مدل‌سازی و بهینه‌سازی فرآیند آلکیلاسیون با روش پاسخ سطح

سروش مهدی‌زاده، فرهاد شهرکی*، کیانوش رزاقی و میرمحمد خلیلی‌پور

گروه مهندسی شیمی، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران

تاریخ دریافت: ۹۵/۳/۱۰ تاریخ پذیرش: ۹۵/۷/۴

چکیده

در این پژوهش به بهینه‌سازی واحد آلکیلاسیون با هدف حداکثر کردن تولید محصولات، با حفظ کیفیت و شرایط عملیاتی، بر مبنای اطلاعات یک واحد صنعتی پرداخته شده است. متغیرهای ورودی فرآیند آکیلاسیون عموما شامل خوراک‌های ورودی، و متغیرهای خروجی که شامل محصولات (آلکیلیت، نرمال بوتان و پروپان)، مقدار مصرف اسید، عدد اکتان آلکیلیت، مقدار جریان برگشتی ایزوبوتان به راکتور و نسبت ایزوبوتان به اولفین در راکتور است. با استفاده از اطلاعات عملیاتی واحد آلکیلاسیون، مدل ریاضی فرآیند بااستفاده از روش پاسخ سطح به‌دست آمد. این روش در زمینه‌های مختلف از جمله تحقیقات آزمایشگاهی و صنعتی بسیار استفاده شده و نتایج قابل اطمینان ارائه داده است. دقت و صحت مدل‌های ارائه شده به کمک تحلیل واریانس (ANOVA) بررسی شد. پس از بررسی صحت مدل‌های ارائه شده، متغیرهای خروجی فرآیند بر مبنای تغییر در متغیرهای ورودی پیش‌بینی شد. در انتها بهینه‌سازی شرایط عملیاتی فرآیند آلکیلاسیون با روش بهینه‌سازی عددی به کمک نرم‌افزار Design Expert ۷ انجام و ارائه گردید.

کلمات کلیدی: واحد آلکیلاسیون، بهینه‌سازی، روش پاسخ سطح، آلکیلیت، تولید بنزین.

مقدمه

در دو دهه اخیر پیشرفت صنعت و همچنین ایجاد قوانین و محدودیت‌های زیست محیطی، پالایشگاه‌ها و صنایع پتروشیمی را ملزم به تولید بنزین باکیفیت بالا کرده است. بر طبق این قوانین بنزین تولید شده باید حاوی ترکیبات اکسیژن‌دار، عاری از آروماتیک‌ها، فراریت کمتر، و فاقد سولفور و اولفین‌ها باشد [۱]. واحد آلکیلاسیون یکی از واحدهای مهم در پالایشگاه‌های نفت می‌باشد که قابلیت تولید بنزین با این ویژگی‌های ذکر شده را دارد و به نام آلکیلیت شناخته می‌شود. آلکیلیت محصول واکنش ایزوبوتان با اولفین‌های ۳ تا ۵ کربنی در حضور سولفوریک اسید یا هیدروفلوئوریک اسید به عنوان کاتالیزگر می‌باشد. این محصول دارای عدد اکتان بالا بوده و همچنین دوست‌دار محیط زیست می‌باشد [۲]. اهمیت فرآیند آلکیلاسیون در صنعت

*مسؤول مکاتبات
آدرس الکترونیکی khodapanah@sut.ac.ir

نفت سبب شده است تا محققان زیادی به تحقیق بر روی این فرآیند بپردازند به طوری‌که در دهه‌های اخیر یکی از زمینه‌های پژوهشی محققان در صنایع نفتی، بهینه‌سازی فرآیند آلکیلاسیون بوده است.

به‌طور کلی در فرآیندهای شیمیایی بهینه‌سازی به‌منظور افزایش بهره‌وری و سوددهی از یکسو و کاهش مصرف انرژی و مواد اولیه و همچنین کاهش آسیب‌های زیست محیطی از سوی دیگر، دارای جایگاه ویژه‌ای می‌باشد [۳]. از سال‌های گذشته تاکنون تحقیقات گوناگونی در زمینه‌ی ساخت مدل‌های تجربی مختلف و بهینه‌سازی واحدهای آلکیلاسیون ارائه شده‌است. پاین، متغیرهای فرآیند آلکیلاسیون و روابط آن‌ها با یکدیگر را مطرح و بررسی کرد [۴]. در آن پژوهش، تعدادی از این روابط از طریق رگرسیون خطی و غیرخطی توصیف و ارائه شد. ساور، فرآیند آلکیلاسیون را با استفاده از معادلات تجربی و فرض‌های ساده کننده با ۱۰ متغیر، ۷ قید تساوی و یک تابع هدف فرمول‌بندی کرد [۵]. این مدل غیرخطی با یک روش خطی بهینه شد که دقت بالایی نداشت. این مدل توسط بارکن و مک‌کورمیک با تغییراتی همراه شد. قیدها به ۸ قید نامساوی تبدیل و مسئله بهینه‌سازی، با روش (SUM)[1] که دقت بالایی داشت حل شد [۶]. فرآیند آلکیلاسیون توسط دمبو به گونه‌ای دیگر فرمول‌بندی شد [۷]. این مدل شامل ۷ متغیرغیرخطی، ۱۲ قید غیرخطی نامساوی و ۲ قید خطی مساوی بود. فرآیند آلکیلاسیون توسط او با هدف بهبود بخشیدن عدد اکتان بهینه شد. رانگا، فرآیند آلکیلاسیون را به صورت چند هدفه با استفاده از روش ε-constraint بهینه کرد [۳]. فرآیند آلکیلاسیون توسط نوربرتو و همکارانش با هدف افزایش سوددهی و کاهش صدمات زیست محیطی به‌طور همزمان بهینه شد [۸]. بهینه‌سازی این فرآیند با هدف حداقل کردن جریان برگشتی ایزوبوتان توسط پترو انجام گردید [۹]. با مروری بر پژوهش‌های انجام شده، می‌توان دریافت که روش‌های بهینه‌سازی همواره درحال بهبود وگسترش می‌باشند. یکی از روش‌هایی که امروزه مقبولیت زیادی در بین محققان در زمینه‌های صنایع نفت، پالایش و پتروشیمی، کاتالیست، مواد و صنایع غذایی برخوردار است، روش پاسخ سطح (RSM)[2] می‌باشد. روش پاسخ سطح مجموعه‌ای از روش‌های ریاضی و آماری است که برای توسعه‌ی مدل فرآیند و بهینه‌سازی پاسخ‌هایی (متغیرهای خروجی) که توسط تعدادی متغیر ورودی تحت تاثیر است استفاده می‌شود [۱۰]. این روش توسط جورج باکس و ویلسون در سال ۱۹۵۱ برای اولین بار معرفی شد و با گذشت زمان گسترش و بهبود یافته است. در طی سال‌های اخیر توجه ویژه‌ای به این روش توسط محققان شده است. نوشادی و همکارانش به بهینه‌سازی فرآیند پیوسته تولید بیودیزل از ضایعات روغن آشپزی در برج تقطیر همراه با واکنش و با کاتالیزگر هتروپولیک اسید پرداختند. در این پژوهش طراحی آزمایش با استفاده از روش پاسخ سطح بر پایه طراحی مرکب مرکزی انجام شد و تجزیه و تحلیل ۴ متغیر عملیاتی شامل شدت جریان کلی خوراک، دمای خوراک، توان جوش‌آور و نسبت متانول/ روغن مورد مطالعه قرار گرفت. در پژوهشی دیگر، الفقی و امین، تاثیر تعاملی متغیرهای واکنش بر درصد ترکیبات و عدد اکتان محصول رفرمیت در واحد رفرمینگ کاتالیستی نفتا را با استفاده از روش پاسخ سطح بررسی کردند. همچنین آدزامیک و همکارانش واکنش ایزومریزاسیون نرمال هگزان در حضور کاتالیزگر زیرکونیوم سولفات را با استفاده از روش پاسخ سطح مطالعه کردند. آتشی و همکارانش تاثیر شرایط فرآیند مانند دما، فشار و نسبت H_2/CO بر انتخاب‌پذیری محصول فیشر- تروپش را با استفاده از مدل آماری براساس اطلاعات آزمایشگاهی مورد مطالعه قرار دادند. همچنین از روش پاسخ

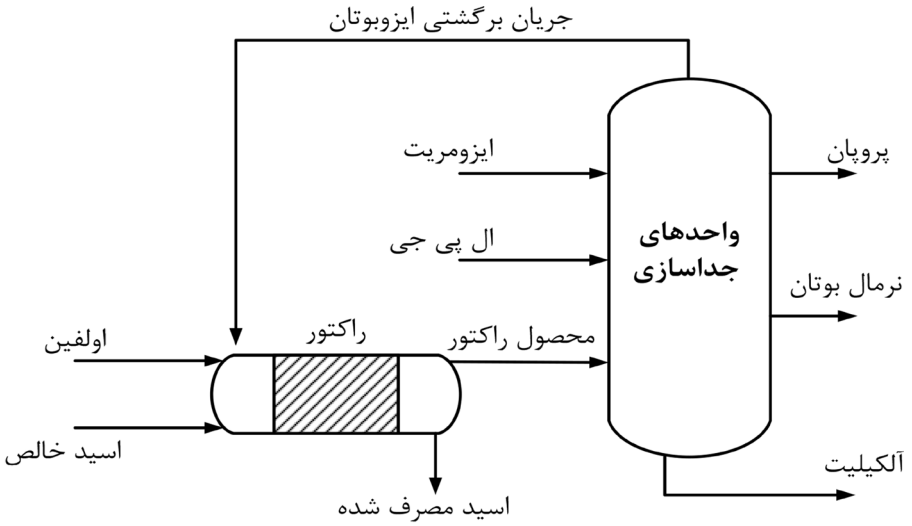
1. Sequential Unconstrained Minimization
2. Response Surface Methodology (RSM)

سطح، برای بررسی تاثیر این شرایط عملیاتی بر انتخاب‌پذیری متان، آلکان‌ها و آلکن‌ها استفاده شد. بهینه‌سازی فرآیند آلکیلاسیون به‌طور موردی با استفاده از روش پاسخ سطح انجام نشده است، اما پژوهش‌های صورت گرفته در فرآیندهای شیمیایی مختلف خود دلیلی مبنی بر مناسب بودن این روش در بهینه‌سازی فرآیند آلکیلاسیون بود.

دراین تحقیق ابتدا به ارائه مدل ریاضی فرآیند آلکیلاسیون پالایشگاه آبادان از طریق آنالیز رگرسیون غیرخطی برروی داده‌های صنعتی واحد پرداخته می‌شود. از آنجایی که مدل‌سازی این فرآیند برروی داده‌های واقعی تاکنون انجام نشده‌است مدل حاضر دارای برتری‌های مشخصی از نقطه نظر مورد مطالعه خود دارا می‌باشد. این داده‌ها در طی یک دوره مشخص عملیاتی اندازه‌گیری شده است. در مرحله بعد با داشتن مدل ریاضی، بهینه‌سازی فرآیند در جهت مشخص کردن بهترین شرایط عملیاتی با استفاده از روش پاسخ سطح انجام شد. با توجه به کارایی بالای این روش و اطلاعات موجود از واحد، بهینه‌سازی واحد آلکیلاسیون با استفاده از روش پاسخ سطح مناسب و عملی است.

فرآیند آلکیلاسیون

وظیفه اصلی واحد آلکیلاسیون تولید بنزین با عدد اکتان بالا و کیفیت مطلوب است. نمایی از فرآیند آلکیلاسیون در شکل ۱ نشان داده شده است. همان‌گونه که از این شکل قابل مشاهده است، خوراک‌های ورودی به راکتور در این فرآیند شامل جریان‌های اولفین و ایزوبوتان برگشتی است. خوراک اولفین بیشتر شامل آلکن‌های ۴ کربنی، ایزوبوتان و نرمال بوتان است. اسید سولفوریک نیز به عنوان کاتالیزور وارد راکتور می‌شود و پس از حضور در واکنش گرمازا بین اولفین‌ها و ایزوبوتان توسط تجهیزات جداکننده از جریان هیدروکربن‌های محصول جدا می‌شود [۳]. هیدروکربن‌های خروجی از راکتور با خوراک ایزومریت (ایزوبوتان و نرمال بوتان) و ال‌پی‌جی (نرمال بوتان و پروپان) وارد بخش جداسازی می‌شوند. محصولات اصلی فرآیند که در بخش جداسازی تفکیک می‌شوند شامل آلکیلیت، نرمال بوتان، پروپان و ایزوبوتان برای جریان برگشتی به راکتورها است. در این تحقیق، متغیرهای ورودی شامل خوراک‌های اولفین، ایزومریت و ال‌پی‌جی بوده و متغیرهای خروجی (پاسخ‌ها) شامل محصولات (آلکیلیت، نرمال بوتان و پروپان)، عدد اکتان بنزین، مقدار مصرف اسید سولفوریک، نسبت ایزوبوتان به اولفین در راکتور و مقدار جریان برگشتی ایزوبوتان به راکتور است.



شکل ۱ نمایی ساده از فرآیند آلکیلاسیون.

متغیرهای خروجی فرآیند آلکیلاسیون از لحاظ اهمیت باهم تفاوت دارند. یکی از مهم‌ترین متغیرها نسبت ایزوبوتان به اولفین در راکتورها است. کم بودن نسبت ایزوبوتان به اولفین باعث پلیمریزاسیون شده که نتیجه آن کاهش کیفیت بنزین می‌باشد [۱۵]. بالا بودن این نسب در راکتور باعث تولید محصولی باکیفیت‌تر می‌شود، اما چون مقدار ایزوبوتان موجود در راکتور زیاد می‌شود، باعث کاهش مقدار تولید محصول می‌شود. بنابراین باتوجه به استانداردهای واحد در پالایشگاه این نسب بین ۸ تا ۱۱ می‌باشد که به عنوان یک قید در بهینه‌سازی در نظر گرفته می‌شود. متغیر مهم دیگر در فرآیند آلکیلاسیون مقدار جریان برگشتی ایزوبوتان به راکتور می‌باشد. زیاد بودن مقدار جریان برگشتی باعث افزایش هزینه‌ها از جمله هزینه پمپ کردن می‌شود. بنابراین مقدار این جریان باید به نحوی حداقل گردد که نسبت ایزوبوتان به اولفین در محدوده‌ی عملیاتی ثابت نگه‌داشته شود [۹]. مدل فرآیند رابطه‌ی بین متغیرهای ورودی و خروجی فرآیند را بیان می‌کند. با در اختیار داشتن اطلاعات عملیاتی واحد در طول یک دوره مشخص می‌توان مدل واحد را بدست آورده و از آن در جهت توصیف روابط بین متغیرهای ورودی و خروجی استفاده کرد. هدف اصلی در فرآیندهای شیمیایی حداکثر نمودن تولید، با حفظ کیفیت محصولات می‌باشد، بنابراین ارزیابی شرایط عملیاتی واحد آلکیلاسیون را براساس حداکثر کردن تولید محصولات باکیفیت بالا انجام شد.

روش کار

روش پاسخ سطح مجموعه‌ای از روش‌های آماری و ریاضی است که برای تجزیه و تحلیل نتایج تجربی کاربرد دارد [۱۶]. این روش در طراحی، بهبود و فرمول‌بندی محصولات جدید نیز بسیار کاربردی است. گسترده‌ترین کاربرد روش پاسخ سطح در زمینه‌های صنعتی است. از روش پاسخ سطح در شرایطی که متغیرهای ورودی زیادی به عملکرد و ویژگی‌های کیفیت محصول (پاسخ‌ها) در فرآیند تاثیر دارند، استفاده می‌شود. وابستگی یک پاسخ به ورودی‌ها به صورت معادله ۱ است [۱۷].

$$Y = f(X_1, X_2, ..., X_k) + \varepsilon \qquad (۱)$$

در معادله بالا Y پاسخ، X ها متغیرهای ورودی و تابع خطا است.

توصیف کامل یک فرآیند نیازمند مدل کردن آن به صورت تابع چند جمله‌ای عموما درجه ۲ یا بالاتر است. مدل درجه ۲ برای فرآیندهای صنعتی مناسب است و دارای نقاط قوت زیر می‌باشد [۱۷]:

- مدل درجه دوم بسیار انعطاف‌پذیر است و معمولا عملکردی مناسب در تقریب صحیح از پاسخ دارد.
- تخمین زدن عامل‌های (B) در مدل درجه دوم آسان‌تر است.
- آزمایش‌ها و تجربیات زیادی عملکرد مناسب مدل درجه دوم را برای توصیف رفتار پاسخ مناسب بیان می‌کنند.

با توجه به مزیت‌های مدل درجه ۲ و همچنین عملیاتی بودن اطلاعات، بنابراین از این نوع مدل برای بررسی تاثیر متغیرهای ورودی بر متغیرهای خروجی در فرآیند آلکیلاسیون استفاده شد. در واقع از آن‌جایی که شرایط عملیاتی ممکن است با تغییرات غیر اصولی همراه باشد مدل درجه ۲ غیرخطی قابلیت توصیف آن را دارد. مدل چند جمله‌ای درجه ۲ را می‌توان به شکل رابطه ۲ در نظر گرفت:

$$\eta = \beta_0 + \sum_{j=1}^{k} \beta_j \chi_j + \sum_{j=1}^{k} \beta_{jj} \chi_j^2 + \sum_{i} \sum_{<j=2}^{k} \beta_{ij} \chi_i \chi_j + e_i \qquad (۲)$$

در این معادله η پاسخ، χ_i و χ_j متغیرهای مستقل، β_0 عدد ثابت و β_j ، β_{jj} و β_{ij} به ترتیب ضرایب جملات خطی، درجه ۲ و برهم‌کنش هستند. هم به‌عنوان خطا در نظر گرفته می‌شود [۱۱].

با استفاده از تحلیل واریانس[1] (ANOVA)، مدل‌های ارائه شده برای پاسخ‌ها مورد ارزیابی قرار گرفت و

1. Analyze of Variance

ضرایب رگرسیون برای جمله‌های خطی، برهم‌کنش و درجه ۲ تخمین زده شد و با استفاده از ضریب همگرایی (R^2) کیفیت برازش معادله مدل‌ها بیان شد. ضریب تعیین یا برازش یکی از آزمون‌های مورد استفاده در تجزیه و تحلیل واریانس برای شناسایی مدل برتر است [۱۷]. محققان برای سنجش دقت مدل خود از R^2_{adj} استفاده می‌کنند. ضریب برازش R^2_{adj} حالت اصلاح شده‌ی ضریب تعیین R^2 است و همواره با افزایش عامل‌ها به مدل افزایش نمی‌یابد. درواقع اگر عامل‌های غیر ضروری به مدل افزوده شود کاهش می‌یابد. محاسبه‌ی ضرایب تعیین با روابط ۳ و ۴ بیان می‌گردد.

$$R^2 = 1 - \frac{SS_E}{SS_T} \quad (۳)$$

$$R^2_{adj} = 1 - \frac{n-1}{n-p}(1-R^2) \quad (۴)$$

در این معادلات P تعداد عامل‌های مدل و n تعداد آزمایش‌ها می‌باشد.

از لحاظ آماری مدلی مناسب است که دارای بیشترین مقدار ضریب برازش باشد. البته باید توجه داشت که این شرط لازم است ولی به تنهایی جهت تشخیص دقت مدل کافی نیست. از لحاظ آماری نیز معنی‌دار بودن مدل‌ها با مقدار P و مقدار F بررسی شد. مقدار F ابا مجذور ارزش T معادل است. در واقع بزرگتر بودن این عامل نشان دهنده اعتبار بیشتر مدل است. این عامل از طریق معادلات ۵ تا ۷ محاسبه می‌شود [۱۷].

$$F_0 = \frac{MS_R}{MS_E} \quad (۵)$$

$$MS_R = \frac{SS_R}{P-1} \quad (۶)$$

$$MS_E = \frac{SS_E}{n-P} \quad (۷)$$

در معادلات بالا SS_R مجموع مربعات رگرسیون و SS_E مجموع مربعات خطا می‌باشند که به ترتیب ازطریق معادلات ۸ و ۹ محاسبه می‌شوند.

$$SS_R = \sum(\hat{Y}_i - \overline{Y}_i)^2 \quad (۸)$$ (مجموع مربعات رگرسیون)

$$SS_E = \sum(Y_i - \hat{Y}_i)^2 \quad (۹)$$ (مجموع مربعات خطا)

در معادلات بالا Y_i مقدار پاسخ، $\overline{Y}_i$ میانگین پاسخ‌ها و $\hat{Y}_i$ مقدار پاسخ حاصل از مدل رگرسیون است.

مقدار ارزش P در واقع معنادار بودن مدل و همچنین اثربخشی عامل‌ها در مدل را بیان می‌کند [۱۷]. بدین منظور ابتدا باید مقدار P تعیین شود و سپس با مقدار α مقایسه شود. مقدار P زمانی بیان کننده دقت مناسب مدل است که از α کمتر باشد و مقدار α معمولا برابر با ۰/۰۵ می‌باشد. بنابراین زمانی که P کمتر از ۰/۰۵ باشد مدل معنادار است. هم چنین مقدار P و مقدار F برای هریک از عوامل نشان دهنده تاثیر آنها در مدل است.

نتایج و بحث

اطلاعات شرایط عملیاتی واحد آلکیلاسیون پالایشگاه آبادان در جدول ۱ ارائه می‌گردد. این اطلاعات برای یک دوره ۳۶ روزه بوده که توسط سیستم‌های پالایشگاهی که در زمان داده‌گیری کالیبره بوده است؛ اندازه‌گیری گردید. بنابراین در این پژوهش نیازی به استفاده از روش‌های طراحی آزمایش نبوده است. این اطلاعات در قسمت Historical data نرم‌افزار دیزاین‌اکسپرت وارد شده و علت نوسان زیاد در بعضی جریان‌ها از کار افتادن واحد و راه‌اندازی مجدد آن در طی این دوره زمانی بوده است. مقدار جریان‌ها در این جدول برحسب کیلوگرم بر ساعت است و پس از تحلیل و بررسی‌های انجام شده بر روی داده‌های این واحد مدل ریاضی پاسخ‌ها با رگرسیون درجه۲ تعیین گردید. همچنین دقت و قابل قبول بودن مدل‌های رگرسیون با استفاده از تحلیل واریانس بررسی شد.

نتایج تحلیل واریانس مدل درجه دوم محصول آلکیلیت در جدول ۲ ارائه می‌گردد. ضریب همگرایی (R^2) این مدل، ۹۶/۸۴٪ و مقدار F برابر ۱۲۰/۲ گزارش گردید که نشان دهنده معنادار بودن مدل رگرسیون می‌باشد.

جدول ۱ اطلاعات فرایندی واحد آلکیلاسیون.

شماره داده	اولفین (A)	ال‌پی‌جی (B)	ایزومریت (C)	آلکیلیت	ایزوبوتان/اولفین	عدد اکتان	ایزوبوتان برگشتی	نرمال بوتان	پروپان	اسید سولفوریک
۱	۱۲۰۰۱	۱۶۰۰۰	۲۴۴۲۶	۱۶۷۶۳	۱۲/۰۳	۹۶/۱	۸۸۵۴۲	۲۷۸۲۲	۲۳۸۱	۱۲۵۰
۲	۱۲۰۰۰	۱۶۰۰۱	۲۵۳۳۴	۱۶۷۸۴	۱۱/۶	۹۶/۲	۸۶۲۰۷	۲۸۱۲۹	۲۳۴۹	۱۲۵۰
۳	۱۰۷۱۴	۱۶۰۰۱	۲۴۳۹۵	۱۵۶۶۶	۱۳/۶	۹۶/۲	۸۹۹۳۴	۲۶۸۹۱	۲۱۱۶	۱۱۹۱
۴	۸۶۹۷	۱۸۰۱۱	۲۴۰۶۴	۱۲۳۸۸	۱۵/۱	۹۶/۱	۸۰۶۸۰	۲۷۹۴۹	۲۳۳۶	۱۱۴۳
۵	۹۲۶۹	۱۹۹۹۹	۲۵۳۱۶	۱۲۹۳۴	۱۳/۴	۹۵/۷	۷۶۰۸۷	۳۰۶۶۳	۲۶۷۰	۱۱۲۳
۶	۱۱۵۲۷	۲۵۰۰۰	۲۳۶۴۶	۱۵۹۴۹	۱۱/۳	۹۵/۷	۷۹۱۳۰	۳۷۲۷۲	۲۸۷۰	۱۱۶۸
۷	۱۱۹۹۹	۲۴۰۱۶	۲۳۳۶۲	۱۶۶۶۶	۱۱/۹	۹۶/۲	۸۱۹۴۹	۳۴۷۸۸	۲۴۳۷	۱۰۰۰
۸	۱۲۰۰۰	۲۲۸۰۲	۲۵۳۰۹	۱۶۷۸۹	۱۰/۸	۹۶	۷۷۹۹۶	۳۳۴۴۰	۲۶۹۵	۱۰۶۴
۹	۱۱۸۲۳	۱۹۲۱۴	۲۴۳۵۱	۱۷۰۶۸	۱۰/۹	۹۵/۸	۷۷۹۸۳	۳۱۳۰۳	۲۰۸۶	۱۰۹۷
۱۰	۱۲۰۰۰	۱۷۹۹۶	۲۴۰۰۳	۱۷۳۴۷	۱۰/۹	۹۵/۹	۸۷۰۱۳	۲۸۲۸۶	۱۹۳۵	۱۱۰۰
۱۱	۱۲۰۰۱	۱۶۱۸۴	۲۵۰۶۶	۱۶۸۸۴	۱۱	۹۵/۹	۸۰۶۱۷	۲۶۷۸۰	۲۳۷۳	۱۱۵۶
۱۲	۹۹۷۵	۱۵۷۶۶	۲۴۳۵۸	۱۳۰۶۸	۱۳/۳	۹۶/۵	۷۹۹۸۷	۲۸۵۰۳	۲۵۸۷	۱۳۲۷
۱۳	۸۷۱۹	۱۵۰۰۳	۲۷۰۸۶	۱۰۹۹۱	۱۶	۹۶/۲	۸۲۲۲۱	۲۵۴۶۳	۱۹۲۴	۱۰۷۳
۱۴	۱۱۸۴۴	۱۴۹۹۸	۲۵۵۸۷	۱۶۷۶۲	۱۱/۹	۹۵/۵	۸۴۱۶۰	۲۸۰۴۶	۲۱۲۲	۱۳۱۶
۱۵	۱۲۰۰۱	۱۵۰۰۱	۲۵۲۰۹	۱۶۷۴۱	۱۱/۸	۹۵/۷	۸۴۳۵۳	۲۸۴۳۲	۱۹۹۶	۱۳۷۰
۱۶	۱۱۱۹۲	۱۵۰۰۳	۲۵۷۴۹	۱۵۶۵۱	۱۲/۶	۹۵/۷	۷۹۷۴۳	۲۹۳۷۲	۲۰۳۵	۱۳۹۱
۱۷	۷۳۶۹	۱۵۰۰۰	۲۸۱۵۷	۱۰۴۶۴	۱۶/۱	۹۵/۷	۶۰۱۷۱	۲۸۹۰۸	۱۷۲۷	۱۳۲۰
۱۸	۱۱۸۸۳	۱۴۹۹۹	۲۷۶۱۱	۱۶۱۵۱	۱۱/۶	۹۶/۱	۸۴۷۱۸	۳۳۷۴۶	۲۳۲۴	۱۴۳۸
۱۹	۱۱۹۴۸	۱۵۰۰۲	۲۷۰۸۶	۱۶۴۶۹	۱۱/۸	۹۵/۹	۸۷۱۴۶	۲۹۰۵۰	۲۳۲۳	۱۲۹۲
۲۰	۱۲۰۰۰	۱۶۱۱۸	۲۸۰۳۸	۱۶۶۴۳	۱۱/۶	۹۵/۵	۹۰۳۸۴	۳۱۰۴۶	۱۹۴۸	۱۳۰۰
۲۱	۱۲۰۰۰	۱۷۶۴۴	۲۶۴۴۶	۱۶۴۵۴	۱۲/۷	۹۵/۸	۹۴۷۰۸	۳۳۰۶۳	۲۰۰۷	۱۳۰۰
۲۲	۱۲۰۰۰	۱۸۰۰۵	۳۰۳۴۴	۱۶۴۵۰	۱۱/۹	۹۵/۹	۹۱۶۲۸	۳۳۵۳۶	۲۰۹۲	۱۳۶۱
۲۳	۱۱۹۹۹	۱۸۰۰۳	۳۱۴۲۵	۱۶۴۴۸	۱۲/۵	۹۵/۷	۹۰۰۰۹	۳۶۶۱۷	۲۲۸۰	۱۳۷۸
۲۴	۶۷۹۸	۱۸۰۰۱	۳۹۴۹۸	۱۱۸۲۶	۱۷/۹	۹۴/۲	۲۸۰۷۵	۳۴۸۸۶	۲۲۶۳	۱۰۷۸
۲۵	۱۱۳۰۵	۱۸۰۰۶	۳۲۷۶۳	۱۵۰۸۴	۱۲/۸	۹۶/۱	۸۸۲۴۲	۳۷۷۷۷	۲۳۹۵	۱۱۵۰
۲۶	۱۱۸۵۷	۱۸۰۰۱	۳۴۶۶۱	۱۶۳۸۷	۱۲/۶	۹۶	۸۵۱۸۸	۳۸۵۵۹	۱۹۹۲	۱۱۸۲
۲۷	۱۲۰۰۱	۱۹۸۶۲	۳۴۷۰۲	۱۶۳۸۱	۱۲/۳	۹۵/۹	۸۴۹۹۶	۴۲۸۱۱	۲۲۱۴	۱۱۵۲
۲۸	۷۱۹۴	۲۶۳۸۸	۳۰۱۰۹	۹۵۷۹	۱۱/۵	۹۲/۹	۵۴۹۷۰	۴۱۱۹۶	۴۴۹۰	۱۷۴۳
۲۹	۱۲۰۰۰	۲۷۰۰۰	۳۱۷۰۳	۱۷۱۶۷	۱۱/۷	۹۵/۸	۹۰۸۰۳	۴۴۷۲۲	۳۷۵۳	۱۱۸۱
۳۰	۱۲۰۰۰	۲۶۹۷۷	۳۳۵۹۱	۱۶۹۶۳	۱۰/۸	۹۵/۹	۹۹۳۴۳	۴۳۴۲۵	۴۰۱۱	۱۰۸۸
۳۱	۱۲۰۰۱	۲۷۰۰۱	۲۸۱۲۹	۱۷۳۰۸	۹/۸۸	۹۵/۸	۹۵۴۲۴	۴۲۶۰۵	۳۵۲۶	۹۳۵
۳۲	۱۱۹۹۰	۲۴۹۷۶	۳۸۵۸۰	۱۷۴۴۸	۱۰/۵	۹۵/۸	۱۰۸۹۹	۴۷۰۹۵	۳۵۵۱	۱۰۳۱
۳۳	۱۱۸۷۱	۱۸۰۸۱	۳۸۰۸۴	۱۶۸۰۵	۱۳/۵	۹۵/۵	۱۰۱۱۰	۴۲۳۹۵	۲۶۰۲	۱۴۳۵
۳۴	۱۱۹۹۶	۱۹۷۹۹	۳۷۲۰۸	۱۶۶۳۷	۱۲/۴	۹۶/۲	۹۹۳۲۴	۴۱۷۸۸	۲۶۹۷	۱۴۵۰
۳۵	۱۱۸۵۱	۲۱۸۳۹	۳۵۸۰۳	۱۶۵۵۳	۱۲/۲	۹۶/۱	۹۲۹۹۶	۴۱۲۱۷	۲۸۶۰	۱۲۰۳
۳۶	۱۱۵۲۶	۲۱۹۹۹	۲۶۷۴۴	۱۶۲۵۸	۱۲/۵	۹۶/۱	۹۱۳۱۴	۳۶۷۳۰	۲۵۴۵	۱۱۵۶

* مقدار جریان‌ها در این جدول برحسب کیلوگرم بر ساعت هستند.

جدول ۲ جدول تحلیل واریانس برای مدل آلکیلیت.

منبع	مجموع مربعات	درجه آزادی	متوسط مجموع مربعات	مقدار F	مقدار P
مدل	۱۵۳۵۲۷۸۰۸	۹	۱۷۰۵۸۶۴۵	۱۲۰/۰۲	<۰/۰۰۱
جمله‌های خطی	۷۵۶۸۵۱۶۸	۳	۲۵۲۲۸۳۸۹	۱۷۷/۷۷	۰/۰۰۱>
A-Olefin	۶۷۰۶۸۳۱۷	۱	۶۷۰۶۸۳۱۷	۴۷۲/۰۶	۰/۰۰۱ >
B-LPG	۴۷۷۷۹	۱	۴۷۷۷۹	۰/۳۴	۰/۵۶۷
C-ISO	۱۱۶۲۴۹۰	۱	۱۱۶۲۴۹۰	۸/۱۹	۰/۰۰۸
جمله‌های درجه دوم	۱۳۷۳۸۵۵	۳	۴۵۷۹۵۲	۳/۲۳	۰/۰۳۹
A^2	۱۷۶۴۳۶	۱	۱۷۶۴۳۶	۱/۲۴	۰/۲۷۵
B^2	۱۲۴۳۰۱	۱	۱۲۴۳۰۱	۰/۸۸	۰/۳۵۸
C^2	۷۴۴۹۸۱	۱	۷۴۴۹۸۱	۵/۲۵	۰/۰۳۰
جمله‌های برهم‌کنش	۱۶۷۲۱۵۸	۳	۵۵۷۳۸۶	۳/۹۳	۰/۰۱۹
AB	۵۱۸۹۴۸	۱	۵۱۸۹۴۸	۳/۶۶	۰/۰۶۷
AC	۱۰۷۸۱۸۸	۱	۱۰۷۸۱۸۸	۷/۶	۰/۰۱۱
BC	۵۶۸۸۳۸	۱	۵۶۸۸۳۸	۴/۰۱	۰/۰۵۶
باقیمانده	۳۶۸۹۷۷۷	۲۶	۱۴۱۹۱۵		

در این مدل جمله‌هایی که مقدار p آنها کوچکتر از ۰/۰۵ است در مدل رگرسیون اهمیت بیشتری دارند. با توجه به جدول ۲ جمله‌های خطی (A) و (C)؛ جمله‌ی درجه دوم (C^2) و جمله‌های برهم‌کنش (A.C) و (B.C) برای مدل آلکیلیت بااهمیت هستند. بنابراین جمله خطی (B)؛ جمله‌های درجه دوم (B^2)، (A^2) و جمله برهم‌کنش (A.C) کم‌اهمیت هستند. جمله‌های خطی با اهمیت‌ترین، سپس جمله‌های برهم‌کنش و در آخر جمله‌های درجه ۲ با اهمیت هستند. همچنین تولید آلکیلیت با مقدار اولفین ورودی به راکتور رابطه مستقیم دارد. اولفین در واقع یکی از واکنش دهنده‌های تولید محصول آلکیلیت است و بنابراین تاثیر مثبت آن قابل انتظار است. تاثیر مثبت جریان اولفین به صورت خطی در مدل مشاهده شد. مدل ارائه شده برای آلکیلیت در معادله ۱۰ به‌خوبی نشان دهنده این موضوع است.

$$\text{Alkylate} = 1542.5814 + 2.47545\,A - 0.20511\,B - 0.36669\,C + 1.079E-05\,C^2 - 3.69E-05\,A\times C + 8.055E-06\,B\times C \quad (۱۰)$$

جدول ۳ مربوط به نتایج تحلیل واریانس برای نسبت ایزوبوتان به اولفین در راکتور است. همان‌طور که در این جدول نشان داده شد، مدل رگرسیون با ضریب همگرایی (R^2 ٪۹۱/۱۱) و به خوبی منعکس کننده پاسخ است. مقدار بالای F و کم بودن مقدار P نیز معنادار بودن مدل رگرسیون را نشان داد. در این مدل می‌توان دریافت که جمله‌های خطی (C)، (B)، (A) و جمله‌های برهم‌کنش (A.B) و (B.C) برروی مدل تاثیرگذار هستند. همچنین جمله‌های درجه دوم (C^2)، (B^2)، (A^2) و جمله برهم‌کنش (A.C) کم اهمیت هستند. از جهت اهمیت ابتدا جمله‌های خطی سپس برهم‌کنش و در آخر درجه دوم قرار دارد. با توجه به مدل حاصل برای پاسخ نسبت ایزوبوتان به اولفین، از آن‌جایی که درصد قابل توجهی از خوراک ایزومریت را ایزوبوتان تشکیل داده است؛ این عامل تاثیر مثبت در مقدار این نسبت دارد. این تاثیر مثبت به صورت جمله خطی در مدل، (معادله ۱۱) ظاهر می‌گردد.

$$IC_4/O = 12.6649 + 1.448E-04\,A - 2.95E-04\,B + 5.707E-04\,C - 1.15E-07\,A^2 + 7.077E-08\,A\times B - 2.37E-08\,B\times C \quad (۱۱)$$

جدول ۳ جدول تحلیل واریانس برای مدل نسبت ایزوبوتان به اولفین، عدد اکتان، ایزوبوتان برگشتی.

	ایزوبوتان/اولفین		عدد اکتان		ایزوبوتان برگشتی	
عامل‌ها	مقدار F	مقدار P	مقدار F	مقدار P	مقدار F	مقدار P
جمله‌های خطی	۸۳/۳۴	۰/۰۰۱ >	۶۲/۰۶	۰/۰۰۱ >	۵۸/۱۴	۰/۰۰۱>
A- Olefin	۴۶/۳۶	۰/۰۰۱ >	۱۲۲/۹۴	۰/۰۰۱ >	۱۲۳/۸	۰/۰۰۱ >
B-LPG	۹۲/۳۴	۰/۰۰۱ >	۵۸/۷۳	۰/۰۰۱ >	۰/۴۱	۰/۵۲۹
C-Iso	۷/۰۱	۰/۰۱۴	۳/۴۴	۰/۰۷۵	۱/۴۳	۰/۲۴۳
جمله‌های درجه ۲	۲/۴	۰/۰۹۱	۵/۰۶	۰/۰۰۷	۰/۸۸	۰/۴۶۴
A^2	۳/۵۴	۰/۰۷۱	۵/۹۵	۰/۰۲۲	۱/۹۴	۰/۱۷۵
B^2	۰/۷۹	۰/۳۸۲	۴/۸۲	۰/۰۳۷	۰/۵۴	۰/۴۷۱
C^2	۰/۲	۰/۶۵۹	۰/۰۳	۰/۸۶۳	۰/۲۸	۰/۶۰۲
جمله‌های برهم‌کنش	۱۳/۲۸	۰/۰۰۱ >	۲۷/۸۶	۰/۰۰۱ >	۰/۱۲	۰/۰۰۱ >
AB	۲۵/۵۲	۰/۰۰۱ >	۸۱/۳	۰/۰۰۱ >	۰/۴۲	۰/۵۲۲
AC	۰/۶۸	۰/۴۱۶	۱/۳۵	۰/۲۵۶	۱۸/۹۷	۰/۰۰۱ >
BC	۶/۷۳	۰/۰۱۸	۱/۰۳	۰/۳۱۹	۱/۵	۰/۲۳۲
	R_{adj}=٪۹۱/۱۱		R_{adj}=٪۸۱		R_{adj}=٪۸۷/۷۵	
	F_{reg}=۸۴/۴۰		F_{reg}=۲۹		F_{reg}=۲۸/۸۵	

در جدول ۳ نتایج تحلیل واریانس برای عدد اکتان مشاهده می‌گردد. مقدار ضریب همگرایی (R^2) برابر ٪۸۷/۸۱ حاکی از مناسب بودن مدل است. مقدار F برابر ۲۹ نیز معنادار بودن مدل را بیان می‌کند. جمله‌های خطی (A) و (B)، جمله‌های درجه دوم (A^2)، (B^2) و جمله برهم‌کنش (A.B) در این مدل با اهمیت هستند. همچنین جمله خطی (C)، درجه دوم (C^2) و جمله‌های برهم‌کنش (A.C) و (B.C) بی‌اهمیت هستند. در این مدل جمله‌های (A) و (B) نقش و اهمیت بالاتری نسبت به جمله‌های مربوط به (C) دارند. همچنین از نظر اهمیت به ترتیب جمله‌های خطی، درجه دوم و برهم‌کنش در اولویت هستند. مدل پاسخ عدد اکتان که با معادله ۱۲ ارائه می‌شود، تحت تاثیر مستقیم مقدار جریان اولفین است. در واقع هرچه مقدار جریان اولفین بیشتر شود تاثیر مستقیم بر کیفیت و عدد اکتان آلکیلیت دارد. با توجه به مدل ارائه شده، اثر اولفین به صورت خطی بوده و جمله‌های برهم کنش (AB) و (AC) در مدل وجود دارد.

$$\text{Octane number} = 99.2727 + 4.552E-04\,A - 3.6E-04\,B - 1.27E-04\,C - 7.91E-08\,A^2 - 6.19E-09\,B^2 + 5.24E-08\,A\times B + 9.844E-09\,A\times C \quad (۱۲)$$

جدول ۳ نتایج تحلیل واریانس ایزوبوتان برگشتی به راکتور ارائه می‌دهد. با توجه به ضریب همگرایی (R^2 ٪۸۷/۷۵) و مقدار F برابر با ۲۵/۸۵ مدل رگرسیون منعکس کننده پاسخ‌ها بوده و معنادار است. طبق جدول ۴ فقط جمله خطی (A) و جمله برهم‌کنش (A.C) با اهمیت هستند. جمله‌های دیگر مدل رگرسیون که شامل جمله‌های خطی (B) و (C)، جمله‌های درجه دوم (C^2)، (B^2)، (A^2) و جمله‌های برهم‌کنش (A.B) و (B.C) تاثیر کمتری دارند. با توجه به این نتایج جمله‌های خطی و برهم‌کنش اهمیت بالاتری نسبت به جمله‌های درجه دوم دارند. مقدار ایزوبوتان برگشتی تحت تاثیر جریان‌های اولفین و ایزومریت است. جریان خوراک ایزومریت بر مقدار جریان برگشتی ایزوبوتان به راکتورها تاثیر مستقیم دارد.

جدول ۴ جدول نتایج بهینه‌سازی فرآیند آلکیلاسیون.

پاسخ	هدف	شرایط بهینه
آلکیلیت (kg/h)	بیشینه	۶/۱۶۲۶۲
نسبت ایزوبوتان به اولفین	۸ تا ۱۱	۸۶۸۴/۱۰
عدد اکتان	بیشینه	۶۹۳۲/۹۵
ایزوبوتان برگشتی (kg/h)	کمینه	۱/۹۰۶۰۴
نرمال بوتان (kg/h)	بیشینه	۷/۴۳۸۹۸
پروپان (kg/h)	بیشینه	۷۱/۳۸۹۳
سولفوریک اسید (kg/h)	کمینه	۸۴/۱۱۴۰
عامل‌ها		
اولفین (kg/h)	در محدوده	۱۱۶۰۳/۶
ال‌پی‌جی (kg/h)	در محدوده	۲۷۰۰۰/۹
ایزومریت (kg/h)	در محدوده	۳۳۰۱۸/۵۴

این تاثیر به علت وجود درصد قابل توجهی از ایزوبوتان در جریان خوراک ایزومریت است. تاثیر مستقیم این خوراک به صورت جمله‌های خطی و برهم‌کنش (AC) در مدل وجود دارد که توسط رابطه ۱۳ بیان می‌گردد.

$$iC_4 = 3.21E-05 - 16.9452\,A - 3.0485\,B - 10.4021\,C + 7.79E-04\,A\times C + 1.081E-04\,B\times C \quad (۱۳)$$

نتایج حاصل از تجزیه و تحلیل واریانس برای جریان محصول نرمال بوتان واحد آلکیلاسیون در جدول ۵ ارائه شده است. طبق این نتایج، با ضریب همگرایی (R^2) برابر ۹۴/۸۶٪ و مقدار F برابر ۷۲/۷۶ مدل رگرسیون مناسب بوده و معنادار است. طبق این مدل تمام جمله‌های درجه اول، جمله درجه دوم (B^2) و جمله‌های برهم‌کنش (A.C) و (B.C) در مدل تاثیرگذارند. همچنین جمله‌های درجه دوم (C^2)، (A^2) و جمله‌ی برهم‌کنش (A.B) بی‌اهمیت هستند. با اهمیت‌ترین جمله‌ها ابتدا جمله خطی، سپس جمله برهم‌کنش و در آخر جمله‌های درجه دوم هستند. مقدار دبی خوراک ال‌پی‌جی با توجه به وجود نرمال بوتان در خود، بیشترین تاثیر را در مدل حاصل برای جریان نرمال بوتان دارا می‌باشد. مدل حاصل برای این پاسخ که با رابطه ۱۴ بیان می‌شود، به خوبی بیان کننده این مطلب است که اثر مستقیم این خوراک به صورت جمله‌های خطی و درجه دوم است.

$$nC_4 = 9144.33 - 2.357\,A + 0.5313\,B + 0.6846\,C + 4.437E-05\,B^2 + 1.024E-04\,A\times C - 5.1E-05\,B\times C \quad (۱۴)$$

جدول شماره ۴ نتایج واریانس برای محصول پروپان را ارائه می‌دهد. طبق این اطلاعات مدل رگرسیون با (R^2 ٪۹۱/۴۸) به خوبی با پاسخ‌ها متناسب است. مقدار F نیز برابر ۴۲/۷۵ است که معنادار بودن مدل را بیان می‌کند. با توجه با این نتایج جمله‌های خطی (B) و (C)، جمله‌ی درجه دوم (B^2) و جمله‌های برهم‌کنش (A.B) و (B.C) در مدل رگرسیون تاثیرگذار هستند. در این مدل جمله خطی (B)، جمله‌های درجه دوم (C^2)، (A^2) و جمله برهم‌کنش (A.C) نیز بی‌اهمیت‌اند. جمله‌های خطی سپس

جدول ۵ جدول تحلیل واریانس برای مدل نرمال بوتان، پروپان، اسید سولفوریک.

	نرمال بوتان		پروپان		اسید سولفوریک	
عامل‌ها	مقدار F	مقدار P	مقدار F	مقدار P	مقدار F	مقدار P
جمله‌های خطی	۳۳/۴۶	۰/۰۰۱ >	۷۷/۲۱	۰/۰۰۱ >	۱/۷	۰/۱۹۲
A- Olefin	۱۳/۶۳	۰/۰۰۱ >	۲/۹۷	۰/۰۹۷	۰/۲۷	۰/۶۰۹
B-LPG	۷۶/۱۷	۰/۰۰۱ >	۲۲۸/۸۴	۰/۰۰۱ >	۲/۰۹	۰/۱۶۱
C-ISO	۳۱/۸۳	۰/۰۰۱ >	۶/۹۵	۰/۰۱۴	۰/۰۸	۰/۷۷۹
جمله‌های درجه ۲	۱/۶۲	۰/۲۰۹	۶/۷۵	۰/۰۰۲	۶/۹	۰/۰۰۲
A^2	۰/۱۵	۰/۷۰۶	۲/۸۵	۰/۱۰۴	۰/۲۱	۰/۶۵۱
B^2	۴/۱۱	۰/۰۵۳	۱۸/۶۷	۰/۰۰۱ >	۱۳/۹۱	۰/۰۰۱ >
C^2	۰/۰۱	۰/۹۳۹	۱/۱	۰/۳۰۳	۱/۳۳	۰/۲۶
جمله‌های برهم‌کنش	۳/۷۷	۰/۰۲۳	۱۴/۸۱	۰/۰۰۱ >	۵/۱۱	۰/۰۰۷
AB	۳/۱۴	۰/۰۸۸	۳۲/۵۹	۰/۰۰۱ >	۱/۲۷	۰/۲۷
AC	۴/۹۹	۰/۰۳۴	۰/۰۴	۰/۸۳۵	۴/۵۸	۰/۰۴۲
BC	۷/۲۳	۰/۰۱۲	۵/۶۸		۱۴/۱۶	۰/۰۰۱ >
	R_{adj}=٪۹۴/۸۶		R_{adj}=٪۹۱/۴۸		R_{adj}=٪۸۶/۱۳	
	F_{reg}=۷۲/۷۶		F_{reg}=۴۲/۷۵		F_{reg}=۱۲/۸۱	

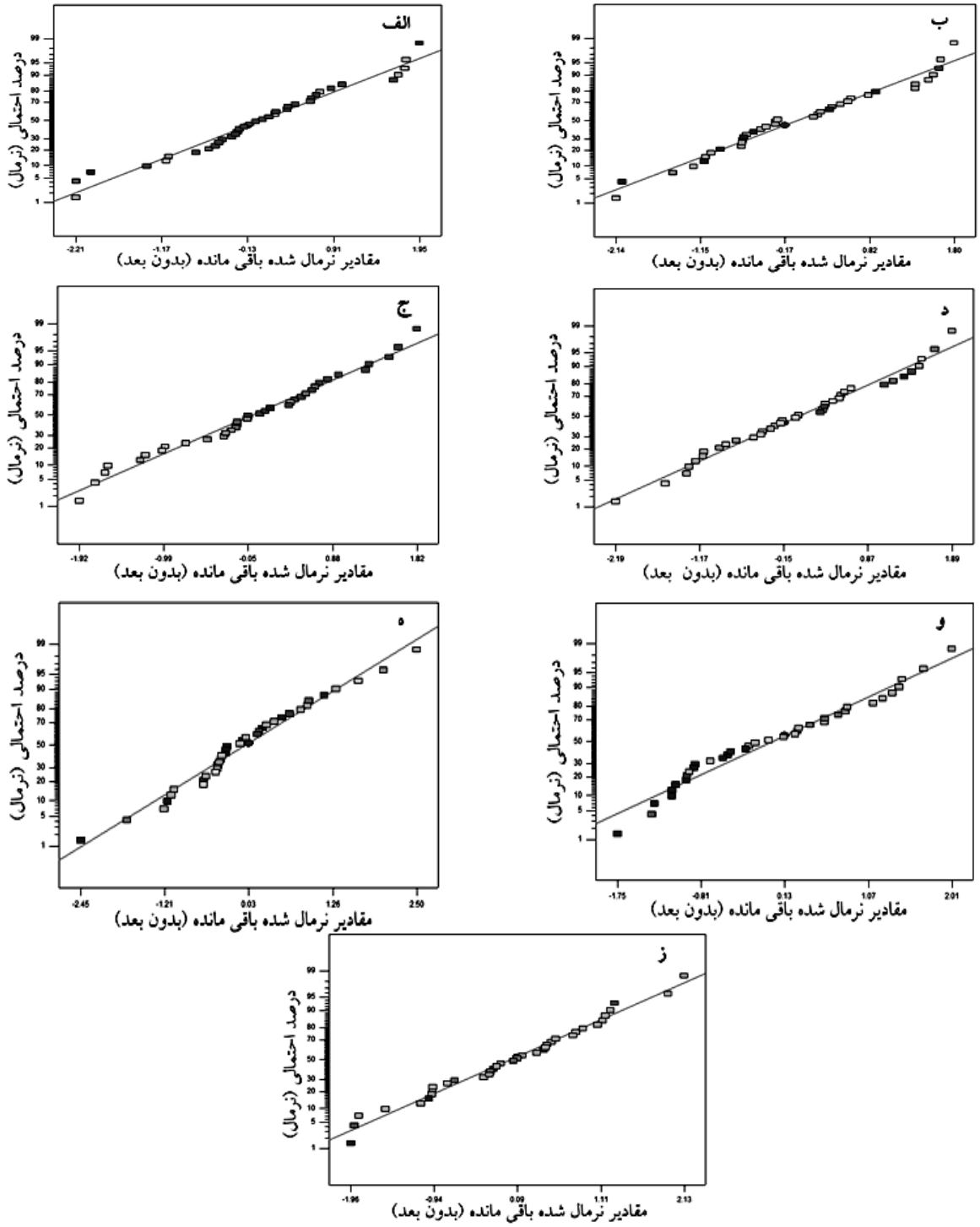
برهم‌کنش و در آخر درجه دوم به ترتیب با اهمیت هستند. با توجه به وجود پروپان در جریان خوراک ال‌پی‌جی، این محصول بیشتر تحت تاثیر مقدار جریان خوراک ال‌پی‌جی ورودی به فرآیند است. این تاثیر مستقیم به به‌صورت جمله‌های درجه دوم و برهم‌کنش (BC) در مدل رابطه ۱۵ ظاهر می‌شود. تایج ارائه شده برای مدل پروپان به‌خوبی تاثیر خوراک ال‌پی‌جی را بر محصول پروپان بیان می‌کند.

$$C_3 = -1492.14 + 1.4192\,A - 0.2821\,B - 0.1102\,C - 4.72E\text{-}05\,A^2 + 1.261E-05\,B^2 - 2.78E-05\,A\times B + 6.955E\text{-}06\,B\times C \quad (۱۴)$$

نتایج تحلیل واریانس کاتالیزور اسید سولفوریک در جدول ۴ ارائه شده است. مدل رگرسیون این پاسخ دارای ضریب همگرایی R^2 برابر با ٪۷۵/۷۷ و مقدار F برابر با ۱۲/۸۱ است. با وجود اینکه دقت این مدل رگرسیون نسبت به مدل‌های دیگر کمتر است با این حال مدل معنادار محسوب می‌شود. در این مدل جمله درجه دوم (B^2) و جمله‌های برهم‌کنش (A.C) و (B.C) تاثیرگذار هستند. جمله‌های دیگر که شامل همه جمله‌های خطی، جمله‌های درجه دوم (C^2)، (A^2) و جمله برهم‌کنش (A.B) جملات بی‌اهمیت محسوب می‌شوند. با توجه به مدل ارائه شده در رابطه ۱۶ ابتدا جمله‌های برهم‌کنش، سپس درجه دوم و در آخر جمله‌های خطی با اهمیت‌تر هستند. مصرف اسید به عنوان کاتالیزور طبق الگوی خاصی نیست و به عوامل زیادی بستگی دارد. مدل ارائه شده برای این پاسخ به خوبی بیان کننده این مورد است.

$$Acid = 96.9815 + 0.1389\,A + 0.0628\,B - 7.66E\text{-}03\,C + 4.42E\text{-}06\,B^2 - 1.72E-05\,A\times B + 6.089E\text{-}06\,A\times C - 2.44E\text{-}06\,B\times C \quad (۱۶)$$

مدل‌هایی که برای فرآیند آلکیلاسیون به‌دست آمد برای پیش‌بینی مقادیر پاسخ‌ها در محدوده تغییرات متغیرهای ورودی قابل استفاده است. میانگین ضرایب برازش برای پاسخ‌های مختلف در حدود ۰/۹ بوده که با توجه به صنعتی و واقعی بودن اطلاعات فرآیندی طبیعی است. ضمن اینکه در بعضی مقالات، مدل با ضریب برازش در حدود ۰/۷۸ نیز معتبر اعلام شده است [۱۸]. همچنین طبق گزارش نرم‌افزار این مدل‌ها به‌خوبی منعکس کننده پاسخ‌ها بوده‌اند. شکل۲ شامل نمودارهای احتمال نرمال- خطای پاسخ ها بوده است.



شکل ۲ نمودار احتمال نرمال- خطای پاسخ‌ها برای مدل: (الف) مقدار آلکیلیت، (ب) نسبت ایزوبوتان به اولفین، (ج) عدد اکتان، (د) جریان ایزوبوتان برگشتی، (ه) جریان نرمال بوتان، (و) جریان پروپان، (ز) مقدار اسید سولفوریک مصرفی.

در این نمودار، پاسخ‌ها ($Y_{(i)}$) در مقابل تابع نرمال استاندار کوانتیل[1] ($\phi^{-1}(c_i)$) رسم می‌شود و نشان دهنده نحوه پراکنده شدن خطاها است. خطاها اختلاف بین مقادیر واقعی و مقادیر پیش‌بینی شده پاسخ‌ها توسط مدل هستند. توزیع مناسب و نرمال نقاط اطراف خط راست نشان دهنده توزیع مناسب خطاها هستند. با توجه به این نمودارها از آنجایی که خطاها به صورت نرمال پراکنده شده‌اند، مدل‌ها معنادار بوده و پاسخ‌های پیش‌بینی شده با اطلاعات واقعی سازگاری دارد.

بهینه‌سازی

بهینه‌سازی فرآیندهای صنعتی به دلیل تاثیر مستقیم بر روی کیفیت محصول و شرایط اقتصادی فرآیند از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. در خلال بهینه‌سازی می‌توان هر پاسخ را به طور جداگانه بهینه کرد اما انتخاب شرایط بهینه فقط برای یک پاسخ، ممکن است اثر منفی بر پاسخ یا پاسخ‌های دیگر داشته باشد [۱۸]. با استفاده از بهینه‌سازی عددی شرایط بهینه برای ۷ متغیر پاسخ در محدوده متغیرهای مستقل انجام شد که نتایج حاصل از آن در جدول ۵ ارائه می‌شود. در این روش عامل‌هایی که در سودآوری واحد تاثیر مثبت دارند بیشینه و هم‌زمان عامل‌هایی که تاثیر منفی دارند کمینه می‌شوند. بنابراین توابع هدف و قیدها به‌گونه‌ای تعیین شده‌اند که سودآوری واحد حداکثر شود. در واقع در این پژوهش هدف به حداکثر رساندن یک تابع هدف ریالی نبوده، بلکه با بشینه و کمینه کردن عامل‌های مثبت و منفی به طور هم‌زمان سودآوری واحد حداکثر شد. بهینه‌سازی با استفاده از بخش بهینه‌سازی عددی در نرم‌افزار دیزاین اکسپرت انجام شد. این روش بهینه‌سازی در بسیاری از پژوهش‌های دیگر انجام شده و نتایج معتبری دارا می‌باشد. در جدول ۵ بیشینه مقدار محصولات به نحوی محاسبه شده است که مقادیر اولفین، ال پی جی و ایزومریت در محدوده عملیاتی خود قرار داشته باشند. همچنین در بهینه‌سازی انجام شده همزمان با بیشینه شدن مقدار محصولات ایزوبوتان برگشتی و مصرف اسید سولفوریک کمینه شده است. از آن جایی که بهینه‌سازی انجام شده بر مینای اطلاعات صنعتی و بر روی مدل پاسخ سطح با درصد اطمینان ۹۹٪ به‌دست آمده است؛ این بهینه‌سازی در این واحد قابلیت اجرایی شدن را دارا است.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش تاثیر متغیرهای ورودی بر متغیرهای خروجی در فرآیند آلکیلاسیون با استفاده از روش پاسخ سطح مطالعه شد. با توجه به ضریب همگرایی برازش (R^2) برای همه مدل‌ها و با استفاده از تحلیل واریانس، مدل ریاضی چند جمله‌ای درجه دوم ارائه شده برای توصیف رفتار پاسخ‌ها در مقابل تغییرات متغیرهای ورودی مناسب است. یکی دیگر از نتایج این مطالعه بهینه‌سازی هم زمان پاسخ‌ها در فرآیند آلکیلاسیون به کمک روش پاسخ سطح می‌باشد. طبق نتایج حاصل از بهینه‌سازی، متغیرهای ورودی و خروجی (پاسخ‌ها) در شرایط مناسب عملیاتی قرار گرفته‌اند. باتوجه به این نتایج، مقدار محصول آلکیلیت ۱۶۲۶۲/۶ kg/h، نسبت ایزوبوتان به اولفین در راکتور ۱۰/۸۶۸۴، عدد اکتان ۹۵/۶۹۳۲، مقدار جریان ایزوبوتان برگشتی ۹۰۶۰۴/۱ kg/h، مقدار جریان نرمال بوتان ۴۳۸۹۸/۷ kg/h، مقدار جریان پروپان ۳۸۹۳/۷۱ kg/h و مقدار جریان سولفوریک اسید ۱۱۴۰/۸۴ kg/h است. مقدار جریان برگشتی ایزوبوتان به راکتور با حفظ محدوده مناسب برای نسبت ایزوبوتان به اولفین در راکتور، حداقل شد که باعث کاهش هزینه‌ها از جمله هزینه پمپ کردن آن می‌شود. همچنین محصول آلکیلیت با عدد اکتان بالای ۹۵ و محصولات دیگر حاضر در فرآیند حداکثر شد. واضح است که با حداکثر شدن تولید این محصولات با حفظ شرایط عملیاتی واحد آلکیلاسیون و کیفیت آن‌ها نتایج

1. Standard Normal Quantile Function

بهینه‌سازی حاضر منجر به حداکثر شدن سودآوری در واحد می‌شود.

علائم و نشانه‌ها

A: مقدار جریان اولفین

B: مقدار جریان ال‌پی‌جی

C: مقدار جریان ایزومریت

n: تعداد آزمایش‌ها

P: تعداد عامل‌های مدل

e_i: خطا در مدل پاسخ سطح

R^2: ضریب تعیین مدل

β_0: عدد ثابت در مدل پاسخ سطح

β_i: ضریب خطی در مدل پاسخ سطح

β_{ii}: ضریب درجه دوم در مدل پاسخ سطح

β_{ij}: ضریب برهمکنش در مدل پاسخ سطح

η: تابع پاسخ در روش پاسخ سطح

ϕ_i: تابع نرمال استاندار کوانتیل

مراجع

[1]. Sun W., Shi Y., Chen J., Xi z. and Zhao L., "*Alkylation kinetics of isobutane by C_4 olefins using sulfuric acid as catalyst*",Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 52, pp. 15262-15269, 2013.

[2]. Albright L. F., "*Alkylation of isobutane with C_3-C_5 olefins to produce high-quality gasoline: Physicochemical sequence of events*", Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 42, pp. 4283-4289, 2003.

[3]. Rangaiah G. P., "*Multi-objective optimization: techniques and applications in chemical engineering*", Vol. 1, worlds scientific Inc., 2009.

[4]. Payne R. E., "*Alkylation - what you should* know *about this process*", Petroleum Refiner, Vol. 37, pp. 316-329, 1958.

[5]. Sauer R. N., Colville A. R. and Burwick C. W., "*Computer points way to more profits*", Hydrocarbon Processing, Vol. 84, 1964.

[6]. Bracken J. and McCormick G. P., "*Selected applications of nonlinear programming*", Research Analysis Corp Mclean va, 1968.

[7]. Dembo R. S., "*A set of geometrie programming test problems and theirsolutions*", Math.Program., Vol. 10, PP. 192-213, 1976.

[8]. Torres F., José M., García N. and Antonio J., "*Isobutane alkylation process synthesis by means of hybrid simulation-multiobjective optimization*", Proceedings of the 24th European Symposium on Computer Aided Process Engineering, Budapest, Hungary, 2014.

[9]. Dragnea P. and Bîldea C. S., "*Process optimization of a butane-butene alkylation plant*", U.P.B. Sci. Bull., Vol. 76, ISSN. 1454 – 2331, 2014.

[10]. Ahmad Rasyid M. F., Salim H. M. Akil. and Ishak Z. A. M., "*Optimization of processing conditions via response surfacemethodology (RSM) of nonwoven flax fibre reinforced acrodurbiocomposites*", 5th International Conference on Recent Advances in Materials, Minerals and Environment(RAMM) & 2nd International Postgraduate Conference on Materials, Mineral and Polymer(MAMIP), Universiti Sains Malaysia, PP. 469 – 476, 2016.

[11]. Noshadi I., Amin N. A. S. and Parnas R. S., "*Continuous production of biodiesel from waste cooking oil in a reactive distillation column catalyzed by solid heteropolyacid: optimization using response surface methodology*

(RSM)", Fuel., Vol. 94, pp. 156-164, 2012.

[12]. Elfghi F. M. and Amin N. A. S., "*Applying response surface methodology to assess the combined effect of process variables on the composition and octane number of reformat in the process of reducing aromatization activity in catalytic naphtha reforming*", React. Kinet. Mech. Cat., Vol. 111, pp. 89-106, 2014.

[13]. Adzamic Z., Adzamic T., Muzic M. and Bionda K. S., "*Optimization of the n-hexane isomerization process using response surface methodology*", Chemical Engineering Research and Design, Vol. 91, No. 1, pp. 100–105, 2013.

[14]. Atashi H., Razmjooei, S., Khorashadizadeh, M., Shiva, M., Tabrizi, F. F., and Mousavi, S. A. H. S., "*Effects of operating conditions on selectivity of Fe–Co–Mn/MgO at high temperature CO hydrogenation*", Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers, Vol. 54, pp. 83-90, 2015.

[15]. HolbrookD. L., "*Handbook of petroleum refining processes*", Meyers RA. (Eds), McGraw Hill Inc., 1996.

[16]. Han H. Z., Li B. X., Wu H. and Shao W., "*Multi-objective shape optimization of double pipe heat exchanger with inner corrugated tube using RSM method*", Int. J. Therm. Sci., Vol. 90, PP. 173-186, 2015.

[17]. Montgomery D. C., and Myers R. H., "*Response surface methodology: process and product optimization using designed experiments*", Raymond H. Meyers and Douglas C. Montgomery, A Wiley-Interscience Publications, 1995.

[18] Šumić Z., Vakula A., Tepić A., Čakarević J., Vitas J. and Pavlić B., "*Modeling and optimization of red currants vacuum drying process by response surface methodology (RSM)*", Food Chem., Vol. 203, PP. 465-475, 2016.