

مدلسازی و شبیه‌سازی فرایندهای جذب سطحی

تألیف

دکتر شهره فاطمی

استاد دانشکده مهندسی شیمی، دانشکده فنی، دانشگاه تهران

دکتر زینب جباری مستحسن



شماره مسلسل ۱۱۸۷۲

شماره انتشار ۴۴۷۰

انتشارات دانشگاه تهران

سرشناسه	: فاطمی، شهره، ۱۳۳۵-
عنوان و نام پدیدآور	: مدل سازی و شبیه سازی فرایندهای جذب سطحی / شهره فاطمی، زینب جباری مستحسن.
مشخصات نشر	: تهران: دانشگاه تهران، مؤسسه انتشارات، ۱۴۰۰.
مشخصات ظاهری	: ۲۸۰ص: مصور، جدول.
فروست	: انتشارات دانشگاه تهران؛ شماره انتشار ۴۴۷۰.
شابک	: 978-964-03-0279-8
وضعیت فهرست نویسی	: فیپا
یادداشت	: چاپ دوم
یادداشت	: کتابنامه
موضوع	: جذب سطحی
موضوع	: Adsorption
شناسه افزوده	: جباری مستحسن، زینب، ۱۳۶۵-
شناسه افزوده	: دانشگاه تهران. مؤسسه انتشارات. University of Tehran. Press
رده بندی کنگره	: TP۱۵۶ ۱۴۰۲
رده بندی دیویی	: ۶۶۰/۲۸۴۲۳۵
شماره کتابشناسی ملی	: ۸۴۷۸۳۰۴

این کتاب مشمول قانون حمایت از حقوق مؤلفان و مصنفان است. تکثیر کتاب به هر روش اعم از فتوکپی، ریسوگرافی، تهیه فایل های pdf، لوح فشرده، بازنویسی در وبلاگها، سایتها، مجلهها و کتاب، بدون اجازه کتبی ناشر مجاز نیست و موجب پیگرد قانونی می شود و تمامی حقوق برای ناشر محفوظ است.



عنوان: مدل سازی و شبیه سازی فرایندهای جذب سطحی
 تألیف: دکتر شهره فاطمی - دکتر زینب جباری مستحسن
 نوبت چاپ: دوم
 تاریخ انتشار: ۱۴۰۲
 شمارگان: ۱۰۰ نسخه
 ناشر: مؤسسه انتشارات دانشگاه تهران
 چاپ و صحافی: مؤسسه انتشارات دانشگاه تهران

«مسئولیت صحت مطالب کتاب با مؤلفان است»

بها: ۳,۲۰۰,۰۰۰ ریال

خیابان کارگر شمالی - خیابان شهید فرشی مقدم - مؤسسه انتشارات دانشگاه تهران

پست الکترونیک: press@ut.ac.ir - تارنما: <http://press.ut.ac.ir>

پخش و فروش: تلفکس ۸۸۳۳۸۷۱۲

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

فهرست مطالب

پیشگفتار.....ق

بخش اول - نظریه و مدلسازی جذب سطحی..... ۱

مقدمه..... ۳

فصل اول - جذب سطحی و ویژگی‌های جاذب..... ۵

۱-۱ مقدمه..... ۵

۲-۱ سازوکار جذب سطحی..... ۶

۳-۱ ویژگی‌های جاذب..... ۸

۱-۳-۱ ظرفیت جذب..... ۸

۲-۳-۱ سینتیک جذب..... ۹

۳-۳-۱ گزینش‌گری..... ۱۰

۴-۳-۱ بازیابی..... ۱۱

۵-۳-۱ تکرارپذیری و پایداری..... ۱۱

۶-۳-۱ صرفه اقتصادی تولید جاذب..... ۱۱

۷-۳-۱ هم‌دمای جذب..... ۱۲

۴-۱ جمع‌بندی..... ۲۸

۵-۱ تمرین..... ۲۸

فصل دوم - سینتیک جذب..... ۳۱

۱-۲ مقدمه..... ۳۱

۲-۲ مدل‌های سینتیک جذب..... ۳۲

۱-۲-۲ مدل سینتیک کلی..... ۳۲

۲-۲-۲ مدل سینتیکی درشت‌حفره و ریزحفره..... ۳۳

۳-۲-۲ مدل سینتیک مقاومت نفوذ در دانه..... ۳۵

۳-۲ تخمین ضریب انتقال جرم در جذب..... ۳۶

۴-۲ انتقال گرما میان دانه و سیال..... ۳۷

۱-۴-۲ موازنه گرما در دانه..... ۳۸

۲-۴-۲ ضریب انتقال گرمای سیال..... ۳۸

۵-۲ جمع‌بندی..... ۳۸

۶-۲ تمرین..... ۳۹

۴۱	فصل سوم - جذب پویا
۴۱	۱-۳ مقدمه
۴۱	۲-۳ نمودار شکست
۴۴	۳-۳ نمودار شکست دما
۴۵	۴-۳ مدل‌سازی پویا در بستر جذب
۴۵	۱-۴-۳ فرض‌های مدل‌سازی
۴۷	۲-۴-۳ موازنه جرم کلی سیال
۴۷	۳-۴-۳ تغییر فشار سیال در بستر
۴۸	۴-۴-۳ موازنه مولی جزء در سیال
۴۸	۵-۴-۳ موازنه مولی جزء در جاذب
۵۰	۶-۴-۳ موازنه انرژی گرمایی
۵۳	۷-۴-۳ روش حل عددی معادله‌ها
۵۳	۵-۳ تمرین

۵۵	فصل چهارم - طراحی بستر جذب و فرایندهای دوره‌ای
۵۵	۱-۴ طراحی بسترهای جذب
۵۶	۱-۱-۴ تجهیز تنظیم دمای بستر
۵۶	۲-۴ فرایندهای دوره‌ای جذب سطحی
۵۸	۱-۲-۴ طراحی فرایندهای دوره‌ای
۶۲	۳-۴ تمرین

۶۳	بخش دوم - شبیه‌سازی فرایندهای جذب سطحی و تخمین پارامترها
۶۵	مقدمه

۶۷	مثال ۱ - نمودار شکست در جذب پویا
۶۷	۱-۱ تعریف مسئله
۶۷	۲-۱ فرض‌های مسئله
۶۸	۳-۱ روش اجرایی
۶۹	۴-۱ پاسخ‌های مورد نیاز
۷۰	۵-۱ حل مسئله
۷۰	۱-۵-۱ فراخوانی شبیه‌ساز
۷۰	۲-۵-۱ تعریف اجزای خوراک و ویژگی‌ها
۷۸	۳-۵-۱ تولید صفحه جریان فرایند
۸۴	۴-۵-۱ ورود شرایط عملیاتی، بستر و فرض‌های مدل
۱۰۷	۶-۱ ارائه پاسخ‌ها
۱۰۷	۱-۶-۱ نمایش نمودارها

۱۰۸	۲-۶-۱ رسم نمودارهای شکست
۱۱۰	۳-۶-۱ ارائه جدول پاسخ‌ها
۱۱۲	۴-۶-۱ رسم نمودار شکست دما در نقاط مختلف بستر
۱۱۳	۵-۶-۱ نمودار در مدت زمان بارگذاری
۱۱۳	۶-۶-۱ رسم نیمرخ تابع‌ها بر حسب مکان
۱۱۴	۷-۶-۱ رسم نیمرخ کسر مولی اجزا
۱۱۷	۸-۶-۱ رسم نیمرخ دمای گاز
۱۱۸	۷-۱ جمع‌بندی و نتیجه‌گیری
۱۱۸	۸-۱ تمرین
۱۱۹	مثال ۲- جذب دوره‌ای با تناوب فشار (در یک بستر با جریان‌های مستقل)
۱۱۹	۱-۲ تعریف مسئله
۱۲۰	۲-۲ فرض‌های مسئله
۱۲۱	۳-۲ روش اجرایی
۱۲۱	۴-۲ پاسخ‌های مورد نیاز
۱۲۲	۱-۴-۲ چگونگی صفحه جریان در شبیه‌ساز
۱۲۲	۵-۲ حل مسئله
۱۲۲	۱-۵-۲ فراخوانی شبیه‌ساز
۱۲۲	۲-۵-۲ تعریف اجزای خوراک و ویژگی‌ها
۱۲۲	۳-۵-۲ تولید صفحه جریان فرایند و اجزای فنی
۱۲۵	۴-۵-۲ ورود شرایط عملیاتی جریان‌ها و مشخصه شیرها
۱۳۱	۵-۵-۲ تنظیم و کنترل مرحله‌های یک دوره
۱۴۱	۶-۵-۲ دستور نهایی اجرا
۱۴۱	۶-۲ ارائه پاسخ‌ها
۱۴۱	۱-۶-۲ نمودارهای شکست در دوره‌های متوالی
۱۴۲	۲-۶-۲ تغییر فشار گاز در دوره‌های متوالی
۱۴۲	۳-۶-۲ دمای گاز در ابتدای بستر بر حسب زمان
۱۴۳	۴-۶-۲ بارگذاری دی‌اکسیدکربن در بستر به مرور زمان
۱۴۴	۵-۶-۲ نیمرخ کسر مولی دی‌اکسیدکربن در فاز گاز و بارگذاری آن
۱۴۵	۷-۲ جمع‌بندی و نتیجه‌گیری
۱۴۵	۸-۲ پیوست
۱۴۵	Linear ۱-۸-۲
۱۴۶	Pop ۲-۸-۲
۱۴۶	ISA ۳-۸-۲
۱۴۷	Chocked ۴-۸-۲
۱۴۷	۹-۲ تمرین

۱۴۹	مثال ۳- جذب دوره‌ای با تناوب فشار (تعادل‌سازی با ابزار اینترکشن).....
۱۴۹	۱-۳- تعریف مسئله.....
۱۴۹	۲-۳- فرض‌های مسئله.....
۱۵۰	۳-۳- روش اجرایی.....
۱۵۰	۴-۳- پاسخ‌های مورد نیاز.....
۱۵۲	۵-۳- حل مسئله.....
۱۵۲	۱-۵-۳- فراخوانی شبیه‌ساز.....
۱۵۲	۲-۵-۳- تعریف اجزای خوراک و ویژگی‌ها.....
۱۵۲	۳-۵-۳- تولید صفحه جریان در شبیه‌ساز.....
۱۵۲	۴-۵-۳- تعریف اینترکشن.....
۱۵۵	۵-۵-۳- تعریف شیرها.....
۱۵۶	۶-۵-۳- ایجاد مسیرهای ارتباطی.....
۱۵۶	۷-۵-۳- ورود شرایط عملیاتی، مشخصه‌های بستر، فرض‌های مدل و مرحله‌ها.....
۱۵۸	۸-۵-۳- تنظیم و کنترل مرحله‌های یک دوره.....
۱۶۳	۹-۵-۳- دستور نهایی اجرا.....
۱۶۳	۶-۳- ارائه پاسخ‌ها.....
۱۶۳	۱-۶-۳- نمودارهای شکست در دوره‌های متوالی.....
۱۶۴	۲-۶-۳- تغییر فشار در دوره‌های متوالی.....
۱۶۴	۳-۶-۳- نمودار بارگذاری جاذب در دوره‌های متوالی.....
۱۶۵	۴-۶-۳- نیمرخ کسر مولی دی‌اکسیدکربن در فاز گاز و بارگذاری آن.....
۱۶۵	۵-۶-۳- گزارش نتایج در جدول.....
۱۶۸	۷-۳- جمع‌بندی و نتیجه‌گیری.....
۱۶۹	۸-۳- پیوست.....
۱۷۰	۹-۳- تمرین.....
۱۷۱	مثال ۴- جذب دوره‌ای با تناوب فشار (همراه با دو بستر).....
۱۷۱	۱-۴- تعریف مسئله.....
۱۷۲	۲-۴- فرض‌های مسئله.....
۱۷۴	۳-۴- روش اجرایی.....
۱۷۴	۴-۴- پاسخ‌های مورد نیاز.....
۱۷۴	۵-۴- حل مسئله.....
۱۷۴	۱-۵-۴- تعریف اجزای خوراک و ویژگی‌ها.....
۱۷۵	۲-۵-۴- تولید صفحه جریان در شبیه‌ساز.....
۱۷۶	۳-۵-۴- ایجاد مسیرهای ارتباطی.....
۱۷۶	۴-۵-۴- شرایط عملیاتی خوراک، مشخصه‌های بستر و فرض‌های مدل.....
۱۸۰	۵-۵-۴- تنظیم مرحله‌های یک دوره.....

۱۸۴	۶-۵-۴ دستور نهایی اجرا.....
۱۸۴	۶-۴ ارائه پاسخ‌ها.....
۱۸۴	۱-۶-۴ نمودارهای شکست اجزا در دوره‌های متوالی.....
۱۸۶	۲-۶-۴ نیمرخ بارگذاری اکسیژن در طول بستر.....
۱۸۶	۳-۶-۴ گزارش نتایج در جدول.....
۱۸۷	۷-۴ جمع‌بندی و نتیجه‌گیری.....
۱۸۷	۸-۴ تمرین.....

مثال ۵- جذب دوره‌ای با تناوب فشار - خلاصه..... ۱۸۹

۱۸۹	۱-۵ تعریف مسئله.....
۱۹۰	۲-۵ فرض‌های مسئله.....
۱۹۰	۳-۵ روش اجرایی.....
۱۹۰	۴-۵ پاسخ‌های مورد نیاز.....
۱۹۰	۵-۵ حل مسئله.....
۱۹۰	۱-۵-۵ فراخوانی شبیه‌ساز.....
۱۹۰	۲-۵-۵ تعریف اجزای خوراک و ویژگی‌ها.....
۱۹۰	۳-۵-۵ تولید صفحه جریان در شبیه‌ساز.....
۱۹۰	۴-۵-۵ ورود شرایط عملیاتی، مشخصه‌های بستر، فرض‌های مدل، مرحله‌ها و مسیرهای ارتباطی.....
۱۹۶	۵-۵-۵ دستور نهایی اجرا.....
۱۹۶	۶-۵ ارائه پاسخ‌ها.....
۱۹۶	۱-۶-۵ نمودارهای شکست در دوره‌های متوالی.....
۱۹۸	۲-۶-۵ نیمرخ کسر مولی CO ₂ در فاز گاز و بارگذاری.....
۲۰۰	۷-۵ جمع‌بندی و نتیجه‌گیری.....
۲۰۰	۸-۵ تمرین.....

مثال ۶- فرایند جذب دوره‌ای با تناوب دما (جداسازی از فاز گاز)..... ۲۰۱

۲۰۱	۱-۶ تعریف مسئله.....
۲۰۲	۲-۶ فرض‌های مسئله.....
۲۰۳	۳-۶ پاسخ‌های مورد نیاز.....
۲۰۵	۴-۶ حل مسئله.....
۲۰۵	۱-۴-۶ فراخوانی شبیه‌ساز.....
۲۰۵	۲-۴-۶ تعریف اجزای خوراک و ویژگی‌ها.....
۲۰۵	۳-۴-۶ تولید صفحه جریان فرایند.....
۲۰۶	۴-۴-۶ ورود شرایط عملیاتی، مشخصه‌های بستر و انتخاب فرض‌های مدل.....
۲۰۹	۵-۴-۶ مشخصه‌های بستر جذب.....
۲۱۲	۶-۴-۶ تعریف و تنظیم مرحله‌ها در فرایند دوره‌ای.....

۲۱۶	۷-۴-۶ دستور نهایی اجرا
۲۱۶	۵-۶ ارائه پاسخ‌ها
۲۱۶	۱-۵-۶ نمودار فشار، دما و نمودارهای شکست
۲۱۸	۲-۵-۶ نیمرخ بارگذاری اجزا در طول بستر
۲۱۹	۳-۵-۶ گزارش نتایج
۲۱۹	۶-۶ نتیجه‌گیری و جمع‌بندی
۲۲۰	۷-۶ تمرین

مثال ۷- فرایند جذب دوره‌ای با تناوب دما (جداسازی از فاز مایع)..... ۲۲۱

۲۲۱	۱-۷ تعریف مسئله
۲۲۲	۲-۷ فرض‌های مسئله
۲۲۲	۳-۷ پاسخ‌های مورد نیاز
۲۲۲	۴-۷ حل مسئله
۲۲۲	۱-۴-۷ فراخوانی شبیه‌ساز
۲۲۲	۲-۴-۷ تعریف اجزای خوراک و ویژگی‌ها
۲۲۲	۳-۴-۷ تولید صفحه جریان و بخش‌های فنی
۲۲۵	۴-۴-۷ معرفی شرایط عملیاتی خوراک، مشخصه‌های بستر و فرض‌های مدل
۲۲۹	۵-۴-۷ تعریف و تنظیم مرحله‌های یک دوره از فرایند
۲۳۱	۶-۴-۷ دستور نهایی اجرا
۲۳۱	۵-۷ ارائه پاسخ‌ها
۲۳۱	۱-۵-۷ نمودارهای شکست در دوره‌های متوالی
۲۳۳	۶-۷ جمع‌بندی و نتیجه‌گیری
۲۳۴	۷-۷ تمرین

مثال ۸- تخمین پارامترهای هم‌دمای جذب ۲۳۵

۲۳۵	۱-۸ تعریف مسئله
۲۳۶	۲-۸ فرض‌های مسئله
۲۳۶	۳-۸ پاسخ‌های مورد نیاز
۲۳۶	۴-۸ حل مسئله
۲۳۶	۱-۴-۸ تعریف اجزا
۲۳۶	۲-۴-۸ فراخوانی هم‌دمای ایستا
۲۳۸	۳-۴-۸ تعریف آزمایش‌ها
۲۴۳	۴-۴-۸ دستور نهایی اجرا
۲۴۴	۵-۸ جمع‌بندی و نتیجه‌گیری
۲۴۵	۶-۸ پیوست
۲۴۶	۷-۸ تمرین

مثال ۹- تخمین ضریب انتقال جرم جزء در جاذب.....	۲۴۷
۱-۹ تعریف مسئله.....	۲۴۷
۲-۹ فرض‌های مسئله.....	۲۴۸
۳-۹ پاسخ‌های مورد نیاز.....	۲۴۹
۴-۹ روش اجرایی.....	۲۴۹
۵-۹ حل مسئله.....	۲۴۹
۱-۵-۹ شبیه‌سازی جذب پویا.....	۲۴۹
۲-۵-۹ استفاده از برنامه تخمین پویا.....	۲۵۰
۳-۵-۹ روش حل عددی.....	۲۵۳
۴-۵-۹ اجرای برنامه.....	۲۵۴
۶-۹ ارائه پاسخ‌ها.....	۲۵۵
۱-۶-۹ نمودار شکست و مقایسه پاسخ‌های مدل و آزمایش.....	۲۵۵
۷-۹ جمع‌بندی و نتیجه‌گیری.....	۲۵۶
۸-۹ تمرین.....	۲۵۶
مراجع.....	۲۵۷

فهرست شکل‌ها

بخش اول

- شکل ۱-۱ مقایسه جذب فیزیکی و جذب شیمیایی از دیدگاه تغییرات انرژی پتانسیل در هنگام جذب..... ۶
- شکل ۲-۱ مقایسه‌ای میان جذب سینتیکی اکسیژن در مقابل نیتروژن به درون غریبال مولکولی کربنی..... ۷
- شکل ۳-۱ نمایی از یک دانه جاذب به همراه حفره‌های درشت، متوسط و ریز..... ۹
- شکل ۴-۱ نمودار تغییرات دیفرانسیلی حجم حفره‌ها بر حسب قطر حفره جاذب..... ۱۰
- شکل ۵-۱ نمایی از هم‌دمای جذب با شکل‌های مختلف: خطی، نامناسب و مناسب..... ۱۲
- شکل ۶-۱ انواع نمودارهای هم‌دمای جذب بر اساس دسته‌بندی آیوپاک..... ۱۵
- شکل ۷-۱ انواع نمودارهای هیستریسیس در هم‌دمای جذب-واجذب بر اساس قانون آیوپاک..... ۱۷
- شکل ۸-۱ نمای فرضی از سطح جاذب و مولکول‌های جذب‌شده بر آن..... ۱۸
- شکل ۹-۱ نمایی از سطح جاذب برای تشکیل لایه اول..... ۱۹
- شکل ۱۰-۱ سامانه اندازه‌گیری ظرفیت تعادلی جاذب با روش وزن‌سنجی..... ۲۴
- شکل ۱۱-۱ سامانه اندازه‌گیری ظرفیت تعادلی جاذب با روش حجم‌سنجی..... ۲۴
- شکل ۱۲-۱ مقایسه برهم‌کنش جاذب و جذب‌شونده، الف- جذب فیزیکی. ب- جذب شیمیایی..... ۲۵
- شکل ۱۳-۱ برازش خطی برای لگاریتم فشار بر حسب معکوس دما، حاصل از چند هم‌دمای جذب در کسر پوشش ثابت..... ۲۷
- شکل ۱-۲ نمایی از دانه جاذب همراه با مسیرهای نفوذ مولکول‌های جذب‌شونده در حفره‌ها..... ۳۱
- شکل ۲-۲ نمایی از یک دانه جاذب متخلخل با حفره‌های درشت و کریستال جامد..... ۳۴
- شکل ۳-۲ نمایی از انتقال و نفوذ جزء از فاز سیال به درون دانه..... ۳۵
- شکل ۱-۳ تغییر غلظت سیال در طول بستر در زمان‌های مختلف..... ۴۲
- شکل ۲-۳ نمودار شکست ماده جذب‌شونده، تغییرات غلظت جزء بر حسب زمان در سیال خروجی از بستر..... ۴۲
- شکل ۳-۳ پدیده برآمدگی در نمودار شکست، در جذب دو جزئی. الف- نمودار شکست تک جزئی و ب- نمودار شکست دو جزئی..... ۴۳
- شکل ۴-۳ نمودارهای شکست برای مقاومت‌های سینتیکی متفاوت..... ۴۳
- شکل ۵-۳ نمودارهای شکست با ضریب پراکندگی مختلف. با افزایش ضریب پراکندگی محوری شیب نمودار کم می‌شود..... ۴۴
- شکل ۶-۳ نمودار تغییر دمای سیال بر حسب زمان در قسمت‌های مختلف بستر: در ابتدا (خط چین)، وسط (خط توپر) و انتهای بستر (نقطه چین)..... ۴۵
- شکل ۷-۳ نمایی فرضی از بستر استوانه‌ای با دیواره، و المان بستر با طول dz..... ۴۸
- شکل ۱-۴ نمایی از سه طرح مختلف برای بستر جذب..... ۵۵
- شکل ۲-۴ نمایی از بسترهای جذب استوانه‌ای همراه با لوله‌ها یا پوسته انتقال گرما..... ۵۶
- شکل ۳-۴ نمایی از هم‌دمای جذب یک ماده در دو دمای مختلف و اثر تغییر فشار و تغییر دما بر جذب تعادلی..... ۵۷
- شکل ۴-۴ نمایی از فرایند دوره‌ای با تناوب فشار شامل چهار مرحله و دو بستر..... ۵۹
- شکل ۵-۴ فرایند دو بستری جذب سطحی با تناوب فشار برای جداسازی اکسیژن از نیتروژن هوا..... ۶۰
- شکل ۶-۴ نمایی از فرایند جذب دو بستری با تناوب دما..... ۶۲

بخش دوم

- شکل ۱-۱ صفحه کار شبیه‌ساز..... ۷۰
- شکل ۲-۱ صفحه انتخاب روش تعیین مشخصه‌های اجزای خوراک..... ۷۱

۷۱	شکل ۳-۱ پنجره <i>Aspen Properties</i> برای ورود اجزای خوراک
۷۲	شکل ۴-۱ جستجوی اجزای مورد نظر
۷۲	شکل ۵-۱ اضافه کردن CO ₂
۷۳	شکل ۶-۱ تکمیل مرحله‌های اضافه شدن هر دو جزء CO ₂ و CH ₄
۷۳	شکل ۷-۱ انتخاب معادله حالت حاکم بر ماده‌ها
۷۴	شکل ۸-۱ راهنمای کمک به کاربر در انتخاب معادله حالت مناسب
۷۴	شکل ۹-۱ تکمیل روند انتخاب اجزا
۷۴	شکل ۱۰-۱ تکمیل روند اجرای ویژگی‌های اجزا
۷۵	شکل ۱۱-۱ نهایی شدن محاسبه ویژگی‌های اجزا
۷۵	شکل ۱۲-۱ معرفی اجزا در محیط شبیه‌ساز جذب سطحی
۷۶	شکل ۱۳-۱ دسترسی شبیه‌ساز به اجزا و ویژگی‌های آن‌ها
۷۷	شکل ۱۴-۱ معرفی اجزا با استفاده از گزینه Don't Use Properties
۷۷	شکل ۱۵-۱ انتخاب گزینه Convert به منظور تغییر وضعیت اجزا
۷۷	شکل ۱۶-۱ تغییر Component list به Component set
۷۷	شکل ۱۷-۱ تعریف اجزا با روش Component Set
۷۸	شکل ۱۸-۱ جمع‌بندی مرحله‌های معرفی اجزای خوراک در شبیه‌ساز با استفاده از Component List و گزینه Use Aspen Property
۷۸	system
۷۹	شکل ۱۹-۱ اضافه کردن بستر به صفحه جریان
۷۹	شکل ۲۰-۱ تغییر نام تجهیزات
۸۰	شکل ۲۱-۱ تغییر نام بستر جذب به Bed
۸۰	شکل ۲۲-۱ اضافه کردن جریان‌ها به Flowsheet
۸۱	شکل ۲۳-۱ مسیرهای ورودی و خروجی جریان
۸۱	شکل ۲۴-۱ استفاده از ماوس برای وصل کردن مسیرهای جریان
۸۲	شکل ۲۵-۱ حرکت ماوس برای افزودن مسیر جریان ورودی
۸۲	شکل ۲۶-۱ تکمیل مسیر جریان‌ها و تجهیزات مورد نیاز برای شبیه‌سازی یک ستون ساده جذب
۸۳	شکل ۲۷-۱ مسیر استفاده از الگوهای آماده
۸۳	شکل ۲۸-۱ الگوی آماده یک بستر ساده جذب گازی
۸۴	شکل ۲۹-۱ انتخاب مدل جریان خوراک در گزینه Model Type به صورت Reversible
۸۵	شکل ۳۰-۱ وارد کردن سایر مشخصه‌های جریان خوراک
۸۵	شکل ۳۱-۱ انتخاب Spec سرعت حجمی خوراک به صورت ثابت
۸۶	شکل ۳۲-۱ تعیین مسیر جریان محصول به حالت Reversible
۸۶	شکل ۳۳-۱ تعریف مشخصه‌های جریان محصول
۸۷	شکل ۳۴-۱ انتخاب Spec فشار محصول به صورت آزاد
۸۷	شکل ۳۵-۱ جدول نتایج بعد از محاسبه در بخش Results برای محصول خروجی
۸۸	شکل ۳۶-۱ پنجره Configure Block/Stream Bed بستر جذب
۸۸	شکل ۳۷-۱ انتخاب شرایط بستر

۸۹.....	شکل ۱-۳۸ صفحه مربوط به فرض‌های مدل و بخش General
۹۰.....	شکل ۱-۳۹ فرض‌های موازنه جرم و مومنتوم
۹۱.....	شکل ۱-۴۰ فرض‌های ویژگی‌های سینتیکی جذب
۹۳.....	شکل ۱-۴۱ بخش تعریف نوع هم‌دمای جذب
۹۴.....	شکل ۱-۴۲ در نظر گرفتن گرمای ویژه فاز جذب‌شده
۹۴.....	شکل ۱-۴۳ فرض مربوط به گرمای جذب سطحی (Heat Of Adsorption Assumption)
۹۵.....	شکل ۱-۴۴ ضریب انتقال حرارت سیال
۹۵.....	شکل ۱-۴۵ فرض‌های ضریب هدایت گرمایی گاز
۹۶.....	شکل ۱-۴۶ انتخاب فرض انتقال گرما به محیط با مدل دقیق، و انتخاب ضریب انتقال گرما به دیواره
۹۷.....	شکل ۱-۴۷ انتخاب فرض‌ها و شرایط موازنه انرژی در مثال حاضر به صورت آدیاباتیک
۹۸.....	شکل ۱-۴۸ فرض مربوط به واکنش
۹۸.....	شکل ۱-۴۹ صفحه مربوط به User Procedure که در مثال حاضر از آن استفاده نشده است
۹۹.....	شکل ۱-۵۰ مشخصه‌های بستر، جاذب و پارامترهای فیزیکی
۱۰۰.....	شکل ۱-۵۱ معرفی شرایط اولیه بستر در قسمت Preset/initials
۱۰۱.....	شکل ۱-۵۲ بخش مربوط به اجرای برنامه و تنظیم حل عددی
۱۰۲.....	شکل ۱-۵۳ روش‌های مختلف حل عددی معادله‌های دیفرانسیل معمولی
۱۰۲.....	شکل ۱-۵۴ صفحه تنظیمات نرم‌افزار در انتخاب گزینه Integrator و گام‌های زمانی برای روش حل عددی
۱۰۳.....	شکل ۱-۵۵ صفحه نرم‌افزار در گزینه Tolerance برای دقت محاسبات عددی در این مثال
۱۰۴.....	شکل ۱-۵۶ بخش مربوط به اجرای برنامه (Run Option)
۱۰۵.....	شکل ۱-۵۷ تنظیمات مربوط به گزینه Run option
۱۰۶.....	شکل ۱-۵۸ اجرای شبیه‌سازی در مرحله ابتدایی (Initialization)
۱۰۷.....	شکل ۱-۵۹ اجرای شبیه‌سازی در شرایط پویا
۱۰۸.....	شکل ۱-۶۰ گزینه باز کردن پنجره رسم نمودارها
۱۰۹.....	شکل ۱-۶۱ باز شدن یک صفحه دوبعدی با نام Breakthrough Plot
۱۰۹.....	شکل ۱-۶۲ رسم نمودار شکست متان و دی‌اکسیدکربن در محصول خروجی
۱۰۹.....	شکل ۱-۶۳ نمایش تنظیم محدودده زمان
۱۱۰.....	شکل ۱-۶۴ تنظیم محدودده نمایش محور عمودی مربوط به متغیر وابسته
۱۱۰.....	شکل ۱-۶۵ رسم جدول تغییرات زمانی نتایج
۱۱۱.....	شکل ۱-۶۶ جدول نمودار شکست برای جزء مولی اجزا
۱۱۱.....	شکل ۱-۶۷ نمایش داده‌های نمودار به صورت جدول
۱۱۲.....	شکل ۱-۶۸ رسم نمودار شکست دما
۱۱۲.....	شکل ۱-۶۹ رسم نمودار دما برحسب زمان در ابتدا (1)، میانه (2) و انتهای بستر (3)
۱۱۳.....	شکل ۱-۷۰ نمودار تغییرات بارگذاری با زمان در ابتدا (1)، میانه (2) و انتهای بستر (3)
۱۱۴.....	شکل ۱-۷۱ باز شدن پنجره Profile Editor برای رسم نیمرخ کسر مولی
۱۱۴.....	شکل ۱-۷۲ باز شدن پنجره Variable Find برای جست‌وجوی متغیر مورد نیاز
۱۱۵.....	شکل ۱-۷۳ یافتن کسر مولی CO ₂ و انتقال آن به قسمت Profile Variables

شکل ۱-۷۴	تعیین متغیرهای وابسته (الف)، و مستقل (ب) و تولید آن‌ها در Profile Variable	۱۱۵
شکل ۱-۷۵	معرفی و مشخص نمودن متغیرهای مستقل و وابسته در سمت راست	۱۱۶
شکل ۱-۷۶	مشخص کردن مقطع زمانی برای رسم نیمرخ‌ها در بخش Time setting	۱۱۶
شکل ۱-۷۷	مشخص کردن زمان‌ها در رسم نیمرخ غلظت	۱۱۷
شکل ۱-۷۸	نیمرخ کسر مولی CO ₂ در سه زمان مختلف ۳۰ (1)، ۱۰۰ (2) و ۱۵۰ ثانیه (3)	۱۱۷
شکل ۱-۷۹	نیمرخ دمای گاز در سه زمان ۳۰ (1)، ۱۰۰ (2) و ۱۵۰ ثانیه (3) در طول بستر	۱۱۸
شکل ۲-۱	مرحله‌های مختلف فرایند PSA در یک بستر در یک دوره: جذب سطحی (مرحله اول)، تخلیه به محیط (مرحله دوم)، شست‌وشوی بستر توسط متان خالص (مرحله سوم) و فشارزنی با متان خالص (مرحله چهارم)	۱۲۱
شکل ۲-۲	تکمیل جریان‌های ورودی و خروجی در صفحه جریان نرم‌افزار	۱۲۳
شکل ۲-۳	افزودن شیرها به صفحه جریان	۱۲۴
شکل ۲-۴	افزودن voidها	۱۲۵
شکل ۲-۵	ایجاد مسیرهای ارتباطی	۱۲۵
شکل ۲-۶	شرایط عملیاتی خوراک ورودی	۱۲۶
شکل ۲-۷	شرایط جریان شست‌وشوی بستر	۱۲۶
شکل ۲-۸	شرایط محصول خروجی موردنیاز	۱۲۶
شکل ۲-۹	شرایط جریان پسماند	۱۲۷
شکل ۲-۱۰	انتخاب مدل عملکرد شیر	۱۲۷
شکل ۲-۱۱	شیر خوراک که بر اساس نرخ جریان مولی تنظیم شده است	۱۲۸
شکل ۲-۱۲	شیر محصول که فقط به صورت باز تنظیم شده است	۱۲۸
شکل ۲-۱۳	شیرهای جریان شست‌وشو و پسماند که در مرحله جذب بسته هستند	۱۲۸
شکل ۲-۱۴	انتخاب مشخصه‌های Void	۱۲۹
شکل ۲-۱۵	انتخاب شکل هندسی Void	۱۳۰
شکل ۲-۱۶	اندازه Void و دمای پوسته و محیط اطراف	۱۳۰
شکل ۲-۱۷	تعریف شرایط اولیه در Void بالا	۱۳۰
شکل ۲-۱۸	تعریف شرایط اولیه در Void پایین	۱۳۱
شکل ۲-۱۹	ایجاد Cycle Organizer برای فرایند دوره‌ای	۱۳۱
شکل ۲-۲۰	صفحه کنترل Cycle Organizer	۱۳۲
شکل ۲-۲۱	تنظیم دوره‌ها	۱۳۲
شکل ۲-۲۲	روش کنترل هر مرحله از دوره فرایند	۱۳۳
شکل ۲-۲۳	شرایط کنترل مرحله اول	۱۳۴
شکل ۲-۲۴	تعریف شرایط متغیرها در مرحله اول	۱۳۵
شکل ۲-۲۵	بخش مربوط به انتخاب و تعریف متغیرها	۱۳۵
شکل ۲-۲۶	بخش انتخاب نوع متغیرها	۱۳۶
شکل ۲-۲۷	تنظیم عملکرد شیرها در مرحله اول	۱۳۶
شکل ۲-۲۸	افزودن یک مرحله جدید	۱۳۷
شکل ۲-۲۹	کپی کردن داده‌های مرحله قبل	۱۳۷

- شکل ۳۰-۲ ترتیب افزودن مرحله جدید ۱۳۷
- شکل ۳۱-۲ تعریف مرحله دوم فرایند و کنترل آن ۱۳۸
- شکل ۳۲-۲ انتخاب و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله دوم ۱۳۸
- شکل ۳۳-۲ ایجاد و معرفی مرحله سوم ۱۳۹
- شکل ۳۴-۲ تنظیم عملکرد شیرها در مرحله سوم فرایند ۱۳۹
- شکل ۳۵-۲ تنظیم شرایط مرحله چهارم فرایند ۱۴۰
- شکل ۳۶-۲ تنظیم عملکرد شیرها در مرحله چهارم و نیز معرفی مشخصه‌های جریان فشارزنی ۱۴۰
- شکل ۳۷-۲ نمودار درصد خلوص گاز متان و دی‌اکسیدکربن در ۵ دوره ۱۴۲
- شکل ۳۸-۲ تغییر فشار گاز در انتهای بستر در ۵ دوره متوالی ۱۴۲
- شکل ۳۹-۲ نمودار دمای گاز در نقطه اول بستر در دوره دوم (الف) و پنج دوره (ب) ۱۴۳
- شکل ۴۰-۲ مقدار بارگذاری CO₂ در ابتدا (1) و انتهای بستر (2) در ۵ دوره ۱۴۴
- شکل ۴۱-۲ نیمرخ کسر مولی دی‌اکسیدکربن در فاز گاز در طول بستر در انتهای هر مرحله در دوره پنجم ۱۴۴
- شکل ۴۲-۲ بارگذاری دی‌اکسیدکربن در طول بستر در انتهای هر مرحله در دوره پنجم ۱۴۵
- شکل ۴۳-۲ مشخصه شیر Pop ۱۴۶
- شکل ۴۴-۲ مشخصه شیر ISA ۱۴۷
- شکل ۴۵-۲ مشخصه شیر Chocked ۱۴۷
- شکل ۱-۳ مرحله‌های شش‌گانه فرایند PSA همزمان برای دو بستر ۱۵۰
- شکل ۲-۳ افزودن gas_interaction به صفحه جریان ۱۵۳
- شکل ۳-۳ پنجره تعریف مشخصه‌های gas_interaction ۱۵۳
- شکل ۴-۳ پنجره Interaction.Specify Table برای تعریف متغیرها و پارامترهای اینترکشن ۱۵۴
- شکل ۵-۳ جدول نمایش نتایج در اینترکشن ۱۵۵
- شکل ۶-۳ اضافه کردن شیرها به صفحه جریان ۱۵۵
- شکل ۷-۳ تکمیل مسیرهای ارتباطی و ارائه صفحه جریان برای شبیه‌سازی ۱۵۶
- شکل ۸-۳ شرایط عملیاتی جریان‌های مختلف ورودی و خروجی فرایند ۱۵۷
- شکل ۹-۳ شرایط شیر اینترکشن که در مرحله جذب (در حالت بسته تنظیم می‌شود) ۱۵۸
- شکل ۱۰-۳ شرایط کنترل و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله اول ۱۵۸
- شکل ۱۱-۳ شرایط کنترلی و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله دوم به روش زمانی ۱۵۹
- شکل ۱۲-۳ شرایط کنترلی و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله سوم ۱۶۰
- شکل ۱۳-۳ شرایط کنترلی و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله چهارم ۱۶۰
- شکل ۱۴-۳ یافتن اینترکشن در بخش Step در Cycle Organizer ۱۶۱
- شکل ۱۵-۳ تنظیم ارتباط مرحله ۲ (اینترکشن) با مرحله ۵ در Cycle Organizer ۱۶۱
- شکل ۱۶-۳ شرایط کنترلی و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله پنجم ۱۶۲
- شکل ۱۷-۳ شرایط کنترلی و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله ششم ۱۶۲
- شکل ۱۸-۳ نمودار کسر مولی گاز متان و دی‌اکسیدکربن در انتهای بستر بر حسب زمان در ۵ دوره متوالی ۱۶۳
- شکل ۱۹-۳ الگوی فشار گاز در انتهای بستر در ۵ دوره ۱۶۴
- شکل ۲۰-۳ تغییرات غلظت دی‌اکسیدکربن در فاز جذب‌شده در ابتدا (1) و انتهای بستر (2) به مرور زمان در پنج دوره ۱۶۴

- شکل ۳-۲۱ نیمرخ کسر مولی دی‌اکسیدکربن در فاز گاز در طول بستر در انتهای مرحله‌های مختلف در دوره پنجم ۱۶۵
- شکل ۳-۲۲ نیمرخ بارگذاری دی‌اکسیدکربن در طول بستر در انتهای مرحله‌های مختلف در دوره پنجم ۱۶۵
- شکل ۳-۲۳ مسیر مشاهده گزارش نتایج در شبیه‌ساز ۱۶۶
- شکل ۳-۲۴ مرحله تهیه گزارش نتایج در شبیه‌ساز ۱۶۶
- شکل ۳-۲۵ جدول گزارش مشخصه جریان‌ها در مرحله اول دوره پنجم ۱۶۷
- شکل ۳-۲۶ گزارش بازده بازیابی در دوره پنجم ۱۶۸
- شکل ۳-۲۷ کنترل مرحله ۲ با استفاده از شرط وقوع یک رخداد (Event driven) ۱۶۹
- شکل ۳-۲۸ کنترل مرحله ۵ در حالتی که مرحله ۲ با استفاده از شرط وقوع یک رخداد (Event driven) کنترل می‌شود ۱۶۹
- شکل ۳-۲۹ کنترل مرحله ۶ با استفاده از شرط وقوع یک رخداد (Event driven) ۱۷۰
- شکل ۴-۱ نمایی از طراحی فرایند جذب دوره‌ای با تناوب فشار ۱۷۱
- شکل ۴-۲ نمایش مرحله‌های مختلف فرایند PSA در دو بستر ۱۷۴
- شکل ۴-۳ معرفی اجزا در شبیه‌ساز ۱۷۵
- شکل ۴-۴ صفحه جریان با در نظر گرفتن دو بستر برای حل دقیق مسئله ۱۷۵
- شکل ۴-۵ شرایط عملیاتی خوراک ورودی ۱۷۷
- شکل ۴-۶ شرایط محصول خروجی مورد نیاز به صورت آزاد ۱۷۷
- شکل ۴-۷ جریان پسماند خروجی به صورت آزاد در مرحله اول ۱۷۷
- شکل ۴-۸ شرایط اولیه برای voidهای دو بستر ۱۷۸
- شکل ۴-۹ شرایط اولیه مخزن‌های اختلاط ۱۷۸
- شکل ۴-۱۰ مشخصه‌های بسترها ۱۸۰
- شکل ۴-۱۱ شرایط کنترلی و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله اول ۱۸۱
- شکل ۴-۱۲ شرایط کنترلی و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله دوم ۱۸۱
- شکل ۴-۱۳ شرایط کنترلی و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله سوم ۱۸۲
- شکل ۴-۱۴ شرایط کنترلی و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله چهارم ۱۸۳
- شکل ۴-۱۵ تنظیمات دوره‌ها ۱۸۳
- شکل ۴-۱۶ نمودار شکست اکسیژن و نیتروژن در ۱۰ دوره متوالی در بستر اول (خط کم‌رنگ) و بستر دوم (خط پررنگ) ۱۸۴
- شکل ۴-۱۷ الگوی تغییر فشار گاز بر حسب زمان در ۵ دوره متوالی در بستر اول (خط توپر) و بستر دوم (خط چین) ۱۸۵
- شکل ۴-۱۸ بارگذاری اکسیژن در ابتدا (۱) و انتهای بستر (۲) در فاز جامد در بستر اول (خط کم‌رنگ) و بستر دوم (خط پررنگ) به مرور زمان در ۱۰ دوره متوالی ۱۸۵
- شکل ۴-۱۹ بارگذاری اکسیژن در طول بستر اول در انتهای مرحله‌های چهارگانه فرایند در دوره دهم ۱۸۶
- شکل ۴-۲۰ جدول گزارش مشخصه‌های جریان‌ها در دوره دهم در مرحله اول ۱۸۶
- شکل ۴-۲۱ گزارش بازده بازیابی نیتروژن در دوره دهم ۱۸۷
- شکل ۵-۱ مرحله‌های مختلف فرایند PVSA، مرحله‌های شش‌گانه در یک دوره بر روی یک بستر، از سمت چپ به راست ۱۸۹
- شکل ۵-۲ اضافه کردن تجهیزات جدید به صفحه جریان ۱۹۱
- شکل ۵-۳ شرایط جریان تخلیه تحت خلأ ۱۹۱
- شکل ۵-۴ تعریف شیر تخلیه جریان تحت خلأ در صفحه جریان ۱۹۲
- شکل ۵-۵ شرایط کنترل و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله اول ۱۹۲

- شکل ۵-۶ شرایط کنترل و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله دوم ۱۹۳
- شکل ۵-۷ شرایط کنترل و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله سوم ۱۹۳
- شکل ۵-۸ شرایط کنترل و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله چهارم ۱۹۴
- شکل ۵-۹ شرایط کنترل و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله ششم ۱۹۵
- شکل ۵-۱۰ شرایط کنترلی و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله هفتم ۱۹۶
- شکل ۵-۱۱ نمودار شکست کسر مولی گاز متان و دی‌اکسیدکربن در انتهای بستر بر حسب زمان در ۵ دوره متوالی ۱۹۷
- شکل ۵-۱۲ تغییر فشار گاز در انتهای بستر در ۵ دوره ۱۹۷
- شکل ۵-۱۳ تغییرات غلظت دی‌اکسیدکربن در فاز جذب‌شده در ابتدا (1) و انتهای بستر (2) به مرور زمان در پنج دوره ۱۹۸
- شکل ۵-۱۴ نیمرخ کسر مولی CO₂ در فاز گاز در طول بستر در انتهای مرحله‌های مختلف در دوره پنجم، دو فرایند PSA و PVSA ۱۹۸
- شکل ۵-۱۵ نیمرخ بارگذاری CO₂ در طول بستر در انتهای مرحله‌های مختلف در دوره پنجم حاصل از دو فرایند PSA و PVSA ۱۹۹
- شکل ۵-۱۶ مقادیر بارگذاری CO₂ در نقاط ابتدایی و انتهایی بستر در انتهای دوره پنجم حاصل از دو فرایند PSA و PVSA ۱۹۹
- شکل ۶-۱ نمایشی از مرحله‌های مختلف فرایند ۲۰۲
- شکل ۶-۲ نمایشی از بستر جذب به همراه لوله‌های داخلی به عنوان مبدل گرمایی برای گرم یا سرد کردن بستر ۲۰۳
- شکل ۶-۳ تعریف اجزا در نرم‌افزار ۲۰۵
- شکل ۶-۴ تشکیل صفحه جریان در شبیه‌ساز ۲۰۵
- شکل ۶-۵ شرایط عملیاتی و ترکیب درصد جریان خوراک ۲۰۶
- شکل ۶-۶ شرایط عملیاتی و ترکیب درصد جریان محصول ۲۰۶
- شکل ۶-۷ شرایط عملیاتی و ترکیب درصد جریان پسماند ۲۰۷
- شکل ۶-۸ مشخصه‌های ورودی شیرها در صفحه جریان ۲۰۷
- شکل ۶-۹ ورود مشخصه‌ها و شرایط اولیه Void بالای بستر ۲۰۸
- شکل ۶-۱۰ ورود مشخصه‌ها و شرایط اولیه Void پایین بستر ۲۰۸
- شکل ۶-۱۱ تعریف شرایط اولیه در ابزار اینترکشن HF ۲۰۹
- شکل ۶-۱۲ تعیین شرایط در ابزار اینترکشن CF ۲۰۹
- شکل ۶-۱۳ پنجره Configure Block/Stream Bed بستر جذب ۲۱۰
- شکل ۶-۱۴ مشخصه‌های گرمایی سیال‌ها در لوله‌های داخلی بستر ۲۱۰
- شکل ۶-۱۵ معرفی پارامترهای فیزیکی، ابعاد بستر و مشخصه‌های جاذب ۲۱۱
- شکل ۶-۱۶ شرایط کنترلی و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله اول ۲۱۲
- شکل ۶-۱۷ شرایط کنترلی و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله دوم ۲۱۳
- شکل ۶-۱۸ شرایط کنترلی و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله سوم ۲۱۳
- شکل ۶-۱۹ شرایط کنترلی و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله چهارم ۲۱۴
- شکل ۶-۲۰ کنترل کارکرد اینترکشن‌ها ۲۱۴
- شکل ۶-۲۱ شرایط کنترلی و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله پنجم ۲۱۵
- شکل ۶-۲۲ شرایط کنترلی و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله ششم ۲۱۵
- شکل ۶-۲۳ تغییر فشار در انتهای بستر، در نقطه ۲۰ در ۵ دوره متوالی ۲۱۶
- شکل ۶-۲۴ نمودار درصد خلوص گاز هیدروژن در خروجی بستر در ۵ دوره ۲۱۷
- شکل ۶-۲۵ تغییر دمای گاز در نقطه ابتدایی (1) و میانی بستر (2) در دوره‌های مختلف ۲۱۷

- شکل ۶-۲۶ میزان بارگذاری CO₂ (در محل ورود خوراک به بستر، نقطه ۱) در فاز جامد به مرور زمان در ۵ دوره متوالی..... ۲۱۸
- شکل ۶-۲۷ میزان بارگذاری CO (در محل ورود خوراک به بستر، نقطه ۱) در فاز جامد به مرور زمان در ۵ دوره متوالی..... ۲۱۸
- شکل ۶-۲۸ نیمرخ بارگذاری دی‌اکسیدکربن در جاذب در طول بستر، از ابتدا تا انتهای بستر، در انتهای زمان هر مرحله در دوره پنجم..... ۲۱۸
- شکل ۶-۲۹ جدول گزارش مشخصه‌های جریان‌ها در دوره پنجم..... ۲۱۹
- شکل ۶-۳۰ گزارش بازده بازیابی هیدروژن در دوره پنجم..... ۲۱۹
- شکل ۷-۱ مشخصه‌های اینترکشن..... ۲۲۴
- شکل ۷-۲ صفحه جریان..... ۲۲۴
- شکل ۷-۳ شرایط عملیاتی جریان‌های مختلف ورودی و خروجی فرایند..... ۲۲۵
- شکل ۷-۴ مشخصه شیرهای خوراک در مرحله جذب..... ۲۲۶
- شکل ۷-۵ مشخصه شیر جریان بازیابی در مرحله جذب..... ۲۲۶
- شکل ۷-۶ مشخصه شیر محصول در مرحله جذب..... ۲۲۶
- شکل ۷-۷ مشخصه شیر پسماند در مرحله جذب..... ۲۲۶
- شکل ۷-۸ مشخصه Voidها..... ۲۲۷
- شکل ۷-۹ صفحه مربوط به فرض‌های مدل و بخش General..... ۲۲۷
- شکل ۷-۱۰ فرض‌های موازنه جرم و مومنتوم..... ۲۲۷
- شکل ۷-۱۱ فرض‌های ویژگی‌های سینتیکی جذب..... ۲۲۸
- شکل ۷-۱۲ تعریف نوع هم‌دما جذب..... ۲۲۸
- شکل ۷-۱۳ انتخاب فرض‌ها و شرایط موازنه انرژی..... ۲۲۸
- شکل ۷-۱۴ ابعاد بستر، مشخصه‌های جاذب و مقدار پارامترهای فیزیکی..... ۲۲۹
- شکل ۷-۱۵ معرفی شرایط اولیه بستر در قسمت Preset/initials..... ۲۲۹
- شکل ۷-۱۶ شرایط کنترل و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله اول..... ۲۳۰
- شکل ۷-۱۷ شرایط کنترلی و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله دوم..... ۲۳۰
- شکل ۷-۱۸ شرایط کنترلی و تنظیم عملکرد شیرها در مرحله سوم..... ۲۳۱
- شکل ۷-۱۹ نمودار شکست کسر مولی آب در انتهای بستر بر حسب زمان در ۱۰ دوره متوالی..... ۲۳۱
- شکل ۷-۲۰ تغییر دمای سیال بر حسب زمان در نقاط ابتدایی، میانی و انتهایی بستر در ۱۰ دوره متوالی..... ۲۳۲
- شکل ۷-۲۱ نیمرخ بارگذاری آب در ابتدا (1)، میانه (2) و انتهای (3) زمان مرحله جذب، بر حسب طول بستر در دوره دهم..... ۲۳۲
- شکل ۷-۲۲ گزارش جریان‌های ورودی و خروجی در مرحله جذب در دوره آخر..... ۲۳۳
- شکل ۷-۲۳ بازده بازیابی و درصد خلوص در دوره آخر..... ۲۳۳
- شکل ۸-۱ فراخوانی هم‌دمای جذب از مسیر اول..... ۲۳۷
- شکل ۸-۲ فراخوانی هم‌دمای جذب در صفحه شبیه‌ساز از مسیر دوم..... ۲۳۷
- شکل ۸-۳ انتخاب نوع فاز سیال، نوع مدل و نوع متغیر مستقل..... ۲۳۸
- شکل ۸-۴ مشخص کردن شرایط اولیه مسئله و حدس‌های اولیه برای پارامترها..... ۲۳۸
- شکل ۸-۵ مسیر انتخاب برنامه تخمین..... ۲۳۹
- شکل ۸-۶ صفحه معرفی متغیرها در برنامه تخمین..... ۲۳۹
- شکل ۸-۷ صفحه یافتن پارامترهای مجهول در برنامه تخمین..... ۲۴۰
- شکل ۸-۸ تعریف آزمایش‌های ایستا در برنامه تخمین..... ۲۴۰

- شکل ۸-۹ انتخاب محدوده پارامترها در برنامه تخمین..... ۲۴۰
- شکل ۸-۱۰ معرفی آزمایش‌های ایستا در برنامه تخمین..... ۲۴۱
- شکل ۸-۱۱ ورود متغیرهای مستقل (فشار و دما) در برنامه تخمین ایستا..... ۲۴۱
- شکل ۸-۱۲ ورود متغیرهای اندازه‌گیری شده (بارگذاری) در برنامه تخمین ایستا..... ۲۴۲
- شکل ۸-۱۳ کپی کردن آزمایش‌های ایستا در برنامه تخمین..... ۲۴۲
- شکل ۸-۱۴ ورود کامل داده‌های آزمایشی ایستا در برنامه تخمین..... ۲۴۲
- شکل ۸-۱۵ انتخاب روش و انتخاب حد خطا برای همگرا شدن نتایج..... ۲۴۳
- شکل ۸-۱۶ مرحله اجرای برنامه تخمین..... ۲۴۴
- شکل ۸-۱۷ تکمیل اجرای برنامه تخمین..... ۲۴۴
- شکل ۸-۱۸ پاسخ‌های حاصل بعد از تخمین..... ۲۴۴
- شکل ۸-۱۹ روش‌های حل مسائل تخمین در شبیه‌ساز..... ۲۴۵
- شکل ۹-۱ صفحه جریان برای بستر جذب در صفحه شبیه‌ساز..... ۲۴۹
- شکل ۹-۲ مشخصه‌های بستر جذب و پارامترهای جذب تعادلی به همراه حدس اولیه برای ضریب انتقال جرم دی‌اکسیدکربن..... ۲۵۰
- شکل ۹-۳ صفحه معرفی متغیرها در برنامه تخمین..... ۲۵۰
- شکل ۹-۴ صفحه بازخوانی پارامترهای مجهول در برنامه تخمین..... ۲۵۱
- شکل ۹-۵ ورود پارامترهای مجهول (پارامتری که باید تخمین زده شود) به برنامه تخمین..... ۲۵۱
- شکل ۹-۶ معرفی آزمایش جدید در بخش تخمین پویا..... ۲۵۲
- شکل ۹-۷ معرفی آزمایش‌های پویا در بخش تخمین..... ۲۵۲
- شکل ۹-۸ معرفی متغیرهای اندازه‌گیری شده (کسر مولی دی‌اکسیدکربن)..... ۲۵۲
- شکل ۹-۹ ورود تمامی آزمایش‌های پویا در بخش تخمین پویا..... ۲۵۳
- شکل ۹-۱۰ انتخاب روش و فرض‌های حل عددی..... ۲۵۴
- شکل ۹-۱۱ تکمیل اجرای مسئله تخمین..... ۲۵۴
- شکل ۹-۱۲ نتایج اجرای برنامه..... ۲۵۵
- شکل ۹-۱۳ مشخصه‌های بستر پس از حل مسئله تخمین..... ۲۵۵
- شکل ۹-۱۴ نمودار شکست دی‌اکسیدکربن حاصل از آزمایش و مقایسه با مدل بعد از تخمین ضریب انتقال جرم..... ۲۵۶

فهرست جدول‌ها

۶۷	جدول ۱-۱ مشخصه‌های خوراک ورودی
۶۷	جدول ۲-۱ مشخصه‌های بستر و جاذب
۶۹	جدول ۳-۱ ثابت‌های همدمای جذب تعادلی لانگمویر نوع دوم بر مبنای فشار
۶۹	جدول ۴-۱ ویژگی‌های فیزیکی اجزای گاز و جامد
۱۱۹	جدول ۱-۲ مشخصه‌های خوراک ورودی
۱۱۹	جدول ۲-۲ مشخصه‌های بستر و جاذب
۱۱۹	جدول ۳-۲ مرحله‌های چهارگانه یک دوره از فرایند PSA
۱۲۰	جدول ۴-۲ ثابت‌های مدل همدمای جذب لانگمویر نوع II بر مبنای فشار
۱۲۱	جدول ۵-۲ ویژگی‌های فیزیکی گاز، فاز جذب و دیواره
۱۷۱	جدول ۱-۴ مشخصه‌های خوراک ورودی
۱۷۲	جدول ۲-۴ مشخصه‌های بستر و جاذب
۱۷۲	جدول ۳-۴ مرحله‌های چهارگانه فرایند PSA
۱۷۳	جدول ۴-۴ ثابت‌های همدمای لانگمویر نوع I برای هر جزء بر مبنای غلظت
۱۷۳	جدول ۵-۴ ویژگی‌های فیزیکی گاز
۲۰۴	جدول ۱-۶ مشخصه‌های خوراک ورودی
۲۰۴	جدول ۲-۶ مشخصه‌های بستر و جاذب
۲۰۴	جدول ۳-۶ ویژگی‌های فیزیکی اجزا
۲۰۴	جدول ۴-۶ ثابت‌های همدمای جذب تعادلی لانگمویر نوع III
۲۰۴	جدول ۵-۶ مشخصه‌های مبدل‌ها و ویژگی‌های سیال جاری
۲۲۱	جدول ۱-۷ مشخصه‌های بستر و جاذب
۲۲۱	جدول ۲-۷ ثابت‌های جذب تعادلی مدل لانگمویر نوع دوم و ضریب انتقال جرم
۲۲۱	جدول ۳-۷ هدایت گرمایی گاز و گرمای جذب اجزا
۲۳۶	جدول ۱-۸ داده‌های همدمای جذب دی‌اکسیدکربن در جاذب سیلیکات در فشارها و دماهای مختلف
۲۴۸	جدول ۱-۹ مشخصه‌های خوراک ورودی
۲۴۸	جدول ۲-۹ مشخصه‌های بستر و جاذب
۲۴۸	جدول ۳-۹ داده‌های آزمایشی نمودار شکست دی‌اکسیدکربن در دمای ۲۹۸ کلوین
۲۴۹	جدول ۴-۹ ثابت‌های همدمای جذب تعادلی لانگمویر برای دی‌اکسیدکربن

پیشگفتار

جداسازی از نیازهای مهم صنایع مختلف اعم از صنایع شیمیایی، پتروشیمیایی، نفت و گاز، محیط زیست، صنایع غذایی و دارویی است. در اغلب فرایندهای بالادستی و پایین دستی نفت و گاز و نیز فرایندهای تولیدی، جداسازی، تصفیه و خالص سازی بخش مهمی از فرایند دستیابی به محصول می باشد. جذب سطحی یکی از فرایندهای مهم در جداسازی و خالص سازی ماده ها است که در آن با عبور جریانی از گاز یا مایع از میان دانه های یک جامد متخلخل، جداسازی ماده ها از یکدیگر انجام می شود. جداسازی با کمک این فرایند در موارد متعددی از جمله حذف گازهای گلخانه ای از هوا، تصفیه آب و پساب های صنعتی، رطوبت زدایی از هوا و گازها، شیرین سازی گاز طبیعی، حذف دی اکسید کربن و گازهای ترش از گاز دودکش، جذب و حذف ماده های آلی از جریان های گازی و آبی، جداسازی ایزومرهای زایلن از یکدیگر، جداسازی نیتروژن و اکسیژن هوا و خالص سازی هیدروژن از گاز سنتز کاربرد دارد. همچنین از آنجا که برای جداسازی ماده ها با فراریت مشابه، نمی توان از روش هایی مانند تقطیر استفاده کرد، معمولاً جذب سطحی به عنوان فرایندی مؤثر و جایگزین پیشنهاد می شود. امروزه با توجه به قانون ها و استانداردهای سخت گیرانه زیست محیطی استفاده از فرایند جذب سطحی بیش از پیش برای خالص سازی و جداسازی گازها و مایع ها از آلاینده های همراه مورد توجه قرار گرفته است.

از آنجا که در فرایند جذب سطحی نوع و ویژگی های جاذب مورد استفاده مهمترین چالش در طراحی و احداث این نوع واحدها می باشد، شناخت جاذب مناسب و ویژگی های آن، سازوکار فرایند جذب، امکان بازیابی و دوام جاذب، روش های دفع و بازیابی جاذب، مدلسازی ریاضی رفتار سیال و بسترهای جذب، شبیه سازی فرایندهای دوره ای جذب-دفع و طراحی آن ها برای دانشجویان و مهندسان شیمی ضروری است. شبیه سازی فرایند کمک می کند تا قبل از احداث یک واحد جذب سطحی و صرف هزینه زیاد در اثر سعی و خطا، برای طراحی، اصلاح و بهینه سازی، عیب یابی و رفع موانع گلوگاهی اقدام شود. با توجه به پویا بودن فرایند جذب سطحی، شبیه سازی آن تابع زمان بوده و نمی توان مانند فرایندهای پایا آن را شبیه سازی کرد، لذا آشنایی با ماهیت پویای این فرایند ضروری است. از شبیه سازی فرایند می توان برای بهینه سازی شرایط عملیاتی نیز بهره مند شد و قبل از صرف هزینه های زیاد با کمک شبیه سازی و بهینه سازی رایانه ای، نتایج را بررسی و برای اصلاح و افزایش بازده فرایند و صرفه اقتصادی، پارامترهای طراحی و عملیاتی مناسب را شناسایی و اصلاح کرد.

در کتاب حاضر، نظریه جذب سطحی، معرفی ویژگی های جاذب، جذب تعادلی، مقاومت های سینتیکی و مدلسازی پویای بسترهای جذب در بخش اول ارائه شده است، تا داده های لازم را برای آشنایی و به کارگیری آنها در شبیه سازی فرایندهای جذب سطحی که به صورت دوره ای کار می کنند، در اختیار بگذارد. در فرایندهای دوره ای، جاذب مورد استفاده بارها به صورت تناوبی در فرایند جذب - دفع شرکت می کند، تا زمانی که رفتار جاذب در یک دوره به حالت پایا نزدیک شود. در بخش دوم، شبیه سازی واحدهای جذب سطحی با نرم افزار جذب سطحی (ASPEN ADSORPTION) انجام می شود. امروزه به دلیل پیچیدگی معادله های ریاضی حاکم، از روش های رایانه ای برای شبیه سازی این فرایندها استفاده می شود. در این بخش، اصول شبیه سازی، روش اجرای آن همراه با آشنایی با نرم افزار و طرز کار آن همزمان با مثال های کاربردی ارائه شده اند.

این کتاب مورد استفاده مراکز دانشگاهی، تحقیقاتی و صنعتی است و راهنمای جامعی است برای کلیه متخصصان، کارشناسان و کارکنان صنعتی که در زمینه پالایش گاز طبیعی، تصفیه و پاکسازی هوا، خالص سازی های مختلف به ویژه هیدروژن، تصفیه آب و... به روش جذب سطحی فعالیت می کنند.

در پایان از همکاری دوستان گرامی سرکار خانم مهندس زهرا منصوری و سرکار خانم مهندس سارا حبیبی که ما را در امر ویرایش کتاب یاری کردند و سرکار خانم سودا شجاع در طراحی جلد کتاب صمیمانه سپاسگزاریم.