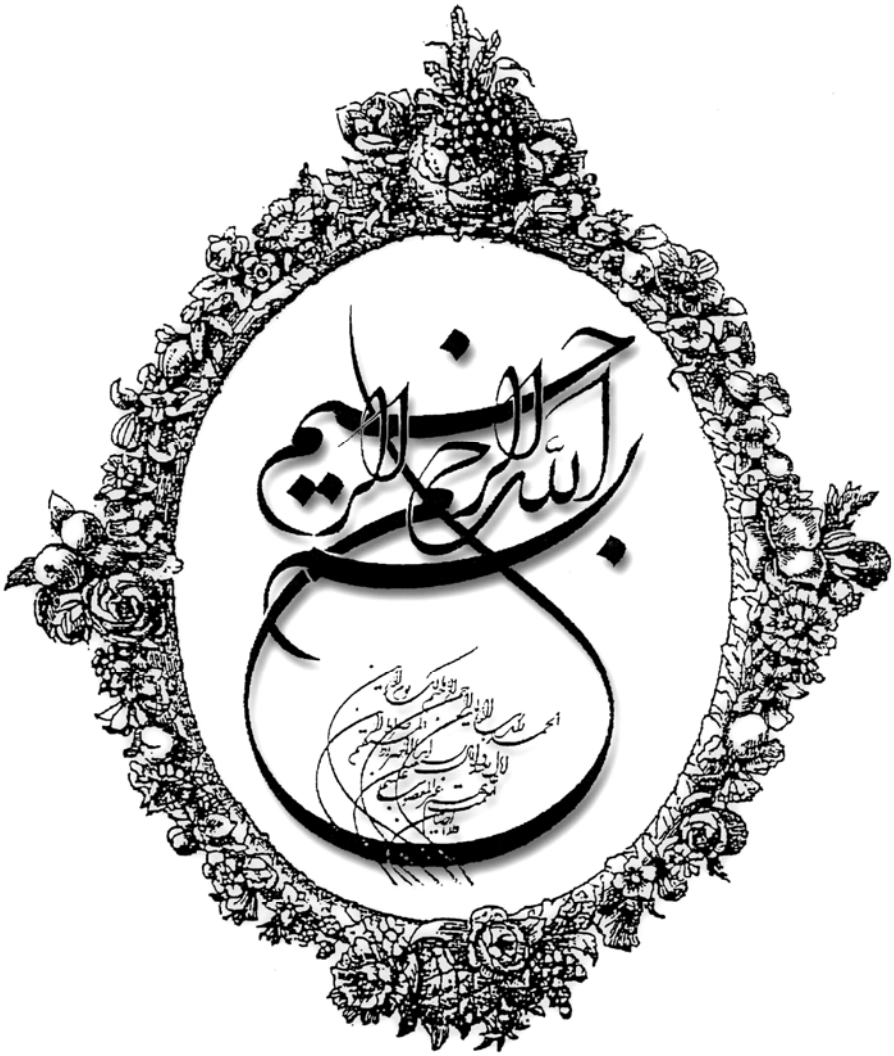
بسم الله الرحمن الرحیم

دانشگاه صنعتی اصفهان
دانشکده مهندسی شیمی

کاربرد شبکه‌های عصبی (هوش مصنوعی) در مدل‌سازی و شبیه‌سازی برج‌های تقطیر واکنشی

پایان نامه کارشناسی ارشد مهندسی شیمی (گرایش پیشرفته)

داود دادخواست

استاد راهنما
دکتر ارجمند مهربانی

۱۳۸۵

دانشگاه صنعتی اصفهان
دانشکده مهندسی شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد مهندسی شیمی آقای داود دادخواست

تحت عنوان

کاربرد شبکه‌های عصبی (هوش مصنوعی) در مدل‌سازی و شبیه‌سازی برج‌های تقطیر واکنشی

در تاریخ۱۳۸۵/۱۱/۷ توسط کمیته تخصصی زیر مورد بررسی و تصویب نهائی قرار گرفت.

۱- استاد راهنمای پایان نامه	دکتر ارجمند مهربانی
۲- استاد مشاور پایان نامه	دکتر محسن دوازه امامی
۳- استاد داور	دکتر محمدرضا احمدزاده
۴- استاد داور	دکتر محسن نصراصفهانی
نماینده کمیته تحصیلات تکمیلی دانشکده	دکترکیخسرو کریمی

تشکر و قدردانی

خداوند را سپاسگزارم به خاطر نعمتهایی که بر بنده خویش عطاء، و در به اتمام رساندن با موفقیت در مرحله دیگری از زندگی مرا یاری نموده است. در اینجا وظیفه خود می دانم از زحمات اساتید ارجمند آقای دکتر ارجمند مهربانی که با راهنمائیها و در اختیار گذاشتن اطلاعات و تجربیات ارزشمند خویش راه دشوار به ثمر رساندن این پروژه را هموارتر کردند، قدردانی نمایم. همچنین از راهنمائیهای صبورانه و دلسوزانه جناب آقای دکتر محسن دوازده امامی که مشاوره این پروژه را به عهده داشتند کمال تشکر را دارم.

در پایان از همکاری صمیمانه تمامی کسانی که در به ثمر رساندن این پروژه مرا یاری نموده اند کمال تشکر و سپاس را دارم.

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعـــات، ابتکارات و نوآوریهای ناشی از تحقیق موضوع این پـایـــان نامه (رساله) متعلق به دانشگـــــاه صنعتـــــی اصفهان است.

تقدیم به مادر مهربانم

چرا که قسمت اعظم موفقیتهای خود را مرهون فداکاریها، تشویق، گذشت و مساعدتهای صادقانه این اسطوره زندگی می دانم.

تقدیم به برادر بزرگوارم جواد و همسر گرامیش خانم محبی

چرا که در تمام مراحل زندگی مرا یاری نموده اند.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

علائم اختصاری ۱

چکیده ۱

فصل اول : مقدمه

۱-۱- دلایل بکارگیری سیستم RD ۵

۱-۲- انتخاب سبک عملیاتی ۸

۱-۳- مزایای استفاده از فرایند تقطیر همراه با واکنش ۹

۱-۴- محدودیتها و مشکلات بکارگیری برجهای تقطیر واکنشی ۱۰

۱-۵- پیچیدگی فرایندهای تقطیر واکنشی ۱۰

۱-۶- شبکه‌های عصبی ۱۲

فصل دوم : مدلسازی و شبیه‌سازی فرایند تقطیر واکنشی

۲-۱- مدلسازی و شبیه‌سازی در مهندسی شیمی ۱۵

۲-۲- مراحل مختلف شبیه‌سازی فرایندها ۱۶

۲-۳- مدلهای حاکم بر برجهای تقطیر واکنشی ۱۸

۲-۳-۱- مدل مراحل تعادلی ۱۸

۲-۳-۲- الگوریتم‌های حل معادلات حاکم بر تقطیر واکنشی در حالت پایا ۲۰

۲-۳-۳- مدل مراحل غیر تعادلی ۲۶

۲-۳-۴- مروری بر انواع مدلهای غیر تعادلی ۲۹

فصل سوم : مدل مراحل تعادلی در شبیه‌سازی دینامیکی برجهای تقطیر واکنشی

۳-۱- مشخصات فیزیکی و شیمیایی اتیل استات ۳۵

۳-۲- پیش‌بینی صحیح خواص فیزیکی برای عملیات شبیه‌سازی ۳۶

۳-۲-۱- انتخاب روشهای خواص فیزیکی مناسب ۳۷

۳-۲-۲- تعیین اعتبار خواص فیزیکی ۴۰

۳-۲-۳- توصیف اجزاء و پارامترهای تعریف نشده در بانکهای اطلاعاتی ۴۰

۳-۲-۴- فراهم نمودن و بکارگیری داده‌هالی خواص فیزیکی مناسب ۴۱

۳-۳- محاسبه خواص فیزیکی در شبیه‌سازی برجهای تقطیر واکنشی ۴۱

۳-۳-۱- محاسبه حجم مولی اجزاء و مخلوط گاز مایع ۴۱

۳-۳-۲- محاسبه فشار بخار اجزاء ۴۲

۳-۳-۳- محاسبهٔ ضریب فوگاسیته ۴۳

۳-۳-۴- محاسبه ظرفیت گرمایی ویژه اجزاء در حالت گاز ایده‌آل ۴۳

۳-۳-۵- محاسبه گرمای نهان تبخیر ۴۴

۴-۳-۶- محاسبه ضرایب اکتیویته ۴۴

۳-۳-۷- محاسبه آنتالپی اجزاء خالص و مخلوط ۴۵
۳-۳-۸- محاسبه ضریب تصحیح معادله تعادل فازی- واکنشی جهت استفاده بصورت تعادل شبه فازی ۴۶
۳-۴- شبیه‌سازی دینامیکی برج تقطیر سینی‌دار همراه با واکنش شیمیایی ۴۷
۳-۴-۱- بازنویسی معادلات بنایی در مدل مرحله تعادلی با اعمال فرض‌های مناسب ۵۰
۳-۴-۲- الگوریتم حل معادلات برج تقطیر واکنشی ۵۷
۳-۵- نتایج حاصل از شبیه‌سازی برج تقطیر واکنشی سینی دار ۵۸

فصل چهارم : اثر پارامترهای مهم در عملکرد برج تقطیر واکنشی

۴-۱- تاثیر جریان برگشتی ۷۸
۴-۲- تاثیر سرعت واکنش شیمیایی ۸۱
۴-۳- تاثیر گرمای مصرفی جوش آور ۸۱
۴-۴- تاثیر فشار عملیاتی بر عملکرد برجهای تقطیر واکنشی ۸۴
۴-۵- پاسخ برج تقطیر واکنشی در برابر تغییرات غلظت واکنشگرها در خوراک ورودی ۸۵
۴-۶- تاثیر مقدار موجودی بر عملکرد برج تقطیر واکنشی ۸۷
۴-۷- تأثیر افزایش دمای خوراک بر عملکرد برج تقطیر واکنشی ۸۸
۴-۸- اعتبار مدل مراحل تعادلی در عملیات تقطیر واکنشی ۸۸
۴-۸-۱- آزمایش لی و دادکویچ ۸۹
۴-۸-۲- آزمایش کوماتسو ۹۱

فصل پنجم : شناسایی دینامیک برج تقطیر واکنشی بوسیله شبکه‌های عصبی

۵-۱- مقدمه ۹۵
۵-۲- تاریخچه شبکه‌های عصبی مصنوعی ۹۶
۵-۳- ساختار نرونهای محاسباتی در شبکه‌های عصبی ۹۸
۵-۴- دسته‌بندی لایه‌های شبکه‌های عصبی ۹۹
۵-۵- ویژگی‌های شبکه عصبی مصنوعی ۱۰۰
۵-۵-۱- قابلیت یادگیری ۱۰۰
۵-۵-۲- قابلیت تعمیم ۱۰۱
۵-۵-۳- مقاوم بودن ۱۰۱
۵-۵-۴- امکان پردازش به طور موازی ۱۰۱
۵-۶- روش نزول گرادیانی ۱۰۲
۵-۷- روش پس انتشار خطا ۱۰۳
۵-۷-۱- فرمول‌بندی روش پس انتشار خطا BP ۱۰۴
۵-۷-۲- ملاحظاتی در مورد الگوریتم BP ۱۰۸
۵-۷-۳- اصلاحاتی در الگوریتم BP ۱۰۹
۵-۷-۴- آموزش گروهی الگوهای آموزشی با ضریب یادگیری متغیر ۱۱۱
۵-۷-۵- شیوه‌های نوین آموزش شبکه ۱۱۲

۵-۸- روش نیوتن ۱۱۲
۵-۹- فرمول‌بندی روش شبه نیوتن (الگوریتم B.F.G.S.) ۱۱۳
۵-۱۰-آموزش شبکه به روش پس انتشار خطای لونبرگ- مارکوارت (L.M) ۱۱۴
۵-۱۰-۱- فرمول‌بندی روش L-M ۱۱۴
۵-۱۱-آموزش شبکه به روش گرادیان مزدوج (C-G) ۱۱۵
۵-۱۱-۱- فرمولاسیون روش گرادیان مزدوج (الگوریتم فلتچر- ریوز) ۱۱۶
۵-۱۲-بررسی برخی مشکلات آموزشی شبکه ها ۱۱۸
۵-۱۲-۱- بروز وضعیت فرا انطباقی ۱۱۸
۵-۱۲-۲- طولانی شدن تعداد دوره‌های آموزشی ۱۱۹
۵-۱۲-۳- آموزش به شبکه با نمونه‌های مطلق ۱۱۹
۵-۱۲-۴- بکارگیری توابع هدف نامناسب ۱۲۰
۵-۱۳- شناسایی سیستم برج تقطیر واکنشی ۱۲۰
۵-۱۴- مراحل شناسایی سیستم با استفاده از شبکه‌های عصبی ۱۲۱
۵-۱۴-۱- تهیه داده‌های تجربی ۱۲۲
۵-۱۴-۲- انتخاب ساختار مدل ۱۲۷
۵-۱۴-۳- تخمین مدل برای مدلسازی و شبیه‌سازی سیستم ۱۲۷
۵-۱۴-۴- سنجش میزان یادگیری و عملکرد شبکه ۱۲۸
۵-۱۴-۴-۱- ضریب همبستگی بین خروجی‌های حقیقی و دلخواه ۱۲۸
۵-۱۴-۴-۲- میانگین خطای نسبی بین خروجی‌های حقیقی و دلخواه ۱۲۹
۵-۱۵- نتایج حاصل از شناسایی سیستم ۱۳۰

فصل ششم : نتیجه‌گیری و ارائه پیشنهادات
۶-۱- پیشنهادات ۱۵۱

ضمائم مقالات پذیرفته شده ۱۵۲
منابع ۱۵۶
چکیده انگلیسی ۱۶۶

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

جدول (۱-۱) برخی سیستمهای مورد توجه در فرایندهای تقطیر واکنشی ۴

جدول (۳-۱) خواص فیزیکی اتیل استات ۳۶

جدول (۳-۲) مقادیر ضرایب ثابت در رابطه HBT..... ۴۲

جدول (۳-۳) مقادیر T_c و ω_{srk} برای اجزاء واکنش استری شدن ۴۲

جدول (۳-۴) ضرایب معادله آنتوان ۴۳

جدول (۳-۵) ضرایب معادله محاسبه ظرفیت گرمایی ویژه در حالت گاز ایده‌آل ۴۴

جدول (۳-۶) مقادیر دمای جوش نرمال و گرمای نهان تبخیر در این دما برای اجزاء واکنش استری شدن..... ۴۴

جدول (۳-۷) مشخصات برج تقطیر واکنشی سینی‌دار برای واکنش استری شدن..... ۴۸

جدول (۳-۸) ترکیب کسر مولی خوراک تزریقی به برج تقطیر واکنشی ۵۹

جدول (۴-۱) ترکیب خوراک ورودی در آزمایش کوماتسو..... ۹۱

جدول (۴-۲) ترکیب نهایی مایع خروجی از هر مرحله در آزمایش کوماتسو ۹۱

جدول (۵-۱) مقایسه ساختارهای مختلف شبکه عصبی برای شناسایی سیستم ۱۳۱

فهرست اشکال

عنوان **صفحه**

شکل (۱-۱) شمایی از فرایند واکنش $A + B \Leftrightarrow C + D$ و تولید محصولات C و D ۵

شکل (۱-۲) شمایی از فرایند واکنش استری شدن $HAc + MtOH \Leftrightarrow MtAc + H_2O$ ۶

شکل (۱-۳) شمایی از برخی کاربردهای متعدد فرایند تقطیر واکنشی ۷

شکل (۱-۴) دو سبک تقطیر واکنشی ۸

شکل (۱-۵) فرایندهای انتقال در تقطیر واکنشی ۱۱

شکل (۲-۱) مراحل مختلف شبیه‌سازی فرایندها ۱۶

شکل (۲-۲) نمایش شماتیک (الف) یک مرحله تعادلی؛ (ب)برج تقطیر چند مرحله‌ای ۱۹

شکل (۲-۳) مدل مرحله تعادلی پیشنهادی دیویس ۲۴

شکل (۲-۴) نمایش یک مرحله غیرتعادلی ۲۷

شکل (۲-۵) نمایش مدل ظرف غیرتعادلی برای برجهای سینی‌دار و آکنده ۳۱

شکل (۲-۶) نمایش جزئیات جریانهای ورودی و خروجی ظرف غیرتعادلی ۳۱

شکل (۲-۷) نمایش مدل یک ظرف غیرتعادلی برای واکنشهای کاتالیستی غیرهمگن ۳۲

شکل (۳-۱) نمایش مراحل در گام نخست برای انتخاب روشهای محاسبه خواص فیزیکی ۳۸

شکل (۳-۲) نمایش نحوه فرایند انتخاب روش محاسبه خواص فیزیکی برای اجزاء قطبی و غیرالکترولیت ۳۹

شکل (۳-۳) نمایش نحوه محاسبات در فاز بخار با مدلهای مختلف ضریب اکتیوتیه ۳۹

شکل (۳-۴) نمودار درختی برای محاسبه انتالپی اجزاء خالص ۴۵

شکل (۳-۵) شمایی از یک برج تقطیر واکنشی سینی دار ۴۹

شکل (۳-۶) مرحله ایده آل تعادلی در تقطیر واکنشی ۵۰

شکل (۳-۷) نمودار تبادل داده‌ها برای یک چگالنده پاره ای ۵۳

شکل (۳-۸) نمودار تبادل داده‌ها برای یک مرحله تعادلی منتخب (سینی خوراک) ۵۴

شکل (۳-۹) نمودار تبادل داده‌ها برای جوش آور ۵۵

شکل (۳-۱۰) نمودار ارتباط داده‌ها بین مراحل مختلف تعادلی ۵۶

شکل (۳-۱۱) فلوچارت الگوریتم حل معادلات دینامیکی برج تقطیر واکنشی ۵۸

شکل (۳-۱۲) ترکیب مایع خروجی از چگالنده ۶۰

شکل (۳-۱۳) ترکیب بخار خروجی از چگالنده ۶۰

شکل (۳-۱۴) ترکیب مایع خروجی از سینی دوم ۶۱

شکل (۳-۱۵) ترکیب بخار خروجی از سینی دوم ۶۱

شکل (۳-۱۶) ترکیب مایع خروجی از سینی سوم ۶۲

شکل (۳-۱۷) ترکیب بخار خروجی از سینی سوم ۶۲

شکل (۳-۱۸) ترکیب مایع خروجی از سینی چهارم ۶۳

شکل (۳-۱۹) ترکیب بخار خروجی از سینی چهارم ۶۳
شکل (۳-۲۰) ترکیب مایع خروجی از سینی پنجم ۶۴
شکل (۳-۲۱) ترکیب بخار خروجی از سینی پنجم ۶۴
شکل (۳-۲۲) ترکیب مایع خروجی از سینی ششم ۶۵
شکل (۳-۲۳) ترکیب بخار خروجی از سینی ششم ۶۵
شکل (۳-۲۴) ترکیب مایع خروجی از سینی هفتم ۶۶
شکل (۳-۲۵) ترکیب بخار خروجی از سینی هفتم ۶۶
شکل (۳-۲۶) ترکیب مایع خروجی از سینی هشتم ۶۷
شکل (۳-۲۷) ترکیب بخار خروجی از سینی هشتم ۶۷
شکل (۳-۲۸) ترکیب مایع خروجی از سینی نهم ۶۸
شکل (۳-۲۹) ترکیب بخار خروجی از سینی نهم ۶۸
شکل (۳-۳۰) ترکیب مایع خروجی از سینی دهم ۶۹
شکل (۳-۳۱) ترکیب بخار خروجی از سینی دهم ۶۹
شکل (۳-۳۲) ترکیب مایع خروجی از سینی یازدهم ۷۰
شکل (۳-۳۳) ترکیب بخار خروجی از سینی یازدهم ۷۰
شکل (۳-۳۴) ترکیب مایع خروجی از سینی دوازدهم ۷۱
شکل (۳-۳۵) ترکیب بخار خروجی از سینی دوازدهم ۷۱
شکل (۳-۳۶) ترکیب مایع خروجی از جوش‌آور ۷۲
شکل (۳-۳۷) ترکیب بخار خروجی از جوش‌آور ۷۲
شکل (۳-۳۸) منحنی سه‌بعدی تغییرات دینامیکی غلظت اسید استیک بر روی هر سینی در فاز مایع ۷۳
شکل (۳-۳۹) منحنی سه‌بعدی تغییرات دینامیکی غلظت اسید استیک بر روی هر سینی در فاز بخار ۷۳
شکل (۳-۴۰) منحنی سه‌بعدی تغییرات دینامیکی غلظت اتانول بر روی هر سینی در فاز مایع ۷۴
شکل (۳-۴۱) منحنی سه‌بعدی تغییرات دینامیکی غلظت اتانول بر روی هر سینی در فاز بخار ۷۴
شکل (۳-۴۲) منحنی سه‌بعدی تغییرات دینامیکی غلظت اتیل استات بر روی هر سینی در فاز مایع ۷۵
شکل (۳-۴۳) منحنی سه‌بعدی تغییرات دینامیکی غلظت اتیل استات بر روی هر سینی در فاز بخار ۷۵
شکل (۳-۴۴) منحنی سه‌بعدی تغییرات دینامیکی غلظت آب بر روی هر سینی در فاز مایع ۷۶
شکل (۳-۴۵) منحنی سه‌بعدی تغییرات دینامیکی غلظت آب بر روی هر سینی در فاز بخار ۷۶
شکل (۳-۴۶) منحنی سه‌بعدی تغییرات دینامیکی دما بر روی هر سینی ۷۷
شکل (۴-۱) اثر جریان برگشتی بر روی میزان خلوص محصول ۷۹
شکل (۴-۲) تأثیر جریان برگشتی بر روی غلظت اتیل استات در چگالنده ۸۰
شکل (۴-۳) تأثیر جریان برگشتی بر روی غلظت اسید استیک در چگالنده ۸۰
شکل (۴-۴) تاثیر سرعت واکنش بر روی غلظت محصول ۸۱

شکل (۴-۵) اثر افزایش گرمای مصرفی جوش‌آور بر خلوص محصول ۸۲
شکل (۴-۶) اثر کاهش گرمای مصرفی جوش‌آور بر خلوص محصول ۸۳
شکل (۴-۷) تغییرات خلوص محصول با گرمای مصرفی جوش‌آور ۸۳
شکل (۴-۸) تغییرات غلظت محصول در سه فشار عملیاتی مختلف ۸۵
شکل (۴-۹) تأثیر افزایش غلظت اسید استیک در خوراک بر روی خلوص محصول ۸۶
شکل (۴-۱۰) تأثیر افزایش غلظت اتانول در خوراک بر روی خلوص محصول ۸۶
شکل (۴-۱۱) تاثیر مقدار موجودی بر روی خلوص اتیل استات در محصول بالای برج ۸۷
شکل (۴-۱۲) تاثیر افزایش دمای خوراک بر روی خلوص اتیل استات در محصول بالای برج ۸۸
شکل (۴-۱۳) مقایسه کسر مولی مواد بر روی هر سینی در فاز مایع حاصل از شبیه‌سازی و آزمایش در برج مورد بررسی لی و داداکوئیچ ۸۹
شکل (۴-۱۴) مقایسه کسر مولی مواد بر روی هر سینی در فاز بخار حاصل از شبیه‌سازی و آزمایش در برج مورد بررسی لی و داداکوئیچ ۹۰
شکل (۴-۱۵) مقایسه پروفایل دما بر روی هر سینی در فاز مایع حاصل از شبیه‌سازی و آزمایش در برج مورد بررسی لی و داداکوئیچ ۹۰
شکل (۴-۱۶) شمایی از برج مورد آزمایش توسط کوماتسو ۹۲
شکل (۴-۱۷) منحنی سه‌بعدی تغییرات دینامیکی غلظت اسید استیک بر روی هر سینی در فاز مایع مربوط به آزمایش کوماتسو ۹۲
شکل (۴-۱۸) منحنی سه‌بعدی تغییرات دینامیکی غلظت اتانول بر روی هر سینی در فاز مایع بر اساس آزمایش کوماتسو ۹۳
شکل (۴-۱۹) منحنی سه‌بعدی تغییرات دینامیکی غلظت اتیل استات بر روی هر سینی در فاز مایع بر اساس آزمایش کوماتسو ۹۳
شکل (۴-۲۰) منحنی سه‌بعدی تغییرات دینامیکی غلظت آب بر روی هر سینی در فاز مایع بر اساس آزمایش کوماتسو ۹۴
شکل (۴-۲۱) مقایسه کسر مولی ترکیبات در فاز مایع حاصل از شبیه‌سازی و آزمایش در برج مورد بررسی کوماتسو ۹۴
شکل (۵-۱) ساختار نرون محاسباتی ۹۸
شکل (۵-۲) سه نمونه از توابع تحریک بکار گرفته شده در شبکه‌های عصبی ۹۹
شکل (۵-۳) ساختار شبکه تک لایه ۹۹
شکل (۵-۴) ساختار شبکه‌های چند لایه پیشرو ۱۰۰
شکل (۵-۵) هدایت به سوی نقاط مینیمم تابع هدف به روش نزول گرادیانی ۱۰۳
شکل (۵-۶) نرون jام از لایه خروجی ۱۰۶
شکل (۵-۷) نرون kام از لایه مخفی l+1 ..... ۱۰۷
شکل (۵-۸) ساختار BP برای یک شبکه سه لایه ۱۰۸
شکل (۵-۹) مراحل شناسایی سیستم با استفاده از شبکه‌های عصبی ۱۲۱

شکل (۵-۱۰) تغییرات شدت واکنش حول نقطه کار برج به عنوان ورودی اول به شبکه عصبی.....۱۲۳
شکل (۵-۱۱) تغییرات شدت خوراک حول نقطه کار برج به عنوان ورودی دوم به شبکه عصبی.....۱۲۳
شکل (۵-۱۲) تغییرات شدت جریان برگشتی حول نقطه کار برج به عنوان ورودی سوم به شبکه عصبی.....۱۲۴
شکل (۵-۱۳) تغییرات گرمای جوش‌آور حول نقطه کار برج به عنوان ورودی چهارم به شبکه عصبی ۱۲۴
شکل (۵-۱۴) تغییرات دمای خوراک حول نقطه کار برج به عنوان ورودی پنجم به شبکه عصبی.....۱۲۵
شکل (۵-۱۵) تغییرات دمای چگالنده حاصل از شبیه سازی، به عنوان خروجی اول از شبکه عصبی.....۱۲۵
شکل (۵-۱۶) تغییرات دمای جوش‌آور حاصل از شبیه سازی، به عنوان خروجی دوم از شبکه عصبی ۱۲۶
شکل (۵-۱۷) تغییرات غلظت اتیل استات در چگالنده حاصل از شبیه سازی، به عنوان خروجی سوم از شبکه عصبی ۱۲۶
شکل (۵-۱۸) تغییرات غلظت اتیل استات در جوش آورحاصل از شبیه سازی، به عنوان خروجی چهارم از شبکه عصبی ۱۲۷
شکل (۵-۱۹) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین غلظت اتیل استات در جوش‌آور برج.....۱۳۲
شکل (۵-۲۰) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین غلظت اتیل استات در چگالنده برج ۱۳۲
شکل (۵-۲۱) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین دمای جوش‌آور برج ۱۳۳
شکل (۵-۲۲) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین دمای چگالنده برج.....۱۳۳
شکل (۵-۲۳) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین غلظت اتیل استات در جوش‌آور برج.....۱۳۴
شکل (۵-۲۴) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین غلظت اتیل استات در چگالنده برج ۱۳۴
شکل (۵-۲۵) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین دمای جوش‌آور برج ۱۳۵
شکل (۵-۲۶) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین دمای چگالنده برج.....۱۳۵
شکل (۵-۲۷) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین غلظت اتیل استات در جوش‌آور برج ۱۳۶
شکل (۵-۲۸) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین غلظت اتیل استات در چگالنده برج.....۱۳۶
شکل (۵-۲۹) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین دمای جوش‌آور برج ۱۳۷
شکل (۵-۳۰) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین دمای چگالنده برج.....۱۳۷
شکل (۵-۳۱) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین غلظت اتیل استات در جوش‌آور برج ۱۳۸

شکل (۵-۳۲) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین غلظت اتیل استات در چگالنده برج ۱۳۸
شکل (۵-۳۳) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین دمای جوش‌آور برج ۱۳۹
شکل (۵-۳۴) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین دمای چگالنده برج ۱۳۹
شکل (۵-۳۵) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین غلظت اتیل استات در جوش‌آور برج ۱۴۰
شکل (۵-۳۶) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین غلظت اتیل استات در چگالنده برج ۱۴۰
شکل (۵-۳۷) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین دمای جوش‌آور برج ۱۴۱
شکل (۵-۳۸) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین دمای چگالنده برج ۱۴۱
شکل (۵-۳۹) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین غلظت اتیل استات در جوش‌آور برج ۱۴۲
شکل (۵-۴۰) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین غلظت اتیل استات در چگالنده برج ۱۴۲
شکل (۵-۴۱) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین دمای جوش‌آور برج ۱۴۳
شکل (۵-۴۲) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین دمای چگالنده برج ۱۴۳
شکل (۵-۴۳) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین غلظت اتیل استات در جوش‌آور برج ۱۴۴
شکل (۵-۴۴) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین غلظت اتیل استات در چگالنده برج ۱۴۴
شکل (۵-۴۵) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین دمای جوش‌آور برج ۱۴۵
شکل (۵-۴۶) میزان یادگیری و عملکرد شبکه در داده‌های آزمایشی برای تعیین دمای چگالنده برج ۱۴۵
شکل (۵-۴۷) خطای نسبی بین نتایج شبیه‌سازی و نتایج شبکه عصبی برای غلظت اتیل‌استات در جوش‌آور با ۸ نرون در لایه میانی ۱۴۶
شکل (۵-۴۸) خطای نسبی بین نتایج شبیه‌سازی و نتایج شبکه عصبی برای غلظت اتیل‌استات در چگالنده با ۸ نرون در لایه میانی ۱۴۷
شکل (۵-۴۹) خطای نسبی بین نتایج شبیه‌سازی و نتایج شبکه عصبی برای دمای جوش‌آور با ۸ نرون در لایه میانی ۱۴۷
شکل (۵-۵۰) خطای نسبی بین نتایج شبیه‌سازی و نتایج شبکه عصبی برای دمای چگالنده با ۸ نرون در لایه میانی ۱۴۸

علائم اختصاری

a : مساحت فصل مشترک (m^2)

c : تعداد واکنشگرها (بدون بعد)

E : شار انرژی (W/m^2)

F : دبی مولی جریان خوراک (mol/s)

f^L : جریان مولی جزء در خوراک مایع ورودی در مدل مرحله غیر تعادلی (mol/s)

f^V : جریان مولی جزء در خوراک بخار ورودی در مدل مرحله غیر تعادلی (mol/s)

H : آنتالپی مولی (J/mol)

h : ضریب انتقال حرارت ($W/m^2.K$)

i : شماره جزء (بدون بعد)

j : شماره مرحله (بدون بعد)

K : ثابت فازی مایع- بخار (بدون بعد)

L : دبی مولی فاز مایع (mol/s)

m : شماره واکنش (بدون بعد)

N : شار انتقال جرم در فصل مشترک ($mol/m^2.s$)

P : فشار (Pa)

Q : شدت انتقال حرارت (J/s)

R : ثابت گازها (J/mol.K)

$R_{m,j}$: شدت واکنش در هر مرحله ($mol/m^3.s$)

r : تعداد واکنشها (بدون بعد)

r^V : نسبت جریان جانبی فاز بخار به جریان فاز بخار (بدون بعد)

r^L : نسبت جریان جانبی فاز مایع به جریان فاز مایع (بدون بعد)

S : دبی مولی جریان جانبی (mol/s)

T : دما (K)

t : زمان (s)

U : موجودی (mol)

V : دبی مولی اجزاء در فاز مایع (بدون بعد)

V_i : حجم مولی مایع جزء i (lit/mol)

x : کسر مولی اجزاء در فاز مایع (بدون بعد)

y : کسر مولی اجزاء در فاز بخار (بدون بعد)

z : کسر مولی اجزاء در خوراک (بدون بعد)

P^{sat} : فشار بخار اشباع (Pa)

P.F : ضریب پوئین تینگ (بدون بعد)

z : ضریب تصحیح تعادل فازی- واکنشی و تبدیل به تعادل شبه فازی (بدون بعد)

S : تعداد نرونها در لایه‌های شبکه (بدون بعد)

R : تعداد ورودیهای شبکه (بدون بعد)

E : تابع هدف برای خطا (بدون بعد)

W_{ij} : وزن‌های اتصالی مابین نرون i ام و j ام شبکه (بدون بعد)

np : تعداد نمونه‌های آموزشی شبکه (بدون بعد)

p : تعداد مراحل آموزشی شبکه (بدون بعد)

f : تابع فعالیت نرون (بدون بعد)

H_p : ماتریس هسین (بدون بعد)

g_p : گرادیان ماتریس وزنهای شبکه (بدون بعد)

J(w) : ماتریس ژاکوبین (بدون بعد)

E(w) : بردار خطای شبکه (بدون بعد)

X_K : بردارهای آموزشی (بدون بعد)

علائم یونانی

α : ضریب ممنتوم (بدون بعد)

γ : ضریب اکتیویته (بدون بعد)

γ : نسبت کارایی شبکه (بدون بعد)

ε : حجم واکنش (m^3)

φ_i : ضریب فوگاسیته جزء i (بدون بعد)

ν : ضریب استوکیومتری (بدون بعد)

μ : پتانسیل شیمیایی (J/mol)

η : مسیر نفوذ (بدون بعد)

η : ضریب یادگیری شبکه (بدون بعد)

$\delta^p_{l,j}$: سیگنال برگشتی جهت تطبیق وزنها (بدون بعد)

η_M : ضریب یادگیری مارکوارت (بدون بعد)

چکیده

طراحی و شبیه‌سازی سیستمهای تقطیرواکنشی بعلت وجود توام واکنش شیمیایی با تعادل فازی پیچیده‌تر از سیستمهای تقطیر معمولی است و اثر متقابل واکنش شیمیایی وتعادل فازی، ترمودینامیک تعادل فازی- واکنشی را می‌طلبد که این نکته تاکید بسیار زیادی بر پیچیدگی این سیستمها دارد.در این رساله مدلسازی و شبیه‌سازی دینامیکی سیستمهای تقطیر واکنشی بر اساس دو روش متفاوت انجام شده است.در ابتدا مدلسازی وشبیه‌سازی فرایند، بر اساس معادلات بنیانی بقای جرم و انرژی انجام گردیده است که پایه‌ای برای شبیه‌سازی دینامیکی برجهای تقطیر واکنشی می‌باشد. سپس نتایج حاصل از شبیه‌سازی مورد بحث و بررسی، و اثرات پارامترهای مهم عملیاتی برج تقطیر واکنشی بر روی عملکرد برج مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است ونتایج حاصل از شبیه‌سازی با نتایج تجربی مقایسه گردیدند که نتایج تجربی توافق خوبی را با نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهند.در ادامه شبیه‌سازی و مدلسازی دینامیکی سیستمهای تقطیر واکنشی با مدل شبکه های عصبی انجام شده است. با توجه به نتایج مطلوب حاصل از شبیه‌سازی مدل مرحله تعادلی، این امکان فراهم شد تا با اخذ اطلاعات مناسب وداده های مورد نیاز، اقدام به شناسایی سیستم مورد بحث با توجه به شبکه های عصبی شود.در این مرحله بعد از تعیین ساختار شبکه مورد نظر و ساختار مدل شناسایی و الگوریتم آموزش شبکه به شناسایی سیستم مورد بحث پرداخته شدکه در نهایت با تغییر پارامترهای موثر شبکه، مناسب‌ترین ساختار برای شناسایی دینامیک سیستم مشخص گردید.در واقع هدف از انجام این کار، استفاده از مدل شناسایی شده توسط شبکه عصبی برای کنترل سیستم می‌باشد.

فصل اول
مقدمه

در سالهای اخیر فرایند تقطیر واکنشی بعنوان جایگزینی قابل توجه در فرایندهای تبدیلی مطرح گردیده است. این فرایند در سیستمهایی که توسط واکنشهای شیمیایی تعادلی و یا تشکیل آزوتروپ محدود می‌شوند، مورد توجه بسزایی قرار گرفته است. افزایش بررسی این فرایند از دیدگاههای مختلف، علاوه بر جنبه علمی آن می‌تواند ناشی از اهمیت تجاری آن باشد. ایده ا ولیه این موضوع به دهه‌های اولیه قرن بیستم برمی گردد[۱]. دلیل استعمال واژه تقطیر کاتالیستی[۱]، استفاده از کاتالیست (همگن[۲] یا غیرهمگن[۳]) برای تسریع واکنش شیمیایی در فرایند مذکور می‌باشد.

نخستین گزارشات در به کارگیری فرایند تقطیر واکنشی به سالهای اول دهه ۲۰ برمی‌گردد. اما اولین مقاله توسط کیز[۴] در سال ۱۹۳۲ به چاپ رسید [۲]. کار وی به واکنش استری شدن اسید استیک با متانول جهت استفاده در صنایع شیمیایی و پتروشیمی اختصاص داشت [۳]. در سالهای اخیر از فرایند مذکور برای تولید ماده MTBE به عنوان عامل ضدضربه[۵] در بنزین به کار رفته است [۴-۶]. همچنین در تولید پلیمرهای تراکمی نظیر تولید Nylon6.6 برجهای تقطیر واکنشی به کار گرفته شده است [۷]. بعلاوه در برخی موارد می‌توان در جداسازی مخلوطهای آزوتروپ با مخلوطهایی با نقطه جوش نزدیک به هم اجزاء نظیر سیستم

1- Catalyst distillation
2- Homogeneous
3- Heterogeneous
4- Keyes
5- Anti-Knock

متا و پارازیلن از فرایند مذکور بهره جست [۸]. غالب مقالات راجع بـه فراینـد تقطیـر واکنـشی بـه فراینـدهای خاص پرداخته‌اند. فهرست برخی از سیستمهای مورد استفاده این فرایند که توسط افراد مختلف مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته‌اند در جدول ۱-۱ ارائه شده است [۹]. همچنین در ضمیمه الـف مراکـز تحقیقـاتی فعـال در زمینه این فرایند و آدرس الکترونیکی برخی محققین ارائه شده است.

با عنایت به مطالب فوق، این امر منجر به توسعه انواع تکنیکها جهت شبیه‌سازی برجهای تقطیر واکنـشی شده است [۱۰-۱۴]. لیکن مسأله طراحی و تجزیه و تحلیل فرایندهای تقطیـر واکنـشی هنـوز مـدون نگردیـده است. غالب مطالعات تحلیلی به مخلوطهای ایده آل چندجزئی مربوط بوده، هر چند در مقالات سالهای اخیـر روشهایی برای مخلوطهای غیر ایده آل نیز پیشنهاد شده است [۴]. در این بخش ابتدا بـه کلیـات فراینـد تقطیـر واکنشی پرداخته و به مزایا و محدودیتهای این فرایند اشاره خواهد شد. در فصول بعدی، مروری بر فعالیتهـای انجـام شـده در زمینـه شـبیه‌سـازی فراینـد تقطیـر واکنـشی صـورت گرفتـه ارائـه مـی‌شـود. در ایـن ارتبـاط، ترمودینامیک فرایند مورد توجه قرار گرفته و سپس اقدام به مدلسازی فراینـد براسـاس معـادلات بنیـانی بقـای جرم و انرژی می‌گردد، که پایه‌ای برای شـبیه‌سـازی دینـامیکی برجهـای تقطیـر واکنـشی اسـت. در فـصلهای مختلف این پایان نامه، نام مختصر RD را به جای نام کامل Reactive Distillation به کار گرفته شده است.

جدول (۱-۱) برخی سیستمهای مورد توجه در فرایندهای تقطیر واکنشی [۹]

$2A \Leftrightarrow B$		
A	***B***	***Refrence***
سیکلوپنتادین	دی سیکلوپنتادین	Robinson and Gilliland (1950)

$A + B \Leftrightarrow 2C$			
A	B	C	***Refrence***
اسید آدیپیک	هگزامتیل دی آمین	نمک	Crosser et al. (1968)
بوتادین	دی اکسیدگوگرد	سولفون بوتادین	A.I.Ch.E. (1970)
اتیلن اکساید	آب	اتیلن گلایکول	Corrigan and Miller
ایزوبوتن	متانول	متیل ترشیابوتیل اتر	Smith et al. (1984)
بنزن	زایلن	تولوئن	Bawa et al. (1975)
انیدریداستیک	آب	اسیداستیک	Costa and Canepa (1969)

$A + B \Leftrightarrow C + D$				
A	***B***	***C***	***D***	***Refrence***
اسید استیک	بوتانل	بوتیل استات	آب	Leyes and Othmer (1945)
اسید استیک	اتانل	اتیل استات	آب	Komatsu and Holland (1977)
اسید استیک	متانول	متیل استات	آب	Corrigan and Ferris (1969)
اسید استیک	وینیل استئارات	استئاریک اسید	وینیل استات	Geelen and Wijffels (1965)
اسید آکریلیک	مونوبوتیل فتالات	دی بوتیل فتالات	آب	Jelinek and Hlavacek (1976)
بوتانل	اتیل استات	اتانل	بوتیل استات	Davies and jeffreys (1973)
بوتانل	مونوبوتیل فتالات	دی بوتیل فتالات	آب	Berman et al. (1948)
اتانل	اسیدلاکتیک	اتیل لاکتات	آب	Keyes (1932)
اسیدفرمیک	اتانل	اتیل فرمات	آب	Rhim et al. (1985)
متازایلن	دی ترشیابوتیل بنزن	ترشیا بوتیل بنزن	ترشیا بوتیل متازایلن	Saito et al. (1971)
متازایلن	ترشیا بوتیل بنزن	ترشیا بوتیل متازایلن	بنزن	Saito et al. (1971)

$A + 2B \Leftrightarrow C + 2D$				
A	***B***	***C***	***D***	***Refrence***
۲،۳ بوتیل گلایکول	اسید استیک	۲،۳ بوتیل گلایکول دی استات	آب	Schniepp et al. (1945)
دی متیل ترفتالات	اتیلن گلایکول	دی گلایکول ترفتالات	متانول	Baratella et al. (1974)