جهت تهیه فایل WORD این مقاله به سایت DaneshResan.com مراجعه نمایید و عنوان مقاله را جستجو کنید
بیش از ۲ میلیون مقاله فارسی در این سایت موجود میباشد

مدلسازی سینتیکی واکنش گوگردزدایی دی بنزوتیوفن توسط الگوریتم ژنتیک

شهره فاطمی
استادیار دانشکده مهندسی شیمی – پردیس دانشکده های فنی - دانشگاه تهران
رامین بزرگمهری
استادیار دانشکده مهندسی شیمی - دانشگاه صنعتی شریف
محمد هاشمی
فارغ التحصیل کارشناسی ارشد مهندسی شیمی – پردیس دانشکده های فنی - دانشگاه تهران

(تاریخ دریافت ۸۲/۱۲/۱۶، تاریخ دریافت روایت اصلاح شده ۸۴/۷/۹، تاریخ تصویب ۸۴/۸/۲۱)

چکیده

امروزه تصفیه گازوییل و نفتای سنگین از ترکیبات گوگردی در صنایع نفت وپالایش به جهت بالابردن کیفیت محصولات و رفع آلودگی زیست محیطی حایز اهمیت است. از آنجایی که برشهای سنگین نفتی دارای ترکیبات سنگین گوگردی از جمله بنزوتیوفن و دی بنزو تیوفن می باشند نیاز است سینتیک واکنش انجام شده مدلسازی شود تا بتوان فرایند گوگرد زدایی(HDS) را در مقیاس نیمه صنعتی و صنعتی شبیه سازی و طراحی کرد.

به این منظوردر مقاله حاضرمدل مناسب سینتیکی برای واکنش گوگردزدایی از خوراک دی بنزو تیوفن بررسی شده و پارامتر های بهینه آن تعیین شده اند. در این تحقیق با کمک الگوریتم های جستجوی تصادفی که یک نوع آن الگوریتم ژنتیک[۱] است این مدلسازی انجام شده است. در مقاله حاضر از میان مدلهای دقیق سینتیکی متداول که معمولا از نوع لانگمیر-هینشلوود[۲] می باشند، شش معادله برای واکنش هیدروژنولیز و چهار معادله برای واکنش هیدروژناسیون انتخاب شده و توسط الگوریتم ژنتیک در برازش با نتایج آزمایشی مرجع [۱] تحلیل شده تا پارامتر های بهینه تعیین شوند. در میان این مدل ها سه مدل با دقت بالاتری برروی نتایج آزمایشی برازش شده است.

همچنین در الگوریتم بکار رفته اثر میزان جهش[۳] بر روی عملکرد بهینه الگوریتم در شرایط ترکیب[۴] کامل بررسی شدو در نهایت ملاحظه شد که در اکثر موارد با ترکیب ۱۰۰٪ و جهش ۵٪ نتایج سریعتر همگرا می شود.

در تحقیق حاضر الگوریتم لونبرگ-مارکوارت[۵] نیز در تحلیل و مقایسه با الگوریتم ژنتیک قرار گرفته است، که نتیجه شد الگوریتم مذکور بر خلاف الگوریتم ژنتیک نسبت به حدس های اولیه حساس است و امکان گرفتار شدن در دام مینیمم نسبی وجود دارد. در نهایت به دلیل عدم حساسیت الگوریتم ژنتیک نسبت به حدس های اولیه، از این الگوریتم در تعیین پارامتر های آرنیوسی ثابت های سرعت و جذب استفاده شده است.

واژه های کلیدی: الگوریتم ژنتیک، سینتیک گوگردزدایی، دی بنزوتیوفن

مقدمه

گوگردزدایی اجزاء و ترکیبات گوگردی نفت خام توسط هیدروژن در فشار بالا یکی از واکنش های اصلی کاتالیستی در صنایع پالایش نفت می باشد. جلوگیری از مسمویت کاتالیستهای واحد رفورمینگ، همچنین ممانعت از آلودگی محیط زیست ضرورت انجام واکنش های گوگردزدایی را دوچندان می سازد. با وجود تحقیقات وسیعی که در زمینه تصفیه نفت خام انجام شده است اما هنوز ابهامات بسیاری در تعیین سینتیک واکنش های گوگردزدایی ترکیبات سنگین گوگردی وجود دارد. تا کنون مدل های مختلفی از واکنش های گوگردزدایی ترکیبات بنزو تیوفن و دی بنزو تیوفن توسط محققین ارائه شده است[۱] [۳] [۴] . بررسی و کنکاش بر روی مدل های سینتیکی واکنش های کاتالیستی چند فازی نیازمند تخمین دقیق تری از پارامترهای سرعت مدل و ثابت های جذب واکنش می باشد.

روشهای متداول که در تعیین پارامتر های بهینه مدل استفاده می شود روشهای برازش غیر خطی از قبیل مارکوارت هستند ، اما ساختار غیر خطی مدل سنتیکی

جهت تهیه فایل WORD این مقاله به سایت DaneshResan.com مراجعه نمایید و عنوان مقاله را جستجو کنید
بیش از ۲ میلیون مقاله فارسی در این سایت موجود میباشد

واکنش های گوگردزدایی بگونه ای است که دارای بیش از یک مقدار مینیمم نسبی بوده و لذا استفاده از این روشها دستیابی به نقاط بهینه مطلق را با مشکل مواجه می کند[۱۴]. امروزه برای حل این گونه مسائل ازالگوریتم های تصادفی استفاده می شود. در میان الگوریتم های مختلف ارائه شده، الگوریتم ژنتیک که ایده آن از سیستم های تکامل طبیعی موجودات زنده (ژن و کروموزوم) برگرفته شده به عنوان روش نوین بهینه سازی مدلهای غیر خطی معرفی شده است[۶]. کاربرد های مختلفی از الگوریتم ژنتیک در برازش مدل های غیر خطی و تعیین پارامتر های بهینه مطرح شده است[۵] [۱۳].

در تحقیق حاضرکاربرد الگوریتم ژنتیک در انتخاب مدل سینتیکی دقیق و تعیین پارامترهای بهینه در واکنش گوگردزدایی خوراک دی بنزوتیوفن در شرایط دما و فشار بالا بررسی شده است. تاثیر پارامترهای الگوریتم ژنتیک از قبیل اندازه جامعه، جهش بر روی عملکرد الگوریتم مورد بررسی قرار گرفته و نتایج حاصل از این روش با نتایج روش مارکوارت مقایسه شده است. در نهایت کاربرد الگوریتم ژنتیک به تنهایی در تعیین پارامتر های ثابت سرعت و جذب بکار گرفته شده است. سرعت و متغیرهای واکنش از داده های آزمایشگاهی مرجع[۱] برداشت شده است. هدف از این تحقیق تأمین الگوریتم مناسبی برای مدلسازی سینتیکی در حیطه مهندسی شیمی است،که از گرفتار شدن در دام مینیمم نسبی و نیز محدودیت در انتخاب حدس های اولیه رهایی یابد.

در ادامه ابتدا شرح مختصری برای الگوریتم های بکار رفته داده می شود و سپس بهینه سازی سینتیکی واکنش گوگردزدایی بطور کامل ارائه می گردد.

الگوریتم مارکوارت

این روش در حقیقت ترکیبی از دو روش Steepest Descent و Gauss-Newton است که از سرعت روش اول به همراه دقت بالای روش دوم در تعیین پارامترهای بهینه توابع غیر خطی استفاده می شود. جزییات الگوریتم استفاده شده در این مقاله به قرار زیر است.

۱- بردار پارامتر های مجهول (

جهت تهیه فایل WORD این مقاله به سایت DaneshResan.com مراجعه نمایید و عنوان مقاله را جستجو کنید
بیش از ۲ میلیون مقاله فارسی در این سایت موجود میباشد

```
ERROR: rangecheck
OFFENDING COMMAND: .buildcmap

STACK:

-dictionary-
/WinCharSetFFFF-V2TT621301FBt
/CMap
-dictionary-
/WinCharSetFFFF-V2TT621301FBt
```