

# بهینه سازی فرآیندهای شیمیایی

مهدی عسکری - مدیریت برنامه ریزی تلفیقی

[mehdi\\_askari1@yahoo.com](mailto:mehdi_askari1@yahoo.com)

**چکیده:** در این مقاله، ابتدا روشهای مختلف بهینه سازی توابع ریاضی آورده شده و نرم افزارهای موجود برای بهینه سازی توابع مختلف معرفی شده است. در ادامه مزایای استفاده از نرم افزار Aspen Plus به منظور شبیه سازی و بهینه سازی همزمان فرآیندهای شیمیایی مورد بحث قرار گرفته است. در ادامه به منظور درک بهتر بهینه سازی فرآیندهای شیمیایی به کمک این نرم افزار یک نمونه عملی ابتدا توسط این نرم افزار شبیه سازی و سپس بهینه سازی شده است.

**کلمات کلیدی:** بهینه سازی، شبیه سازی، Aspen Plus، فرآیندهای شیمیایی

**مقدمه:** هدف از بهینه سازی یافتن بهترین جواب قابل قبول، با توجه به محدودیتها و نیازهای مسأله است. برای یک مسأله، ممکن است جوابهای مختلفی موجود باشد که برای مقایسه آنها و انتخاب جواب بهینه، تابعی به نام تابع هدف تعریف می شود. انتخاب این تابع به طبیعت مسأله وابسته است. به عنوان مثال، زمان سفر یا هزینه از جمله اهداف رایج بهینه سازی شبکه های حمل و نقل می باشد. به هر حال، انتخاب تابع هدف مناسب یکی از مهمترین گامهای بهینه سازی است. گاهی در بهینه سازی چند هدف به طور همزمان مد نظر قرار می گیرد؛ این گونه مسائل بهینه سازی را که دربرگیرنده چند تابع هدف هستند، مسائل چند هدفی می نامند. ساده ترین راه در برخورد با این گونه مسائل، تشکیل یک تابع هدف جدید به صورت ترکیب خطی توابع هدف اصلی است که در این ترکیب میزان اثرگذاری هر تابع با وزن اختصاص یافته به آن مشخص می شود. هر مسأله بهینه سازی دارای تعدادی متغیر مستقل است که آنها را متغیرهای طراحی می نامند که با بردار  $\Pi$  بعدی  $x$  نشان داده می شوند. هدف از بهینه سازی تعیین متغیرهای طراحی است، به گونه ای که تابع هدف کمینه یا بیشینه شود. مسائل مختلف بهینه سازی به دو دسته زیر تقسیم می شود:

الف) مسائل بهینه سازی بی محدودیت: در این مسائل هدف، بیشینه یا کمینه کردن تابع هدف بدون هرگونه محدودیتی بر روی متغیرهای طراحی صورت می پذیرد.

ب) مسائل بهینه سازی با محدودیت: بهینه سازی در اغلب مسائل کاربردی، با توجه به محدودیتهایی صورت می گیرد؛ محدودیتهایی که در زمینه رفتار و عملکرد یک سیستم می باشد و محدودیتهای رفتاری و محدودیتهایی که در فیزیک و هندسه مسأله وجود دارد، محدودیتهای هندسی یا جانبی نامیده می شوند.

برای بهینه سازی توابع ریاضی، روش های مختلفی مورد استفاده قرار می گیرد. روشهایی که با توجه به شرایط متفاوت می باشند که از آنجمله می توان به روش سیمپلکس، ندر مید و فلچر ریوز اشاره نمود. بعضی از روشهای بهینه سازی مانند الگوریتم ژنتیک، شبکه عصبی، جستجوی ممنوع و سیستم مورچه برگرفته از طبیعت می باشند.

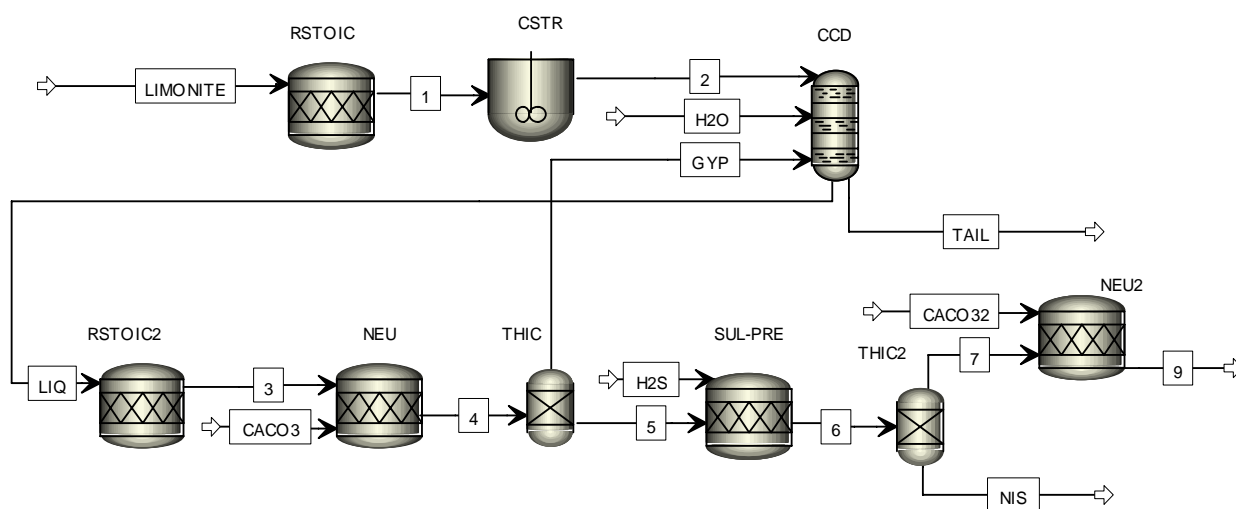
به منظور تسهیل در حل مسائل بهینه سازی نرم افزارهای مختلفی مورد استفاده قرار می گیرد که با توجه به خطی یا غیر خطی بودن توابع و همچنین محدودیتهای اعمال شده می توان هر یک از آنها را به کار برد. این نرم افزارها عبارتند از: WINQSB, DS, LINDO LINGO, TORA, WINGAMS, GINO, STORM, QSOM, MPL, LINPROG, WINSTON, WINMAT. نرم افزار MATLAB نیز دارای ابزار قوی برای بهینه سازی توابع می باشد. در اینجا با توجه با اینکه هدف معرفی این نرم افزارها نمی باشد فقط به نام آنها اکتفا کردیم.

نکته قابل توجه در استفاده از این نرم افزارها، عدم امکان بهینه کردن فرآیندهای نفتی و گازی همراه با شبیه سازی آنها می باشد. به این منظور استفاده از نرم افزار شبیه ساز مانند Aspen Plus که همراه با اجرای فرآیند بتوان آن را بهینه کرد بسیار مفید می باشد.

هدف این مقاله بهینه سازی یک نمونه فرآیند شیمیایی می باشد. انتخاب این واحد شیمیایی به این علت است که اطلاعات کامل فرایند که با Aspen Plus شبیه سازی شده در دسترس است و می توان آن را بهینه نمود. قابل ذکر است که برای فرآیندهای نفتی و گازی نیز این روش قابل اجرا می باشد.

## شبیه سازی واحد استخراج نیکل از سنگ معدن لیمونیت

کار شبیه سازی را توسط نرم افزار Aspen plus انجام می دهیم. در شکل (۱) دیاگرام واحد استخراج نیکل از سنگ معدن لیمونیت در محیط Aspen plus آورده شده است.



شکل ۱: دیاگرام واحد استخراج نیکل از سنگ معدن لیمونیت

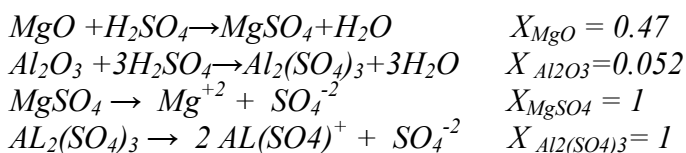
**خوراک ورودی:** با توجه به اینکه ظرفیت تولید اکثر واحدهای استخراج نیکل، ۲۵۰۰۰ تن نیکل در سال معادل ۵۳.۸ کیلو مول نیکل بر ساعت می باشد، در اینجا نیز ظرفیت واحد را همین مقدار در نظر میگیریم. با در نظر گرفتن بازده تقریبی کل فرآیند برابر با ۹۲٪، دبی مولی نیکل ورودی باید ۵۸.۵ کیلومول بر ساعت باشد. دبی مولی سایر عناصر را با توجه به درصد آنها در سنگ معدن مطابق جدول ۱ به دست می آوریم.

جدول ۱: دبی مولی مواد مختلف خوراک ورودی واحد استخراج نیکل از لیمونیت

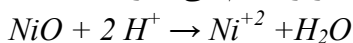
ماده	MgO	NiO	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	SiO <sub>2</sub>
دبی مولی (کیلو مول بر ساعت)	114	58.5	1207	1235

همراه سنگ معدن خشک آب نیز وجود دارد، بطوریکه درصد وزنی جامد خوراک ورودی ۴۵٪ می باشد. برای استخراج از اسید سولفوریک استفاده می کنیم. اسید سولفوریک ورودی قبل از بهینه سازی، ۱۸٪ وزنی سنگ معدن خشک می باشد

**راکتور RStoic:** واکنش استخراج نیکل کندترین واکنش می باشد، لذا حجم راکتور را واکنش استخراج نیکل تعیین می کند و واکنش استخراج عناصر دیگر در تعیین حجم راکتور تأثیری ندارند. به این علت واکنش استخراج نیکل را در یک راکتور CSTR، که نرم افزار حجم آن را می دهد در نظر می گیریم. واکنش عناصر دیگر را که فقط درصد تبدیل آنها مهم می باشد و در تعیین حجم تأثیری ندارند را در راکتور RStoic انجام می دهیم. در راکتور RStoic فقط واکنش و درصد تبدیل مواد مهم می باشند و احتیاجی به سینتیک واکنش نمی باشد. برای تعیین درصد تبدیل فلزهای دو و سه ظرفیتی از داده های تجربی استفاده می کنیم. درصد تبدیل نهایی فلزهای دو و سه ظرفیتی به ترتیب ۴۷ و ۵.۲ درصد به دست می آید. با توجه به توضیحات ذکر شده واکنش اکسید فلزهای دو و سه ظرفیتی با اسید سولفوریک و درصد تبدیل آنها مطابق زیر می باشند.



اسید سولفوریک با قیمانده در محلول تقریباً به طور کامل تجزیه می شود. پس از انجام این واکنشها جریان خروجی از RStoic وارد راکتور CSTR می شود تا واکنش استخراج نیکل در آن صورت بگیرد. **راکتور استخراج نیکل:** واکنش استخراج نیکل در راکتور CSTR به صورت زیر انجام می گیرد.



برای استخراج نیکل از معادله زیر استفاده می کنیم.

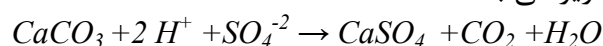
$$-r_{Ni} = 0.6657 w_{Ni} m_{H^+}$$

اما در نرم افزار بایستی ضریب ثابت را به صورت  $e^{-E/RT} K_0$  وارد نماییم. با توجه به اینکه دما برابر با  $T = 250^\circ C$  می باشد، باید یک مقدار تقریبی برای E در نظر بگیریم و بعد مقدار  $K_0$  را به دست آوریم. در این راکتور  $T = 250^\circ C$   $P = 36 \text{ atm}$  زمان اقامت برابر با ۴۰ دقیقه می باشد.

**واحد CCD Wash:** برای جدا کردن یونهای مورد نظر از جامد واکنش نداده تجهیزات مختلفی وجود دارد. در اینجا از استفاده می کنیم. تعداد مراحل CCD Wash معمولاً بین ۲ تا ۱۰ می باشد. هر مرحله مانند یک تغلیظ کننده عمل می کند. CCD Wash مورد استفاده در این واحد شامل ۷ مرحله می باشد.

در نرم افزار برای CCD Wash نسبت مایع به جامد در جریان زیرین و بازده هر مرحله یا یکی از مراحل و مقدار ماده شستشو دهنده که در اینجا آب می باشد را باید بدهیم بازده را در اینجا به طور تقریبی ۰.۹ می گیریم. متغیر دیگر یعنی مقدار آب ورودی را طوری تنظیم می کنیم که به جداسازی مطلوب برسیم. برای این کار از قسمت Model Analysis Tools / Sensitivity نرم افزار استفاده می کنیم. با محاسبه مقدار آب بر حسب درصد یون نیکل در مایع غلیظ به کل یون نیکل در ورودی، مقدار مناسب آب را پیدا می کنیم. بعد از اجرای برنامه مشاهده می شود، دبی مولی آب مورد نیاز برای اینکه ۹۷٪ از یونهای نیکل ورودی به CCD Wash وارد جریان مایع غلیظ شود، ۱۶۰۰۰ کیلومول بر ساعت می باشد.

**واحد های دیگر فرآیند:** مایع غلیظ خروجی از CCD Wash به منظور خنثی سازی وارد یک راکتور می شود. این مرحله به منظور تهیه یک محیط خنثی به منظور رسوب سولفید در مرحله بعدی می باشد. خنثی سازی توسط کربنات کلسیم انجام می شود. مقدار کربنات کلسیم با توجه به مقدار یون هیدروژن تنظیم می شود. واکنش انجام شده در راکتور به صورت زیر می باشد.



راکتور مورد استفاده با توجه به اینکه سینتیک واکنش را نمی دانیم و فقط درصد تبدیل مهم می باشد RStoic می باشد. با توجه به اینکه هدف خنثی سازی می باشد، درصد تبدیل را بر حسب یون هیدروژن و برابر با ۹۰٪ می گیریم.

دوغاب سنگ گچ تولید شده برای جدا سازی به CCD Wash برگردانده می شود. برای جداسازی دوغاب سنگ گچ از مایع غلیظ از تغلیظ کننده استفاده می کنیم. مایع خروجی از تغلیظ کننده به منظور رسوب نیکل آن وارد یک راکتور می شود. یون نیکل با  $H_2S$  در دمای  $120^\circ C$  و فشار ۱۲۰۰ کیلو پاسکال واکنش می دهد و به صورت سولفید نیکل رسوب می کند. در واقع شرایط در این واحد به صورتی می باشد که فقط نیکل و کبالت رسوب کنند. راکتور رسوب سولفید نیکل با توجه به اینکه سینتیک را نمی دانیم و فقط درصد تبدیل مهم می باشد RStoic می باشد. در مرحله بعدی در یک تغلیظ کننده NiS جدا می شود.

چون در مرحله رسوب سولفید، یون هیدروژن زیادی تولید می گردد، به منظور خنثی کردن یون هیدروژن اضافی یک راکتور خنثی کننده در انتها قرار می دهیم. خنثی سازی توسط کربنات کلسیم انجام می شود. مقدار کربنات کلسیم با توجه به مقدار یون هیدروژن تنظیم می شود. راکتور مورد استفاده با توجه به اینکه سینتیک را نمی دانیم و فقط درصد تبدیل مهم می باشد RStoic می باشد. با توجه به اینکه هدف خنثی سازی می باشد، درصد تبدیل را بر حسب یون هیدروژن و برابر با ۹۰٪ می گیریم.

## بهینه سازی فرآیند

بعد از اینکه شبیه سازی فرآیند، بهینه سازی را انجام می دهیم. بهینه سازی در واقع استفاده از روشی مشخص برای به دست آوردن بهترین و موثرترین حل برای یک مسئله می باشد. به منظور بهینه سازی از قسمت Optimization و Sensitivity نرم افزار استفاده می کنیم.

تابعی که برای بهینه کردن در نظر می گیریم، نسبت برگشت سرمایه (ROI) می باشد که به صورت زیر تعریف می شود.

سرمایه گذاری کل / سود سالیانه پس از کسر مالیات = نسبت برگشت سرمایه  
متغیرهایی که بایستی بهینه کرد، عبارتند از: (۱) مقدار اسید سولفوریک در خوراک ورودی (۲) مقدار آب در واحد Wash CCD (۳) مقدار کربنات کلسیم در مراحل خنثی سازی (۴) مقدار سولفید هیدروژن. مقادیر سولفید هیدروژن و کربنات کلسیم باید به اندازه استوکیومتری وارد شوند. اما در حالت اول این مواد را حدود ۲۰٪ بیش از استوکیومتری وارد می کنیم و بهینه سازی را انجام می دهیم تا مقادیر بهینه به دست آیند. بعد در حالت بهینه مقادیر این مواد را اصلاح می کنیم و به اندازه استوکیومتری وارد می کنیم و تابع هدف را دوباره محاسبه می کنیم تا مقدار بهینه نهایی به دست آید. بنابراین دو متغیر دیگر یعنی مقدار اسید ورودی و آب مصرفی در CCD Wash را متغیرهای بهینه سازی در نظر می گیریم.  
با توجه به تعریف نسبت برگشت سرمایه، برای پیدا کردن مقدار بهینه آن، ابتدا باید سرمایه گذاری کل را به دست آوریم. با توجه به ضریب لانگ، برای فرآیندهای جامد و سیال سرمایه ثابت ۴.۱ برابر قیمت تجهیزات و سرمایه گذاری کل ۴.۹ برابر قیمت تجهیزات می باشند. بنابراین برای به دست آوردن سرمایه گذاری کل، اولین موردی که باید تعیین شود قیمت تجهیزات می باشد.

#### تعیین قیمت تجهیزات

**راکتور CSTR فشار بالا:** به علت خوردگی از جنس تیتانیوم می باشد. نرم افزار حجم راکتور را محاسبه می کند. بنابراین باید تابع قیمت راکتور را بر حسب حجم راکتور به دست آوریم.  
با توجه به به جنس راکتور و فشار بالای آن یعنی ۳۶ اتمسفر نموداری برای قیمت راکتور بر حسب حجم در مراجع موجود پیدا نمی شود. بنابراین ابتدا قیمت راکتور را بر حسب حجم، برای این واحد با جنس SS304 به دست می آوریم. سپس با این فرض که ضخامت جداره راکتور برای SS304 و تیتانیوم یکسان می باشند، تابع قیمت به دست آمده برای SS304 را در نسبت چگالی ها ضرب می کنیم. سپس با توجه به اختلاف قیمت SS304 و تیتانیوم و سختی کار با دو ماده تابع به دست آمده را در نسبت قیمت ضرب می کنیم تا در نهایت تابع قیمت واحد با جنس تیتانیوم به دست آید.

$$\begin{aligned} \text{Cost}(\$) &= 1.8 * V + 2E6 & 284000 < V(L) < 530000 & \text{SS304} \\ \text{Cost}(\$) &= 20.78 * V + 2.309E7 & 284000 < V(L) < 530000 & \text{titanium} \end{aligned}$$

**CCD Wash:** شامل ۷ مرحله است که هر یک مثل یک تغلیظ کننده عمل می کند. بنابراین روشی که برای CCD Wash استفاده می شود، برای تغلیظ کننده نیز قابل استفاده می باشد. برای واحد CCD Wash نرم افزار Aspen Plus سطح مقطع را نمی دهد. بنابراین یک سری فرض در نظر می گیریم تا بتوانیم تابع قیمت واحد را بر حسب مواردی که نرم افزار قابلیت محاسبه آنها را دارد، به دست آوریم.  
در فرآیند استخراج نیکل اگر غلظت جامد بر حسب Kg solid/Lit slurry از ۲۰٪ وزنی در ورودی به ۶۰٪ در جریان زیرین افزایش یابد، سطح مورد نیاز بر دبی جرمی جامد ورودی برابر با  $0.8m^2 / (ton / day)$  خواهد شد.

با استفاده از عدد  $0.8m^2/(ton/day)$  در CCD Wash و تغلیظ کننده ها بجز تغلیظ کننده دوغاب سنگ گچ، تابع سطح بر حسب غلظتها را به دست می آوریم. سپس با ترکیب این تابع با رابطه قیمت بر حسب سطح، تابع قیمت واحد را بر حسب غلظتها به دست می آوریم. رابطه حاصله به صورت زیر است:

$$cost(\$) = \left[ \left( \frac{6.36E8}{c_i} - \frac{6.36E8}{c_u} \right) (mass\ solid) \right]^{0.7275}$$

برای ۷ مرحله رابطه به دست آمده را در ۷ ضرب می کنیم.

**واحد خنثی سازی:** جنس واحد را از SS304 انتخاب می کنیم. تابع قیمت واحد در اطراف حجم

به دست آمده از قسمت شبیه سازی به صورت رابطه زیر می باشد:

$$Cost(\$) = (367.82 * V + 47159) \quad 132 < V(m^3) < 380$$

برای محاسبه قیمت ابتدا دبی حجمی مواد ورودی را حساب می کنیم و سپس با فرض زمان اقامت برابر

سی دقیقه، حجم واحد را به دست می آوریم. با داشتن حجم قیمت به دست می آید.

**واحد جداسازی دوغاب سنگ گچ (تغلیظ کننده):** از تغلیظ کننده برای جداسازی دوغاب سنگ گچ

استفاده می شود. از اطلاعات مربوط به Magnesia hydroxide from brine برای محاسبه سطح استفاده

می کنیم. اگر غلظت جامد بر حسب Kg solid/Lit slurry از ۱۰-۸٪ به ۴۰-۲۵٪ برسد سطح مورد نیاز بر

دبی جامد ورودی  $5-10m^2/(ton/day)$  خواهد بود.

با جاگذاری غلظتهای ورودی و جریان زیرین به ترتیب برابر با ۱۰٪ و ۲۵٪ در رابطه ۳-۵،  $v_i$  برابر با

$v_i = 1.2m/day$  یا  $v_i = 0.05m/hr$  به دست می آید. برای غلظتهای دیگر ورودی و جریان زیرین از

این  $v_i$  استفاده می کنیم. با روشی مشابه با آنچه برای CCD wash توضیح دادیم، داریم:

$$Cost(\$) = \left[ \left( \frac{2.1E9}{c_i} - \frac{2.1E9}{c_u} \right) (mass\ solid) \right]^{0.7275}$$

**واحد رسوب سولفید:** جنس واحد را به علت خوردگی تیتانیوم انتخاب می کنیم. تابع قیمت واحد در

اطراف حجم به دست آمده از قسمت شبیه سازی به دست می آید.

$$Cost(\$) = (367.82 * V + 47159) \quad 132 < V(m^3) < 380 \quad SS304$$

$$Cost(\$) = (4244.6 * V + 544450) \quad 132 < V(m^3) < 380 \quad titanium$$

برای محاسبه قیمت ابتدا دبی حجمی مواد ورودی را حساب می کنیم و سپس با فرض زمان اقامت برابر سی

دقیقه، حجم واحد را به دست می آوریم سپس با داشتن حجم قیمت به دست می آید.

**واحد جداسازی NiS:** برای این واحد از تغلیظ کننده استفاده می کنیم. واحد جداسازی، مانند یکی از

تغلیظ کننده های CCD Wash می باشد. تابع قیمت به روش مشابه با CCD Wash به دست می آید.

$$cost(\$) = \left[ \left( \frac{6.36E8}{c_i} - \frac{6.36E8}{c_u} \right) (mass\ solid) \right]^{0.7275}$$

**واحد دوم خنثی سازی:** جنس واحد را از SS304 انتخاب می کنیم. تابع قیمت واحد در اطراف حجم

به دست آمده از قسمت شبیه سازی به صورت زیر می باشد.

$$Cost(\$) = (367.82 * V + 47159) \quad 132 < V(m^3) < 380$$

برای محاسبه قیمت ابتدا دبی حجمی مواد ورودی را حساب می کنیم و سپس با فرض زمان اقامت برابر سی دقیقه، حجم واحد را به دست می آوریم. با داشتن حجم، قیمت به دست می آید. حال که تابع قیمت تجهیزات مختلف را به دست آوریم، از جمع این توابع قیمت کل تجهیزات به دست می آید. سپس با ضرب کردن قیمت کل تجهیزات در ۴.۹ سرمایه گذاری کل را به دست می آوریم. مورد دیگر که برای محاسبه نسبت برگشت سرمایه باید به دست آوریم، سود سالیانه پس از کسر مالیات می باشد. برای این منظور باید ابتدا سود ناخالص را به دست آورده و بعد از کسر ۴۰٪ مالیات از آن سود خالص را به دست آوریم. با توجه به اینکه سود ناخالص برابر درآمد کل منهای قیمت تمام شده محصول می باشد، باید این دو مورد را به دست آوریم.

**محاسبه درآمد کل:** در محاسبه درآمد کل با توجه به اینکه محصول به دست آمده از فرآیند استخراج، نیکل خالص نمی باشد و به صورت NiS می باشد، حدود ۲۵٪ هزینه برای به دست آوردن نیکل از NiS از درآمد کل کم می کنیم. با توجه به جرم ملکولی NiS و Ni و قیمت نیکل، درآمد کل سالیانه حاصل از فروش نیکل برابر است با:

$$NiS(Kg/hr) * (58.7/90.77) * 15 * 0.75 * 330 * 24 = \$57620 * NiS(Kg/hr)$$

همراه نیکل کبالت نیز از سنگ معدن استخراج می شود. با توجه به رفتار مشابه این دو عنصر، درصد تبدیل تقریباً برابری دارند. مقدار کبالت در سنگ معدن لیمونیت حدود ۰.۱ نیکل، اما ارزش آن ۳ برابر نیکل می باشد. با توجه به اینکه جرم ملکولی این دو ماده تقریباً برابر می باشد، درآمد کل ۱.۳ برابر درآمد حاصل از نیکل می باشد. درآمد کل سالیانه برابر است با:

$$\$NiS (Kg/hr) * 74906$$

**محاسبه قیمت تمام شده:** قیمت تمام شده شامل موارد متعددی است که یکی از آنها مواد اولیه می باشد. پس ابتدا به بررسی هزینه مربوط به مواد اولیه می پردازیم و سپس موارد دیگر مربوط به قیمت تمام شده را بررسی می کنیم.

قیمت سنگ معدن را ۰.۱ قیمت محصول مورد نظر، یعنی قیمت نیکل که برابر با \$15/Kg می باشد، در نظر می گیریم. نیکل را بصورت اکسید نیکل وارد می کنیم. بنابراین برای اینکه هزینه سالیانه سنگ معدن را برحسب اکسید نیکل به دست آوریم، باید تابع را در نسبت جرم ملکولی نیکل به اکسید نیکل نیز ضرب کنیم. هزینه سالیانه سنگ معدن با فرض ۳۳۰ روز کاری و ۲۴ ساعت در روز برابر است با:

$$Cost(\$) = NiO(Kg/hr) * (58.7/74.7) * 15 * 0.1 * 330 * 24 = 9335.5 * NiO(Kg/hr)$$

قیمت بقیه مواد اولیه و هزینه سالیانه آنها با توجه به ۳۳۰ روز کاری و ۲۴ ساعت در روز در جدول ۲ آورده شده است.

جدول ۲: قیمت واحد و هزینه سالیانه مواد اولیه

ماده	قیمت واحد	هزینه سالیانه
H <sub>2</sub> O	\$5.05E-5/Kg	0.4*H <sub>2</sub> O(Kg/hr)
H <sub>2</sub> S	\$0.573/Kg	4538*H <sub>2</sub> S(Kg/hr)
CaCO <sub>3</sub>	\$0.13/Kg	1029.6*CaCO <sub>3</sub> (Kg/hr)
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	\$0.055/Kg	435.6*H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> (Kg/hr)

قیمت تمام شده به غیر از مواد اولیه بر حسب درصدی از خود قیمت تمام شده و یا درصدی از قیمت تجهیزات نیز می باشد. در اینجا برای تعیین قیمت تمام شده از روش حدس و خطا استفاده می کنیم. روش استفاده شده در زیر آورده شده است.

برای حدس اولیه قیمت تمام شده را نصف ارزش نیکل یعنی برابر با  $7.5 / \text{Kg}$  در نظر می گیریم. در نهایت قیمت تمام شده را با توجه به قیمت مواد اولیه و تجهیزات مجدداً به دست می آوریم و کنترل می کنیم که آیا فرض گرفته شده درست می باشد یا نه. اگر تفاوت حدس اولیه با آنچه در نهایت به دست می آوریم زیاد بود، با حدس دیگری محاسبات را تکرار می کنیم.

با حدس اولیه  $7.5 / \text{Kg}$ ، قیمت تمام شده در نهایت  $9.75 / \text{Kg}$  به دست می آید. تفاوت قیمت تمام شده به دست آمده با حدس اولیه زیاد می باشد. بنابراین باید حدس دیگری بزیم. در اینجا محاسبات مربوط به حدس دوم که  $9.5 / \text{Kg}$  می باشد را می آوریم.

$9.5 / \text{Kg} =$  قیمت تمام شده محصول

که سالیانه آن بر حسب NiS با توجه به توضیحات ذکر شده در محاسبه درآمد کل سالیانه، برابر است با:

$$9.5 * 330 * 24 * (58.7/90.77) * 0.75 * \text{NiS}(\text{Kg}/\text{hr}) = \$ 36492 * \text{NiS}(\text{Kg}/\text{hr})$$

در جدول ۳ مواردی که از مجموع آنها قیمت تمام شده به دست می آید، آورده شده اند.

جدول ۳: موارد مورد نیاز جهت محاسبه قیمت تمام شده

مورد	هزینه سالیانه (\$)
<b>هزینه های مستقیم</b>	
مواد اولیه	جداگانه محاسبه می شود
کارگر عملیاتی	$3649 * \text{NiS}(\text{Kg}/\text{hr})$
نظارت مستقیم و کارگر ماهر	$364 * \text{NiS}(\text{Kg}/\text{hr})$
تسهیلات جانبی	$3649 * \text{NiS}(\text{Kg}/\text{hr})$
تعمیر و نگهداری	$0.246 * \text{قیمت تجهیزات}$
تامین منابع عملیاتی	$0.0205 * \text{قیمت تجهیزات}$
هزینه های آزمایشگاهی	$364 * \text{NiS}(\text{Kg}/\text{hr})$
<b>هزینه های ثابت</b>	
استهلاک	$0.415 * \text{قیمت تجهیزات}$
مالیات محلی	$0.0802 * \text{قیمت تجهیزات}$
بیمه	$0.0205 * \text{قیمت تجهیزات}$
هزینه های بالا سری	$3649 * \text{NiS}(\text{Kg}/\text{hr})$
هزینه های اداری	$1094 * \text{NiS}(\text{Kg}/\text{hr})$
هزینه توزیع و فروش	$1094 * \text{NiS}(\text{Kg}/\text{hr})$
هزینه تحقیق و توسعه	$1824 * \text{NiS}(\text{Kg}/\text{hr})$



از جمع موارد ذکر شده قیمت تمام شده سالیانه برابر است با:

$$\text{NiS(Kg/hr)} * 15690 + 0.779 * \text{قیمت تجهیزات} + \text{هزینه مواد اولیه}$$

محاسبه نسبت برگشت سرمایه: سود ناخالص برابر کل درآمد منهای قیمت تمام شده محصول می باشد، بنابراین سود ناخالص برابر است با:

$$0.779 * \text{قیمت تجهیزات} - \text{هزینه مواد اولیه} - \text{NiS(Kg/hr)} * 15690 - \text{NiS(Kg/hr)} * 74906$$

$$= \text{قیمت تجهیزات} * 0.779 - \text{هزینه مواد اولیه} - \text{NiS(Kg/hr)} * 59216$$

پس از کسر ۴۰٪ مالیات، سود خالص سالیانه برابر است با:

$$0.467 * \text{قیمت تجهیزات} - 0.6 * \text{هزینه مواد اولیه} - \text{NiS(Kg/hr)} * 35529$$

در نتیجه نسبت برگشت سرمایه برابر است با:

$$4.9 * \text{قیمت تجهیزات} / (0.467 * \text{قیمت تجهیزات} - 0.6 * \text{هزینه مواد اولیه} - \text{NiS(Kg/hr)} * 35529)$$

$$= [4.9 * \text{قیمت تجهیزات} / (0.6 * \text{هزینه مواد اولیه} - \text{NiS(Kg/hr)} * 35529)] - 0.095$$

که قسمت اول رابطه را به عنوان تابع هدف برای بهینه کردن به نرم افزار می دهیم. بعد از بهینه کردن مقدار به دست آمده از نرم افزار را از ۰.۰۹۵ کم می کنیم تا نسبت برگشت سرمایه بهینه به دست آید.

$$4.9 * \text{قیمت تجهیزات} / (0.6 * \text{هزینه مواد اولیه} - \text{NiS(Kg/hr)} * 35529)$$

## بهینه سازی توسط کامپیوتر

ابتدا باید تابع هدف را مشخص کنیم. برای این منظور باید متغیرهای لازم را تعریف کنیم. بعضی از متغیرها را، به عنوان مثال حجم کل یک جریان را باید توسط Prop-sets برای نرم افزار مشخص کنیم. متغیرهای تعریف شده برای نرم افزار همراه با توضیحات آنها با توجه به نام آنها در نرم افزار در جدول ۴ آورده شده اند.

که در جدول ۴، دبی های حجمی بر حسب  $m^3/hr$ ، حجم راکتور بر حسب L و دبی های جرمی بر حسب Kg/hr می باشند. حال باید تابع هدف را با توجه به توضیحات بالا بنویسیم. تابع تعریف شده در نرم افزار پس از مرتب کردن به صورت زیر در می آید.

Objective function : (Z\*35529-

$$(5601 * M + 262 * N + 0.24 * O + 0.24 * P + 618 * (Q + A4) + 2723 * R)) / ((101.925 * S + 1.132E8) + (8.18E7 * (A + B + C) - 8.18E7 * D * (T + X) / U) ** 0.7275 + 902 * (F + G + A2 + A3) + 462158 + (1.8E7 * H - 1.8E7 * C * A1 / X) ** 0.7275 + 10408 * (I + J) + 2670252 + (5.66E6 * K - 5.66E6 * L * V / W) ** 0.7275)$$

دو متغیر بهینه سازی دبی جرمی آب CCD Wash و دبی جرمی اسید سولفوریک می باشند. مقدار تابع هدف به دست آمده از نرم افزار پس از بهینه کردن برابر با ۰.۵۴۲ می باشد. حال با مقادیر آب و اسید سولفوریک به دست آمده که به ترتیب برابر با ۱۶۱۲۰ و ۳۸۵ کیلو مول بر ساعت می باشند، شبیه سازی را اجرا می کنیم. سپس مقادیر سولفید هیدروژن و کربنات کلسیم را به اندازه استوکیومتری وارد می کنیم و دوباره شبیه سازی را اجرا می کنیم تا مقدار بهینه نهایی تابع هدف به دست آید. مقدار تابع هدف در این حالت برابر با ۰.۵۶۶ می شود. بنابراین نسبت برگشت سرمایه بهینه برابر است با:

$$\text{نسبت برگشت سرمایه (ROI)} = 0.566 - 0.095 = 0.471$$

جدول ۴: متغیرهای تعریف شده در نرم افزار در واحد استخراج نیکل از لیمونیت

متغیر	توضیح	متغیر	توضیح
A	دبی حجمی جریان ۲	P	دبی جرمی ماده H <sub>2</sub> O در جریان H <sub>2</sub> O
B	دبی حجمی جریان H <sub>2</sub> O	Q	دبی جرمی ماده CaCO <sub>3</sub> در جریان CaCO <sub>3</sub>
C	دبی حجمی جریان GYP	R	دبی جرمی ماده H <sub>2</sub> S در جریان H <sub>2</sub> S
D	دبی حجمی جریان TAIL	S	حجم راکتور CSTR
E	دبی حجمی جریان LIQ	T	دبی جرمی جامد جریان ۲
F	جریان دبی حجمی ۳	U	دبی جرمی جامد جریان TAIL
G	دبی حجمی جریان CaCO <sub>3</sub>	V	دبی جرمی جامد جریان ۶
H	دبی حجمی جریان ۴	W	دبی جرمی جامد جریان NiS
I	دبی حجمی جریان ۵	X	دبی جرمی جامد جریان GYP
J	دبی حجمی جریان H <sub>2</sub> S	Y	دبی جرمی جامد جریان CaCO <sub>3</sub>
K	دبی حجمی جریان ۶	Z	دبی جرمی ماده NiS در جریان NiS
L	دبی حجمی جریان NiS	A1	دبی جرمی جامد جریان ۴
M	دبی جرمی ماده NiO در جریان limonite	A2	دبی حجمی جریان ۷
N	دبی جرمی ماده H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> در جریان limonite	A3	دبی حجمی جریان CaCO <sub>3</sub> 2
O	دبی جرمی ماده H <sub>2</sub> O در جریان limonite	A4	دبی جرمی جامد جریان CaCO <sub>3</sub> 2

بررسی فرض مربوط به قیمت تمام شده: برای بررسی صحت فرض گرفته شده برای قیمت تمام شده، در حالت بهینه قیمت تجهیزات و هزینه مواد اولیه را محاسبه می کنیم. قیمت تجهیزات در حالت بهینه در جدول ۵ آورده شده اند. مجموع قیمت تجهیزات 4.8 E7 می باشد که ۰.۶۲ از قیمت تجهیزات مربوط به راکتور می باشد.

قیمت تمام شده با محاسبه هزینه مواد اولیه و قیمت تجهیزات برابر است با :

$$\text{قیمت تجهیزات} * 0.779 + \text{هزینه مواد اولیه} + 15690 * \text{NiS(Kg/hr)}$$

$$15690 * 5159.4 + 0.779 * 4.79E7 + 9.26E7 = 2.1E8$$

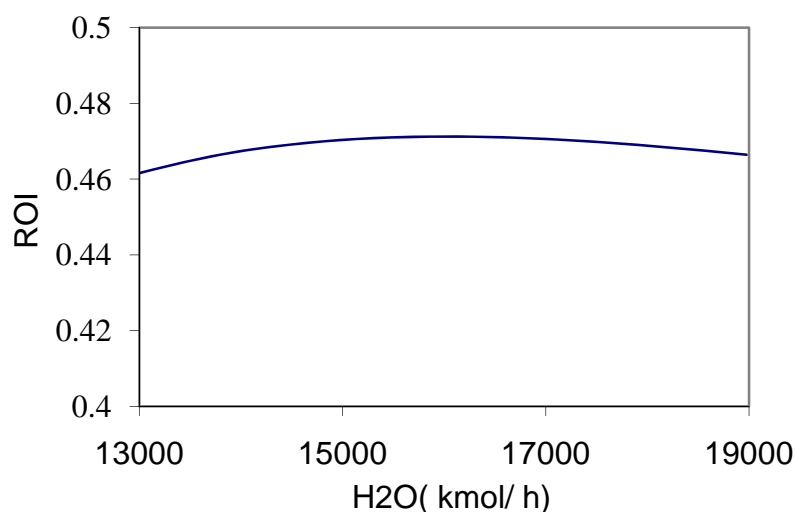
اگر قیمت تمام شده را محاسبه نماییم، در این حالت \$10.6/Kg به دست می آید. که با مقدار فرض شده \$9.5/Kg حدود ۱۰٪ اختلاف دارد. این اختلاف قابل قبول است و احتیاج به تکرار محاسبات نمی باشد.

جدول ۵: قیمت تجهیزات در حالت بهینه برای واحد استخراج نیکل از لیمونیت

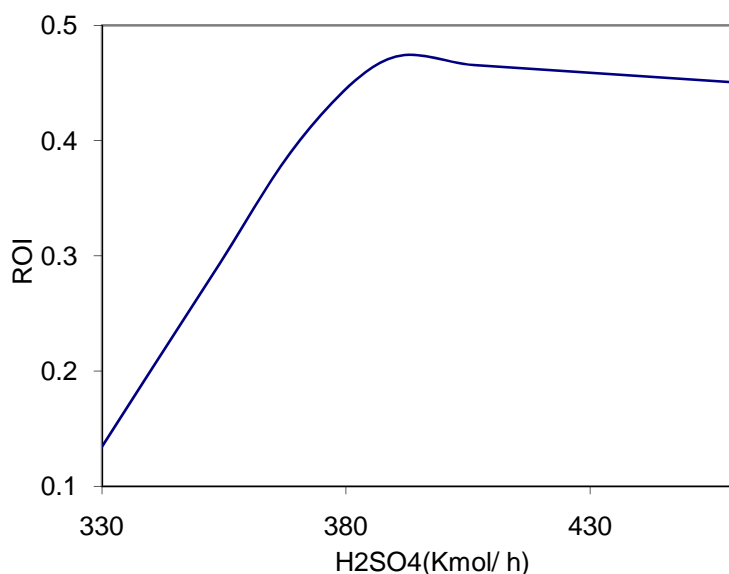
تجهیزات	قیمت(دلار)
راکتور CSTR فشار بالا	3E7
CCD Wash	1.138E7
واحد خنثی سازی	0.0128E7
واحد جدا سازی دوغاب سنگ گچ(تغلیظ کننده)	0.31E7
واحد رسوب سولفید	0.185E7
واحد جداسازی NiS	0.133E7
واحد دوم خنثی سازی	0.0122E7

### آنالیز حساسیت در حالت بهینه

بعد از بهینه سازی نهایی برای اینکه متوجه بشویم با تغییر متغیر های بهینه سازی مقدار نسبت برگشت سرمایه به چه اندازه تغییر می کند و فرآیند تا چه حدی به مقدار بهینه متغیر ها حساس می باشد با استفاده از قسمت Sensitivity با تغییر یکی از متغیر ها در حالیکه دیگری ثابت می باشد، نسبت برگشت سرمایه را حساب می کنیم. نتایج برای تغییر نسبت برگشت سرمایه با آب CCD Wash تغییر اسید سولفوریک در شکل‌های ۲ و ۳ آورده شده اند.

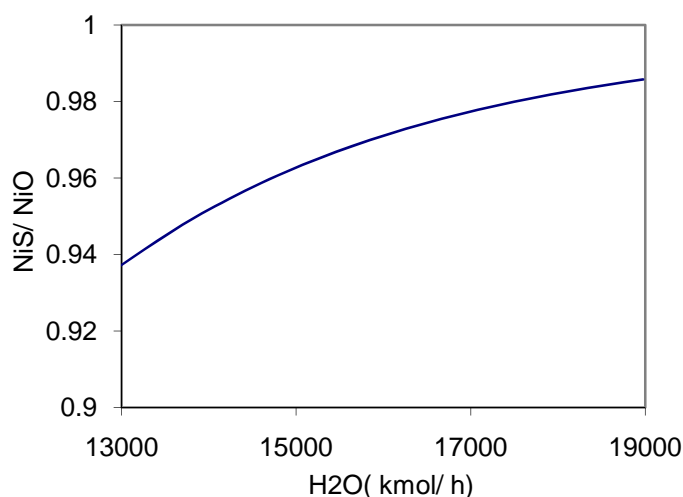


شکل ۲: چگونگی تغییر ROI با تغییر آب CCD Wash در حالت بهینه برای واحد لیمونیت



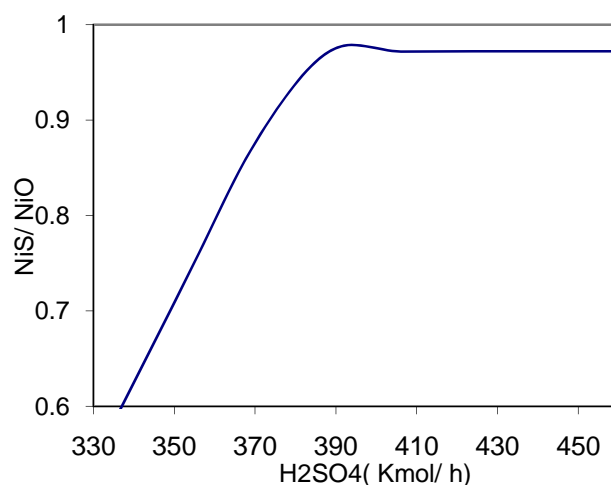
شکل ۳: چگونگی تغییر ROI با تغییر اسید سولفوریک در حالت بهینه برای واحد لیمونیت

با توجه به شکل‌های ۲ و ۳ مشاهده می‌شود که مقدار نسبت برگشت سرمایه به مقدار آب CCD Wash حساس نبوده و با تغییر دبی آب تغییر نسبت برگشت سرمایه کوچک می‌باشد. در مورد اسید سولفوریک، اگر مقدار اسید کمتر از مقدار بهینه وارد شود مقدار نسبت برگشت سرمایه به شدت کاهش می‌یابد. بنابراین وارد کردن مقدار اسید سولفوریک به اندازه بهینه بسیار مهم می‌باشد. اما به غیر از نسبت برگشت سرمایه، نسبت مولی سولفید نیکل به اکسید نیکل که نشان دهنده نسبت نیکل در خروجی به نیکل در ورودی می‌باشد، نیز مهم است. نتایج مربوط به تغییر نسبت مولی سولفید نیکل به اکسید نیکل با آب CCD Wash و اسید سولفوریک به ترتیب در شکل‌های ۴ و ۵ نشان داده شده‌اند.



شکل ۴: چگونگی تغییر نیکل خروجی به نیکل ورودی با تغییر آب CCD Wash در حالت بهینه برای واحد لیمونیت

با توجه به شکل ۴ مشاهده می شود که مقدار نسبت نیکل در خروجی به ورودی به مقدار آب واحد CCD Wash حساس نیست. با تغییر دبی آب همانطوریکه انتظار می رود این نسبت زیاد می شود اما تغییر آن کوچک می باشد.



شکل ۵: چگونگی تغییر نیکل خروجی به نیکل ورودی با تغییر اسید سولفوریک در حالت بهینه برای واحد لیمونیت

در مورد اسید سولفوریک، اگر مقدار اسید کمتر از مقدار بهینه وارد شود مقدار نسبت نیکل در خروجی به نیکل ورودی به شدت کاهش می یابد. بنابراین وارد کردن مقدار اسید سولفوریک به اندازه بهینه بسیار مهم می باشد.

## نتیجه گیری

در این مقاله برای شبیه سازی و بهینه سازی همزمان فرآیند از نرم افزار Aspen Plus استفاده گردید. زیرا این نرم افزار دارای بانک اطلاعاتی قوی برای مواد مختلف می باشد. همچنین این نرم افزار این قابلیت را دارد که با تنوع تجهیزات موردنیاز، فرآیندهای مختلف شیمیایی را شبیه سازی کند و سپس با ابزار قدرتمندی که دارد بهینه سازی و آنالیز حساسیت را به خوبی انجام دهد. بنابراین فرآیندهای مختلف شیمیایی را می توان با این نرم افزار شبیه سازی و بهینه سازی نمود و بعد از انتخاب بهترین حالت تغییرات لازم را در واحدهای پالایشگاهی و پتروشیمی ها اعمال نمود.

## مراجع

- [1]- Krause, E., Blakey, B. C., Papangelakis, V. G. " Pressure Acid Leaching of Nickeliferous Laterite Ores" ALTA 1998 Nickel/Cobalt pressure leaching and hydrometallurgy forum, May 1998.
- [2]- Queneau, P. B., Doane, R. E., Cooperrider, M. W., Berggren, M. H., Rey, P. " Control of Autoclave Scaling During Acid Pressure Leaching of Nickeliferous Laterite Ore" Metall. Trans B Vol. 15B, 1984, PP. 433-440.

- [3]- Kyle, J. H., Corrans, I. J. " Pilot Plant testing of Nickel Laterites" ALTA 1998  
*Nickel/Cobalt pressure leaching and hydrometallurgy forum, May 1998.*
- [4]- Dutrizac, J. E. Morlemius, A. J. " Control of Iron During Hydrometallurgical Processing of Nickeliferous Laterites Ore" CIM, 1986.
- [5]- Rubisov, D. H., Papangelakis, V. G." Sulphuric Acid Pressure Leaching of Laterites-a Comprehensive Model of a Continuous Autoclave" *Hydrometallurgy, Vol. 58, 2000, PP. 89-101*
- [6]-Svarovsky, L., *Solid-Liquid Separation. 4th Edition, Boston: Butterworth-Heineman, 2000.*
- [7]-Peters, M. S., Timmerhaus, D. K., West, R. E., *Plant Design and Economics For Chemical Engineers. 5th Edition, New York, McGraw Hill, 2003.*
- [8]- [www.matche.com/EquipCost](http://www.matche.com/EquipCost)
- [9]- Perry, R. H, Green, D.V., *Perry's Chemical Engineer's Handbook. New York, McGraw Hill, 1999.*
- [10]-*Chemical Market Reporter*