

TỦ SÁCH HOÀNH  
KỸ THUẬT HÓA HỌC

# Mô phỏng các quá trình cơ bản trong CÔNG NGHỆ HÓA HỌC

NGUYỄN THỊ MINH HIẾN

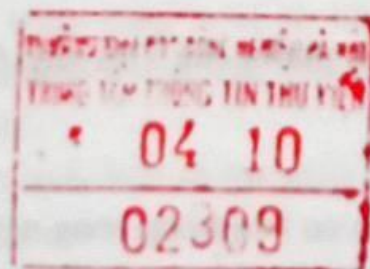


NHA XUẤT BẢN BÁCH KHOA HÀ NỘI

NGUYỄN THỊ MINH HIỀN

**MÔ PHỎNG  
CÁC QUÁ TRÌNH CƠ BẢN TRONG  
CÔNG NGHỆ HÓA HỌC**

*(Xuất bản lần thứ hai, có sửa chữa)*



**NHÀ XUẤT BẢN BÁCH KHOA HÀ NỘI**



Bản quyền thuộc về trường Đại học Bách khoa Hà Nội.

Mọi hình thức xuất bản, sao chép mà không có sự cho phép bằng văn bản của trường là vi phạm pháp luật.

Mã số: 169 - 2016/CXBIPH/03 - 02/BKHN

**Biên mục trên xuất bản phẩm của Thư viện Quốc gia Việt Nam**

Nguyễn Thị Minh Hiến

Mô phỏng các quá trình cơ bản trong công nghệ hóa học / Nguyễn Thị Minh Hiến. - H. : Bách khoa Hà Nội, 2016. - 232tr. ; 24cm

Thư mục: tr. 227

ISBN 978-604-938-761-6

1. Công nghệ hóa học 2. Mô phỏng 3. Phần mềm UNISIM 4. Giáo trình  
660.0285 - dc23

BKF0051p-CIP



## LỜI NÓI ĐẦU

Ngày nay, mô phỏng là phương pháp tính toán hiệu quả và đã trở thành xu thế tất yếu trong nghiên cứu và thiết kế công nghệ hóa học. Có rất nhiều phần mềm mô phỏng của các công ty phần mềm được phát triển và sử dụng rộng rãi trong thiết kế công nghệ, như: PRO/II, DYNASIM (Simsci); HYSIM, HYSYS, HTFS, STX/ACX, BDK (AspenTech); UNISIM DESIGN (Honeywell-UOP); PROSIM, TSWEET (Bryan Research & Engineering); Design II (Winsim); IDEAS Simulation; Simulator 42,..., trong đó phổ biến nhất là PRO/II, DYNASIM (Simsci), HYSYS (AspenTech) và UNISIM (Honeywell-UOP).

Sự phát triển mạnh mẽ của công nghệ hóa học trong thế kỷ XXI đòi hỏi mỗi kỹ sư công nghệ cần phải hiểu và sử dụng thành thạo ít nhất một trong số các phần mềm mô phỏng phổ biến nói trên.

Các phần mềm mô phỏng đều có cơ sở nhiệt động học rất vững chắc và đầy đủ, khả năng thiết kế linh hoạt, cùng với mức độ chính xác và tính thiết thực của các hệ nhiệt động cho phép thực hiện các mô hình tính toán rất gần với thực tế công nghệ. Các công cụ mô phỏng công nghệ rất mạnh phục vụ cho nghiên cứu tính toán thiết kế công nghệ của các kỹ sư trên cơ sở hiểu biết về các quá trình công nghệ hóa học, đáp ứng các yêu cầu công nghệ nền tảng cơ bản cho mô hình hóa và mô phỏng các quá trình công nghệ từ khai thác tới chế biến trong các nhà máy xử lý khí và nhà máy làm lạnh sâu, cho đến các quá trình công nghệ lọc hóa dầu và công nghệ hóa học.

Ở mức độ cơ bản, việc hiểu biết và lựa chọn đúng các công cụ mô phỏng và các cấu tử cần thiết cho phép mô hình hóa và mô phỏng các quá trình công nghệ một cách phù hợp và tin cậy. Điều quan trọng nhất là phải hiểu biết sâu sắc quá trình công nghệ trước khi bắt đầu thực hiện mô phỏng, bởi vì mô phỏng chỉ cung cấp các công cụ phục vụ cho mô phỏng tính toán công nghệ, mà không thể suy nghĩ thay cho các kỹ sư.

Trong các phần mềm mô phỏng hóa học hiện nay, UNISIM và HYSYS là hai phần mềm đang được sử dụng rộng rãi trong các trường đại học công nghệ. Cuốn *Mô phỏng các quá trình cơ bản trong công nghệ hóa học* này cung cấp những kiến thức cơ bản cho sinh viên lần đầu tiên sử dụng UNISIM và có ít hoặc chưa có kinh nghiệm mô phỏng trên máy tính. Sách cũng là giáo trình dành cho



sinh viên năm thứ ba của các trường đại học công nghệ, đồng thời có thể sử dụng như một chỉ dẫn cho các khóa học cao hơn trong công nghệ hóa học, khi đó UNISIM được coi như một công cụ mô phỏng để giải quyết các vấn đề công nghệ. Ngoài ra, cuốn sách còn có thể sử dụng đồng thời cho cả sinh viên và kỹ sư thực hành, như một tài liệu hướng dẫn hay một cuốn sổ tay cho các khóa học UNISIM.

Phần mềm UNISIM DESIGN chạy trong môi trường Windows có giao diện thân thiện với người sử dụng. UNISIM cũng giống như tất cả các phần mềm khác, luôn luôn có sự phát triển phiên bản mới, tuy nhiên phần cơ bản hầu như không thay đổi từ phiên bản này đến phiên bản khác. Cuốn sách này hướng dẫn sử dụng phần mềm UNISIM DESIGN, được công ty Honeywell-UOP cung cấp có bản quyền tại phòng thí nghiệm Công nghệ Lọc Hóa dầu và Vật liệu xúc tác trường Đại học Bách khoa Hà Nội. UNISIM là chương trình mô phỏng rất phức tạp và vì thế trong một cuốn sách không thể đề cập đến tất cả các vấn đề. Sách đặt trọng tâm vào phần cơ bản của UNISIM, trong lần tái bản này có sửa chữa và bổ sung thêm công cụ logical Balance, nhằm giúp cho những người lần đầu tiên làm quen với mô phỏng có thể lựa chọn công cụ phù hợp trong tính toán thiết kế công nghệ.

Trong phạm vi cuốn sách này sẽ nghiên cứu tìm hiểu các thiết bị được mô phỏng trong UNISIM, sử dụng các công cụ của UNISIM để mô phỏng một số quá trình công nghệ hóa học đơn giản, nghiên cứu ảnh hưởng của các thông số công nghệ đến chất lượng sản phẩm. Chương 7 sẽ đưa ra các bài tập mô phỏng trong đó vận dụng các kiến thức đã được cung cấp trong các chương trước để mô phỏng một số quá trình công nghệ hóa học và công nghệ chế biến khí từ đơn giản đến phức tạp. Vì vậy đòi hỏi người sử dụng phải học nghiêm túc và thực hành thành thạo toàn bộ các chương trước thì mới có thể làm được các bài ứng dụng trong chương này, khi đó sẽ thấy hết sức thú vị và hiệu quả.

Trong năm 2012, các sinh viên K52 ngành Công nghệ Hóa Dầu đã tham gia cuộc thi "Sử dụng phần mềm UNISIM DESIGN thiết kế mô phỏng công nghệ" do Honeywell tổ chức hàng năm cho sinh viên châu Á - Thái Bình Dương, đạt giải nhất và một giải nhì.

Tác giả xin gửi lời cảm ơn tới các sinh viên năm cuối chuyên ngành Công nghệ Hữu cơ Hóa Dầu, trường Đại học Bách khoa Hà Nội và các trợ giảng đã tham gia rất nhiệt tình, làm việc rất nghiêm túc và có hiệu quả, góp phần rất quan trọng để cuốn sách có thể được hoàn thành.

Tác giả rất mong nhận được sự góp ý của bạn đọc để sửa chữa bổ sung cuốn sách cho những lần xuất bản sau được tốt hơn. Xin chân thành cảm ơn!

*Tác giả*



# MỤC LỤC

LỜI NÓI ĐẦU .....	3
<b>CHƯƠNG 1. GIỚI THIỆU VỀ MÔ PHÒNG .....</b>	<b>7</b>
1.1. Mục đích của mô phỏng .....	7
1.2. Giới thiệu các phần mềm mô phỏng Công nghệ Hóa học .....	9
1.3. Phần mềm mô phỏng UNISIM DESIGN.....	11
<b>CHƯƠNG 2. PHƯƠNG TRÌNH TRẠNG THÁI.....</b>	<b>30</b>
2.1. Phương trình trạng thái - các biểu thức toán học .....	31
2.2. Thực hiện mô phỏng.....	32
2.3. Nhập thêm biến trong <i>Workbook</i> .....	34
2.4. Sử dụng <i>Case Studies</i> .....	37
2.5. Thay đổi <i>Fluid Package</i> .....	41
2.6. Tóm tắt và ôn tập chương 2 .....	41
2.7. Bài tập.....	41
<b>CHƯƠNG 3. CÁC THIẾT BỊ PHỤ TRỢ .....</b>	<b>43</b>
3.1. Bơm .....	44
3.2. Máy nén .....	49
3.3. Tuốc bin giãn nở khí ( <i>Expander</i> ) .....	55
3.4. Thiết bị trao đổi nhiệt .....	58
3.5. Tháp tách pha .....	61
3.6. <i>Cyclone</i> .....	67
3.7. Tóm tắt và ôn tập chương 3 .....	71
3.8. Bài tập nâng cao .....	72
<b>CHƯƠNG 4. CÁC THIẾT BỊ PHẢN ỨNG .....</b>	<b>73</b>
4.1. Thiết bị phản ứng chuyển hóa .....	73
4.2. Thiết bị phản ứng cân bằng.....	81
4.3. Thiết bị phản ứng GIBBS.....	90
4.4. Thiết bị phản ứng khuấy liên tục (CSTR) .....	96
4.5. Thiết bị phản ứng dòng chảy (PFR).....	110



<b>CHƯƠNG 5. CÁC CÔNG CỤ TÍNH TOÁN .....</b>	<b>118</b>
5.1. Công cụ logic <i>Adjust</i> .....	118
5.2. Công cụ logic <i>Set</i> .....	122
5.3. Công cụ logic <i>Recycle</i> .....	125
5.4. Công cụ logic <i>Balance</i> .....	128
5.5. Tính toán thông số tháp chưng bằng <i>Shortcut Distillation</i> .....	148
5.6. Phân chia dòng các cấu tử bằng <i>Component Splitter</i> .....	151
5.7. Bảng tính ( <i>Spread Sheet</i> ).....	154
5.8. Tối ưu hóa ( <i>Optimizer</i> ).....	162
5.9. Tóm tắt và ôn tập chương 5 .....	183
<b>CHƯƠNG 6. CÁC MÔ HÌNH PHÂN TÁCH.....</b>	<b>184</b>
6.1. Tháp hấp thụ.....	185
6.2. Tháp chưng luyện.....	192
<b>CHƯƠNG 7. MÔ PHÒNG MỘT SỐ QUÁ TRÌNH CÔNG NGHỆ HÓA HỌC .....</b>	<b>207</b>
7.1. Quá trình Dehydro hóa n-heptan sản xuất Toluen .....	208
7.2. Quá trình Hydroclo hóa Ethylen .....	210
7.3. Quá trình oxy hóa Ethylen .....	212
7.4. Quá trình chưng tách hỗn hợp Hydrocacbon nhẹ.....	214
7.5. Quá trình tổng hợp Ethylene Glycol (EG) từ Ethylene.....	215
7.6. Quá trình tổng hợp Maleic Anhydride (MA) từ Benzene.....	216
7.7. Quá trình tổng hợp styrene từ Ethyl Benzene (EB) .....	218
7.8. Quá trình tổng hợp Amoniac .....	218
7.9. Quá trình cô đặc dung dịch .....	219
PFD CHƯƠNG 7 .....	222
<b>GIẢI NGHĨA MỘT SỐ CỤM TỪ TIẾNG ANH TRONG MÔ PHÒNG .....</b>	<b>225</b>
<b>TÀI LIỆU THAM KHẢO.....</b>	<b>227</b>
<b>CHỈ MỤC .....</b>	<b>228</b>