ششمین کنگره ملی تحقیقات راهبردی در
شیمی و مهندسی شیمی
با تاکیـــد بر فناوری های بومی ایـــران

بررسی و مقایسه روش‌های مختلف نمونه‌برداری داده‌های راکتور بستر ثابت کاتالیستی

شقایق بشیری، الهام یساری*

۱-دانشجو کارشناسی‌ارشد مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد
۲- استادیار مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

چـــکـــیـــده

فرایند آنالیز و تحلیل تعداد زیاد داده، جهت یافتن الگوهای معنادار و قوانین موجود در بین داده‌ها، به‌عنوان داده‌کاوی شناخته می‌شود. در این بحث سعی بر آن است تا با مقایسه انواع مختلف روش نمونه‌برداری، بهترین شیوه نمونه‌برداری از بین چهار روش سوبل، هالتون، ابرمکعب لاتین و تصادفی از منظر معیار ارزیابی میانگین مربعات خطا، مورداستفاده قرار گیرند. برای مقایسه روش‌های مختلف، نیاز به بانک اطلاعاتی اولیه است که توسط مدل‌سازی راکتور بستر ثابت کاتالیستی تولید دی متیل اتر از گاز سنتز حاصل می‌شود. نتایج نشان می دهد که نمونه گیری ابر مکعب لاتین(LHS) بسیار کارآمدتر از سایر تکنیک‌های نمونه‌برداری است.

کلمات کلیدی :داده‌کاوی، مدل‌سازی، روش‌های نمونه‌گیری، دی متیل اتر

مقدمـه یا بیـان مسئـلـه

نمونه‌برداری، فرایند انتخاب مشاهدات برای توصیف مناسب از جمعیت است.

- اهمیت داشتن روش نمونه‌برداری در صحت نتایج
- هزینه و سرعت کم در جمع‌آوری داده‌ها

ملزومات شیوه نمونه‌برداری

- تعیین تعداد نمونه
- تعیین مرزها

اهـداف و روش پـژوهـش

برای مقایسه بین تکنیک‌های نمونه‌برداری از مدل‌سازی راکتور بستر ثابت کاتالیستی تولید دی‌متیل اتر به گاز سنتز در نرم‌افزار MATLAB استفاده شده است.

- مروری بر متداول‌ترین تکنیک‌های نمونه‌برداری و مقایسه روش‌های نمونه‌گیری با یکدیگر جهت گزینش بهترین روش نمونه‌گیری می‌باشد.

۱. تصادفی

- استفاده آسان بدون هیچ فرض، دانش و قاعده‌ای خاص در انتخاب نقاط از فضای نمونه
- ایجاد فضای خالی بزرگ در فضای طراحی در تعداد داده کم

۲. ابرمکعب لاتین

- تقسیم دامنه هر متغیر ورودی به n بازه منفصل با احتمالات یکسان

۳. سوبل

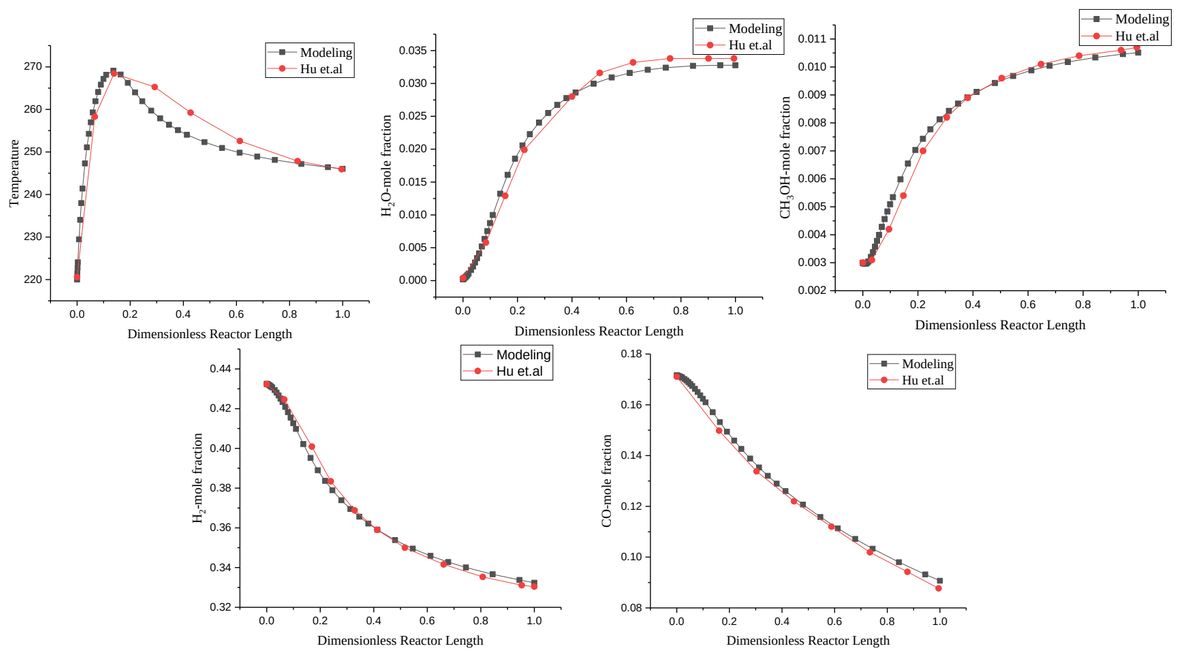
- جز دسته روش‌های نمونه‌برداری شبه تصادفی
- ابعاد دنباله سوبل، از دنباله Van der Corput با پایه اعداد اول ساخته می‌شود؛ بُعد اول دنباله سوبل بر پایه ۲ و ابعاد بالاتر، جایگشتی از توالی بُعد اول

۴. هالتون

- روش نمونه‌برداری شبه‌تصادفی
- اولین و دومین بُعد دنباله هالتون از دنباله Van der Corput بر پایه ۲ و ۳

فرضیات

۱. صرف‌نظر از تغییرات غلظت، دما و فشار در جهت شعاعی
۲. صرف‌نظر از اتلاف حرارت و پایا بودن راکتور
۳. گرادیان غلظت در جهت محوری و پلاگ بودن جریان
۴. پیروی مخلوط گازی از قانون گاز ایده آل



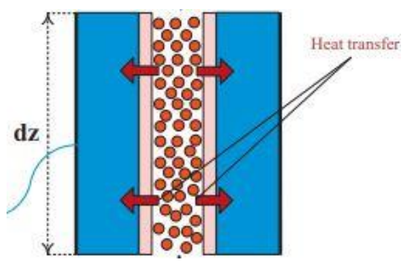
میزان گرمای واکنش (kJ/mol)	واکنشهای شیمیایی: واکنش	نام واکنش
-90.85	$CO + 2H_2 \leftrightarrow CH_3OH$	سنتز متانول
-50.1	$CO_2 + 3H_2 \leftrightarrow CH_3OH + H_2O$	سنتز متانول
-23.4	$2CH_3OH \leftrightarrow CH_3OCH_3 + H_2O$	آبگیری از متانول

موازنه جرم و انرژی برای المانی از راکتور

$$\frac{\varepsilon c u_s}{L_r}\frac{\partial x_i}{\partial z} = \rho_b\left(\sum_{j=1}^{n_r}\nu_{ij}r_j - x_i\sum_{i=1}^{n_c}\sum_{j=1}^{n_r}\nu_{ij}r_j\right)$$

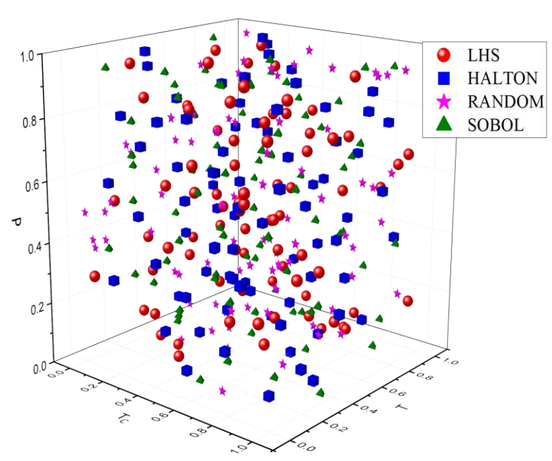
$$\frac{\rho_g C_{p_g} u_s}{L_r}\frac{\partial T}{\partial z} = \left(\rho_b\left(\sum_{i=1}^{n_r}(-\Delta H)_i r_i\right) + \frac{4U_{eff}}{d_{out}}(T - T_c) * config_{coeff}\right)$$

$$\frac{dP}{dz} = -10^{-5}L_r\left(1.75 + 150\left(\frac{1-\varepsilon}{d_p\rho_g u_s/\mu_g}\right)\right)\frac{u_g^2\rho_g}{d_p}\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3}$$

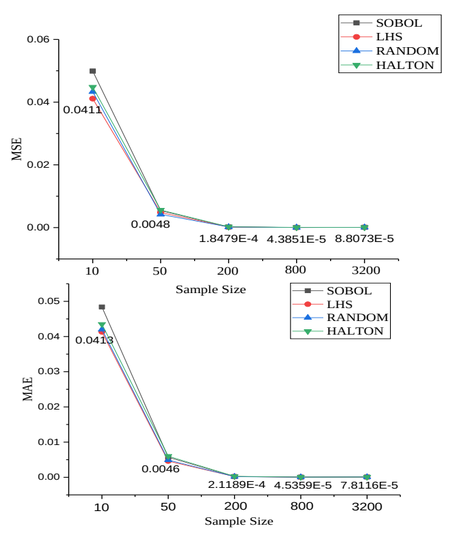


ورودی‌ها	کمینه مقدار	بیشینه مقدار	خروجی‌ها
دمای ورودی (°C)	195	265	دما خروجی
دمای پوسته (°C)	195	260	دمای بیشینه
فشار ورودی (bar)	30	80	غلظت ۸ ماده

یـافـتـــه هـــای پژوهـــش



مقایسه چهار روش نمونه برداری در نمودار سه بعدی



تغییرات میانگین مربعات خطا داده‌ها بر اساس تعداد نمونه‌ها

راهبـردهـــای پیـشـنـهادی

- در اندازه داده‌ها بیش از ۲۰۰، مقدار خطا داده‌ها در روش‌های متفاوت نمونه‌گیری، تقریباً یکسان است؛ درحالی‌که تعداد نمونه کمتر از ۲۰۰، خطا در تمام روش‌های نمونه‌برداری افزایش‌یافته است.
- با افزایش تعداد داده از ۵۰ به ۲۰۰ میزان خطا ۹۶٪ کاهش می‌یابد.
- روش نمونه‌گیریLHS نسبت به روش‌های دیگر برتری دارد.
- یکی از کاربردهای روش‌های نمونه‌گیری، در ساخت انواع مختلف مدل‌های جایگزین است.

مـنـــابـــع

[1]H. Taherdoost, ‘Sampling Methods in Research Methodology; How to Choose a Sampling Technique for Research’, SSRN Journal, 2016.
[2]E. Yasari, ‘A green industrial scale di-methyl ether reactor with aiming to CO 2 reduction: staging and multi-objective optimization approach’, Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers, vol. 81, pp. 110–118, Dec. 2017.