اولین کنفرانس احتراق ایران
بهمن ماه ۱۳۸۴ - تهران- دانشگاه تربیت مدرس

مدلی برای محاسبهٔ فاکتور جنس و کاربرد آن در محاسبات ایمنی آتش در برجهای تقطیر

روح الله عابدی فسخودی[۱]، مهرداد منطقیان[۲]
دانشگاه تربیت مدرس، دانشکدهٔ فنی مهندسی، گروه مهندسی شیمی
manteghi@modares.ac.ir

چکیده

فاکتور جنس یکی از مهمترین عوامل در محاسبات ایمنی می باشد. این فاکتور بیانگر اثر خطر زایی مواد موجود در محیط مورد مطالعه است. مقدار این فاکتور در جداول به عنوان تابعی از عدد فعالیت و نقطهٔ جرقه ارائه شده است. در این مطالعه مدلی ارائه شده که با استفاده از دمای جوش نرمال (N.B.P) و درجهٔ(API) مواد هیدروکربنی میتواند مقدار MF را بطور دقیق برای مواد هیدروکربنی چه در شرایط خالص و چه در برجهای تقطیر مورد محاسبه قرار دهد.

واژه‌های کلیدی: ایمنی حریق- فاکتور جنس- برج تقطیر- اندیس آتش و انفجار.

۱- مقدمه

یکی از مهمترین پارامترهای مورد محاسبه در محاسبات ایمنی، شعاع آسیب پذیر می باشد که از معادلهٔ زیر بدست می آید[۶].

$$R_{Exposure} = 0.84 \times F\ \&\ EI \qquad (۱)$$

F&EI اندیس آتش و انفجار می‌باشد که نقش بسیار اساسی در محاسبات ایمنی حریق ایفا می‌کند و به صورت زیر محاسبه میگردد [۱].

$$F\ \&\ EI = MF \times F_1 \times F_2 \qquad (۲)$$

در معادلهٔ ۲، F_1 و F_2 به ترتیب فاکتورهای عمومی و اختصاصی فرآیند هستند که به تجهیزات فرآیندی و شرایط فرآیند بستگی دارند[۱]. اما فاکتور MF ، به نوع ماده و یا در حالت مخلوط به ترکیب درصد موادی که مخلوط را تشکیل می‌دهند بستگی دارد. این فاکتور در مراجع برای ۳۰۰ گونه از مواد خالص محاسبه گردیده و در مورد مواد مخلوط از رابطهٔ زیر محاسبه میگردد[۱].

$$MF_{Mix} = \sum_{i=1}^{n} x_i \cdot MF_i \qquad (۳)$$

۲- فاکتور جنس در مخلوط های هیدروکربنی

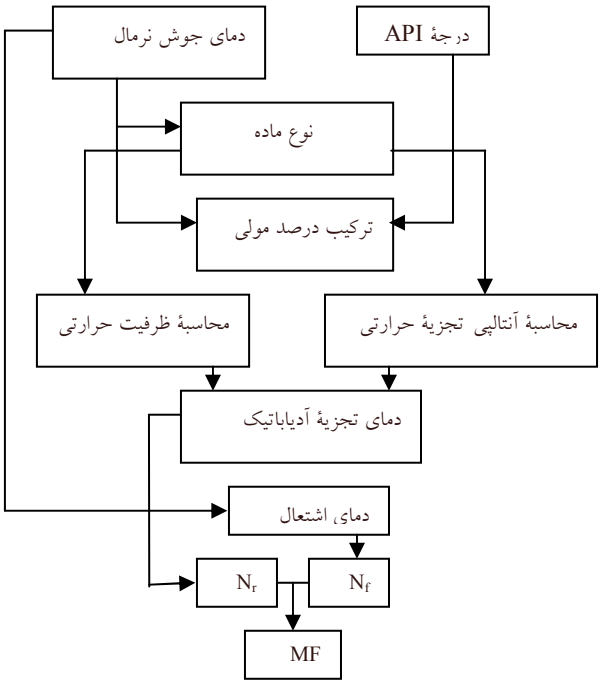
بطور کلی فاکتور جنس تابعی از دو عدد N_r و N_f است که به ترتیب به آن ها عدد فعالیت(Reactivity)و عدد اشتعال پذیری(Flammability)گویند. N_r با استفاده از دمای تجزیهٔ آدیاباتیک و N_f با استفاده از دمای اشتعال و دمای جوش نرمال محاسبه میشود. در شکل ۱ محاسبات بطور بصورت دقیق نشان داده شده است.

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد
۲- دانشیار

با استفاده از جدول ۱ و تابع پله ای واحد با تعریف

$$U_n(x)\begin{cases}1 & x > a\\ 0 & x \le a\end{cases}$$

که در آن x میتواند هر متغیری باشد و به ازای گسترهٔ تغییرات x تابع $U_n(x)$ فقط دارای دو مقدار است، با استفاده از این خاصیت میتوان ارتباطی را بین فضای پیوستهٔ اطلاعات و مقادیر ناپیوسته مورد نیاز برقرار کرد.



شکل۱ الگوریتم محاسبه فاکتور جنس

جدول ۱ مقادیر فاکتور جنس بر حسب N_f وN_r[۱]

	T_D K	<830	830to 935	935to1010	1010to1080	>1080
	DTA/DSC Peak °C	>400	305 to 400	215 to 305	125 to 215	<125
	NFPA 325M	N_r=0	N_r=1	N_r=2	N_r=3	N_r=4
Non combustible	N_f =0	1	14	24	29	40
F.P>140°F	N_f =1	4	14	24	29	40
100°F<F.P<140°F	N_f=2	10	14	24	29	40
F.P<100°F B.P>100°F	N_f =3	16	16	24	29	40
F.P<100°F B.P<100°F	N_f =4	21	21	24	29	40
Combustible Dust						
ST-1		16	16	24	29	40
ST-2		21	21	24	29	40
ST-3		24	24	24	29	40
Combustible Solids						
Dense > 40mm thick		4	14	24	29	40
Open < 40mm thick		10	14	24	29	40
Closed Cell Foam		16				
Open Cell Foam		21				

رابطه زیر برای N_r حاصل میشود.

$$N_r = U_n\left(\frac{T_D}{830}\right) + U_n\left(\frac{T_D}{935}\right) + U_n\left(\frac{T_D}{1010}\right) + U_n\left(\frac{T_D}{1080}\right) \quad (۴)$$

در این معادله T_D بر حسب K می باشد. همچنین در مورد N_f نیز خواهیم داشت[۱].

$$N_f = \alpha\left[4 - U_n\left(\frac{T_F}{560}\right) - U_n\left(\frac{T_F}{600}\right) - U_n\left(\frac{T_B}{560}\right)\right] \quad (۵)$$

در این رابطهT_B وT_F برحسبR می باشند و α ضریب قابلیت احتراق است و برای مواد قابل احتراق برابر ۱ و برای مواد غیر قابل احتراق عددی معادل صفر است.

برای آنکه بتوانیم T_D را محاسبه نماییم می بایست انتگرال زیر را حل نماییم.

$$\Delta H_{Decomposition} = \int_{T=298}^{T=T_D} \sum_{i=1}^{n} X_i C_{Pi} dT \quad (۶)$$

که در این مورد نیاز به فرضیاتی به قرار زیر داریم :

۱- مخلوط هیدروکربنی از دو مادهٔ پارافینی و آروماتیکی تشکیل شده است.

۲- برای اطمینان از منظور نمودن حداکثر مخاطرات فرض میشود که در دمای مورد نظر دو مادهٔ آروماتیکی و پارافینی در حال جوش هستند.

با استفاده از این دو فرض میتوان عدد کربنی آروماتیکی و پارافینی را بر حسب دمای جوش نرمال بدست آورد. با استفاده از جدول مرجع[۷] دو معادلهٔ زیر را میتوان برازش نمود[۳].

$$n_p = 4.4691 \times \exp(0.0045 \times N.B.P.) \quad (۷)$$

$$n_a = 0.2577 \times (N.B.P.)^{0.6976} \quad (۸)$$

در این معادلات N.B.P نقطهٔ جوش نرمال بر حسب ^oC می باشد. میزان خطا در این دو معادله بسیار پایین بوده و نزدیک به ۵٪است[۳]. برای تخمین ترکیب درصد مولی پارافین و آروماتیک در صنایع نفتی از اندیسی بنام اندیس ارتباط .C.I استفاده می کنیم. این اندیس به شکل زیر محاسبه میگردد[۴].

$$C.I. = \frac{16201.66}{T_B} + 473.7d - 45.8 \quad (۹)$$

در این معادله d دانسیتهٔ محلول بر حسب g/cm^2 و T_B دمای جوش محلول بر حسب R است. مقدار .C.I برای پارافین ها عددی در حدود صفر و برای آروماتیک ها ۱۰۰ می باشد. با استفاده از این اندیس میتوان ترکیب درصد پارافینی و آروماتیکی را به شکل زیر تعریف نمود [۳].

$$X_p = 1 - \frac{C.I.}{100} \quad (۱۰)$$

$$X_a = \frac{C.I.}{100} \quad (۱۱)$$

پس از تخمین ترکیب درصد ماده نوبت به آن میرسد که از روی n_P و n_a ، C_{PP} و C_{Pa} را محاسبه نماییم . با استفاده از مراجع، C_P را میتوان از معادلهٔ زیر بدست آورد[۲].

$$C_P = C_1 + C_2\left[\frac{C_3/T}{\sinh\left(C_3/T\right)}\right]^2 + C_4\left[\frac{C_5/T}{\cosh\left(C_5/T\right)}\right]^2 \quad (۱۲)$$

که مقادیر C_1، C_2، C_3، C_4 وC_5 برای پارافین ها و آروماتیک ها در جداول آمده است[۲]. با استفاده از این جداول میتوان معادلاتی را بین ضرایب و عدد کربنی برازش نمود[۳]. برای ضرایب ظرفیت حرارتی در پارافین ها داریم:

$$C_1p = -0.0002{n_p}^3 + 0.1629n_p + 0.0877 \quad (۱۳)$$

$$C_2p = 0.0033{n_p}^3 + 0.4827n_p + 0.4030 \quad (۱۴)$$

$$C_4p = 0.0017{n_p}^2 + 0.3593n_p + 0.0607 \quad (۱۵)$$

و همچنین برای ضرایب آروماتیک ها داریم:

$$C_1a = 0.0028{n_a}^3 - 0.0973{n_a}^2 + 1.1274n_a - 3.4456 \quad (۱۶)$$

$$C_2a = 0.0050{n_a}^3 - 0.0180{n_a}^2 + 2.2958n_a - 6.0288 \quad (۱۷)$$

$$C_3a = 0.009{n_a}^3 - 0.0254{na}^2 + 0.4680 - 0.3918 \quad (۱۸)$$

معادلات ۱۰ تا ۱۸ رابطه ای بین عدد کربنی و ضرایبC_{1p}،C_{2p} ، C_{4p} و همچنین C_{1a}، C_{2a}، C_{3a} را با دقت بالایی (۹۳٪-۹۵٪) بر قرار میکند. اما در مورد ضرایبC_{3p}،C_{5p} و همچنین C_{4a}،C_{5a} به علت نوسان زیاد اطلاعات نمیتوان معادله ای با دقت بالا برازش نمود. بنابراین با داشتن اعداد کربنی پارافینی و آروماتیکی و با استفاده از جداول مرجع[۲] و گذاشتن دستور if-elseif-end در برنامهٔ MF میتوان مقادیرC_{3p}، C_{5p} وC_{4a}، C_{5a} را در متن برنامهٔ رایانه ای گنجاند و با استفاده از معادلهٔ ۱۲ مقادیر C_{PP} و C_{Pa} را محاسبه و در نهایت مقدار ظرفیت گرمایی مخلوط را به شکل زیر تعیین نمود.

$$C_{P_{Mix}} = X_aC_{Pa} + X_PC_{PP} \quad (۱۹)$$

آخرین پارامتری که برای محاسبهٔ T_D مورد نیاز است، آنتالپی تجزیهٔ حرارتی می باشد که مقادیر آن برای پارافین ها و آروماتیک ها موجود است[۲]. میتوان معادلات زیر را بر این داده ها برازش نمود.

$$HDP = \left(-2\times10^{-4}n_p^3 + 0.0061n_p^2 + 1.9939n_p + 4.5656\right)\times10^7 \quad (۲۰)$$

$$HDA = \left(0.078n_a^3 - 3.0859n_a^2 + 31.2995n_a + 103.0159\right)\times10^7 \quad (۲۱)$$

$$HDT = x_p \cdot HDP + x_a \cdot HDA \quad (۲۲)$$

خطای ایجاد شده در این برازش ها بطور متوسط ۴٪ است[۳].حال میتوان با استفاده از معادلهٔ ۶، T_D را بدست آورد. برای محاسبهٔ T_F خواهد رسید از معادلهٔ ریاضی – دابرت استفاده نمودیم[۵].

$$\frac{1}{T_F} = -0.014568 + \frac{2.84947}{T_B} + 1.903\times10^{-3}\ \ln T_B \quad (۲۴)$$

لازم به ذکر است که در این معادله T_B و T_F بر حسب R است.

۳- نتایج مدلسازی

برنامه MF برای ۳۰۰ گونهٔ پارافین و آروماتیک اجرا شد نمونه ای از نتایج حاصل شده در جدول ۲ نشان داده شده است.

جدول ۲ مقایسهٔ فاکتور جنس مرجع و نتایج حاصل از مدل برای برخی از پارافین ها و آروماتیکها

نام ماده	N.B.P	API	MF مدل	MF مرجع	MW مدل	MW مرجع	نام ماده	N.B.P	API	MF مدل	MF مرجع	MW مدل	MW مرجع
متان	-۲۵۹	۳۴۰	۲۱	۲۱	۳۶	۱۶	هگزان	۱۵۵/۷	۸۱/۶	۱۶	۱۶	۹۹	۸۶
اتان	-۱۲۸	۲۴۷	۲۱	۲۱	۵۸	۳۰	هپتان	۲۰۹/۲	۷۴/۲	۱۶	۱۶	۹۹	۱۰۰
پروپان	-۴۴	۱۴۷	۲۱	۲۱	۵۸	۴۴	اکتان	۲۵۸	۸۶/۶	۱۶	۱۶	۱۱۳	۱۱۴
بوتان()	۱۰/۹	۱۲۰	۲۱	۲۱	۷۲	۵۸	کتان	۵۳۶	۵۰/۱	۱۴	-	۲۱۱	۲۲۶
بوتان()	۳۱/۱	۱۱۱	۲۱	۲۱	۷۲	۵۸	هگزان	۱۷۷/۴	۵۰/۳	۱۶	۱۶	۸۹	۸۴
پنتان()	۸۲/۲	۹۴/۹	۲۱	۲۱	۸۵	۷۲	بنزن	۱۷۶/۲	۲۸/۶	۱۶	۱۶	۷۸	۷۸
پنتان()	۹۶/۹	۹۲/۷	۲۱	۲۱	۸۶	۷۲	تولوئن	۲۳۱/۱	۳۰/۸	۱۶	۱۶	۹۵	۹۲

۴- نتیجه گیری

با استفاده از اطلاعات پالایشگاه تهران MF را برای سینی هایی از برج تقطیر در خلاء که اطلاعات آنها موجود است بدست آورده و به نتایج زیر رسیدیم.

۱- MF در بالاترین سینی بیشترین مقدار را دارد و این امر قابل پیش بینی بوده است.

۲- در برج تقطیر در خلاء MF مربوط به سینی های ۱۸و۲۰ عددی برابر ۴ است. محصول این دو سینی Lube oil است که در جدول [اقتباس از مرجع ۱] نیز برابر ۴ ذکر شده است.

۳- در برج تقطیر اتمسفریک MF محاسبه شده در سینی ۴۳ مربوط به برش نفتا است. در مرجع ۱ برای نفتا همین عدد (۱۶) گزارش شده است.

۴- در برج تقطیر اتمسفریک سینی های ۲۷و۲۹ مربوط به نفت سفید است. MF گزارش شده در مرجع ۱ برای آنها همین عدد (۱۴) است.

۵- در برج تقطیر اتمسفریک خروجی از قسمت پایین برج مربوط به سینی ۵ است که خوراک برج تقطیر در خلاء را تأمین می کند.MF محاسبه شده از مدل برای این برش ۴ است که با مقدار ارائه شده در مرجع ۱ تطبیق دارد.

جدول ۳ نتایج حاصل از مدل در برشهای برج تقطیر در خلاء و تقطیر اتمسفریک پالایشگاه تهران

نوع برج	V	V	V	V	V	V	A	A	A	A	A	A	A	A
شمارهٔ سینی	۳۴	۲۳	۲۰	۱۸	۱۲	۶	۴۳	۳۷	۳۳	۲۹	۲۷	۱۷	۱۵	۵
درجهٔ *API*	۲۸/۵	۲۲/۷	۱۹/۷	۱۹/۷	۱۵/۶	۱۳/۲	۶۲/۴	۷۳/۳	۵۳/۶	۵۵/۱	۴۶/۸	۳۶/۱	۳۶/۱	۳۳/۱
دمای جوش نرمال(^{o}F)	۳۴۲	۵۶۰	۶۳۰	۶۶۵	۷۰۰	۷۳۰	۳۰۸	۳۰۸	۳۲۰	۳۶۱	۴۴۰	۵۳۷	۵۳۰	۶۲۵
فاکتور جنس مدل	۱۰	۴	۴	۴	۴	۴	۱۶	۱۶	۱۶	۱۴	۱۴	۴	۴	۴
فاکتور جنس مرجع	_	_	۴	۴	_	_	۱۶	_	_	۱۴	۱۴	_	_	۴

V: برج تقطیر در خلاء A: برج تقطیر اتمسفریک

نشانه ها و علائم

α	ضریب قابلیت احتراق
$C.I$	اندیس ارتباط
C_p	ظرفیت حرارتی ($J/kmol.K$)
$F\&EI$	اندیس آتش و انفجار
HD	آنتالپی تجزیهٔ ($J/kmol$)
MF	فاکتور جنس
n_a	عدد کربنی آروماتیکی
$N.B.P$	نقطهٔ جوش نرمال (^{o}C)
N_f	عدد اشتعال پذیری
n_p	عدد کربنی پارافین
N_r	عدد فعالیت
$R_{Exposure}$	شعاع انتشار (ft)
T_B	دمای جوش (R)
T_D	دمای تجزیهٔ حرارتی آدیاباتیک (K)
T_F	دمای اشتعال (R)

مراجع

[1] *Dow Fire& Explosion Index hazard classification guide.* 5th ed. New York:American Institute of Chemical Engineers. 1985

[2] Robert H. Perry, Don W. Green. *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. 7th ed.ch 3,4.

[۳] روح الله عابدی، ارائهٔ یک مدل برای محاسبهٔ فاکتور جنس در برجهای تقطیر هیدروکربنی، پایان نامهٔ کارشناسی ارشد، دانشگاه تربیت مدرس، زمستان ۱۳۸۳

[4] W.L. Nelson. *Petroleum refinery engineering*. 4th ed.1987.

[5] M.R. Riazi, T.E. Daubert, *Predicting flash and pour points, Hydrocarbon Process* September (1987) 81–83.

[۶] مهرداد منطقیان، تعیین دامنهٔ انفجار در صنایع، دانشگاه تربیت مدرس، ۱۳۷۲.

[7]James G Speight. *Handbook of petroleum product analysis*. John Wiley & Sons, Inc, 2002.