبری در جهان برای تولید پلی پروپیلن در فاز دوغابی (دو فازی مایع و گاز) است، موفق شده است که با استفاده از الگوریتم RTO دقت در مدلسازی را افزایش دهند و بتوانند حدس بزنند که پلیمر از خود در شرایط مختلف چه عکس العملی نشان خواهند داد [12].

بر اساس کمبود اطلاعات منطقی در زمینه راکتورهای مختلف تولید پلیمر پروپیلن، در این مقاله ابتدا با استفاده از رویکرد فرایند تحلیل سلسله مراتبی (در نرم افزار اکسپرت چویس نسخه 11,1) راکتورهای مختلف تولید پلی پروپیلن بررسی و راکتور مناسب بر اساس معیارهای عملیاتی انتخاب خواهد شد. پس از این مرحله راکتور پیشنهاد شده توسط

⁹ Shin Hyuk Kim

¹⁰ Spheripol

¹¹ gPROMS

¹² Lee JC

¹³ Pro/II

¹⁴ Mauhar S. M

¹⁵ Hatzantonis

فرایند تحلیل سلسله‌مراتبی در نرم‌افزار اسپن پلاس پلیمر (نسخه 11) شبیه‌سازی شده و پارامترهای عملیاتی راکتور تولید پلی‌پروپیلن بهینه خواهند گردید.

2- روش کار

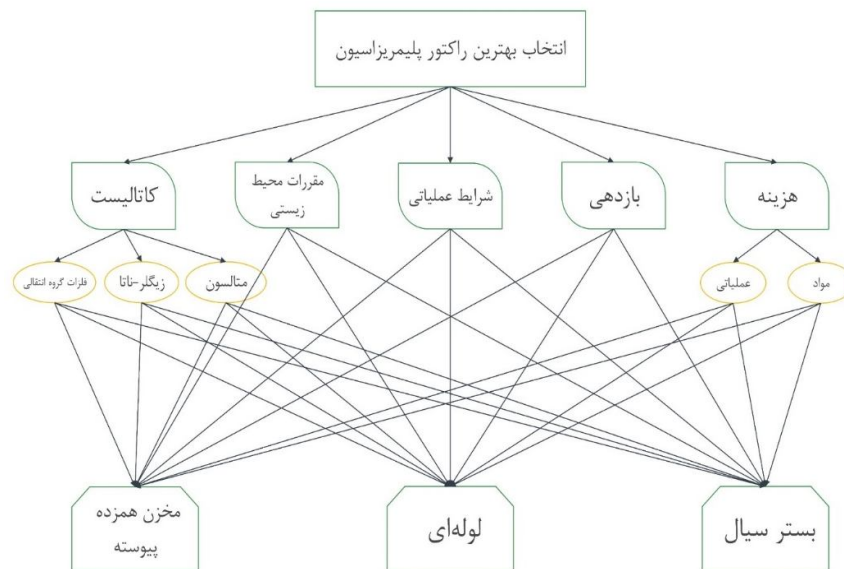
2-1 فرایند تحلیل سلسله‌مراتبی

طبیعی است که با پیشرفت فناوری‌های مختلف فرایندهای گوناگونی برای پلیمریزاسیون پلی‌پروپیلن مطرح گردد، در کنار این امر بایستی به قوانین سخت‌گیرانه‌ای که برای انرژی و محیط‌زیست وضع شده نیز ملاک قرار گیرد؛ بنابراین با نگاه به‌تمامی این ابعاد برای تولید پلی‌پروپیلن معیارهای زیادی بایستی در نظر گرفته شده و در گزینش فرایند ملاک عمل قرار گیرد [9]. واضح و مبرهن خواهد بود که افزایش معیارها و ابعاد جدید فرایند گزینش روش را پیچیده و مشکل خواهد کرد. بر این اساس، فرایند تحلیل سلسله‌مراتبی برای مقایسه منطقی و سیستماتیک میان این روش‌ها، فناوری‌ها، معیارهای مختلف و یا دستگاه‌های مرتبط انتخاب شده و مورد استفاده قرار گرفت. حسن فرایند تحلیل سلسله‌مراتبی در کنار بررسی سیستماتیک و منطقی روش‌ها و یا معیارها مقایسه زوجی موارد مختلف است که هر کدام را اولویت‌بندی کرده بر اساس وزنی که به هر یک از روش‌ها و یا معیارها می‌دهد، امکان انتخاب بهترین گزینه از میان آن‌ها را فراهم می‌کند [9-10]. این رویکرد به دلیل قابلیت مقایسه هر گزینه با همه گزینه‌های دیگر، امکان انتخاب بهترین گزینه با توجه به معیارهای موردنظر را فراهم می‌کند. همین امر باعث شده است تا به یکی از روش‌های مورد ترجیح در انتخاب‌های پیچیده تبدیل شود. فرایند تحلیل سلسله‌مراتبی مانند دیگر روش‌های تجزیه و تحلیل دارای چهار مرحله (گام¹⁶) بوده که به‌اختصار، مرحله اول نمودار درختی سلسله‌مراتبی را شامل شده، مرحله دوم تعیین هدف، مرحله سوم مقایسه زوجی پارامترهای مختلف (از جمله معیارها و گزینه‌ها) و نهایتاً مرحله آخر بررسی ناسازگاری تصمیم‌گیری می‌باشد [10]. با توجه به حجم و بعضاً پیچیدگی‌های محاسبات و احتمال خطای انسانی بهتر است تا از یک نرم‌افزار استفاده شود. نرم‌افزار اکسپرت چویس¹⁷ برای همین منظور در فرایند تحلیل سلسله‌مراتبی مورد استفاده قرار می‌گیرد. کار با این نرم‌افزار نسبتاً آسان بوده و با وارد کردن گزینه‌ها و معیارهای مورد نظر، امکان تجزیه و تحلیل (اولویت‌بندی) آن‌ها امکان‌پذیر است. همچنین این نرم‌افزار برای فهم بهتر کاربر مقایسه دوتایی¹⁸ را به روش‌های گوناگون انجام می‌دهد که مرسوم‌ترین روش مقایسه، مقایسه عددی است [9-10، 13]. معیارهای در نظر گرفته شده برای این فرایند شامل 5 مورد، هزینه‌ها (هزینه عملیاتی و مواد)، کاتالیست (زیگلر-ناتا، متالسونی و فلزات انتقالی)، بازدهی، شرایط عملیاتی و مقررات زیست‌محیطی می‌باشد. گزینه‌های این فرایند که شامل انواع راکتورهای پلیمریزاسیون می‌شوند شامل 3 مورد راکتور بستر سیال، راکتور لوله‌ای و همزن‌دار پیوسته هستند.

¹⁶ Step

¹⁷ Expert Choice

¹⁸ Pair-Wise



شکل 1- روندنمای درختی فرایند تحلیل سلسله مراتبی برای انتخاب راکتور مناسب

2-2 شبیه‌سازی فرایند انتخابی

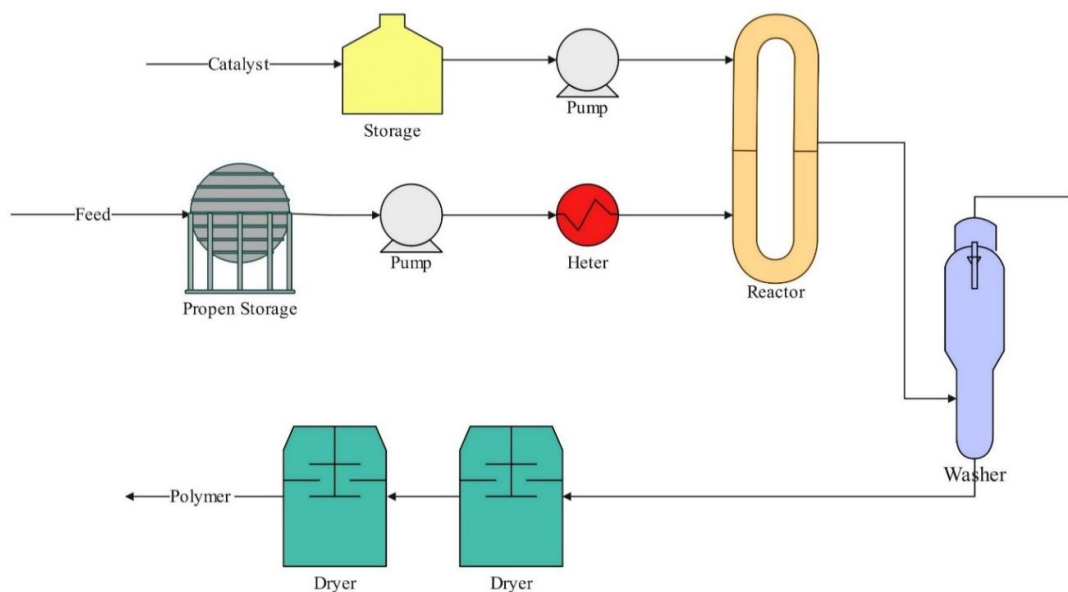
همان‌طور که پیش‌تر نیز اشاره شد این کار دومرحله‌ای بوده و پس از انتخاب گزینه مناسب برای تولید پلی‌پروپیلن لازم است تا فرایند در نرم‌افزارهای جامع شبیه‌سازی شده و شرایط عملکردی مستخرج گردید و نهایتاً بهینه‌سازی بر روی آن انجام گیرد. از شناخته شده‌ترین نرم‌افزار جامع و شبیه‌سازهای مناسب در صنایع پلیمری، نرم‌افزار Aspen Plus Polymer می‌باشد. نرم‌افزار Aspen Plus در سال 1982 توسط شرکت آمریکایی AspenTech معرفی شد. نرم‌افزار Aspen Plus رابط کاربری بسیار ساده و روان دارد که این موجب محبوبیت آن نسبت به بقیه نرم‌افزارهای شبیه‌سازی فرایند شده، همچنین در عین سادگی در رابط کاربری، بانک اطلاعات کامل و دقیقی از فرایندها و مواد مورد استفاده در صنعت دارد که سبب اعتماد به این نرم‌افزار می‌شود [14]. همچنین برای شبیه‌سازی‌های فرایندهای پلیمری تنها مرجع مناسب می‌باشد.

از ویژگی‌های نرم‌افزار Aspen Plus می‌توان به موارد ذیل اشاره کرد: اولین ویژگی برجسته، قدرت شبیه‌سازی دقیق و جامع فرایندهای شیمیایی است. این نرم‌افزار قادر است فرایندهای پیچیده را با دقت بالا مدل‌سازی کند و با قابلیت پیش‌بینی دقیق نتایج و بازدهی فرایندها امکان پیش‌بینی دقیق نتایج را بدهد. انعطاف‌پذیری بالا در مدل‌سازی فرایندها که انواع مدل‌ها و ماژول‌های مختلفی را در اختیار کاربران قرار می‌دهد. بهینه‌سازی فرایندها که این امکان را می‌دهد تا هزینه‌ها کاهش و فرایندها را به حداکثر بهره‌وری رساند. رابط کاربری کارآمد و ساده به همراه پشتیبانی فنی مجازی و بروزرسانی‌های منظم، خود را همیشه به‌روز نگه می‌دارد و کاربر را از آخرین تکنولوژی‌ها و توسعه‌های نرم‌افزاری بهره‌مند می‌سازد که باعث شده این نرم‌افزار عنوان یکی از نرم‌افزارهای برتر در زمینه طراحی و بهینه‌سازی فرایندهای صنعتی شناخته شده است و توسط مهندسين شیمی و صنایع شیمیایی به‌عنوان یک ابزار بسیار مؤثر و قابل اعتماد مورد استفاده قرار می‌گیرد [14-15].

با استفاده از این نرم‌افزار قسمت واکنشی تولید پلی‌پروپیلن بعد از انتخاب گزینه مناسب (راکتور) در فرایند تحلیل سلسله‌مراتبی شبیه‌سازی شد.

2-3 شرح فرایند

در این فرایند، پروپیلن مایع ذخیره شده در مخزن کروی ابتدا به کمک پمپ به سمت تجهیز پیش گرمایش (مبدل پوسته و لوله) هدایت می‌شود تا دما افزایش پیدا کند. پروپیلن گرم شده به داخل راکتور فرستاده می‌شود، در آن سو کاتالیست جامد وارد یک مخزن می‌شود که در آن مونومرها به همراه یک عامل انتقال زنجیر (هیدروژن) و خود کاتالیست که زیگلر-ناتا (نسل چهارم) می‌باشد، ترکیب می‌شوند و در نهایت باعث فعال شدن و دوغابی شدن حالت کاتالیست می‌شود. سپس کاتالیست فعال شده به مرور به راکتور لوله‌ای تزریق می‌شود. پس از انجام واکنش پلیمریزاسیون در داخل راکتور سیال ما که به شکل دوغابی است از خروجی راکتور لوله‌ای خارج و به سمت برج شستشو هدایت می‌شود (پس از خروج سیال از راکتور واکنش پلیمریزه شدن کامل متوقف می‌شود). در واشر پروپیلن مایع گرم به سیال زده می‌شود که باعث جداسازی پروپیلن از پودر پلیمری ما می‌شود. نهایتاً محصول پایین سری واشر وارد تجهیز خشک‌کن می‌شود تا محصول خشک شود و در آن رطوبت باقی نماند؛ سپس محصول خروجی خشک‌کن محصول نهایی (پلی پروپیلن) است.



شکل 2- نمودار جریان‌ی فرایند شبیه‌سازی شده در نرم‌افزار

3- نتایج و بحث

3-1 فرایند تحلیل سلسله مراتبی

با توجه به مطالعات انجام گرفته سه راکتور بستر سیال، راکتور لوله‌ای و همزن‌دار پیوسته به عنوان گزینه برای فرایند تولید پلیمر پروپیلن انتخاب گردید. همچنین پنج فاکتور هزینه‌ها (هزینه عملیاتی و مواد)، کاتالیست (زیگلر-ناتا، متالسونی و فلزات انتقالی)، بازدهی، شرایط عملیاتی و مقررات زیست‌محیطی به عنوان معیار برای فرایند AHP در نظر گرفته شد. مقایسه زوجی بین معیارها و گزینه‌ها براساس مطالعات موردی قبلی انجام شد. اولویت هر یک از معیارها و گزینه‌ها بر اساس شرایط مختلف در فرآیند تولید پلی پروپیلن ارزیابی و در نهایت مورد مقایسه قرار گرفت. ماتریس مقایسه زوجی معیارها و گزینه‌ها به ترتیب در جدول 1 و 2 ارائه شده است.

جدول 1- مقایسه زوجی مقیاس معیارها

گزینه‌ها	راکتور لوله‌ای	راکتور همزن‌دار	راکتور بستر سیال
راکتور لوله‌ای	1	5	2
راکتور همزن‌دار		1	0/33
راکتور بستر سیال			1
نسبت ناسازگاری	9%		

جدول 2- مقایسه زوجی مقیاس گزینه‌ها

معیار	هزینه مواد و ساخت	کارایی	مقررات زیست محیطی	شرایط عملیاتی	کاتالیست
هزینه مواد و ساخت	1	3	2	4	2
کارایی		1	0/33	2	0/33
مقررات زیست محیطی			1	4	2
شرایط عملیاتی				1	0/5
کاتالیست					1
نسبت ناسازگاری	8/5%				

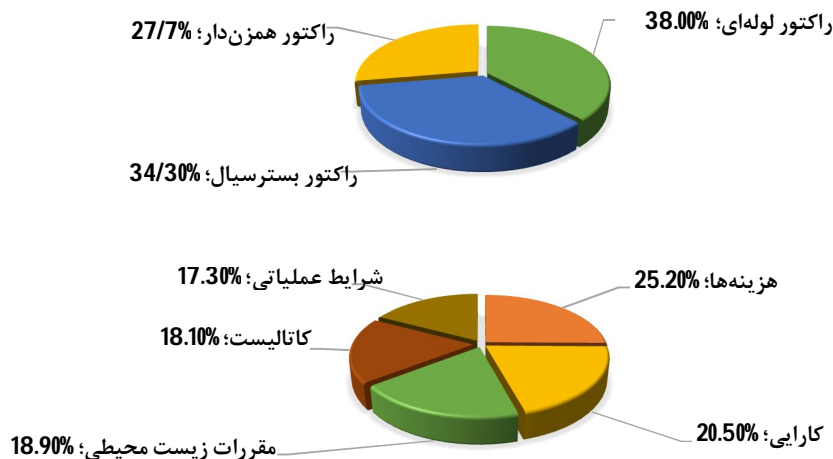
یکی از پارامترهای تصمیم‌گیری با اهمیت در فرآیند سلسله مراتب تحلیلی نسبت ناسازگاری¹⁹ است. اگر ناسازگاری به دست آمده کمتر از 10 درصد باشد، پاسخ به این روش می‌تواند ارزشمند و قابل اعتماد باشد. مقدار ناسازگاری برای معیارها و گزینه‌ها به ترتیب 8/5% و 9% به دست آمد. این دو مقدار بدست آمده نشان می‌دهد که محاسبات را می‌توان با معیار مناسبی پذیرفت، بنابراین تحلیل ارجحیت هر کدام از گزینه‌ها می‌تواند قابل استناد باشد. مقایسه زوجی معیارها و گزینه‌ها در شکل 3 بصورت دایره‌ای²⁰ نشان داده شده است. همانطور که از شکل 3 مشاهده می‌شود، پارامتر هزینه با بالاترین درصد 25/2% نسبت به سایر معیارها بیشترین ارجحیت را دارد و سپس پارامتر بازدهی، دارای اولویت دوم با 20/5% درصد ارجحیت است. با توجه به اینکه پارامتر هزینه بالاترین اهمیت را در بین معیارها دارد. بنابراین، هزینه‌های عملیاتی و مواد بایستی به طور ویژه مورد بررسی قرار گیرند. از این رو، انتخاب یک راکتور مناسب (فاکتور گزینه) تا حد زیادی بر هزینه‌های فرآیند تأثیر خواهد گذاشت. همچنین براساس معیارهای هزینه باید به مصرف ساخت و انرژی در راکتور توجه ویژه‌ای شود.

طبیعی است که هر یک از سه گزینه مزایا و معایبی دارد که برای مقایسه زوجی باید به دقت مطالعه شود. ویژگی‌های هر گزینه (راکتور مناسب) در بخش مقدمه، مواد و روش‌ها [3-7] ذکر شده است. با توجه به ارزیابی به‌دست‌آمده، می‌توان اشاره کرد که راکتور لوله‌ای با 38% نسبت به سایر گزینه‌ها (راکتورها) بیشترین اولویت را دارد. علاوه بر این، با توجه به مطالعات قبلی، راکتور بستر سیالی دارای اولویت کمتری نسبت به راکتور لوله‌ای با اولویت 34/3% است. با توجه به معیار با ارجحیت بالا (هزینه)، طبیعتاً در انتخاب راکتور نیز این عامل بایستی در اولویت بررسی باشد. بنابراین در مقایسه زوجی راکتور هر دو هزینه عملیاتی و مواد بایستی توأم در نظر گرفته شود. با توجه به اینکه هزینه‌های

¹⁹ Inconsistency Ratio

²⁰ Pie

عملیاتی راکتور بستر سیالی با توجه به شرایط فرایندی معمولاً بیشتر از راکتور لوله‌ای است. بنابراین، منطقی خواهد بود که راکتور لوله‌ای یک برتری نسبی در مقایسه با راکتور بستر سیالی داشته باشد.



شکل 3- نتایج فرایند تحلیل سلسله مراتبی برای معیارها و گزینه‌ها

3-2 شبیه‌سازی فرایند

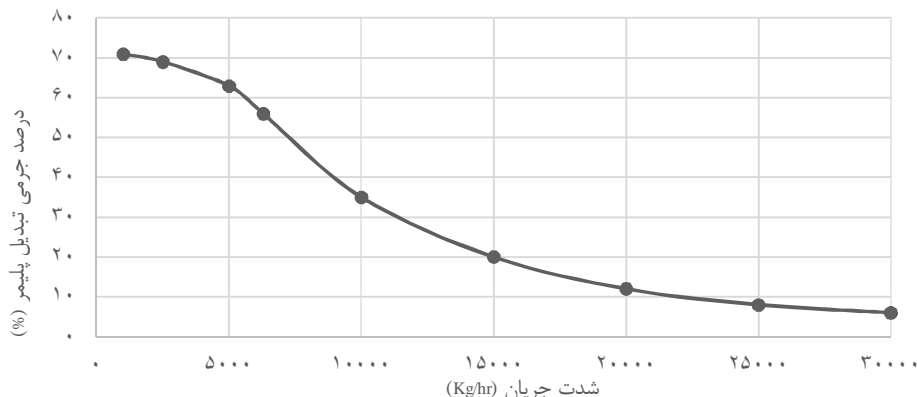
اولین گام در بررسی پارامترهای شبیه‌سازی نرم‌افزاری، اعتبارسنجی²¹ داده‌های اطلاعاتی خواهد بود. با توجه به بررسی اطلاعات مطالعه موردی، بیشترین خطا در داده‌های نرم‌افزاری 10 درصد است که خطای معقولی در بحث اعتبارسنجی می‌باشد. جدول 3 نتایج شبیه‌سازی و خطاهای تابع هدف را نشان داده است.

جدول 3- مقادیر شبیه‌سازی در نرم افزار

عنوان	مقدار شبیه‌سازی	مقدار واقعی	خطا (%)
دمای ورودی راکتور (°C)	40	44	10
دمای خروجی راکتور (°C)	70	76	8
درصد تبدیل پلیمر (%)	55	50	9
شدت جریان ورودی به راکتور (Kg/hr)	6300	6300	0

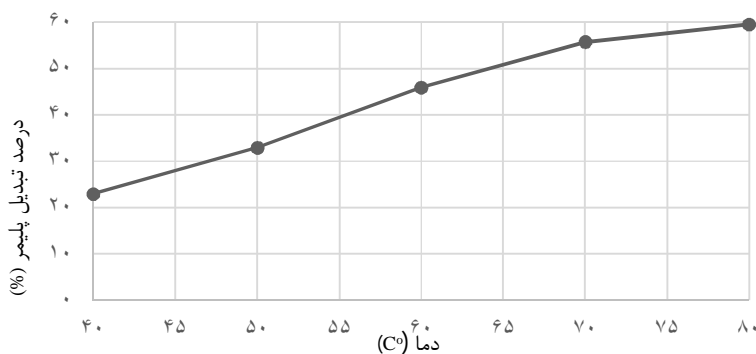
²¹ Validation

با توجه به تابع هدف تعریف شده (درصد جرمی خروجی پلیمر و کاهش هزینه عملیاتی)، بهتر است تا شرایط فرایندی طوری تعریف شود تا واکنش‌های جانبی²² تا حد امکان کاهش یابد. افزایش درصد پلیمر در خروجی راکتور و همچنین تعدیل کردن هزینه‌های عملیاتی دو عامل موثری خواهند بود که هزینه‌های فرایندی و بازدهی را به طور باور نکردنی بهبود می‌بخشند. طبیعتاً بررسی هریک از عامل‌های تاثیرگذار در فرایند بایستی بررسی شده تا به یک نقطه بهینه رسید. یکی از پارامترهای تاثیر گذار در فرایند شدت جریان‌های ورودی به راکتور خواهد بود که در شکل 4 تاثیر شدت جریان ورودی بر درصد خروجی پلیمر بررسی شده است.



شکل 4- نتایج تغییرات شدت جریان ورودی در مقابل درصد خروجی پلیمر

همانطور که در شکل 4 نیز مشخص است با افزایش شدت جریان جرمی مونومر پروپیلن درصد خروجی از راکتور کاهش یافته است که این امر می‌تواند به کاهش تاثیر کاتالیست‌های فرایند مربوط شود. مشخص است که با کاهش معقولی از شدت جریان جرمی مونومر و سگمنت می‌توان درصد پلیمر خروجی را افزایش داد. همانطور که از شکل 4 واضح و مبرهن است با تغییر در شدت جریان ورودی می‌توان تا 70 درصد میزان جرمی پلیمر را افزایش داد که یک افزایش 30 تا 40 درصدی را نسبت به مقدار واقعی نشان می‌دهد. از پارامترهای تاثیرگذار دیگر بر روی درصد پلیمر خروجی و همچنین هزینه‌های عملیاتی مقایسه دمای ورودی به راکتور است که نتایج در شکل 5 نمایش داده شده است.



شکل 5- نتایج تغییرات دما در مقابل درصد خروجی پلیمر

²² Side-Reaction

از شکل 5 می‌توان نتیجه گرفت که با افزایش دمای ورودی خوراک به راکتور درصد پلیمر خروجی از راکتور افزایش خواهد یافت، که این امر به سینتیک فرایند می‌تواند مرتبط باشد. در نقطه مقابل افزایش دما باعث افزایش هزینه‌های عملیاتی خواهد شد که این امر در تضاد با تابع هدف خواهد بود. بنابراین افزایش دما براساس یک بازه منطقی بایستی رخ دهد تا عملکرد تابع هدف هزینه‌های عملیاتی چندان دچار نقصان نشود. با بررسی پارامترهای تاثیرگذار و تجزیه و تحلیل توابع هدف می‌توان نقطه بهینه را برای این فرایند مشخص کرد. براساس نتایج بدست آمده از شبیه سازی و شکل‌های 4 و 5 می‌توان نقطه بهینه را برای این مطالعه موردی بصورت ذیل نمایش داد (جدول 4).

جدول 4- مقادیر بهینه‌سازی برای شبیه‌سازی

نقطه بهینه	عنوان
78	دمای ورودی به راکتور (°C)
5000	شدت جریان ورودی راکتور (Kg/hr)
45	فشار عملیاتی راکتور (Bar)
61	درصد پلیمر در خروجی

مشخص است که، بهره‌برداری از یک واحد پلیمریزاسیون مستلزم برنامه‌ریزی دقیق و بهینه‌سازی مستمر شرایط عملیاتی است. میزان سرمایه‌گذاری اولیه امکان تهیه تجهیزات اساسی و زیرساخت‌های پایه را فراهم می‌آورد. باین‌حال، برای دستیابی به بهره‌وری مطلوب و کاهش هزینه‌های جاری، باید به نکات کلیدی و اقدامات مدیریتی و فنی خاصی توجه نمود. در شرایط واقعی میزان هزینه عملیاتی فرایند 1063040 دلار در سال خواهد بود، که با اعمال شرایط بهینه فرایند می‌توان هزینه عملیاتی را تا 984938 دلار در سال کاهش داد. با بررسی دیگر مقالات بهینه‌سازی فرایند پلیمریزاسیون پلی‌پروپیلن نیز مشاهده می‌شود که بهینه‌سازی انجام شده در حدود 10/75 درصد می‌باشد که توسط اس ام ماهور و همکاران در سال 2004 انجام شد و در پژوهشی که توسط شین هیوک کیم و همکاران در سال 2016 بهینه‌سازی فرایند از نظر انرژی حدود 5 درصد می‌باشد [7].

4- نتیجه‌گیری کلی

شبیه‌سازی و بهینه‌سازی فرایند تولید پلیمر پروپیلن با استفاده از مونومر آن منجر به نتایج زیر شد: فرایند تحلیل سلسله مراتبی برای انتخاب بهترین راکتور برای تولید پلی‌پروپیلن از میان راکتورهای لوله‌ای، بستر سیالی و همزن دار به کار گرفته شد. نتایج به دست آمده از AHP نشان داد که معیارهای هزینه با 25 درصد در مقایسه با سایر معیارها بالاترین اولویت را دارند. همچنین راکتور لوله‌ای به عنوان گزینه برتر انتخاب شد. با وجود این، راکتور بسترسیالی در صورتی که از هزینه‌های عملیاتی پایین‌تری برخوردار باشد، می‌تواند بهترین گزینه باشد. نسبت ناسازگاری در فرایند تحلیل سلسله مراتبی برای پارامتر معیارها و گزینه‌ها به ترتیب 8/5 و 9 درصد بدست آمد. درصد خروجی پلیمر از راکتور و کاهش هزینه‌های عملیاتی به عنوان دو تابع هدف این شبیه‌سازی تعریف شدند. نتایج به دست آمده نشان داد که می‌توان در نقطه بهینه درصد خروجی پلیمر پروپیلن را تا 70 درصد افزایش داد که یک افزایش نسبتاً چشمگیری را نشان می‌دهد. نتایج بهینه‌سازی فرایند نشان داد که بهترین شدت جریان جرمی ورودی به راکتور 5000 کیلوگرم بر ساعت و دمای گاز ورودی خوراک بایستی 78 درجه سانتی‌گراد باشد. با بهینه‌سازی شرایط

موجود می‌توان تا حد زیادی در مصرف انرژی صرفه‌جویی داشت بطوریکه، با تغییر شرایط عملیاتی از حالت واقعی به بهینه می‌توان به 7/34 درصد صرفه‌جویی اقتصادی رسید.

5- منابع

- [1] W. C. Yan, T. Dong, Y. N. Zhou, and Z. H. Luo, "Computational modeling toward full chain of polypropylene production: From molecular to industrial scale," *Chemical Engineering Science*, vol. 269, pp. 118448, 2023.
- [2] D. B. Malpass and E. Band, *Introduction to industrial polypropylene: properties, catalysts processes*. John Wiley & Sons, 2012.
- [3] P. Pladis and C. Kiparissides, "Polymerization Reactors," *Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering*, Elsevier, 2014.
- [4] D. W. Green and M. Z. Southard, "Chemical reactors," in D. W. Green and R. H. Perry, Eds., *Perry's chemical engineers' handbook*, 8th ed., pp. 19-1-19-162, McGraw-Hill Education, 2008.
- [5] N. Ghasem, "Modeling and Simulation of a Multizone Circulating Reactor for Polyethylene Production with Internal Cooling," *Polymers*, vol. 15, no. 18, pp. 3741, 2023.
- [6] J. C. Lee, O. S. Kofi, S. H. Kim, S. U. Hong, and M. Oh, "Polypropylene production simulation with cape-open interfacing of pro/ii and gproms," *Journal of Engineering Science and Technology*, vol. 10, pp. 48-61, 2015.
- [7] S. H. Kim, S. W. Baek, J. C. Lee, S. U. Hong, and M. Oh, "Dynamic simulation of liquid polymerization reactors in Sheripol process for polypropylene," *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 2015.
- [8] S. M. Mauhar, B. G. Barjaktarovic, and M. N. Sovilj, "Optimization of propylene-propane distillation process," *Chemical Papers*, vol. 58, no. 6, pp. 386-390, 2004.
- [9] A. Karimi, H. Nejhab Abyaz, K. Rahimzadeh, and E. Fatehifar, "Using the Analytical Hierarchy Process to Study the Industrial Air Pollution Control Equipment: Optimal Choice," *Journal of Farayandno*, vol. 17, no. 79, pp. 5-14, 2022.
- [10] S. Alipour, A. Sadeghi, H. Omidvarborna, and A. Karim, "Techno-Economic Assessment of the AHP Based Selected Method for Separating Formic Acid from an Aqueous Effluent," *Journal of Chemical and Petroleum Engineering*, vol. 56, no. 1, pp. 107-121, 2022.
- [11] F. Farzami, M. Askari, and M. A. Eraghi, "Sensitivity analysis and multi-objective optimization of gas-phase polymerization of propylene using Ziegler-Natta catalysts," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 184, pp. 457-472, 2022.
- [12] H. P. Hatzantonis, "Estimation of the optimum propane content for the Spheripol Polypropylene process," **Journal of Process Control**, vol. 99, pp. 1-18, 2021.
- [13] J. E. Leal, "AHP-express: A simplified version of the analytical hierarchy process method," *MethodsX*, 2019.
- [14] Aspen Technology, Inc., "Aspen Polymers: User Guide," May 2017. www.aspentech.com.
- [15] A. S. Reginato, J. J. Zacca, and A. R. Secchi, "Modeling and simulation of propylene polymerization in nonideal loop reactors," 2003.