

UOT 547.291:66.095.3.001.57

**MODELLƏŞDİRMƏ, OPTİMALLAŞDIRMA VƏ AVTOMATLAŞDIRMA ÜÇÜN
ALQORİTM VƏ PROQRAM TƏMİNATININ METANOLUN METAN TURŞUSUNA
HETEROGEN-KATALİTİK OKSIDLƏŞMƏSİ PROSESİ MİSALINDA İŞLƏNİB
HAZIRLANMASI**

Ü.Ə.Əliyeva

AMEA-nın M.F.Nagiyev adına Kimya Problemləri İnstitutu

AZ 1143 Bakı, H.Cavid pr., 29; e-mail: itpcht@lan.ab.az

Azərbaycan Dövlət Neft Akademiyası

AZ 1010 Bakı, Azadlıq pr., 20; e-mail: aulka@rambler.ru

İşdə avtomatlaşdırılmış kimya texnoloji qurğuların fəaliyyəti üçün proqram təminatının işlənilib hazırlanması və təcrübənin planlaşma üsulu ilə proseslərin tədqiqi məsələlərinə baxılmışdır. Pd tərkibli seolit katalizator üzərində metanolun metan turşusuna oksidləşməsi prosesi tədqiq olunmuş, prosesin regressiya modeli qurulmuşdur.

Açar sözlər: optimal planlaşdırma, modelləşdirmə, avtomatlaşdırma, regressiya tənliyi, metan turşusu

Avtomatlaşdırma və elektron hesablama maşınlarının tətbiqi ilə tədqiqatların optimal təşkili yeni kimya texnoloji proseslərin işlənilib hazırlanmasını asanlaşdırır və sürətləndirir.

Bu istiqamətlərdən biri fərdi kompüterlərin (FK) əsasında ölçmə məlumatlarının avtomatlaşdırılmış emalı və təcrübə qurğunun real zaman miqyasında FK komandaları ilə birbaşa rəqəmli idarə edilməsi ilə bağlıdır [1]. Digər istiqamət üçün isə optimal kompozisiya planlarından istifadə etməklə fəal təcrübə planlaşdırma üsulunun tətbiqi xarakterikdir. Bu üsulların əsasında son vaxtlar hesablama tədqiqatları üçün bir sıra proqram və proqram kompleksləri yaradılıb və öz tətbiqini tapmışdır [2].

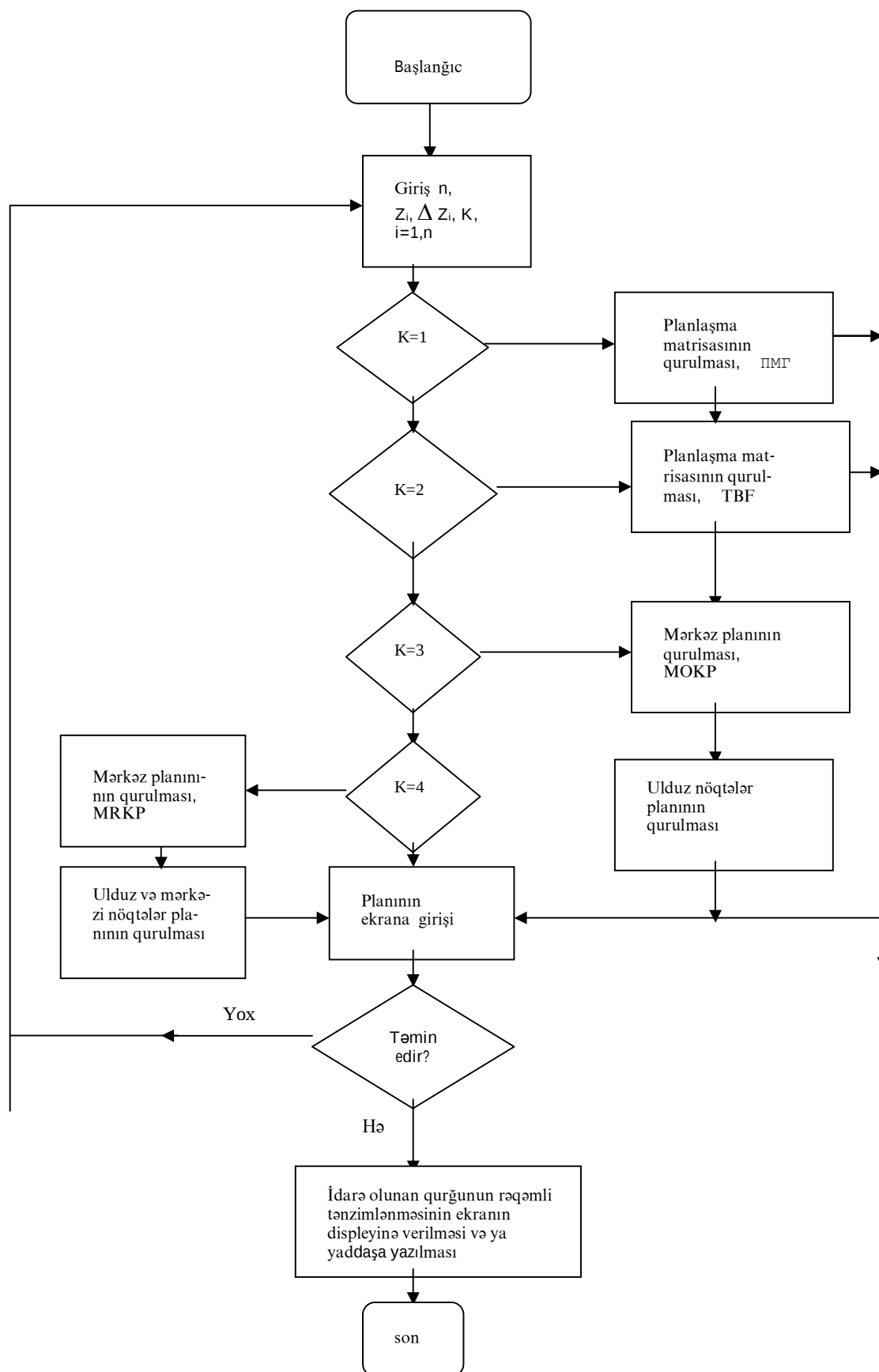
Təqdim olunan işdə təcrübənin optimal planlaşdırma üsuluna görə tətbiqi proqram paketindən (TPP) istifadə etməklə dialoq sisteminin işlənilib hazırlanmasının nəticələri verilmişdir. Sistemin iş prinsipi FK-nın istifadəsinə əsaslanır və aşağıdakı əsas əməliyyatların aparılmasını təmin edir: 1. İlkin matrisasının formalaşdırılması, təcrübənin planlaşdırılması, onun qiymətləndirilməsi və ekranın monitoruna və yaxud bilavaistə qurğunun idarəetmə sistemində verilməsi; 2. Aparılan silsilə təcrübələrə uyğun olaraq tədqiq olunan proses haqqında keyfiyyət və kəmiyyət göstəricilərinin qəbulu və onların işlənməsi; 3. Prosesin regressiya modelinin tapılması və təcrübə verilənlərə görə onların adekvatlığının yoxlanması; 4. Optimal meyarların seçilməsi və prosesin gedişinin optimal sahəsinin tapılması.

İşlənmiş TPP modul prinsipi əsasında yerinə yetirilmişdir ki, bu da yeni proqramlar daxil etməklə onun genişləndirilməsinə və

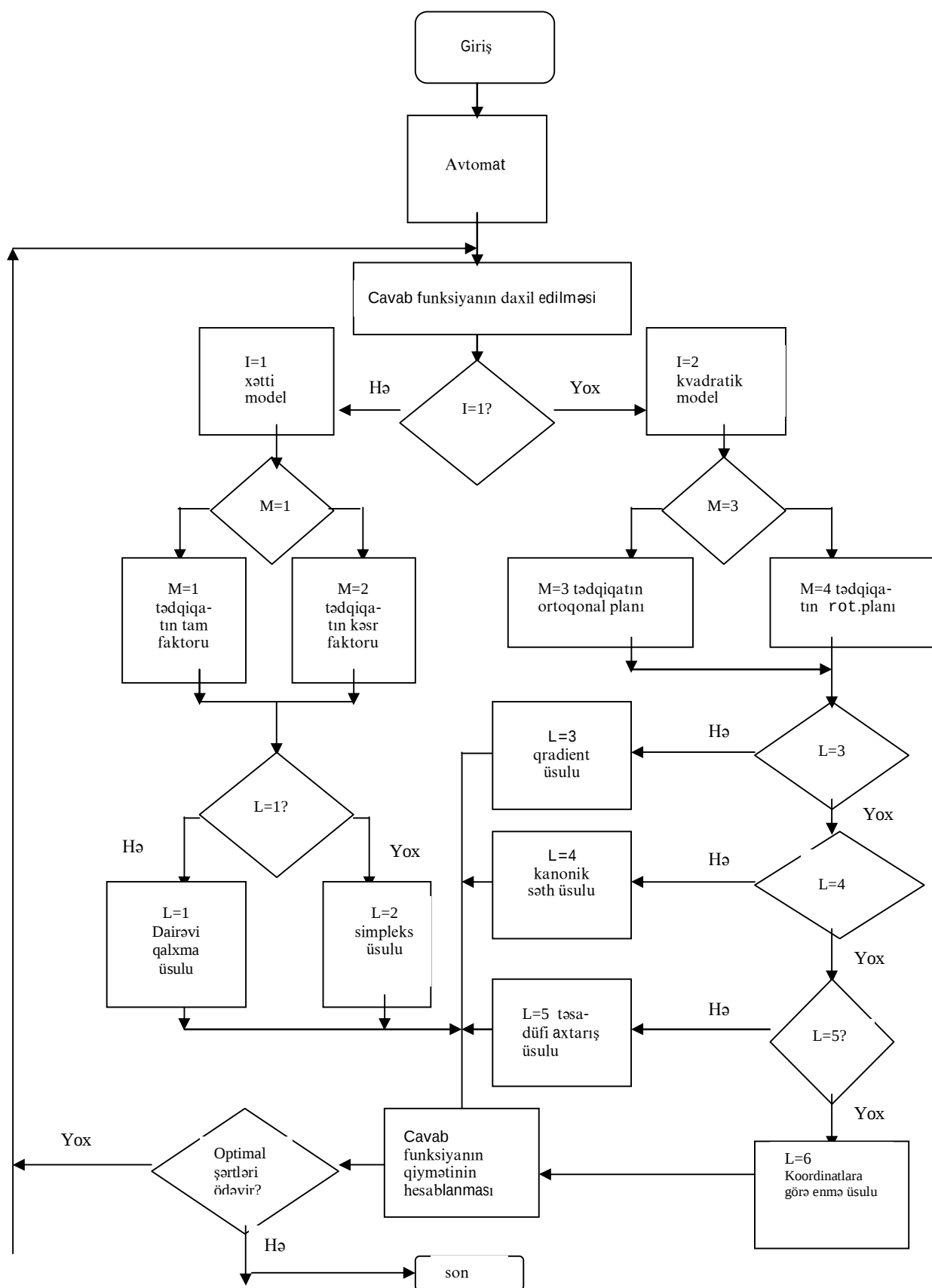
yeniləşdirilməsinə imkan verir. Bütün TPP -yə daxil olan proqramlar FORTRAN-IV dilində yazılıb.

I-ci mərhələdə TPP-nin işi tədqiqat amillərinin planının qurulması ilə başlanır. Dialoq rejimində istifadəçi tərəfindən FK-ə amillərin sayı n , onların sıfır səviyyəsi Z , dəyişmə intervalı ΔZ , həmçinin planın arzulanan variantını təyin edən kodun K qiyməti daxil olunur. Nəzərə alınır ki, məqsəddən asılı olaraq plan matrisası tam amil təcrübəsi (TAT), kəsir amilli təcrübə (KAT), tam mərkəzi ortoqonal kompozisiya (TMOK) və həmçinin mərkəzi rototabel kompozisiya (MRK) planına çevirmək mümkündür. Son 2 halda planın nüvəsinə əlavə olaraq ulduz çiyinləri kəmiyyətləri və planın mərkəzindəki təcrübələrin sayı təyin olunur (Şəkil 1).

II-ci mərhələdə TPP-lər təcrübə nəticələrin emalı üçün tətbiq olunur. Bu mərhələdə istifadəçi tərəfindən FK-ə təklif olunmuş ardıcılıqla tədqiq olunan prosesin cavab funksiyası daxil edilir. FK rəqəmli idarəetmə sistemində təcrübə qurğu vasitəsilə qoşulduğu hallarda TPP-də reaksiya məhsullarının xromatoqrafik üsulla analizi üçün əlavə proqram nəzərdə tutulub. Bu proqram real zaman miqyasında xromatoqrafik məlumatın qəbulunu, analiz olunan məhsulların kəmiyyət və keyfiyyət göstəricilərinin tərkibinin təyini, reaksiya məhsullarında komponentlərin faiz tərkibinin seçimini və əldə olunan məlumatların FK-in yaddaşına daxil olunmasını təmin edir. Sonrakı hesablamalarda bu məlumatlar optimallaşdırılan prosesin cavab funksiyası kimi qəbul olunur.



Şəkil 1. Çıxış matrisasının planlaşmasının dialoq sistemində formalaşması işinin blok sxemi (I-ci mərhələ)



Şəkil 2. Verilmiş aktiv tədqiqatların emalı zamanı dialoq sisteminin blok sxemi (II-ci mərhələ)

FK-ə daxil edilmiş təcrübi verilənlərə əsasən 4 proqramdan birindən istifadə etməklə tədqiq olunan prosesin modelinin reqressiya tənliyi qurulur. Lazım olan proqramın seçilməsi verilmiş təcrübi tədqiqat planına əsasən aparılır. TAT, KAT, TMOK və yaxud MRK planları üzrə qoyulmuş təcrübələrin nəticələrinin emalı üçün uyğun olaraq M1, M2, M3 və ya M4 proqramları istifadə olunur (şəkil 2). Onların köməyi ilə reqressiya tənliyinin əmsalları hesablanır, Student meyarı ilə əmsalların dəyəri yoxlanılır və qoyulmuş təcrübələrin həyata keçmə dərəcəsi qiymətləndirilir. Bu zaman alınmış reqressiya tənliyinin əmsalları adekvatlığı Fişer meyarının köməyi yoxlanılır.

Əgər alınmış tənlik prosesi qeyri-adekvat təsvir edirsə, bu zaman istifadəçiyə həyata keçmiş planı daha yüksək tərtibli kompozisiya planına çevirmək və əlavə təcrübələr qoymaq imkanı yaradılır. Bu halda yenidən yaranmış kompozisiya planının nüvəsi əvvəlki təcrübi planla üst-üstə düşməyə də bilər. Modelin adekvatlığı təsdiq olunan zaman prosesin optimal şəraitinin şərtlərinin tapılması üçün verilmiş optimallaşma proqramlarının iştirakı ilə verilənlərin sonrakı emalı aparılır.

Xətti modeldə ($\bar{I}=1$) optimal həllin tapılması üçün cavab funksiyasının səthi üzrə dairəvi qalxma üsulu (proqram L1) və simpleks üsulu (proqram L2) tətbiq olunur (şəkil 2).

İkinci tərtib reqressiya tənliyi üçün ($\bar{I}=2$) optimal qiymətlərin tapılması üçün TPP-yə daxil olan təsadüfi axtarış üsulundan (proqram L5), koordinatlara görə enmə üsulundan (proqram L6), kanonik səthdə hərəkət üsulundan (proqram L4) istifadə olunur [3]. TPP - yə qeyri-xətti funksiyanın maksimumunu tapmaq üçün nəzərdə tutulan gradient üsulu proqramı da (L3) daxil edilib.

Gradient üsulu əsasında alqoritm axtarışı məhdudiyyət nəzərə alınmaqla qurulub:

$$f(\bar{z}) = 0, \bar{z} \in Q\{z_{i\min} \leq z_{i\max}, 1 \leq i \leq n\} \quad (1)$$

burada $\bar{z} = (z_1, z_2, \dots, z_n)$ - idarə olunan parametrlərin vektorudur.

Verilmiş alqoritm optimuma doğru hərəkəti F funksiyasının ən böyük dəyişməsi istiqamətində, yəni optimallaşma meyarının gradienti istiqamətində həyata keçirir. Optimallaşdırma meyarı kimi aşağıdakı

funksional tətbiq olunur:

$$F = \sum_{i=1}^n [f_i^{\text{q}}(\bar{z}) - f_i^{\text{p}}(\bar{z})]^2 \quad (2)$$

Təcrübi verilənlərin emalı proqramlarının ardıcıl seçilməsi struktur kodu ilə təyin olunur. Onun köməyi ilə istifadəçi müraciət olunan proqramların «hesablama zəncirini» yaradır. Struktur kod İML tam ədəddir, I rəqəm reqressiya modelinin xəttliliyini ($\bar{I}=1$) və ya qeyri-xəttliliyini ($\bar{I}=2$) göstərir. II rəqəm aktiv təcrübi verilənlərin emalı üçün mümkün olan üsullardan birini, III rəqəm isə optimallaşdırmanın mümkün olan üsullarından birini göstərir.

Təcrübələr FK-a qoşulmuş avtomatlaşdırılmış kimya- texnoloji pilot qurğusunda tərpənməz katalizator layında aparılmışdır.

Təcrübi qurğunun idarəetmə parametrləri kimi seçilmişdir: reaktorun temperaturu Z_1 , metil spirtinin Z_2 və oksigenin Z_3 parsial təzyiqləri, reagentlərin ötürülməsinin həcmi sürəti Z_4 . Təcrübələrin planlaşdırılması zamanı qurulmuş planın mərkəzinin koordinatları:

$$Z_1^0 = 100^\circ \text{C}; \quad Z_2^0 = 0,27 \frac{\text{mol}}{\text{saat}};$$

$$Z_3^0 = 0,4 \frac{\text{mol}}{\text{saat}}; \quad Z_4^0 = 2050 \text{ saat}^{-1} \text{ olmuşdur.}$$

Təcrübələr rototabel mərkəzi kompozisiya planına uyğun olaraq qoyulmuşdur ($k=4$). Onların aparılmasından sonra FK-ə reaksiya məhsullarının xromatoqrafik analizindən istifadə etməklə təyin olunmuş cavab funksiyasının ədədi qiymətləri y - qarışqa turşusunun faizlə çıxımı daxil edilir. Verilənlərin təcrübə massivinin sonrakı emalı FK-ə 144 struktur kodu verildikdən sonra yerinə yetirilir. Bununla da istifadəçi tərəfindən proses üçün model kimi xətti reqressiya tənliyi seçildi, işlənmə üsulu kimi isə MRK planı və kanonik oxlar üzrə hərəkəti üsulu götürülmüşdür.

Göstərilən alqoritm və proqram blokları konkret olaraq metanolun metan turşusuna heterogen-katalitik oksidləşməsi prosesi üçün tətbiq edildi. Verilən proses üçün təcrübə aparılması planı aşağıdakı kimi tərtib olunmuşdur:

Planlaşdırma matrisi

Təcrübənin nömrəsi	Amillər, natural miqyasda				Amillər, ölçüsüz miqyasda				
	Z_1	Z_2	Z_3	Z_4	x_1	x_2	x_3	x_4	y
1	70	0,07	0,1	850	-1	-1	-1	-1	22
2	130	0,47	0,1	850	+1	-1	-1	-1	27
3	70	0,07	0,1	850	-1	+1	-1	-1	27
4	70	0,07	0,7	850	-1	-1	+1	-1	26
5	70	0,47	0,1	3250	-1	-1	-1	+1	16
6	130	0,07	0,1	850	+1	+1	-1	-1	32
7	130	0,07	0,7	850	+1	-1	+1	-1	21
8	130	0,47	0,1	3250	+1	-1	-1	+1	21
9	70	0,47	0,7	850	-1	+1	+1	-1	31
10	70	0,47	0,1	3250	-1	+1	-1	+1	21
11	70	0,07	0,7	3250	-1	-1	+1	+1	20
12	130	0,47	0,7	850	+1	+1	+1	-1	36
13	130	0,47	0,1	3250	+1	+1	-1	+1	26
14	130	0,07	0,7	3250	+1	-1	+1	+1	25
15	70	0,47	0,7	3250	-1	+1	+1	+1	25
16	130	0,47	0,7	3250	+1	+1	+1	+1	30

Cədvəldəki y sütunu qarışqa turşusunun faizlə çıxımını göstərir.

Cədvəldə göstərilən plandan istifadə edərək, xətti regressiya tənliyinin əmsalları hesablanmışdır:

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4 \quad (3)$$

Məsələn, b_1 əmsalının təyini üçün $x_{1i}y_i$ hasillərin cəmi hesablanır:

$$\sum_{i=1}^8 x_{1i}y_i = 30$$

$$b_1 = \frac{\sum_{i=1}^{16} x_{1i}y_i}{16} = \frac{30}{16} = +1,9$$

Anoloji olaraq, digər əmsallar da hesablanır:

$$b_0 = 25,3; \quad b_2 = 3,1; \quad b_3 = 1,4; \quad b_4 = -2,4$$

Bu zaman xətti regressiya tənliyi aşağıdakı kimi olur:

$$\hat{y} = 25,3 + 1,9x_1 + 3,1x_2 + 1,4x_3 - 2,4x_4$$

Göründüyü kimi, həcmi sürəti xarakterizə edən ölçüsüz amil olan x_4 -ə uyğun əmsal mənfə qiymətə malikdir. Bu onunla izah olunur ki, kontakt zamanının əksinə bərabər olan həcmi sürətin artması metan turşusunun çıxımının azalmasına gətirib çıxarır.

Anoloji olaraq qarşılıqlı əlaqə əmsalları da hesablanmışdır. Student meyyarının köməyi ilə bu əmsalları yoxlayaraq, belə nəticəyə gəldik ki, onların prosesin gedişinə təsiri cüzdür. Ona görə də bu əmsalların tənlikdə nəzərə alınmaması tənliyin adekvatlığına təsir göstərmir.

İşlənmiş üsullar metanolun qarışqa turşusuna oksidləşməsi prosesinin modelləşməsi və optimallaşması üçün modifikasiya olunmuş seolit katalizatorlarında tətbiq olunmuş üsullarından biridir.

Hesablama kompleksi universal xarakter daşıyır, rəqəmsal və analitik modelləşmə üçün, həmçinin kimya-texnoloji proseslərin avtomatik idarə edilməsində tətbiq olunur. Bu da aparılan tədqiqatların həcmi azaltmağa və vaxta qənaət etməyə imkan verir.

ƏDƏBİYYAT

1. А.М.Алиев, Р.М.Касимов, Э.М.Мамедов, В.А.Расулов. Экспериментальная химико-технологическая установка для исследования активности катализаторов в системе реакторов.//Азербайджанский химический журнал. №3. 2000. 37-40 с.
2. Мустафина С.А. Автоматизация, моделирование и оптимизация каталитических процессов. // Компьютерные учебные программы и инновации. М., 2006. №-8. С.106-109.
3. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. М. : Высшая школа. 1985. 319 с.

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМОВ И ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ АВТОМАТИЗАЦИИ, МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОПТИМИЗАЦИИ НА ПРИМЕРЕ ГЕТЕРОГЕННО-КАТАЛИТИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ОКИСЛЕНИЯ МЕТАНОЛА В МЕТАНОВУЮ КИСЛОТУ

У.А.Алиева

В работе рассмотрены вопросы разработки программного обеспечения для функционирования автоматизированных химико-технологических установок и исследования на них процессов методом планирования экспериментов. Исследован процесс получения метановой кислоты окислением метанола на Pd-содержащем цеолитном катализаторе. Разработана регрессионная модель процесса.

Ключевые слова: оптимальное планирование, моделирование, уравнение регрессии, окисление метанола

DEVELOPMENT OF ALGORITHMS AND SOFTWARE FOR SOLVING AUTOMATION, OPTIMIZATION AND MODELLING PROBLEMS AFTER THE EXAMPLE OF HETEROGENEOUS CATALYTIC OXIDATION PROCESS OF METHANOL IN METHANE ACID

U.A.Alieva

The paper discusses questions of software development for functioning of automated chemical processing plants, and research on these processes by means of experimental design. The process of obtaining formic acid by the oxidation of methanol on Pd-containing zeolite catalyst has been studied. A regression model of the process has been developed.

Keywords: optimal planning, modeling, regression equation, methanol oxidation

Redaksiyaya daxil olub 19.03.2012.