

طراحی مفهومی و ارزیابی اقتصادی تولید وینیل کلراید به روش داگلاس

محمد معین مهردادیان^۱ و ابوالقاسم بهرامی^۲

۱- دانشجوی دکتری مهندسی شیمی، دانشگاه کردستان، سنندج، ایران. (m.mehrdadian@uok.ac.ir)

۲- دانشجوی دکتری مدیریت دولتی، دانشگاه آزاد اسلامی، ساری، ایران. (pmcs.bahrami@gmail.com)

چکیده

وینیل کلراید مونومر (VCM) به عنوان ماده اولیه اصلی در تولید پلی‌وینیل کلراید (PVC)، یکی از پرکاربردترین پلیمرهای جهان، نقش حیاتی در صنایع پزشکی، ساختمانی و... ایفا می‌کند. با رشد تقاضای جهانی PVC، بهینه‌سازی فرآیند تولید VCM از نظر فنی، اقتصادی و زیست‌محیطی به موضوعی کلیدی تبدیل شده است. در این مقاله طراحی و ارزیابی اقتصادی فرایند تولید وینیل کلراید به روش داگلاس با انتخاب شرایط عملیاتی مناسب و تعیین واکنش‌های تاثیرگذار، اطلاعات اولیه فرایند، ساختار جریان‌های ورودی و خروجی و قیمت تقریبی تجهیزات، مورد ارزیابی قرار گرفته است. نتایج این مقاله نشان می‌دهد که تولید این محصول از پتانسیل اقتصادی مناسبی برخوردار است.

کلمات کلیدی: طراحی مفهومی-ارزیابی اقتصادی-وینیل کلراید-روش داگلاس

۱. مقدمه

وینیل کلراید یک ارگانوکلراید (ترکیبات آلی کلر) است که به آن VCM یا کلرواتن نیز گفته می‌شود. گازی با بوی شیرین، بسیار سمی، قابل اشتعال و سرطان‌زا است [1]. این ترکیب بی‌رنگ، یک ماده شیمیایی مهم صنعتی است که عمدتاً برای تولید پلی‌وینیل کلرید پلیمر (PVC) استفاده می‌شود [2]. بر اساس آمار انجمن بین‌المللی PVC، تولید جهانی این ماده در پایان سال ۲۰۲۲ به ۴۸ میلیون تن رسیده است که نشان دهنده رشد سالانه ۳.۵ درصدی نسبت به پنج سال قبل می‌باشد [3]. این رشد عمدتاً ناشی از تقاضای فزاینده در «صنعت ساختمان (۱۰٪ مصرف): تولید لوله‌های فاضلاب، پروفیل درب و پنجره»؛ «کاربردهای پزشکی (۱۵٪): ساخت کیسه‌های خون، لوله‌های انتقال دارو» و «بسته‌بندی (۱۰٪): فیلم‌های بسته‌بندی مواد غذایی» می‌باشد.

اولین بار در سال ۱۸۳۵ از واکنش ۲۱-دی کلرواتان با محلول پتاسیم هیدروکسید در اتانول تولید شد. در سال ۱۹۱۲ شیمیدانی آلمانی از واکنش استیلن با هیدروژن کلرید با استفاده از کاتالیزور کلرید جیوه، وینیل کلراید را سنتز کرد. همچنین این ترکیب می‌تواند به عنوان محصول جانبی در سنتز کلروفلوئوروکربن‌ها به دست آید. امروزه حدود ۸۵ درصد وینیل کلراید توسط واکنش‌های کلر با اتیلن و هوا تولید می‌شود. این ماده به عنوان خوراک راکتورهای پلیمریزاسیون استفاده می‌شود که در نهایت به پلیمر پلی‌وینیل کلراید تبدیل می‌شود [4].

طراحی فرایند داگلاس یک روش سیستماتیک و سلسله‌مراتبی برای طراحی فرآیندهای شیمیایی است که توسط جفری داگلاس در کتاب "طراحی مفهومی فرآیندهای شیمیایی" ارائه شده است [5]. این روش به مهندسان شیمی کمک می‌کند تا با در نظر گرفتن ابعاد فنی، اقتصادی و محیط‌زیستی، بهترین ساختار فرایند را برای طراحی واحدهای پتروشیمی،

پالایشگاه‌ها، صنایع دارویی و... انتخاب کنند. از مزایای این روش می‌توان به «سیستماتیک بودن: کاهش احتمال خطا در طراحی با پیروی از مراحل ساختاریافته»؛ «انعطاف‌پذیری: امکان بررسی چندین گزینه طراحی قبل از اجرا» و «توجه به مسائل اقتصادی: ادغام تحلیل هزینه در مراحل اولیه طراحی» اشاره نمود.

۲. مراحل طراحی مفهومی فرآیند

۲.۱. مرحله صفر طراحی (ورود اطلاعات اولیه)

هدف تولید: $163000 \frac{\text{ton}}{\text{yr}}$ وینیل کلراید (VC)

ماده اولیه: اتیلن دی کلراید (EDC)

واکنش فرآیند: کلریناسیون مستقیم تولید VC از EDC بوسیله کراکینگ حرارتی، هنگامی رخ می‌دهد که EDC تا دمای $475-525^\circ\text{C}$ و فشار 3.0MPa حرارت داده شود. در نتیجه تحت این اثر، مولکول‌های آن به VC و HCl شکسته می‌شود. این واکنش بسیار گرماگیر بوده و در یک کوره فرآیندی انجام می‌پذیرد.

جدول ۱- استوکیومتری فرایند تولید VC

Reaction	K value
$\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2 \xrightleftharpoons{K_1} \text{C}_2\text{H}_3\text{Cl} + \text{HCl}$	$K = \frac{K_f}{K_b}$ $K_f = 10^{13.6} \exp\left(-\frac{58000}{1.987 T}\right)$ $K_b = 3 \times 10^8 \exp\left(-\frac{44000}{1.987 T}\right)$

جدول ۲- محدودیت‌های تولید VC

Temperature (C)	Pressure (MPa)	Purity (%)	Conversion (%)	Water (ppm)
475 - 525	1.5 - 3	99.5	53 - 63	Less than 10

جدول ۳- خواص فیزیکی ترکیبات خوراک

Components	Mw (gr/mol)	Npb (C)	ΔH_{f298} (J/mol)	C_p (J/mol.K)
EDC	36.5	+84	-2.42×10^5	20.49
VC	62.5	-14	$+3.517 \times 10^4$	5.949
HCL	99	-85	-9.236×10^4	30.67

جدول ۴- قیمت مواد اولیه بر مبنای سال ۲۰۱۳

Components	Price (\$/kg)	Price (\$/kmol)
EDC	0.3749	37.11
VC	0.4624	28.9
HCL	1.5891	56.41

۲.۲. مرحله اول طراحی (پیوسته/ناپیوسته)

طبق تعریف اگر نرخ تولید سالانه واحد صنعتی بیش از $10 \times 10^6 \frac{\text{lb}}{\text{yr}}$ باشد، فرآیند تولید پیوسته و اگر بیش از $1 \times 10^6 \frac{\text{lb}}{\text{yr}}$ باشد، فرآیند تولید ناپیوسته در نظر گرفته می‌شود. لذا باتوجه به تولید VC به مقدار $163000 \frac{\text{ton}}{\text{yr}}$ که معادل $359 \times 10^6 \frac{\text{lb}}{\text{yr}}$ فرآیند پیوسته لحاظ می‌شود.

۲.۳. مرحله دوم طراحی (ساختار جریان ورودی و خروجی)

لازم است برای تصمیم‌گیری در این مرحله به سوالات زیر پاسخ داده شود:

آیا لازم است خوراک ورودی به فرآیند خالص‌سازی شود؟

خوراک (EDC) دارای خلوص 99.5% است، بنابراین نیازی به خالص‌سازی نمی‌باشد.

آیا نیازی به خارج کردن یا بازگرداندن محصول جانبی برگشت‌پذیر وجود دارد؟

در این فرآیند محصولات جانبی برگشت‌پذیر وجود ندارد.

آیا باید از جریان Purge-Recycle استفاده کرد؟

در این فرآیند هیچ‌گونه محصول سبک بارزشی وجود ندارد.

آیا واکنش‌گر بازیابی می‌شود؟

باتوجه به قیمت بالای خوراک، مقدار واکنش‌نکرده می‌بایست به فرآیند بازگردد.

این فرآیند چه تعدادی جریان خروجی دارد؟

برای پاسخگویی به این سوال، ابتدا باید همه مواد حاضر در فرآیند به ترتیب نقطه جوش در یک جدول مرتب شوند

(جدول ۵-). سپس مقصد هر یک از اجزا را تعیین کرده، اجزایی که مقصد یکسان و نقطه جوش نزدیک به هم دارند

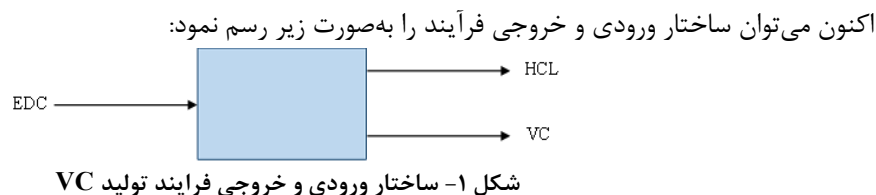
در یک گروه قرار داده می‌شوند.

ضمناً تعداد گروه‌ها بدون در نظر گرفتن جریان‌های برگشتی و خروجی از فرآیند می‌باشند.

بنابراین مطابق جدول زیر، دو جریان محصول وجود دارد یکی محصول اصلی (VC) و دیگری (HCl).

جدول ۵- جریانات موجود در فرایند تولید VC

Components	Mw (gr/mol)	Nbp (C)	Classification	Destinations Code
H ₂	2	-252	Light Product	Valuable By-Product
HCl	36.5	-85	By-Product	
C ₂ H ₂	26	-84	By-Product	
Cl ₂	70.9	-34	By-Product	
VC	62.5	-14	Primary Product	Product
EDC	99	84	Reactant	Recycle



براساس نرخ تولید VC به مقدار 163000 ton/yr می‌توان سایر شدت جریانات را محاسبه نمود.

$$P_{VC} = 163000 \frac{\text{ton}}{\text{yr}} \times \frac{1000 \text{ kg}}{1 \text{ ton}} \times \frac{1 \text{ kmol}}{62.5 \text{ kg}} \times \frac{1 \text{ yr}}{8150 \text{ hr}} = 320 \text{ Kmol/hr}$$

$$F_{F,EDC} = \frac{P_{VC}}{S} = \frac{320}{0.99} = 323.23 \text{ Kmol/hr}$$

باتوجه به اینکه تمامی EDC یا در واکنش اول (مطلوب) یا در واکنش دوم (نامطلوب) مصرف می‌شود؛ پس می‌توان شدت جریان محصول جانبی با ارزش را محاسبه کرد:

$$F_{HCl} = (F_{F,EDC} \times S) + (F_{F,EDC} \times (1-S)) = 320 \times 0.99 + 320 \times 0.01 = 323.23 \text{ Kmol/hr}$$

حال با محاسبه هر سه جریان، می‌توان مقدار پتانسیل اقتصادی (E_{p1}) را تخمین زد.

$$E_{p1} = \text{Product cost} + \text{Byproduct cost} - \text{Raw material cost}$$

$$E_{p1} = [P_{VC} \times C_{VC}] + [P_{HCl} \times C_{HCl}] - [F_{F,EDC} \times C_{F,EDC}] \times 8150 \frac{\text{hr}}{\text{yr}}$$

$$E_{p1} = \left[\left(320 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}} \times 28.9 \frac{\$}{\text{kmol}} \right) + \left(323.23 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}} \times 56.41 \frac{\$}{\text{kmol}} \right) - \left(323.23 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}} \times 37.11 \frac{\$}{\text{kmol}} \right) \right] \times \left[8150 \frac{\text{hr}}{\text{yr}} \right]$$

$$E_{p1} = 126213627 \frac{\$}{\text{yr}}$$

۲.۴. مرحله سوم طراحی (ساختار جریان برگشتی)

لازم است برای تصمیم‌گیری در این مرحله به سوالات زیر پاسخ داده شود:

چند سیستم راکتور نیاز است؟

باتوجه به اینکه تنها یک واکنش وجود دارد پس فقط یک سیستم راکتور از نوع کوره فرآیندی پیرولیز کافی است.

چند جریان برگشتی داریم؟

تنها یک جریان برگشتی مورد نیاز است.

آیا واکنش‌گری را اضافه وارد می‌کنیم؟

واکنش‌گر اضافی وارد سیستم نمی‌شود.

آیا کمپرسور گازی نیاز است؟

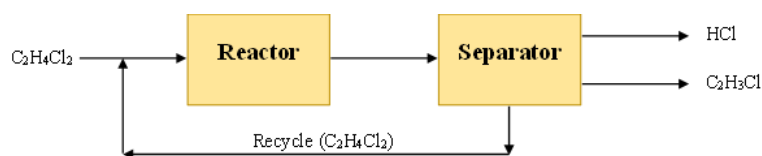
می‌توان EDC باقی‌مانده از واکنش را در خروجی کوره فرآیندی، کندانس نمود و از طریق یک پمپ بازگردانده شود.

آیا راکتور می‌تواند به صورت آدیاباتیک عمل کند؟

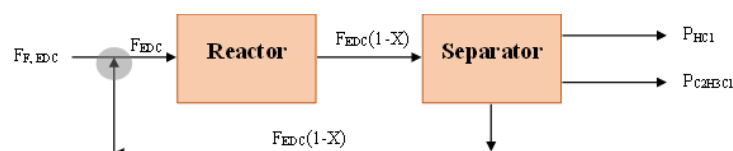
باتوجه به اینکه واکنش از نوع پیرولیز است، کاتالیست مورد استفاده قرار نمی‌گیرد و چون انجام واکنش به دمای بالا نیاز دارد یک منبع حرارتی دارای احتراق بایستی تعبیه شود.

آیا نیاز به جابه‌جایی میزان تبدیل تعادلی می‌باشد؟

به دلیل بالابودن میزان تبدیل تعادلی در این دما، نیازی به این جابه‌جایی نیست. اکنون می‌توان ساختار جریان برگشتی فرآیند (شکل-۲) و موازنه (شکل-۳) را به صورت زیر رسم نمود:

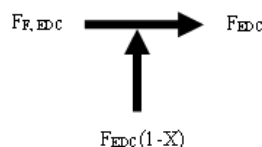


شکل ۲- ساختار جریان برگشتی فرایند تولید VC



شکل ۳- موازنه فرایند تولید VC

و موازنه حول نقطه اختلاط ورودی (نقطه مشخص شده با علامت ●) را ترسیم و محاسبه نمود:



شکل ۴- موازنه حول نقطه اختلاط ورودی به راکتور

$$F_{EDC}(1-X) + F_{F,EDC} = F_{EDC}$$

$$F_{F,EDC} = F_{EDC} \times X$$

$$P_{EDC} = \frac{F_{F,EDC}}{X} = \frac{323.23}{0.533} = 604.55 \text{ Kmol/hr}$$

در ادامه تغییرات دمای آدیاباتیک و محاسبات آن براساس جدول (۶) مورد بررسی قرار می‌گیرد.

جدول ۶- تغییر دمای آدیاباتیک

Components	$\Delta H_{f,298}$ (J/mol)	$C_{p,298}$ (J/mol. K)	$\Delta H_{f,773}^*$ (J/mol)
EDC	-2.42×10^5	20.49	-1.2×10^5
VC	$+3.517 \times 10^4$	5.949	$+3.799 \times 10^4$
HCL	-9.236×10^4	30.67	-7.779×10^4

$$\Delta H_f(T) = \Delta H_f^*(298 \text{ K}) + C_p(T - 298 \text{ K})$$

$$\Delta H = \sum \Delta H_{f, \text{Product}} - \sum \Delta H_{f, \text{Feed}}$$

$$\Delta H = [(-7779 \times 10^4) + (3799 \times 10^4) + (-1.2 \times 10^5)] = 80267 \frac{\text{KJ}}{\text{hr}}$$

$$Q = \Delta H \times F_{F,EDC} \rightarrow Q = 80267 \frac{\text{J}}{\text{mol}} \times 323.23 \frac{\text{Kmol}}{\text{hr}} = 25.944 \times 10^6 \frac{\text{KJ}}{\text{hr}}$$

$$\Delta T = \frac{Q}{F \cdot C_p} \rightarrow 773 \text{ K} - T_{\text{out}} = \frac{25.944 \times 10^6 \frac{\text{KJ}}{\text{hr}}}{604.55 \frac{\text{Kmol}}{\text{hr}} \times 20.49 \frac{\text{J}}{\text{mol.K}}} \rightarrow T_{\text{out}} = 1321.4 \text{ K}$$

حداکثر دمای مجاز برای پیشگیری از پلیمریزاسیون VC، 798 K است، طبق دمای محاسبه‌شده فوق، افزایش دما در محدوده مجاز اعلام‌شده نمی‌باشد لذا وجود یک کوره فرآیندی نیاز خواهد بود. باتوجه به الزام‌شدن وجود راکتور از نوع کوره فرآیندی پیرولیز (که علت استفاده آن کاهش هزینه‌ها می‌باشد)، نیاز است هزینه نصب آن محاسبه شود. داده‌های مربوط به Cost Models از صفحه ۵۷۰ کتاب داگلاس (شکل ۵-۱) استخراج شده‌اند.

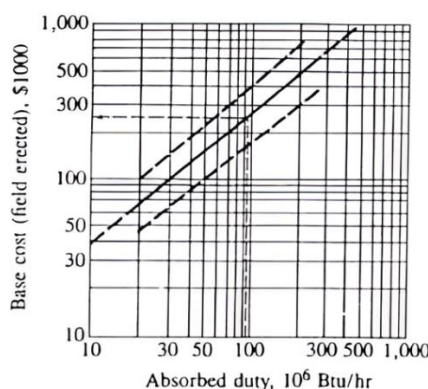
Process Furnaces

Mid-1968 cost, box or A-frame construction with multiple tube banks, field erected.

$$\text{Installed Cost, \$} = \left(\frac{M\&S}{280} \right) (5.52 \times 10^3) Q^{0.85} (1.27 + F_c)$$

where Q = adsorbed duty, 10^6 Btu/hr; $20 < Q < 300$

$$F_c = F_d + F_m + F_p$$



Process furnaces. [K. M. Guthrie, Chem. Eng., 76(6): 114 (March 24, 1969).]

Correction factors F_c for process furnace

Design type	F_d	Radiant tube material	F_m	Design pressure, psi	F_p
Process heater	1.00	Carbon steel	0.0	Up to 500	0.00
Pyrolysis	1.10	Chrome/tioly	0.35	1000	0.10
Reformer (no catalyst)	1.35	Stainless	0.75	1500	0.15
				2000	0.25
				2500	0.40
				3000	0.60

شکل ۵-۱ Cost Models مربوط به راکتور از نوع کوره فرآیندی پیرولیز [5]

هزینه نصب راکتور از نوع کوره پیرولیز:

$$\text{Installed Cost} = \left(\frac{1798.1}{280} \right) (5.52 \times 10^3) (24.6^{0.85}) (1.27 + 1.45) = 1467096.33 \$$$

هزینه ثابت به صورت هزینه سالانه محاسبه می‌شود:

$$\text{Total Annual Cost of Furnace} = 1422273.9 \$ \times 0.33 \frac{1}{\text{yr}} = 484141.79 \frac{\$}{\text{yr}}$$

حال با بهره‌گیری از E_{p1} ، مجدد پتانسیل اقتصادی محاسبه می‌گردد:

$$E_{p2} = 126213627 \frac{\$}{\text{yr}} - 484141.79 \frac{\$}{\text{yr}} = 125729485.2 \frac{\$}{\text{yr}}$$

۲.۵. مرحله چهارم طراحی (طراحی بخش جداسازی)

لازم است برای تصمیم‌گیری در این مرحله به سوالات زیر پاسخ داده شود:

❏ اگر احتمال آلودگی محصول توسط مواد سبک وجود دارد، چگونه می‌توان این مواد را جدا کرد؟
HCl بخاطر فشار بخار بالا و خاصیت خوردندگی‌اش بهتر است در برج اول جدا شود، بنابراین جداکردن مواد سبک آلوده‌کننده و خورنده در برج اول بهترین راه‌کار است.

❏ مواد سبک را به کجا باید فرستاد؟
مواد سبک پس از خروج از برج اول با یک عملیات سردسازی برای کنداندن شدن احتیاج دارد، پس باید ابتدا به واحد Coolant و سپس به محل تجمع منتقل می‌شود. سایر مواد سبک موجود در خوراک نیز در این مرحله همراه HCl خارج شوند.

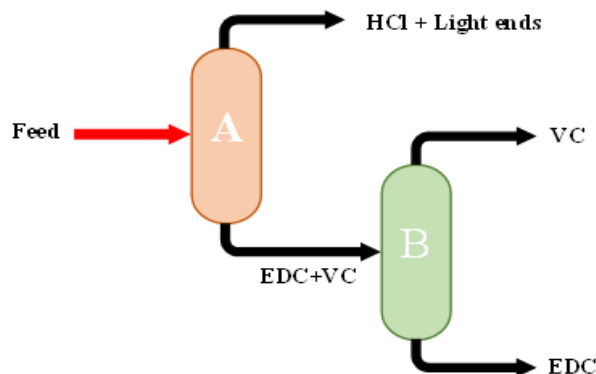
❏ آیا موادی را که با یکی از واکنش‌گرها تشکیل هم‌جوش می‌دهند، چگونه می‌توان این مواد را جداکرد؟
در این فرایند واکنش‌گرها تشکیل هم‌جوش نمی‌دهند.

❏ چه نوع جداسازی‌هایی می‌توان توسط تقطیر انجام داد؟
در برج اول جداسازی HCl و اندکی مواد سبک و در برج دوم جداسازی VC از EDC تفکیک می‌شوند.

❏ چه نوع توالی برای برج‌های تقطیر مناسب است؟
چون ۳ ماده باید از هم جدا شوند پس طبق جدول صفحه ۱۷۶ کتاب داگلاس، ۲ برج مورد نیاز است.

❏ اگر تقطیر امکان‌پذیر نیست، چگونه می‌توان جداسازی‌ها را انجام داد؟
انجام جداسازی با تقطیر امکان‌پذیر است.

در شکل (۶) Flow diagram مربوط به چیدمان برج‌های تقطیر مشخص شده است. در ادامه توضیحات و روش انجام محاسبات مربوط به هزینه برج‌های تقطیر ارائه خواهد شد. متداول‌ترین روش مورد استفاده برای طراحی ستون تقطیر روش محاسباتی FUG است که در واقع تعمیم‌یافته روش‌های محاسباتی دوجزئی است که دقت قابل ملاحظه این روش، عدم نیاز به رسم شکل و لحاظ نمودن طیف وسیعی از سازندگان مزیت عمده آن است.



شکل ۶- دیاگرام جریان مربوط به برج‌های تقطیر

۲.۵.۱. گام اول: تعیین دو سازنده بعنوان سازنده کلیدی سبک و سنگین

ابتدا باید تمام سازندگان خوراک را به ترتیب فراریتهای نسبی مشخص نمود (جدول-۵). سازندگان زودفرار به سبک و سازندگان دیرفرار به سنگین موسومند. اغلب یک سازنده که به نام سازنده کلیدی سبک خوانده می‌شود در محصول پایین ستون به‌میزان غیرقابل‌اغماضی وجود دارد (این مقدار تا اندازه‌ای است که در محاسبات صفر منظور نشود) باین حال سازندگان سبک‌تر از این سازنده در محصول پایین ستون وجود ندارند. به همین ترتیب معمولاً یک سازنده که سازنده کلیدی سنگین خوانده می‌شود، در محصول بالای ستون به میزان قابل توجهی وجود دارد، درحالی‌که سازندگان سنگین‌تر از این سازنده در محصول بالای ستون مقدارشان بسیار ناچیز و در حد صفر است. فراریت نسبی سازندگان به‌صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\alpha_{j,hk} = \frac{(K\text{-value})_i}{(K\text{-value})_{hk}}$$

$\alpha_{j,hk}$ یعنی فراریت نسبی برحسب سازنده کلیدی سنگین سنجیده می‌شود. به‌علت استفاده مکرر فراریتهای نسبی سازندگان در تعیین نسبت جریان برگشتی، تعداد سینی‌های ستون تقطیر و تعیین درست سازندگان کلیدی سبک و سنگین از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. البته تعیین سازندگان کلیدی در قسمت‌های بعدی مورد آزمون قرار می‌گیرد و در صورت نادرست بودن این کار باید با گزینه‌های دیگر امتحان شود. معمولاً سازندگان کلیدی، سازندگانی هستند که هدف مساله یا هدف طراحی بر مبنای بازیافت آن‌ها در بالا و پایین ستون مشخص می‌شود. این مرحله می‌تواند در شناخت سازندگان کلیدی کمک کند.

۲.۵.۲. گام دوم: محاسبات تقطیر ناگهانی^۱

محاسبات تقطیر ناگهانی خوراک که به تقطیر تعادلی مرسوم است مختصراً به‌صورت زیر می‌باشد:

$$F = L_F + G_F$$

$$F \cdot Z_{j,f} = L_F \cdot x_{j,if} + G_F \cdot y_{j,gf}$$

$$K_j = \frac{y_{j,gf}}{x_{j,lf}}$$

(G_F , L_F) جریان‌های مولی بخار و مایع می‌باشند و ($y_{j,gf}$ و $x_{j,if}$, $Z_{j,f}$) به ترتیب اجزای مولی خوراک، خروجی مایع و خروجی بخار است.

محاسبات با حدس نسبت L_F/G_F آغاز می‌شود، در ادامه بدست آوردن K-Value برای تمام سازندگان در دمای خوراک و دستیابی به مقادیر $y_{j,gf}$ از موازنه مواد:

$$y_{j,gf} = \frac{\left(1 + \frac{L_F}{G_F}\right) \cdot Z_{j,f}}{\left(1 + \frac{L_F}{G_F \cdot K_j}\right)}$$

نهایتاً صدقیت رابطه زیر بررسی می‌شود:

$$\sum G_F \cdot y_{j,gf} = 1.0$$

^۱ Flash

در صورت نادرستی رابطه بالا برگشت به مرحله اول و در صورت درستی رابطه بالا ادامه محاسبات انجام خواهد شد. در مرحله پایانی بدست آوردن LG پارامتر q که در محاسبات بعدی استفاده می‌شود به صورت $(q=LF/F)$ محاسبه می‌شود.

۲.۵.۳. گام سوم: استفاده از روابط Underwood برای تعیین حداقل جریان برگشتی R_{min}

رابطه زیر (موسوم به Shiras) در حداقل جریان برگشتی برقرار است و در واقع صحت انتخاب سازندگان کلیدی را بررسی می‌کند.

$$\frac{x_{j,D} \cdot D}{Z_{j,F} \cdot F} = \left(\frac{\alpha_j - 1}{\alpha_{lk} - 1} \times \frac{x_{lk,D}}{Z_{lk,F}} \right) + \left(\frac{\alpha_{lk} - \alpha_j}{\alpha_{lk} - 1} \times \frac{x_{hk,D} \cdot D}{Z_{hk,F} \cdot F} \right)$$

اگر کسر سمت چپ معادله برای سازنده خاصی بزرگ‌تر از 1.01 یا کوچکتر از 0.01- شود، سازنده مورد نظر بین محصولات توزیع نمی‌شود و اگر کسر سمت چپ معادله بین 0.01 تا 0.99 باشد، سازنده مورد نظر بدون تردید بین محصولات توزیع می‌شود. بدین ترتیب می‌توان از صحت انتخاب سازندگان کلیدی آگاه شد. در صورت انتخاب اشتباه سازندگان کلیدی باید به ابتدای مسیر یعنی انتخاب سازندگان کلیدی برگشت و گزینه‌های دیگری را انتخاب نمود. تنها مرحله تکراری حل مسأله در روش میانبر همین مرحله است و از این مرحله به بعد اگر سازندگان کلیدی درست انتخاب شده باشند دیگر مرحله تکراری در حل مسأله وجود ندارد. در ادامه روابط دیگری که در حداقل جریان برگشتی برقرار هستند را در مسأله به کار برده و بقیه مجهولات محاسبه می‌شود.

روش‌های متعددی برای تخمین R_{min} وجود دارد که اغلب آن‌ها طولانی بوده و از دقت زیادی نیز برخوردار نیستند. نظر به اینکه تنها هدف از تعیین R_{min} ، تخمین ترکیب مولی محصولات در حداقل جریان برگشتی و اطمینان از مناسب بودن جریان برگشتی واقعی است، مقدار دقیق R_{min} مورد نیاز نمی‌باشد. در انتخاب R واقعی باید توجه داشت که این مقدار باید از R_{min} بیشتر باشد.

روش Underwood کاملاً دقیق نیست با این حال نتایج قابل قبولی بدون مراحل تکراری با استفاده از این روش بدست می‌آید. معادلات آن به صورت زیر است:

$$\sum \frac{\alpha_j \cdot Z_{j,F}}{\alpha_j - \Phi} = 1 - q$$

$$\sum \frac{\alpha_j \cdot x_{j,D}}{\alpha_j - \Phi} = R_{min} + 1$$

D مقدار مولی محصول مقطر و $x_{j,D}$ جزء مولی سازنده j در محصول مقطر است. تمام مقادیر α_j در دمای متوسط عملیاتی بدست می‌آیند. q نسبت مایع به خوراک است که در قسمت قبل روش محاسبه آن ذکر شده است. مقادیر Φ ارقامی هستند که بین فراریت‌های نسبی سازندگان توزیع شده قرار می‌گیرند. بنابراین تعداد ارقام مورد نیاز Φ یکی بیش از تعداد سازندگان موجود بین دوسازنده کلیدی است.

ارقام مذکور بین α_{lk} و α_{hk} واقع می‌باشند. محاسبات Underwood به صورت زیر است:

- به ازای دمای متوسط عملیاتی تمام α_j ها برای سازندگان بدست می‌آیند.
- رابطه اول Underwood برای تمام سازندگان و به ازای Φ مجهول نوشته می‌شود. تعداد ارقام Φ همانطوری که گفته شد یکی بیشتر از تعداد سازندگان توزیع شده است، لذا معادله اول را برای این تعداد Φ باید حل کرد.

- با استفاده از Φ های بدست آمده و رابطه دوم Underwood مقادیر مجهول در یک دستگاه n معادله و n مجهول دسته‌بندی شده و حل می‌شوند، پس ترکیب نسبی محصولات در بالای ستون $X_{j,D}$ برای تمام سازندگان بدست می‌آید. همچنین R_{min} نیز محاسبه می‌شود.
- با استفاده از رابطه $x_{j,w} \cdot W = Z_{j,f} \cdot F - y_{j,D} \cdot D$ ترکیب نسبی محصولات در محصول پایین ستون x برای تمام سازندگان بدست می‌آید.

۲.۵.۴. گام چهارم: استفاده از روابط Fenske در جریان برگشتی کامل

ترکیبی‌نسبی محصول با نسبت جریان برگشتی تغییر می‌کند و محاسبات در جریان برگشتی کامل سبب کمک به تعیین ترکیب‌نسبی نهایی می‌شود. کاربرد معادله فنسکی محدود به مخلوط‌های دو جزئی نیست بلکه می‌توان آن را برای تقطیر چندجزئی نیز بکار برد. هیچ محدودیتی در انتخاب دو سازنده وجود ندارد. با انتخاب سازنده کلیدی بجای سازنده i و سازنده سنگین بجای سازنده j رابطه فنسکی به صورت زیر درمی‌آید:

$$N_{min} = \frac{\log \left[\left(\frac{X_{i,N+1}}{X_{i,1}} \right) \cdot \left(\frac{X_{j,1}}{X_{j,N+1}} \right) \right]}{\log(\alpha_{i,j})_m}$$

$$(\alpha_{i,j})_m = \left[(\alpha_{i,j})_N (\alpha_{i,j})_1 \right]^{\frac{1}{2}}$$

مقدار متوسط α عبارت از میانگین هندسی فراریت های نسبی در دمای نقطه شبنم محصول مقطر و دمای نقطه حباب محصول پسماند است و تخمین آن مستلزم حدس و خطای مختصری می‌باشد. مقادیر X_i و $X_{j,N+1}$ در همان جزءمولی سازندگان کلیدی سبک و سنگین در کندانسور می‌باشد. در محاسبه N_{min} همان‌طوری که از مدل ارایه‌شده مشخص است، ریویولر منظور نشده‌است و N_{min} حداقل تعداد مراحل بدون محاسبه کندانسور و ریویولر می‌باشد. پس از محاسبه N_{min} ، ترکیب‌نسبی محصولات را برحسب حداقل تعداد مراحل برای تمام سازندگان با استفاده از رابطه Fenske می‌توان محاسبه کرد.

۲.۵.۵. گام پنجم: استفاده از تصحیح Gilliland برای تخمین R_{real} و N_{real}

پس‌ازاین‌که N_{min} و R_{min} بدست آمد، جهت تخمین تعداد سینی‌های واقعی در یک جریان برگشتی مشخص می‌توان از روش‌های متعددی استفاده کرد. تعیین R_{real} ، معمولاً به گونه‌ای است که اقتصاد مسأله در بهترین شرایط باشد. هرچه جریان برگشتی زیاد شود خلوص محصول مقطر بیشتر خواهد شد و این در اقتصاد مسأله بسیار تأثیرگذار است اما از یک نقطه مشخص با زیاد شدن جریان برگشتی هیدرولیک مسأله بیشتر تحت تأثیر قرار می‌گیرد که نیاز به مراحل تعادلی بیشتر و قطر بیشتر برای ستون، ارتفاع بیشتر برای ستون پمپ، کمپرسورهای قوی‌تر و... باعث می‌شود که هزینه بر اقتصاد مسأله تأثیر بیشتری بگذارد. بنابراین نسبت جریان برگشتی به ستون باید به گونه‌ای تخمین زده‌شود که خلوص محصول تا حد قابل قبول بالا باشد و همچنین هزینه تولید این محصول تا حد قابل قبول پایین باشد.

روش‌های متعدد و تحقیقات وسیعی در این زمینه وجود دارد؛ اولاً نمودار گیلیند-مولکانوف که رابطه بین جریان برگشتی و تعداد سینی‌ها را بیان می‌کند. طبق این تحقیقات برای یک عملیات به‌خصوص تقطیر، بهترین مقدار برای تعیین R_{real} با معیار ساده زیر انجام می‌شود. اما در اکثر موارد 1.3 را برای نسبت بهینه R در نظر می‌گیرند.

○ برای تعداد مراحل زیاد: $(R/R_{min})_{opt} \approx 1.1$

○ برای تعداد مراحل متوسط: $(R/R_{min})_{opt} \approx 1.3$

○ برای تعداد مراحل کم: $(R/R_{min})_{opt} \approx 1.5$

ثانیاً رابطه گیلیند که برای تعیین تعداد واقعی سینی‌ها استفاده می‌شود:

$$\frac{N - N_m}{N + 1} = 0.75 \left[1 - \left(\frac{R - R_m}{R + 1} \right)^{0.5688} \right]$$

در ادامه و باتوجه به روابط گفته‌شده مقادیر مربوط به برج‌ها مشخص شده‌اند.

محاسبات مربوط به برج A:

$$(\alpha_{i,j})_m = 4.67, R_{min} = 0.91, R_{real} = 1.09, \left(\frac{R_{real}}{R_{min}} \right)_{opt} = 1.2$$

$$N_{min} = \frac{\log \left[\left(\frac{0.995}{1 - 0.005} \right) \left(\frac{1 - 0.005}{0.005} \right) \right]}{\log 4.67} = 6.86 \approx 7$$

$$\frac{N_{real} - 7}{N_{real} + 1} = 0.75 \left[1 - \left(\frac{1.09 - 0.91}{1.09 + 1} \right)^{0.5688} \right] \rightarrow \frac{N_{real} - 7}{N_{real} + 1} = 0.563 \rightarrow N_{real} = 17.3 \approx 17$$

محاسبات مربوط به برج B (مطابق روش حل فوق):

$$(\alpha_{i,j})_m = 5.02, R_{min} = 0.44, R_{real} = 0.53, \left(\frac{R_{real}}{R_{min}} \right)_{opt} = 1.2$$

$$N_{min} = 6.55 \approx 7$$

$$N_{real} = 18.4 \approx 18$$

جهت انجام محاسبات مربوط به هزینه نصب برج‌ها، داده‌های مربوط به Cost Models از صفحات ۵۷۴ و ۵۷۵ کتاب داگلاس استخراج شده‌اند (شکل-۷). با جای‌گذاری مقادیر بدست آمده از شکل مذکور در روابط مربوط به Vessel و Internal، هزینه نصب هر یک از برج‌ها مشخص می‌شود:

$$\text{Pressure Vessel for Tower A} = 252010.31 \$$$

$$\text{Tower Internal for Tower A} = 21527.28 \$$$

$$\text{Pressure Vessel for Tower B} = 258617.82 \$$$

$$\text{Tower Internal for Tower B} = 22339.63 \$$$

هزینه ثابت برج‌ها از جمع مقادیر فوق بدست می‌آید و سپس به‌صورت هزینه سالانه محاسبه می‌شود:

$$\text{Towers Cost} = 252010.31 + 21527.28 + 258617.82 + 22339.63 = 554495.04 \$$$

$$\text{Total Annual Cost of Towers} = 554495.04 \$ \times 0.33 \frac{1}{\text{yr}} = 282983.36 \frac{\$}{\text{yr}}$$

حال با بهره‌گیری از E_{p2} ، باردیگر پتانسیل اقتصادی محاسبه می‌گردد:

$$E_{p3} = E_{p2} - \text{TAC of Towers} = 125729485.2 \frac{\$}{\text{yr}} - 282983.36 \frac{\$}{\text{yr}} = 125446501.57 \frac{\$}{\text{yr}}$$

پس از اعمال هزینه‌های Utility (جدول-۷)، درخاتمه پتانسیل اقتصادی نهایی طرح بدست می‌آید:

$$E_{p,\text{total}} = E_{p3} - \text{Util. Costs} = 125446501.57 \frac{\$}{\text{yr}} - 3719018 \frac{\$}{\text{yr}} = 121727483.57 \frac{\$}{\text{yr}}$$

Pressure Vessels, Columns, Reactors

$$\text{Installed Cost, } S = \left(\frac{M\&S}{280} \right) 101.9 D^{1.066} H^{0.802} (2.18 + F_c)$$

where D = diameter, ft

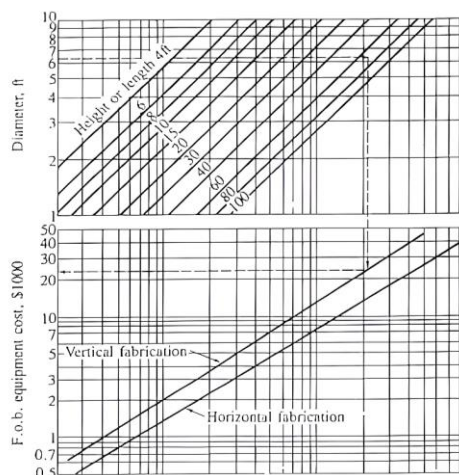
H = height, ft

$$F_c = F_m F_p$$

Pressure	Up to 50	100	200	300	400	500	600	700	800	900	1000
F_p	1.00	1.05	1.15	1.20	1.35	1.45	1.60	1.80	1.90	2.30	2.50

Correction factors for pressure vessels

Shell material	CS	SS	Monel	Titanium
F_m , clad	1.00	2.25	3.89	4.25
F_m , solid	1.00	3.67	6.34	7.89



Distillation Column Trays and Tower Internals

$$\text{Installed Cost, } S = \left(\frac{M\&S}{280} \right) 4.7 D^{1.55} H F_c$$

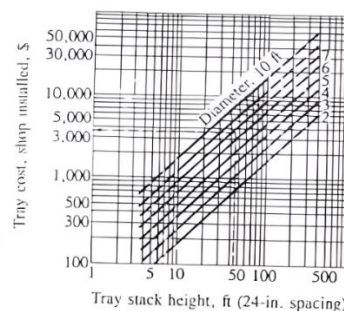
where D = diameter, ft

H = tray stack height, ft (24-in. spacing)

$$F_c = F_s + F_t + F_m$$

Correction factors for column trays

Tray spacing, in.	24	18	12				
F_s	1.0	1.4	2.2				
Tray type		Grid (no down-comer)	Plate	Sieve	Trough or valve	Bubble cap	Koch Cascade
F_t	0.0		0.0	0.0	0.4	1.8	3.9
Tray material	CS	SS	Monel				
F_m	0.0	1.7	8.9				



Distillation column trays [K. M. Guthrie, Chem. Eng., 76(6): 114 (March 24, 1969)]

شکل ۷- Cost Models مربوط به Vessel و Internal برج تقطیر [5]

جدول ۷- هزینه‌های Utility مربوط به سال ۲۰۱۳

Utility	Cost (\$/yr)
Cooling Water (298-319 K)	76830
Steam (300 psig)	724895
Fuel Oil	2506533
Refrigerant	410760
Total	3719018

۳. نتیجه‌گیری

در این مقاله به طراحی مرحله‌به‌مرحله، فرایند تولید VC پرداخته شد و این نتیجه حاصل شد که تولید VC با ظرفیت 163000 $\frac{\text{ton}}{\text{yr}}$ از پتانسیل اقتصادی مناسبی بالغ بر $\frac{\$}{\text{yr}}$ 121727483.57 برخوردار است.

۴. مراجع

- 1.Wang, H., & Zhao, Y. (2023). "Process intensification in VCM production: Energy and environmental analysis". Chemical Engineering Science, 276, 118752.
- 2.Smith, J. et al. (2020). "Vinyl Chloride: Production and Applications". Journal of Chemical Engineering, 45(3), 112-125. Atluri, S.N. and Shen, S. (2002), "The Meshless Local Petrov–Galerkin (MLPG) Method", Tech Science Press, USA.
- 3.IHS Markit (2023). "Vinyl Chloride Monomer (VCM) World Analysis".
- 4.Wang, H., & Zhao, Y. (2023). "Process intensification in VCM production: Energy and environmental analysis". Chemical Engineering Science, 276, 118752.
- 5.Douglas, J. M. (1988). "Conceptual design of chemical processes". McGraw-Hill.

Conceptual Design and Economic Evaluation of Vinyl Chloride Production Using the Douglas Method

Mohammad Moein Mehrdadian¹ and Abolghasem Bahrami²

¹Ph.D. Candidate in Chemical Engineering, University of Kurdistan, Sanandaj, Iran. (m.mehrdadian@uok.ac.ir)

²Ph.D. Candidate in Public Administration, Islamic Azad University, Sari, Iran. (pmcs.bahrami@gmail.com)

Abstract

Vinyl chloride monomer (VCM), the primary raw material in the production of polyvinyl chloride (PVC), one of the most widely used polymers in the world, plays a vital role in industries such as medical and construction. With the growing global demand for PVC, optimizing the VCM production process in terms of technical, economic, and environmental aspects has become a key issue.

This paper presents the design and economic evaluation of the vinyl chloride production process using the Douglas method. This involves selecting appropriate operating conditions, identifying key reactions, gathering initial process data, configuring input and output streams, and estimating equipment costs. The results of this study indicate that the production of this compound has favorable economic potential.

Keywords: Conceptual design, Economic evaluation, Vinyl chloride, Douglas method.