

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه رازی

دانشکده فنی مهندسی

گروه مهندسی شیمی

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته مهندسی شیمی  
گرایش کاتالیست و ترموسینتیک

مدلسازی جعبه خاکستری راکتور اتیلن اکساید

استاد راهنما:

دکتر غلامرضا زاهدی

نگارش:

محسن چوپانی

تیر ۱۳۸۷

۹۶۴۳۵

کتابخانه اطلاعات رازی  
تاسیس ۱۳۸۷

۱۳۸۷ / ۷ / ۲۱

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات، ابتکارات و  
نوآوری های ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه  
متعلق به دانشگاه رازی است.



دانشکده فنی مهندسی

گروه مهندسی شیمی

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته مهندسی شیمی  
گرایش کاتالیست و ترموستیک

دانشجو: محسن چوپانی

تحت عنوان

**مدلسازی جعبه خاکستری راکتور اتیلن اکساید**

در تاریخ ۸۷/۴/۹ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه ..... به تصویب نهایی رسید.

امضاء  


۱- استاد راهنما، دکتر غلامرضا زاهدی با مرتبه‌ی علمی استادیار

امضاء  


۲- استاد داور داخل گروه، دکتر جمشید بهین با مرتبه‌ی علمی استادیار

امضاء  


۳- استاد داور خارج از گروه، دکتر ناهید شاه آبادی با مرتبه‌ی علمی استادیار

## چکیده

در کار حاضر، راکتور اتیلن اکساید مجتمع پتروشیمی اراک با مدل ناهمگن شبیه سازی شده است. در مدل ناهمگن معادلات برای دو فاز گاز و کاتالیست در دو حالت پایدار و ناپایدار در نظر گرفته شده‌اند. در مرحله اول ابتدا معادلات در حالت پایدار حل شده‌اند، سپس نتایج حالت پایدار به عنوان مقادیر اولیه برای حالت ناپایدار در نظر گرفته شده و سپس معادلات حل شده‌اند؛ که در هر دو حالت نتایج شبیه سازی با داده های واحد، به خوبی مطابقت داشتند. همچنین برای حل این معادلات از نرم افزار FEMLAB استفاده شده است و مطابقت خوبی بین نتایج شبیه سازی با داده های واحد وجود دارد.

در مرحله دوم، این تحقیق یک مدل مخلوط (جعبه خاکستری) شبکه عصبی را برای شبیه سازی راکتور اتیلن اکساید مجتمع پتروشیمی اراک بکار می‌برد. مدل مخلوط یا جعبه خاکستری شامل دو قسمت است: یک قسمت مدل ریاضی و قسمت دیگر مدل شبکه عصبی می‌باشد. مدل ریاضی قوانین بقای جرم، انرژی و نیز معادله افت فعالیت کاتالیزور را بکار می‌برد و با استفاده از جزء مولی‌های خروجی بدست آمده از شبکه های عصبی، دمای خروجی راکتور را حساب می‌نماید. مدل مخلوط یا جعبه خاکستری برای شبیه سازی راکتور اتیلن اکساید مجتمع پتروشیمی اراک بکار رفته که در این مدل سازی حاصل ضرب سرعت در غیر فعال شدن کاتالیست از طریق شبکه عصبی برای تمامی اجزاء بدست آمده و جایگزین سینتیک استفاده شده از مقالات گردیده است. روش حاصل راه حلی سریع جهت تخمین خروجی راکتور اتیلن اکساید با زمان و نیز تغییر دما و فشار با زمان و طول بستر ارائه می‌دهد.

## فهرست مطالب

صفحه	عنوان
ث	لیست شکل‌ها
ح	لیست جداول
خ	نشانه‌ها
۱	فصل اول: مقدمه
۲	۱-۱ مقدمه
۲	۲-۱ اتیلن اکساید
۳	۳-۱ شبکه‌های عصبی مصنوعی
۴	۴-۱ مدل جعبه خاکستری
۷	فصل دوم: مرور تاریخی
۸	۱-۲ کاتالیست
۹	۱-۱-۲ ته نشین کردن نقره بر روی پایه
۹	۲-۱-۲ استفاده از ارتقاء دهنده‌ها
۱۱	۳-۱-۲ بازیابی کاتالیست
۱۳	۲-۲ سینتیک
۱۴	۳-۲ غیر فعال شدن کاتالیست
۱۵	۴-۲ تاریخچه شبکه‌های عصبی
۱۸	فصل سوم: فرآیند تولید اتیلن اکساید
۱۹	۱-۳ تشریح فرآیندهای ساخت اتیلن اکساید
۱۹	۱-۱-۳ فرآیند کلرو هیدرین
۱۹	۲-۱-۳ فرآیند اکسیداسیون مستقیم اتیلن
۲۰	۲-۳ تشریح فرآیند کلرو هیدرین
۲۳	۳-۳ تشریح فرآیندهای اکسیداسیون مستقیم اتیلن
۲۳	۱-۳-۳ اکسیداسیون با هوا
۲۶	۲-۳-۳ اکسیداسیون با اکسیژن
۲۷	۴-۳ متغیرهای مهم در فرآیند اکسیداسیون مستقیم اتیلن
۲۸	۱-۴-۳ تهیه کاتالیست
۲۹	۲-۴-۳ روشهای مختلف جهت نشان دادن نقره بر روی پایه کاتالیست
۳۰	۳-۴-۳ کند کننده‌ها
۳۰	۴-۴-۳ اثر دما
۳۱	۵-۴-۳ تاثیر زمان تماس
۳۱	۶-۴-۳ تاثیر فشار

۳۲	۷-۴-۳ تاثیر ناخالصی
۳۳	۸-۴-۳ نسبت ترکیب شونده‌ها
۳۳	۹-۴-۳ تبدیل در هر گذر
۳۴	۱۰-۴-۳ نسبت برگشتی
۳۴	۱۱-۴-۳ گازهای بی اثر در خوراک
۳۴	۱۲-۴-۳ عملیات بستر متحرک در مقابل بستر ثابت
۳۸	۵-۳ مصارف و کاربردهای اکسید اتیلن
۳۸	۶-۳ آمار دارندگان پروانه دهنده
۴۰	<b>فصل چهارم: مدلسازی</b>
۴۱	۱-۴ مقدمه
۴۳	۲-۴ مدل راکتور
۴۳	۱-۲-۴ مدل ناهمگن
۴۵	۲-۲-۴ معادلات سرعت واکنش
۴۵	۳-۲-۴ افت فعالیت کاتالیست
۴۶	۴-۲-۴ ضرایب انتقال جرم
۴۷	۵-۲-۴ ضریب کلی انتقال حرارت
۴۷	۳-۴ حل عددی
۴۸	۱-۳-۴ شبیه سازی در حالت پایا
۴۹	۲-۳-۴ شبیه سازی در حالت دینامیکی
۵۲	۴-۴ حل از طریق نرم افزار FEMLAB
۵۳	۱-۴-۴ توصیف حلقه تولید اتیلن اکساید
۵۴	۵-۴ ارائه مدل ریاضی برای شبیه سازی حلقه تولید اتیلن اکساید
۵۴	۱-۵-۴ معرفی مدل
۵۶	۲-۵-۴ خواص ترمودینامیکی
۵۷	۳-۵-۴ معادلات سینتیکی سرعت واکنش مورد استفاده در نرم افزار FEMLAB
۵۸	<b>فصل پنجم: شبکه‌های عصبی مصنوعی</b>
۵۹	۱-۵ مقدمه
۵۹	۱-۱-۵ تشابهات شبکه‌های عصبی بیولوژیکی و مصنوعی
۶۰	۲-۵ تاریخچه‌ی شبکه‌های عصبی
۶۱	۳-۵ مبانی شبکه‌های عصبی مصنوعی
۶۲	۴-۵ طبقه‌بندی شبکه‌های عصبی مصنوعی از لحاظ نوع ساختمان
۶۲	۱-۴-۵ شبکه‌های پیشرو
۶۲	۲-۴-۵ شبکه‌های پسرو

۶۳	۵-۵ طبقه‌بندی از لحاظ الگوریتم آموزش
۶۳	۱-۵-۵ آموزش همراه با نظارت
۶۳	۲-۵-۵ آموزش بدون نظارت
۶۳	۶-۵ اصول شبکه‌های عصبی مصنوعی
۶۴	۱-۶-۵ چگونگی عملکرد شبکه‌های عصبی
۶۵	۷-۵ خواص شبکه‌های عصبی
۶۶	۸-۵ کاربرد شبکه‌های عصبی
۶۷	۹-۵ اصول محاسباتی شبکه‌های عصبی
۶۷	۱-۹-۵ اجزای یک نرون
۶۸	۱۰-۵ شبکه MLP
۶۸	۱-۱۰-۵ ساختمان شبکه
۷۰	۲-۱۰-۵ الگوریتم آموزش
۷۱	۱۱-۵ شبکه RBF
۷۱	۱-۱۱-۵ ساختمان شبکه
۷۲	۲-۱۱-۵ الگوریتم آموزش
۷۳	۱-۲-۱۱-۵ خوشه بندی K-mean
۷۳	۲-۲-۱۱-۵ فاکتور مقیاس فاصله
۷۳	۳-۲-۱۱-۵ تعیین فاکتورهای وزنی
۷۴	۱۲-۵ تخمین متغیرهای خروجی توسط شبکه‌های عصبی
۷۶	<b>فصل ششم: بحث و نتیجه گیری</b>
۷۷	۱-۶ نتایج مدل سازی ریاضی در نرم افزار MATLAB
۷۷	۱-۱-۶ شبیه سازی در حالت پایدار
۷۸	۱-۱-۱-۶ نتیجه گیری
۸۱	۲-۱-۶ شبیه سازی در حالت دینامیکی
۸۴	۱-۲-۱-۶ نتیجه گیری
۸۴	۳-۱-۶ مقایسه بین نتایج شبیه سازی در حالت دینامیکی و داده‌های صنعتی
۸۴	۴-۱-۶ ارزیابی مدل
۸۶	۲-۶ نتایج شبیه‌سازی در نرم افزار FEMLAB
۸۶	۱-۲-۶ بحث و نتیجه گیری
۹۳	۳-۶ نتایج شبیه‌سازی جعبه خاکستری
۱۰۱	<b>منابع و مآخذ</b>



صفحه	عنوان	شکل
۵	ساختار سری یک مدل جعبه خاکستری با شبکه عصبی	شکل ۱-۱
۶	ساختار موازی یک مدل جعبه خاکستری با شبکه عصبی	شکل ۲-۱
۱۱	انواع کاتالیست مورد استفاده در صنعت	شکل ۱-۲
۲۲	فرآیند کلرو هیدرین	شکل ۱-۳
۲۵	فرآیند اکسید اسیون با هوا	شکل ۲-۳
۲۷	فرآیند اکسید اسیون با اکسیژن	شکل ۳-۳
۲۷	ادامه فرآیند اکسید اسیون با اکسیژن	شکل ۴-۳
۳۷	راکتور اتیلن اکساید	شکل ۵-۳
۴۳	المانی در جهت محوری برای نوشتن موازنه جرم و انرژی در دو فاز	شکل ۱-۴
۴۳	المانی در جهت محوری برای نوشتن موازنه جرم	شکل ۲-۴
۴۴	المانی در جهت محوری برای نوشتن موازنه انرژی	شکل ۳-۴
۵۳	حلقه تولید اتیلن اکساید	شکل ۴-۴
۵۴	راکتور جریان پلاگی که در نرم افزار FEMLAB تعریف شده است.	شکل ۵-۴
۶۴	شبکه عصبی ساده با یک لایه مخفی	شکل ۱-۵
۶۷	شمای کلی نرون شماره ۱	شکل ۲-۵
۶۹	ساختمان شبکه عصبی MLP	شکل ۳-۵
۷۲	ساختمان شبکه عصبی RBF	شکل ۴-۵
۷۵	مدل جعبه خاکستری راکتور اتیلن اکساید	شکل ۵-۵
۷۹	نمودار درصد مولی (a) اتیلن اکساید (b) اتیلن و (c) اکسیژن در فاز گاز در حالت پایا بر حسب طول راکتور	شکل ۱-۶
۸۰	نمودار درصد مولی (a) دی اکسید کربن (b) آب و (c) دما در فاز گاز در حالت پایا بر حسب طول راکتور	شکل ۲-۶
۸۱	روند افت فعالیت کاتالیست در طول راکتور برای یک دوره ۱۱۰۰ روز عملیاتی	شکل ۳-۶
۸۲	نمودار درصد مولی (a) اتیلن اکساید (b) اتیلن و (c) اکسیژن در دو بعد طول راکتور و زمان برای یک ۱۱۰۰ روز عملیاتی، که از مدل دینامیکی ناهمگن بدست آمده است.	شکل ۴-۶
۸۳	نمودار درصد مولی (a) دی اکسید کربن (b) اکسیژن و (c) دمای فاز گاز در دو بعد طول راکتور و زمان برای یک ۱۱۰۰ روز عملیاتی، که از مدل دینامیکی ناهمگن بدست آمده است.	شکل ۵-۶
۸۵	مقایسه بین نتایج شبیه‌سازی دینامیکی مدل ناهمگن با داده‌های واحد	شکل ۶-۶

- شکل ۶-۷ درصد خطا بین نتایج شبیه‌سازی دینامیکی مدل دینامیکی ناهمگن و داده‌های واحد
- شکل ۶-۸ نمودار درصد مولی (a) اتیلن اکساید (b) اتیلن و (c) اکسیژن در فاز گاز با استفاده از نرم افزار FEMLAB بر حسب حجم راکتور
- شکل ۶-۹ نمودار درصد مولی (a) دی اکسید کربن (b) آب و (c) دما در فاز گاز با استفاده از نرم افزار FEMLAB بر حسب حجم راکتور
- شکل ۶-۱۰ نمودار دبی مولی (a) اتیلن اکساید (b) اتیلن و (c) اکسیژن در فاز گاز با استفاده از نرم افزار FEMLAB بر حسب حجم راکتور
- شکل ۶-۱۱ نمودار دبی مولی (a) دی اکسید کربن (b) آب و (c) درصد تبدیل با استفاده از نرم افزار FEMLAB بر حسب حجم راکتور
- شکل ۶-۱۲ اثر دمای ورودی بر روی تشکیل لکه داغ (hot-spot) با استفاده از نرم افزار FEMLAB
- شکل ۶-۱۳ نمایش جعبه سفید، سیاه و خاکستری
- شکل ۶-۱۴ نمودار درصد مولی (a) اتیلن اکساید (b) اتیلن و (c) اکسیژن در فاز گاز در حالت پایا بر حسب طول راکتور با استفاده از شبکه های عصبی
- شکل ۶-۱۵ نمودار درصد مولی (a) دی اکسید کربن (b) آب و (c) دما در فاز گاز در حالت پایا بر حسب طول راکتور با استفاده از شبکه های عصبی
- شکل ۶-۱۶ شبیه‌سازی دینامیکی مدل ناهمگن- جعبه خاکستری برای ۱۳۰ و ۱۸۰ روز عملیاتی
- شکل ۶-۱۷ کسر مولی اتیلن اکساید بر حسب طول راکتور بعد از گذشت ۲۵، ۵۰، ۷۵ و ۱۰۰ روز عملیاتی
- شکل ۶-۱۸ کسر مولی اتیلن بر حسب طول راکتور بعد از گذشت ۲۵، ۵۰، ۷۵ و ۱۰۰ روز عملیاتی
- شکل ۶-۱۹ کسر مولی اکسیژن بر حسب طول راکتور بعد از گذشت ۲۵، ۵۰، ۷۵ و ۱۰۰ روز عملیاتی

لیست جداول

صفحه	عنوان	جدول
۱۲	کاربرد و موارد استفاده کاتالیست‌ها در صنعت	جدول ۱-۲
۱۲	انواع پایه با کاربردشان	جدول ۲-۲
۱۳	انواع آلومینا با کاربردهایشان	جدول ۳-۲
۳۸	آمار دارندگان شرکت های پروانه دهنده	جدول ۱-۳
۳۹	آمار موجود فرآیندهای اکسیژن و هوا	جدول ۲-۳
۴۷	جرم مولکولی و حجم بحرانی ترکیبات	جدول ۱-۴
۵۴	مشخصات راکتور و کاتالیست	جدول ۲-۴
۵۷	مقدار ضرایب برای بدست آوردن خواص ترمودینامیکی	جدول ۳-۴
۵۷	ثوابت سرعت واکنش	جدول ۴-۴
۸۴	مقایسه بین پیش بینی سرعت تولیدی اتیلن اکساید بوسیله مدل ناهمگن با داده های واحد	جدول ۱-۶
۹۱	مقایسه بین نتایج شبیه سازی و داده های صنعتی	جدول ۲-۶
۹۸	مقایسه بین نتایج شبیه سازی در دو حالت جعبه سفید و خاکستری با داده های صنعتی	جدول ۳-۶

نشانه ها

$A_c$	$m^2$	سطح مقطع هر لوله راکتور
$A_i$	$m^2$	سطح داخلی هر لوله راکتور
$A_o$	$m^2$	سطح خارجی هر لوله راکتور
$a$	[-]	فعالیت کاتالیست
$a_v$	$m^2.m^{-3}$	مساحت سطحی ویژه هر کاتالیست
$c_{Pg}$	$J.mol^{-1}$	گرمای ویژه گاز در فشار ثابت
$c_{Ps}$	$J.mol^{-1}$	گرمای ویژه جامد در فشار ثابت
$c_t$	$mol.m^{-3}$	غلظت مولی جریان گاز
$D_i$	$m$	قطر داخلی لوله
$D_{ij}$	$m^2.s^{-1}$	ضریب نفوذ جزء $i$ در $j$
$D_m^i$	$m^2.s^{-1}$	ضریب نفوذ جزء $i$ در مخلوط
$D_o$	$m$	قطر خارجی لوله
$d_p$	$m$	قطر ذره های کاتالیست
$E_d$	$J.mol^{-1}$	انرژی اکتیواسیون
$F_t$	$mole.s^{-1}$	دبی مولی کلی برای هر لوله
$f_i$	bar	فوکاسیته برای هر جزء
$\Delta H_{fi}$	$J.mol^{-1}$	آنتالپی تشکیل جزء $i$
$\Delta H_{298}$	$J.mol^{-1}$	آنتالپی واکنش در ۲۹۸ درجه کلوین
$h_f$	$W.m^{-2}.K^{-1}$	ضریب انتقال حرارت گاز - جامد
$h_i$	$W.m^{-2}.K^{-1}$	ضریب انتقال حرارت بین فاز گاز و دیواره راکتور
$h_o$	$W.m^{-2}.K^{-1}$	ضریب انتقال حرارت بین بخار اشباع خنک کننده و دیواره راکتور
$K$	$W.m.K^{-1}$	ضریب هدایت فاز گاز
$K_d$	$s^{-1}$	ثابت افت فعالیت کاتالیست
$K_i$	$bar^{-1}$	ثابت جذب تعادلی برای جزء $i$
$K_{pi}$	[-]	ثابت تعادل برای جزء $i$
$K_w$	$W.m.K^{-1}$	ضریب هدایت دیواره راکتور
$K_{gi}$	$m.s^{-1}$	ضریب انتقال جرم برای جزء $i$ بین فاز گاز و ذرات جامد
$L$	$m$	طول راکتور
$M_i$	$g.mol^{-1}$	جرم مولکولی جزء $i$
$N$	[-]	تعداد اجزاء اکسیداسیون اتیلن
$P$	bar	فشار کلی

$P_a$	bar	فشار اتمسفری
$R$	$J.mol^{-1}.K^{-1}$	ثابت عمومی گازها
$Re$	[-]	عدد رینولدز
$R_p$	m	شعاع ذره های کاتالیست
$r_i$	$mol.kg^{-1}.s^{-1}$	سرعت واکنش برای جزء $i$
$r_1$	$mol.kg^{-1}.s^{-1}$	سرعت واکنش اکسیداسیون
$r_2$	$mol.kg^{-1}.s^{-1}$	سرعت واکنش احتراق
$Sc$	[-]	عدد اشمیت
$T$	K	دمای فاز گاز
$T_R$	K	دمای مرجع در معادله افت فعالیت کاتالیست
$T_s$	K	دمای فاز جامد
$T_{shell}$	K	دمای آب در پوسته
$t$	s	زمان
$U_{shell}$	$W.m^{-2}.K^{-1}$	ضریب کلی انتقال حرارت
$u$	$m.s^{-1}$	سرعت ظاهری فاز گاز
$u_g$	$m.s^{-1}$	سرعت خطی فاز گاز
$y_i$	$mol.mol^{-1}$	جزء مولی $i$ در فاز گاز
$y_{is}$	$mol.mol^{-1}$	جزء مولی $i$ در فاز جامد
$z$	m	مختصات محوری راکتور
$\Delta z$	m	المانی از محور راکتور
نمادهای یونانی		
$\varepsilon_S$	$m^3.m^{-3}$	ضریب تخلخل کاتالیست
$\mu$	$Kg.m^{-1}.s^{-1}$	ویسکوزیته فاز سیال
$v_{ci}$	$cm^3.mol^{-1}$	حجم بحرانی جزء $i$
$\rho_B$	$Kg.m^{-3}$	دانسیته کاتالیست
$\rho_g$	$Kg.m^{-3}$	دانسیته فاز گاز

# فصل (١)

مقدمه

## ۱-۱ کلیات

هدف اصلی از این پایان نامه، مدل سازی و شبیه سازی راکتور اتیلن اکساید مجتمع پتروشیمی اراک به کمک شبکه های عصبی و نرم افزار FEMLAB می باشد. در فصل اول یک مقدمه ای برای تولید اتیلن اکساید، شبکه های عصبی مصنوعی و جعبه خاکستری آمده است. در ادامه در فصل دوم مروری بر کارهای انجام شده در زمینه اتیلن اکساید آمده است. در فصل سوم فرآیندهای تولید اتیلن اکساید و مقایسه ای بین این فرآیندها مورد بررسی قرار گرفته است؛ همچنین در ادامه این پروژه در فصل چهارم مدل سازی راکتور مورد بحث قرار گرفته و در فصل پنجم کلیاتی در زمینه شبکه های عصبی مصنوعی آمده و در آخر کلیه نتایج بدست آمده از مدل سازی جعبه سفید، جعبه سیاه و خاکستری با داده های واقعی مقایسه شده است.

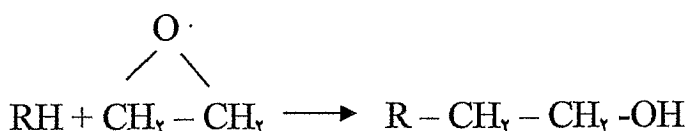
## ۱-۲ اتیلن اکساید

در گذشته نه چندان دور، عمده تولید اتیلن اکساید در جهان با روش کلروهیدرین انجام می گرفت تا اینکه اولین واحد صنعتی تولید اتیلن اکساید با فرآیند اکسیداسیون مستقیم، در سال ۱۹۳۷ توسط کمپانی یونیون کارباید در ایالات متحده راه اندازی شد. بعد از آشکار شدن مزیت های تولید اتیلن اکساید با فرآیند اکسیداسیون مستقیم نسبت به فرآیند مرسوم کلروهیدرین، فرآیند اکسیداسیون مستقیم شروع به جایگزین شدن نمود تا اینکه در نیمه دوم دهه شصت، فرآیند کلروهیدرین تقریباً منسوخ شد. علت عمده منسوخ شدن آن تولید فاضلاب آبی عظیم در این روش بود که به شدت به محیط زیست آسیب می رساند. همچنین از دیگر عوامل منسوخ شدن این روش می توان به: پیچیدگی، مشکل بودن و هزینه زیاد مصرف در این روش نسبت به اکسیداسیون مستقیم اشاره کرد در این روش محصول بدست آمده گرانتر از محصول تولیدی با روش اکسیداسیون مستقیم بود.

اکسید اتیلن (اکسیران، اپوکسی اتان) گازی است بی رنگ با بویی شبیه اتر که در درجه حرارت  $10/4$  درجه سانتی گراد و فشار  $760$  میلیمتر جیوه به مایع تبدیل می شود؛ اکسید اتیلن مایع نیز بی رنگ بوده و به هر نسبت با آب، الکل، اتر و بیشتر حلالهای معروف آلی قابل اختلاط می باشد. بخارات اکسید اتیلن آتشگیر و قابل انفجار می باشد و بطور کلی بر فلزات اثر خورنده ندارد.

اکسید اتیلن یکی از فرآورده های مهم پتروشیمی است که به عنوان یک ماده واسطه در تولید بسیاری از مواد شیمیایی مانند اتیلن گلایکول، پلی اتیلن گلایکول، گلایکول اترها، اتانول آمین ها، اتیلن سیانوهیدرین،

هیدراکسی اتیل سلولز، هیدراکسی اتیل استارچ و انواع زیادی از مواد شوینده و پاک کننده‌ها بکار برده می‌شود. به علت میل ترکیبی زیاد اکسید اتیلن، تقریباً هیدراکسی با کلیه ترکیباتی که دارای اتم هیدروژن قابل دسترس باشند از قبیل آب، الکلها، آمونیاک، آمینها و اسیدهای آلی ترکیب شده با تولید حرارت، ترکیبی با عامل هیدراکسی اتیل ( $\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$ ) تولید می‌نماید.



عامل هیدراکسی اتیل، قابلیت حلالیت این مواد را در آب بالا برده و باعث بالا بردن نقطه جوش این مواد از ۵۰ تا ۲۰۰ درجه سانتی گراد می‌شود. عامل هیدراکسی اتیل که یک عامل الکلی از نوع اول است، به نوبه خود می‌تواند نقطه شروعی برای تهیه آلدئیدها، اسیدها، استرها، کلرایدها و آمین‌ها گردد.

اکسید اتیلن در مجاورت کاتالیست‌های اسیدی، بازی، کلرور فلزات و حتی اکسید آهن قابلیت پلیمریزه شدن دارد. پلیمر تولید شده در آب قابل حل بوده و به جهت داشتن این خاصیت از آن در صنایع کشاورزی و دارویی و آرایشی استفاده می‌گردد.

تشکیل پلیمر اکسید اتیلن در دستگاه‌ها و لوله‌هایی که اکسید اتیلن مایع از آن عبور می‌کنند مشکلاتی را به وجود می‌آورد که برای جلوگیری از آن بایستی هنگام عملیات با این ماده تدابیر ویژه فراهم گردد.

### ۱-۳ شبکه‌های عصبی مصنوعی

شبکه‌های عصبی مصنوعی، ابزارهای محاسباتی می‌باشند که رفتار هوشمندانه از خود نشان می‌دهند. این شبکه‌ها رفتاری شبیه به رفتار سلولهای عصبی بدن انسان دارند. در مغز انسان نرون‌ها توسط شبکه پیچیده عصبی با هم مرتبط هستند. حسگرهای بدن انسان هر گونه برانگیختگی را مشاهده می‌کنند و این اطلاعات ورودی را در طول نرون‌ها به مغز می‌فرستند. درون مغز، نرون‌ها برانگیخته شده و با یکدیگر ارتباط برقرار می‌کنند. بر اساس ورودی، نتیجه‌هایی شکل می‌گیرند و به صورت جواب خروجی از مغز فرستاده می‌شوند. بر اساس چنین رفتاری مدل‌سازی‌های کامپیوتری انجام شده است که رفتار هوشمند از خود نشان می‌دهند. این مدل‌های کامپیوتری به شبکه‌های عصبی مصنوعی معروف می‌باشند. شبکه‌های عصبی به طور کلی سیستم‌های ریاضی یادگیر غیر خطی هستند.

در زمینه مهندسی شیمی نیز، تحقیقات مختلفی انجام شده است و استفاده از شبکه‌های عصبی برای مواردی نظیر تشخیص خطا در سیستم‌ها، شبیه‌سازی فرآیندها، کنترل فرآیندها و غیره رو به افزایش است. استفاده گسترده از شبکه‌های عصبی به چند عامل بستگی دارد:



- با توسعه علوم کامپیوتر و دسترسی آسان به آنها، استفاده از شبکه‌های عصبی بسیار آسان گشته و از نظر اقتصادی هم مقرون به صرفه می‌باشد.
- شبکه‌های عصبی مصنوعی شبکه‌هایی هستند که از داده‌های نمونه سیستم به منظور توسعه مدل استفاده می‌کنند و نیازی به برخورداری از اطلاعات و دانش قبلی نسبت به سیستم مورد مطالعه نیست.
- تحلیل مسائل پیچیده‌ای که روش‌های سنتی و مرسوم به سختی قادر به حل آنها هستند، توسط شبکه‌های عصبی به راحتی صورت می‌گیرد.

یک روش معمول برای شبیه‌سازی و شناسایی یک سیستم استفاده از اصول اولیه و سپس تخمین مقدار پارامترهای مدل با استفاده از داده‌های فرآیندی می‌باشد. این روش اغلب مشکل یا پرهزینه است، زیرا ممکن است که فرآیند بسیار پیچیده و یا ناشناخته باشد. به هر حال در مدل‌های بسیار پیشرفته هم، اغلب از فرض‌های ساده‌کننده، استفاده شده است که دقت شناسایی را کاهش می‌دهند. با توجه به این مشکلات استفاده از مدل‌های بدون پارامتر که فقط از داده‌های ورودی و خروجی فرآیند به منظور شناسایی و شبیه‌سازی سیستم استفاده می‌کنند، ضروری به نظر می‌رسد. به منظور شبیه‌سازی سیستم‌های غیرخطی، تعدادی از روش‌های بدون پارامتر پیشنهاد شده‌اند. شبکه‌های عصبی نوع دیگری از مدل‌های دینامیک غیرخطی هستند. مدل‌هایی بر مبنای اصول بنیادی، توانایی برون‌یابی بهتری نسبت به شبکه‌های عصبی دارند، اما آموزش پذیری شبکه‌های عصبی (در محدوده‌هایی که شبکه‌ها آموزش دیده‌اند) توانایی آنها را برای تخمین و شناسایی بهتر سیستم‌ها افزایش داده است.

شبکه‌های عصبی، با قابلیت قابل توجه آنها در استنتاج معانی از داده‌های پیچیده یا مبهم، می‌تواند برای استخراج الگوها و شناسایی روش‌هایی که آگاهی از آنها برای انسان و دیگر تکنیک‌های کامپیوتری بسیار پیچیده و دشوار است به کار گرفته شود. یک شبکه عصبی تربیت یافته، می‌تواند به عنوان یک متخصص در مقوله اطلاعاتی‌ای که برای تجزیه و تحلیل به آن داده شده به حساب آید. از این متخصص می‌توان برای برآورد وضعیت‌های دلخواه استفاده کرد.

راکتور اتیلن اکساید مثال خوبی از یک سیستم دینامیک پیچیده غیرخطی می‌باشد. شبیه‌سازی و شناسایی این راکتور با توجه به پیچیدگی سیستم و زمان بر بودن برنامه‌های مبتنی بر حل معادلات دیفرانسیل حاکم بر سیستم، می‌تواند نمونه خوبی برای نمایش توانایی‌های شبکه‌های عصبی مصنوعی باشد.

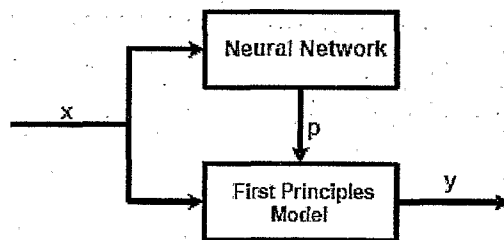
## ۱-۴ مدل جعبه خاکستری

یک مدل فرآیندی می‌تواند یک مدل از اصول اولیه - که با استفاده از شناخت فیزیکی فرآیند ایجاد شده - یا یک مدل جعبه سیاه که مبتنی بر آزمایش ساخته شده است، باشد. هر دو دارای معایبی می‌باشند که در زیر به برخی از این معایب اشاره شده است:

مدل‌های اصول اولیه سخت می‌باشند، همچنین اغلب پرخرج یا حتی نشدنی هستند، در صورتی که مدل‌های جعبه سیاه اغلب شناخت فیزیکی از سیستم ندارند و معمولاً در یک رنج محدود درست می‌باشند؛ هر چند که این مدل‌ها ارزان بدست می‌آیند. مدل ترکیبی اصول اولیه و جعبه سیاه، به نام جعبه خاکستری آمده است. از دیدگاه کاربردی، مدل‌سازی جعبه خاکستری یک راه خیلی مناسب برای مدل‌سازی فرآیندهای غیر خطی می‌باشد، از این رو، ساختار مدل را می‌توان از اصول اولیه موازنه جرم و حرارت استنتاج کرد و مشخصات غیر خطی فرآیند را می‌توان از ترکیب نتایج تجربی مدل‌سازی کرد.

تامپسون و کرامر [۱] در سال ۱۹۹۴ یک گزارش و مقایسه‌ای بین روش‌های مختلف مدل‌سازی در فرآیندهای شیمیایی با استفاده از شبکه‌های عصبی و دانش قبلی ارائه کردند. ما توجه مان را روی روش‌های طراحی شبه پارامتری متمرکز کردیم، تا زمانی که یک ترکیبی از شبکه عصبی با مدل پارامتری انجام شود، که این ترکیب می‌تواند بصورت سری یا موازی باشد.

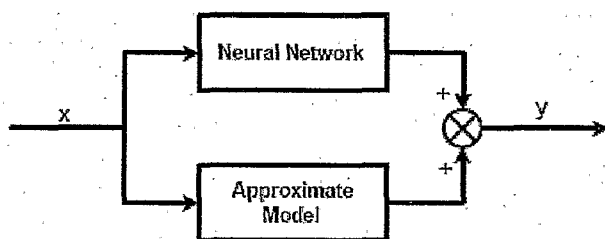
کویلووس و همکارانش [۲] در سال ۱۹۹۶، مدل اصول اولیه را برای توصیف فرآیند خشک کن ذرات جامد استفاده کردند، در صورتی که پارامتر مجهول  $P$  در مدل اصول اولیه بوسیله شبکه‌های عصبی تخمین زده شده بود. در شکل ۱-۱ ساختار مدل جعبه خاکستری که بصورت سری می‌باشد نمایش داده شده است.



شکل ۱-۱ ساختار سری یک مدل جعبه خاکستری با شبکه عصبی

سیجوجیوس و انگر [۳] در سال ۱۹۹۲ نیز از ساختار سری مدل جعبه خاکستری برای مدل‌سازی فرآیند تخمیر استفاده کردند. ارائه معتبر این تکنیک مدل‌سازی جعبه خاکستری سری با شبکه‌های عصبی روی روش مدل‌سازی جعبه سیاه شبکه‌های عصبی سودمند می‌باشد. بر خلاف مدل شبکه‌های عصبی، تا زمانی که سرتاسر شبکه با تعدادی از پارامترهای شبکه در ارتباط باشد، مدل اصول اولیه برهم کنش متغیرهای فرآیند را از فیزیک مساله مشخص می‌کند. بنابراین مدل مخلوط را می‌توان آسان‌تر آموزش داد و برای پیش‌بینی اهداف مورد نظر قابل اطمینان می‌باشد.

در بعضی مواقع، ما با موقعیت هایی روبرو می شویم که یک شرح کامل و درستی از فرآیند در دسترس نیست. برای مثال، برای یک راکتور گرمازا، سیستم سرمایش یا گرمایش ممکن است خیلی خوب مطالعه و مدل شده باشد اما سینتیک سیستم واکنش را نمی توان به سادگی مدل کرد. در اینجا از روش سری نمی توان استفاده کرد و بناچار ما باید از روش موازی استفاده نماییم. ساختار موازی شبکه مخلوط یا جعبه خاکستری در شکل ۱-۲ نشان داده شده است.



شکل ۱-۲ ساختار موازی یک مدل جعبه خاکستری با شبکه عصبی

## فصل (۲)

مرور تاریخی