

Пешкова Е. В., Попов А. Е.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОПТИМИЗАЦИИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ В УСЛОВИЯХ НЕОПРЕДЕЛЁННОСТИ

Компьютерное моделирование применяется для исследования, оптимизации и проектирования реальных технологических объектов. Прежде чем сформулировать и решить задачу оптимизации ХТО, необходимо выяснить насколько сильно влияние неопределённых параметров на поведение процесса.

Исследование влияния неопределённых параметров на работу химического реактора позволит нам сделать ряд полезных выводов.

Существует ли область допустимых управляющих воздействий, обеспечивающая получение химических продуктов с заданными свойствами?

Возможно ли построение системы оптимального управления синтезом красителей?

Проведем исследование влияния неопределенных параметров на работу промышленной установки диазотирования ароматических аминов, работающей в соответствии со следующим техническим заданием: производительность установки по конечному продукту составляет $Q = 1000 \text{ т / год}$;

должны быть обеспечены следующие условия экологической безопасности и требования к качеству продукции:

а) проскок амина $\eta \leq 1\%$;

б) содержание диазосмол в целевом продукте $\Pi_{\chi} \leq 1\%$;

Выполнение требований технического задания необходимо обеспечить в условиях неопределенности некоторых параметров:

- концентрации твердой фазы амина в питании реактора $[C_A]_S^{\text{вх}}$, значение которой всегда будет колебаться от номинального из-за неточности систем дозирования твердых и жидких веществ

- кинетического коэффициента A растворения твердой фазы амина, значение которой известно приблизительно и задаётся интервальными значениями.

Чтобы оценить влияние неопределённых параметров, будем производить моделирующий расчёт для их предельных и номинальных значений, изменяя управляющие воздействия.

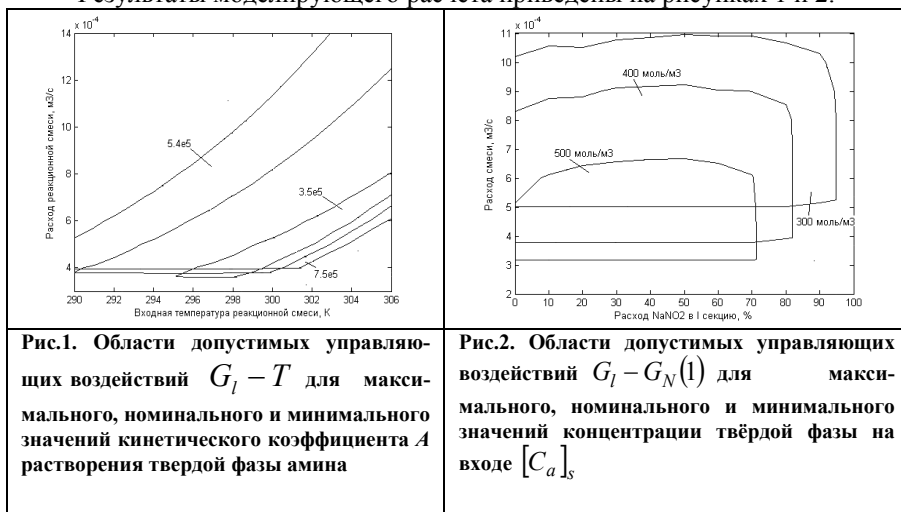
Номинальные значения неопределенных параметров,
ожидаемые отклонения и области их значений

Неопределенные параметры	Номинальные значения	Отклонения от номинальных значений	Интервал неопределенных значений
$[C_a]_s^{ex}$	400 моль/м ³	±25%	[300; 500]
A	$5,4 \cdot 10^5$	±25%	$[3,5 \cdot 10^5, 7,5 \cdot 10^5]$

Как показали численные эксперименты, наиболее сильное влияние на выход продукта оказывают и являются вектором управляющих воздействий $u = (G_{реакц.}^{ex}, T^{ex}, G_{(N)_i}^{ex})$, $i = 1, N$ где $G_{реакц.}^{ex}$, T^{ex} - расход и температура суспензии амина на входе в реактор; $G_{(N)_i}^{ex}$ - распределение подачи нитрита натрия по секциям реактора.

Влияние каждого фактора рассматривалось по отдельности. Сканировали область управляющих воздействий и выявили зависимость ряда параметров: степень превращения амина в диазосоединение, учитывая, что исходное сырьё – ароматический амин – является весьма дорогостоящим; количество диазосмол в диазосоединении, поскольку оно оказывает существенное влияние на качество получаемого пигмента и просок сырья.

Результаты моделирующего расчёта приведены на рисунках 1 и 2.



Из рисунков видно, что при изменении параметров A и $[C_A]_s$ области перемещаются, изменяя при этом свою конфигурацию. При увеличении A (рис.1) области $G_I^0 - T_c^0$ уменьшаются, и при некотором $A < 3,5$ могут вырождаться в точку, что затрудняет стабилизацию условия проведения реакции и требует построения системы оптимального управления реактором синтеза красителей.

Из рис.2 следует, что области допустимых управляющих воздействий $G_I^0 - G_N(1)$ также имеют пересечение для данных условий. Эти области уменьшаются и при некотором значении $[C_A]_s > 500$ могут вырождаться в точку. Это также делает необходимым построение системы оптимального управления. Очевидно, что 100%-ная подача нитрита натрия в первую секцию реактора нецелесообразна, потому что находится за пределами области допустимых значений. Таким образом, необходимо распределить подачу нитрита натрия по секциям реактора.

Выполненные исследования статических режимов процесса диазотирования, осуществляемого в турбулентных трубчатых реакторах, позволяют сделать следующие выводы.

1) при отклонениях среднего размера частиц в питании реактора от номинального значения невозможно добиться высокого выхода диазосоединения и выполнения регламентных технологических условий за счет управления $G_I^{(0)}, G_N^{(0)}, G_N^{(1)}, T^{(0)}$. Необходимы технологические приемы стабилизации \bar{r}_0 .

2) для управления процессом диазотирования целесообразно использовать расходы суспензии амина $G_I^{(0)}$ или нитрита натрия $G_N^{(0)}$, а также распределение подачи нитрита по модулям реактора $G_N^{(i)}, i = 1, 2, 3$, добиваясь при этом стабилизации температуры суспензии амина $T^{(0)}$ в питании реактора.

Исследование с помощью математической модели статических режимов реактора трубчатого типа позволило выявить технологические переменные, которые в значительной степени влияют на качественные показатели процесса диазотирования и определить области допустимых режимов в пространстве этих переменных. Основываясь на результатах проведенных исследований были выбраны варьируемые параметры в задаче оптимизации установки диазотирования трубчатого типа.

При традиционном подходе к решению задачи оптимизации вектору неопределенных параметров ξ присваивают некоторое номинальное значение, что не совсем правильно.

Возможна следующая постановка задачи оптимизации в условиях неопределенности.

На этапе эксплуатации ХТО неопределенные параметры ξ могут быть определены в каждый момент времени и управляющие переменные z могут быть использованы для обеспечения выполнения ограничения:

$$\min_d M^\xi \left\{ \min_z C(d, z, \xi) \mid g_j(d, z, \xi) \leq 0 \right\} \quad (1)$$

$$\text{при условии: } \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J} g_j(d, z, \xi) \leq 0 \quad (2)$$

В случае мягких ограничений, использовать в качестве критерия выражение (1) нельзя, т.к. ξ фиксирована. В этом случае критерий оптимизации должен быть построен следующим образом. Пусть есть множество $\hat{\Xi}$ значений ξ при которых могут быть выполнены ограничения задачи. При этом $\text{Вер}[\xi \in \hat{\Xi}] \geq P_{зад}$

В критерии оптимизации (1) для каждого $\xi \in \hat{\Xi}$ переменную z следует выбирать из условия минимума $C(d, z, \xi)$ при выполнении ограничений $g_j(d, z, \xi) \leq 0$. В случае, если $\xi \notin \hat{\Xi}$, z будем выбирать из условия минимизации функции, учитывая штраф за нарушение ограничений, т.е.

$$C'(d, z, \xi) = C(d, z, \xi) + R \cdot \max \left(\max_{j \in \hat{J}} g_j(d, z, \xi), 0 \right)$$

где R – штрафной коэффициент; \hat{J} – множество индексов ограничений за нарушение которых берется штраф.

Сама оптимизационная задача может быть записана следующим образом: $\min_d (I_1(d) + I_2(d))$ (1')

$$\text{где } I_1(d) = \int_{\hat{\Xi}} \left(\min_z C(d, z, \xi) \mid g_j(d, z, \xi) \leq 0, j \in J \right) \cdot P(\xi) d\xi,$$

$$I_2(d) = \int_{\Xi \setminus \hat{\Xi}} \min_z C'(d, z, \xi) P(\xi) d\xi$$

Такая постановка задачи гарантирует, что ограничения $g_j(d, z, \xi) \leq 0, j \in J$ будут выполняться при изменении неопределенных параметров в заданных пределах $\xi \in \Xi, \Xi = \xi \mid \xi^L \leq \xi \leq \xi^U$.

*Работа выполнена под руководством д.т.н.,
профессора кафедры ТО и ТП Дворецкого С. И.*