



ملی مهندسی شیمی ایران  
دانشگاه فردوسی مشهد - آبان ۱۴۰۰

کنگره  
همین

## کواهی ارائه مقاله

بدین وسیله کواهی می شود که مقاله با عنوان

استفاده از روش گراف در شبیه سازی حلقه ی تولید آمونیاک پتروشیمی خراسان

با نویسندگی: نرگس میرسعیدی، محمد علی فنائی و علی گرمودی اصیل

در هفدهمین کنگره ملی مهندسی شیمی ایران که در تاریخ ۱۸ تا ۲۰ آبان در گروه مهندسی شیمی دانشگاه فردوسی مشهد برگزار گردید، مورد پذیرش قرار گرفته و ارائه شده است.

مهدی پور افشاری  
دبیر کنگره

وحید تقی خانی  
دبیر انجمن مهندسی شیمی ایران

اکبر شاهسوند  
دبیر علمی کنگره

## استفاده از روش گراف در شبیه سازی حلقه‌ی تولید آمونیاک پتروشیمی خراسان

نرگس میرسعیدی\*؛ محمد علی فنائی\*\*؛ علی گرمودی اصیل<sup>۳</sup>

دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی شیمی گرایش مدلسازی، شبیه سازی و کنترل، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد، ایران

\* [na.mirsaeedi@mail.um.ac.ir](mailto:na.mirsaeedi@mail.um.ac.ir)

\*\* [fanaei@um.ac.ir](mailto:fanaei@um.ac.ir)

### چکیده

در برنامه های شبیه سازی، هنگام شبیه سازی فرآیندهای صنعتی که از تعداد زیادی حلقه برخوردارند، تعیین نمودن اطلاعات جریان‌های برگشتی درون این حلقه‌ها به عنوان فرض اولیه، در جهت همگرایی سریع شبیه سازی و کاهش زمان محاسبات مورد نیاز است. بنابراین انتخاب یک روش مناسب به منظور تعیین تعداد جریان‌های برگشتی مورد نیاز در جهت همگرایی شبیه سازی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. در این کار، از روش گراف به منظور مشخص نمودن حداقل تعداد جریان‌های مذکور در جهت همگرایی شبیه سازی حلقه‌ی تولید آمونیاک پتروشیمی خراسان در شرایط پایا که به کمک نرم افزار شبیه ساز اسپن-پلاس انجام شده، استفاده شده است. در نهایت نیز، جریان‌های برگشتی حاصله به کمک این روش و سپس ترتیب حل شبیه سازی ارائه گردیده است.

**واژه‌های کلیدی:** شبیه سازی، حلقه‌ی تولید آمونیاک، روش گراف

### ۱- مقدمه

به طور کلی، برنامه‌های شبیه سازی فرآیندهای صنعتی، به صورت مدولار (Modular) سازماندهی می‌شوند. این مدل‌ها عموماً محاسبات واحد اصلی فرآیندهای معمول مانند تقطیر، جذب، تبادل حرارت، میعان و

۱- کارشناسی ارشد مهندسی شیمی گرایش مدلسازی، شبیه سازی و کنترل

۲- دانشیار گروه مهندسی شیمی دانشگاه فردوسی مشهد، تخصص در زمینه‌ی مدلسازی، شبیه سازی و کنترل فرآیند

۳- استادیار گروه مهندسی شیمی دانشگاه بجنورد

غیره می‌باشند. از طرفی، برنامه‌ی اجرایی وظیفه‌ی نظارت بر پیشرفت محاسبات در کل شبکه‌ی فرآیندی را بر عهده داشته و توالی اجرا نیز بر مبنای اطلاعات داده شده به برنامه صورت می‌گیرد. از آنجا که توالی محاسبات می‌تواند به راحتی توسط برنامه‌ی اجرایی مدیریت شود، مسئله‌ی اصلی در تحلیل یک شبکه‌ی فرآیندی مرتبط با ساختار محاسبات جریان برگشتی و یا مدیریت بازخورد اطلاعات به منظور کاهش زمان محاسبات است. بنابراین توالی بهینه‌ی محاسبات با تعیین اطلاعات جریان‌های برگشتی به عنوان حدس اولیه قابل دستیابی می‌باشد. این جریان‌ها به عنوان پارامترهای تکرار در جهت همگرایی محاسبات تکراری شبکه در نظر گرفته شده و توسط جایگزینی مستقیم و یا الگوریتمی مانند روش محدود و گستین (Bounded Wegstein Procedure) به راحتی به حل یک سیستم معادلات ریاضی شکل می‌دهند. یکی از روش‌های کاربردی جهت تعیین حداقل تعداد جریان‌های برگشتی یا جریان‌های برش (Tear) مورد نیاز در جهت همگرایی شبیه سازی فرآیندهای صنعتی که دارای تعداد زیادی حلقه هستند، روش گراف (Flow Graph Signal) می‌باشد. این روش در سال ۱۹۷۱ توسط بارکلی و موتارد (Barkley & Motard) ارائه شده است [1].

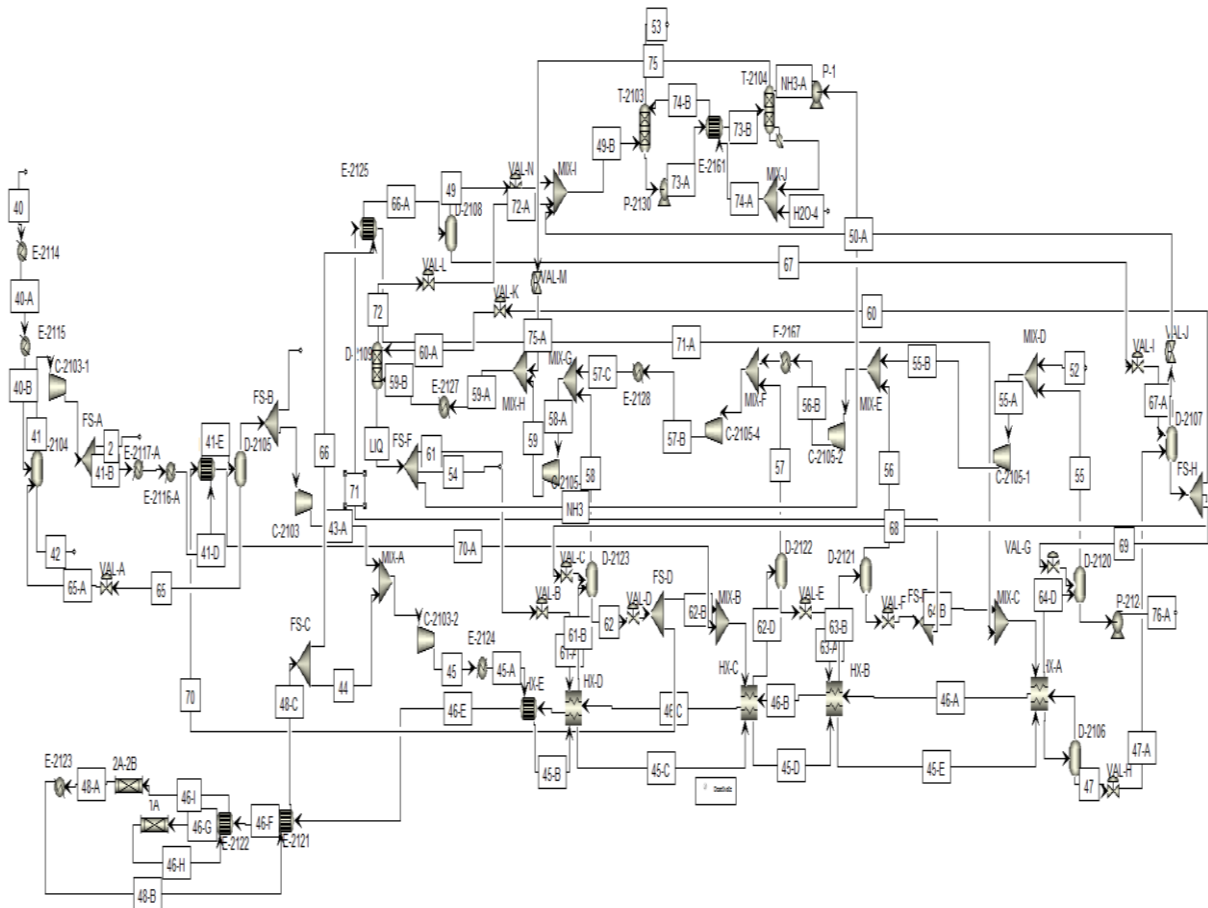
### ۳- روش گراف

تا کنون روش‌های متفاوتی برای تعیین جریان‌های برش (Tear Streams) ارائه شده است. یکی از روش‌های کاربردی و ساده، روش گراف است. که از مزایای این روش می‌توان به تعیین حداقل تعداد جریان برش مورد نیاز برای همگرایی شبیه سازی فرآیندهایی که دارای تعداد زیادی حلقه هستند اشاره نمود. به منظور انجام روش گراف در قدم نخست می‌بایست صفحه جریان (Flowsheet) فرآیند را به سیگنال فلو گراف (Signal Flow Graph) تبدیل نمود. بدین منظور جریان‌ها و تجهیزات فرآیندی موجود در صفحه جریان فرآیند، به ترتیب به گره‌ها و سیگنال‌ها در سیگنال فلو گراف تبدیل می‌شوند. سپس جدولی از تمامی گره‌ها و پیش سازه‌های (Precursors) آنها تشکیل شده و گرهی که یک پیش سازه دارد توسط آن جایگزین می‌گردد. در قدم بعدی گرهی که پیش سازه‌ی خودش شود به عنوان جریان برش در نظر گرفته شده و حذف می‌شود.

### ۳- اعمال روش گراف در شبیه سازی حلقه‌ی تولید آمونیاک پتروشیمی خراسان

شبیه سازی حلقه‌ی تولید آمونیاک خراسان که از ۴ مرحله‌ی افزایش فشار گاز سنتز هیدروژن و نیتروژن، تولید آمونیاک، تبرید و جداسازی آمونیاک از جریان محصول و جداسازی آمونیاک از جریان تخلیه (Purge) تشکیل شده در شکل ۱ ارائه شده است. به منظور اعمال روش گراف در شبیه سازی مذکور، نخست می‌بایست صفحه جریان فرآیند را به سیگنال فلو گراف تبدیل کرده و سپس پیش سازه‌های تمامی گره‌های گراف مشخص شود و در قدم بعدی گرهی که یک پیش سازه دارد توسط آن جایگزین گردد. در این کار با توجه به پیچیدگی

شبهه سازی و زمانبر بودن تبدیل صفحه جریان به سیگنال فلو گراف، مراحل مذکور با توجه به شبهه سازی و بدون تبدیل آن به سیگنال فلو گراف انجام شده است. بدین منظور جریان یا جریان‌های خروجی هر تجهیز به عنوان گره و جریان یا جریان‌های ورودی آن به عنوان پیش سازه در نظر گرفته شده اند و سپس گرهی که تنها یک پیش سازه دارد توسط آن جایگزین می‌شود. در قدم بعد مطابق با مراحل روش گراف، گره‌هایی که پیش سازه‌ی خودشان شده اند به عنوان جریان برش در نظر گرفته شده و حذف می‌شوند. بنابراین مجدداً گره‌هایی با یک پیش سازه ایجاد شده که باید توسط آنها جایگزین شوند و این روند ادامه می‌یابد تا تمامی جریان‌های برش محاسبه شوند. مراحل اعمال روش گراف در شبهه سازی مذکور در جداول ۱ و ۲ ارائه شده است. لازم به ذکر است که در خصوص مرحله‌ی اول، تنها جریان‌هایی که بیش از یک پیش سازه دارند، در جدول آورده شده اند.



شکل ۱- شبهه سازی حلقه‌ی تولید آمونیاک پتروشیمی خراسان



جدول ۱- مراحل اعمال روش گراف در شبیه سازی حلقه ی تولید آمونیاک پتروشیمی خراسان

	node	precur sors	node	precur sors	node	precur sors	node	precur sors	node	precur sors
E-2129	41-E	41-D 70	41-E	41-E 62						
	70-A	41-D 70	70-A	41-E 62	70-A	62				
E-2121	46-F	48-B 46-E	46-F	46-E 46-I	46-F	46-E 46-I	46-F	48-C 46-F		
	48-C	48-B 46-E	48-C	46-E 46-I	48-C	46-E 46-I	48-C	48-C 46-F		
E-2122	46-G	46-F 46-H	46-G	46-F 46-G						
	46-I	46-F 46-H	46-I	46-F 46-G	46-I	46-F				
MIX-A	44-A	44 43-A	44-A	48-C 41-E	44-A	48-C				
HX-E	46-E	45-A 46-D	46-E	44-A 45-B	46-E	44-A				
	45-B	45-A 46-D	45-B	44-A 45-B						
D-2120	55	69-A 64-D	55	51 64-C	55	51 64-C	55	66-A 64-C	55	66-A 64-C
MIX-C	64-C	64-B 71-A	64-C	62-C 71-A	64-C	62-C 71-A	64-C	62 71-A	64-C	62 71-A
MIX-B	62-C	62-B 70-A	62-C	62 70-A	62-C	62 70-A				
D-2123	62	68-A 61-B	62	51 LIQ	62	51 LIQ	62	66-A LIQ	62	66-A LIQ
	58	68-A 61-B	58	51 LIQ	58	51 LIQ	58	66-A LIQ	58	66-A LIQ
D-2109	72	60-A 59-B	72	51 59-A	72	51 59-A	72	66-A 59-A	72	66-A 59-A
	LIQ	60-A 59-B	LIQ	51 59-A	LIQ	51 59-A	LIQ	66-A 59-A	LIQ	66-A 59-A
MIX-H	59-A	75-A 59	59-A	75 58-A	59-A	75 58-A	59-A	75 58-A	59-A	75 58-A
MIX-G	58-A	57-C 58	58-A	57-A 58	58-A	57-A 58	58-A	57-A 58	58-A	57-A 58
MIX-F	57-A	56-C 57	57-A	56-A 62-C	57-A	56-A 62-C	57-A	56-A 62	57-A	56-A 62
MIX-E	56-A	55-B 56	56-A	55 62-C	56-A	55 62-C	56-A	55 62-C	56-A	55 62
D-2107	50	67-A 47-A	50	66-A 45-B	50	66-A				
	51	67 47	51	66-A 45-B	51	66-A				
E-2125	66-A	66 71	66-A	48-C 62-C	66-A	48-C 62-C	66-A	48-C 62	66-A	62
	71-A	66 71	71-A	48-C 62-C	71-A	48-C 62-C	71-A	48-C 62	71-A	62
MIX-I	49-B	49-A 72-A 50-A	49-B	66-A 72 50	49-B	66-A 72 50	49-B	66-A 72 66-A	49-B	66-A 72 66-A
T-2103	73	49-B 74-B	73	49-B 74-B	73	49-B 74-B	73	49-B 74-B	73	49-B 74-B



E-2161	74-B	73-A 74-A	74-B	73 74	74-B	73 74	74-B	73 74	74-B	73 74
	73-B	73-A 74-A	73-B	73 74	73-B	73 74	73-B	73 74	73-B	73 74
T-2104	75	73-B NH3-A	75	LIQ 73-B	75	LIQ 73-B	75	LIQ 73-B	75	LIQ 73-B
	74	73-B NH3-A	74	LIQ 73-B	74	LIQ 73-B	74	LIQ 73-B	74	LIQ 73-B

جدول ۲- ادامه‌ی جدول ۱

node	precursors	node	precursors	node	precursors	node	precursors	node	precursors
62	62 LIQ								
58	62 LIQ	58	LIQ						
72	62 59-A	72	59-A						
LIQ	62 59-A	LIQ	59-A						
59-A	75 58-A	59-A	75 58-A	59-A	75 59-A				
58-A	62 58	58-A	58						
49-B	62 72	49-B	72						
73	49-B 74-B	73	49-B 74-B	73	59-A 74-B	73	74-B		
74-B	73 74	74-B	73 74	74-B	73 74	74-B	73 74	74-B 73-B	---
73-B	73 74	73-B	73 74	73-B	73 74	73-B	73 74	74-B 73-B	---
75	LIQ 73-B	75	LIQ 73-B	75	59-A 73-B	75	73-B	LIQ 73-B	75 ---
74	LIQ 73-B	74	LIQ 73-B	74	59-A 73-B	74	73-B	LIQ 73-B	74 ---

۱-۳- جریان‌های برش

جریان‌های برش شبیه سازی حلقه‌ی تولید آمونیاک که به کمک روش گراف حاصل شده اند عبارتند از:  
41-E, 46-G, 45-B, 46-F, 48-C, 62, 59-A, 73-B, 74-B

### ۳-۲- ترتیب حل شبیه سازی

ترتیب حل شبیه سازی حلقه‌ی تولید آمونیاک با توجه به جریان‌های برش حاصله عبارت است از:

E-2114, E-2115, (SOLVER-1), 1A, E-2122, 2A-2B, E-2123, E-2127, FS-C, D-2105, FS-B, VAL-A, D-2104, C-2103-1, FS-A, E-2117-A, E-2116-A, C-2103, MIX-A, C-2103-2, E-2124, VAL-D, FS-D, E-2129, MIX-B, HX-DH03, HX-CH03, HX-BH03, HX-AH02, D-2106, HX-AH03, HX-BH01, HX-CH01, HX-DH01, HX-E, E-2121, VAL-H, HX-CHTR, D-2122, VAL-E, HX-BHTR, D-2121, VAL-F, FS-E, E-2125, MIX-C, HX-AHTR, D-2108, VAL-I, D-2107, VAL-J, FS-H, VAL-C, VAL-G, D-2120, MIX-D, C-2105-1, MIX-E, C-2105-2, E-2167, MIX-F, C-2105-4, E-2128, VAL-K, D-2109, VAL-L, FS-F, VAL-B, P-1, T-2104, VAL-M, VAL-N, MIX-I, T-2103, P-2130, MIX-J, E-2161, HX-DHTR, D-2123, MIX-G, C-2105-5, MIX-H, (RETURN SOLVER-1), P-2124

### ۴- نتیجه گیری

در این کار از روش گراف به منظور محاسبه‌ی جریان‌های برش شبیه سازی حلقه‌ی تولید آمونیاک پتروشیمی خراسان استفاده شده است. این روش نسبتاً ساده در محاسبات دستی نیز قابل کاربرد است و از مزایای آن، تعیین حداقل جریان‌های برش مورد نیاز در جهت همگرایی شبیه سازی فرآیندهای صنعتی با تعداد حلقه‌ی زیاد می‌باشد. پس از اعمال این روش در شبیه سازی مذکور، جریان‌های برش حاصله و ترتیب حل شبیه سازی ارائه شده است.

### تشکر و قدردانی

مقاله‌ی حاضر از پایان نامه‌ی کارشناسی ارشد مورد حمایت شرکت پتروشیمی خراسان استخراج شده است. لذا از مدیر عامل و کارشناسان محترم شرکت پتروشیمی خراسان تشکر و قدردانی می‌شود.

### مراجع



## Using the graph method in simulation of Khorasan Petrochemical Ammonia Production Loop

**Narges.Mirsaeedi**

*na.mirsaeedi@mail.um.ac.ir*

*fanaei@um.ac.ir*

### **Abstract**

In simulation programs, when simulation of industrial processes that have a large number of loops, it is necessary to specify the return flows information within these loops as the first assumption, in order to quickly converge the simulation and reduce computation time. Therefore, selecting a suitable method to determine the number of required return flows for the convergence of the simulation is of particular importance. In this work, the graph method is used to determine the minimum number of mentioned flows in order to converge the simulation of Khorasan Petrochemical Ammonia Production Loop in stable conditions, which was done with the help of Aspen-Plus simulator software. Finally, the resulting return flows using this method and then the order of simulation solution are presented.

**Keywords:** Simulation, Ammonia Production Loop, graph method.