

*Б.Б. Поляков, Д.С. Хабарова**

ДВУХЭТАПНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ ТУРБУЛЕНТНОГО ТРУБЧАТОГО РЕАКТОРА ТОНКОГО ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА

Имитационная модель $y = \Psi(d, z, \xi)$ статики нелинейного процесса тонкого органического синтеза – диазотирования ароматических аминов, осуществляемого в турбулентном трубчатом реакторе диазотирования, позволяет рассчитывать выходные переменные y реактора диазотирования: производительность Q , концентрации $c^{(\text{ВЫХ})} = (c_D, c_{AK}, c_\chi, c_\sigma)$ диазосоединения, азотистой кислоты, диазосмол и нитрозных газов, расходы $G^{(\text{ВЫХ})} = (G_I^{(\text{ВЫХ})}, G_s^{(\text{ВЫХ})})$ жидкой и твердой фазы суспензии диазораствора, количества твердой фазы амина Π_η , диазосмол Π_χ и нитрозных газов Π_σ в диазорастворе на выходе из реактора диазотирования [1], где d, z, ξ – векторы конструктивных, режимных (управляющих) переменных и неопределенных параметров реактора диазотирования, соответственно.

Сформулируем техническое задание на проектирование турбулентного трубчатого реактора диазотирования ароматических аминов с диффузор-конфузорными устройствами турбулизации потока (рис. 1): для заданной производительности реактора $Q = 1000$ т/год (по диазосоединению) требуется обеспечить значения «проскока» ароматического амина $\Pi_\eta = G_s^{(\text{ВЫХ})} / G_s^{(0)} \times 100\%$, содержания диазосмол

$$\Pi_\chi = c_\chi^{(\text{ВЫХ})} G_I^{(\text{ВЫХ})} / \left(\left[c_A^{(0)} \right]_s G_I^{(\text{ВЫХ})} \right) \times 100\% \quad \text{и} \quad \text{нитрозных} \quad \text{газов}$$

$\Pi_\sigma = c_{AK}^{(\text{ВЫХ})} G_I^{(\text{ВЫХ})} / (c_N^{(0)} G_N^{(0)}) \times 100\%$, $\Pi_\sigma \leq \hat{\Pi}_\sigma$, где $\left[c_A^{(0)} \right]_s, c_\chi^{(\text{ВЫХ})}$ – концентрации ароматического амина в твердой фазе на входе в реак-

* Работа выполнена под руководством канд. техн. наук, доц. ГОУ ВПО ТГТУ Д.С. Дворецкого.

тор и не превышающие предельно допустимые значения $\hat{\Pi}_\eta = 0,25\%$, $\hat{\Pi}_\chi = 0,9\%$, $\Pi_\sigma = 0,5\%$, т.е. $\eta \leq \hat{\eta}$, $\Pi_\chi \leq \hat{\Pi}_\chi$ и концентрация диазосмол на выходе из реактора; $c_N^{(0)}$, $G_N^{(0)}$ – концентрация нитрита натрия и расход нитрита натрия на входе в реактор. Выполнение этих требований необходимо обеспечить в условиях интервальной неопределенности некоторых технологических параметров и коэффициентов математической модели процесса диазотирования, а именно – концентрации твердой фазы амина $[C_a^{(0)}]_s = 370,0(\pm 4\%)$ моль/м³ на входе в реактор, кинетического коэффициента в уравнении растворения твердой фазы ароматического амина $A = 5,4 \cdot 10^5(\pm 5\%)$, кинетических коэффициентов (энергий активации $E_{04} = 87150(\pm 0,2\%)$ Дж/моль, $E_{05} = 63690(\pm 0,2\%)$ Дж/моль) реакции разложения диазосоединения.

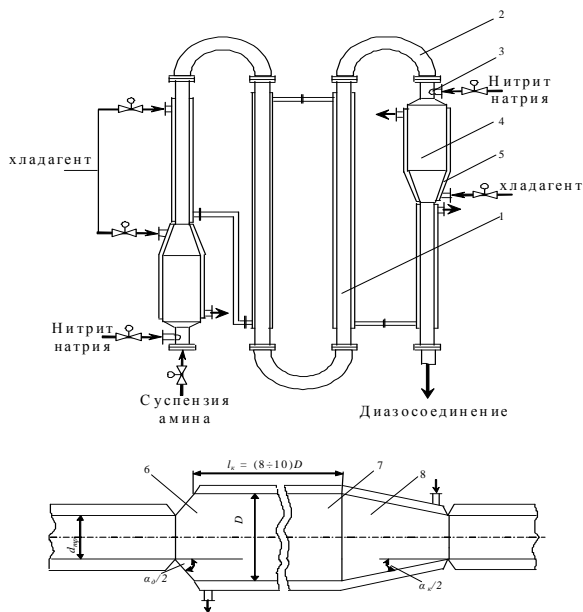


Рис. 1. Малогабаритный турбулентный трубчатый реактор с камерами смешения диффузор-конфузорного типа (комбинированный реактор):

1 – трубчатый модуль; 2 – колено; 3 – форсунки для распыления нитрита натрия; 4 – диффузор-конфузорное устройство; 5 – теплообменная рубашка; 6 – диффузор; 7 – прямой участок; 8 – конфузор; $d_{\text{тр}}$ – диаметр трубчатой части реактора; D – диаметр камеры смешения; l_k – длина камеры смешения; α_d – угол расширения диффузора; α_k – угол сужения конфузора

Задача оптимального проектирования заключается в определении конструктивных параметров d (диаметра D и длины трубчатого реактора L , числа m и места установки $l_j, j=1, 2, \dots$ диффузор-конфузорных устройств) и режимных (управляющих) переменных z (температуры $T^{(0)}$ суспензии ароматического амина на входе в реактор и распределения подачи нитрита натрия $G_N^{(1)} = \gamma G_N^{(0)}$, $G_N^{(2)} = (1 - \gamma) \cdot G_N^{(0)}$ по длине реактора), обеспечивающих минимум приведенных затрат ПЗ(d, z, θ) на создание реактора и его работоспособность при эксплуатации независимо от случайного изменения вектора неопределенных параметров θ в заданной области Ξ . Ограничения могут задаваться в жесткой и/или мягкой (вероятностной) формах. В жесткие ограничения включают, как правило, требования обеспечения заданного качества производимой продукции, технологического регламента, относящиеся к взрыво-, пожаробезопасности и экологической безопасности производства. Сформулируем двухэтапную задачу оптимального проектирования турбулентного трубчатого реактора диазотирования ароматических аминов со смешанными ограничениями: требуется определить векторы d^* и z^* , при которых достигается минимум ПЗ, т.е.

$$\text{ПЗ}^* = \min_{d, u, z(\xi)} u; \quad (1)$$

$$y = \Psi(d, z, \xi); \quad (2)$$

$$\Pr\{g_0(d, z(\xi), \xi) = \text{ПЗ}(d, z(\xi), \xi) \leq u\} \geq \rho_0; \quad (3)$$

$$\Pr\{g_1(d, z(\xi), \xi) = Q_{\text{зад}} - Q(d, z(\xi), \xi) \leq 0\} \geq \rho_1; \quad (4)$$

$$\chi_1(d) = \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J_2} g_j(d, z, \xi) \leq 0; \quad (5)$$

$$g_2(d, z(\xi), \xi) = \hat{\Pi}_\eta - \Pi_\eta(d, z(\xi), \xi); \quad g_3(d, z(\xi), \xi) = \hat{\Pi}_\chi - \Pi_\chi(d, z(\xi), \xi);$$

$$g_4(d, z(\xi), \xi) = \hat{\Pi}_\sigma - \Pi_\sigma(d, z(\xi), \xi).$$

В задаче (1) – (5) u – скалярная переменная (аналог конструктивных переменных); $\Pr\{\bullet\}$ – вероятность выполнения ограничения $\{\bullet\}$; $g_0, g_j, y_{j, \text{зад}}$ – функции ограничений и предельно допустимые значения выходных переменных; ρ_0, ρ_j – заданные значения вероятности выполнения ограничений; $\chi(d)$ – функция гибкости реактора диазотирования; ограничения с индексами $j \in J_1 = \{0, 1\}$ являются мягкими, а с индексами $j \in J_2 = \{2, 3, 4\}$ – жесткими.

Характерной особенностью двухэтапных задач оптимизации технических систем является возможность на этапе их функционирования подстройки режимных (управляющих) переменных z в зависимости от уточнения вектора неопределенных параметров ξ , т.е. управляющие переменные z являются многомерными функциями $z = z(\xi)$. Введем обозначения

$$\bar{g}_j(d, u, z, \xi) = \begin{cases} g_j(d, z, \xi) - u, & j = 0; \\ g_j(d, z, \xi), & j \in J_1; \end{cases}$$

и множество $S^{(k)} = \{\xi^i : i \in I^{(k)}\}$ накопления точек ξ с индексами $i \in I^{(k)}$, в которых нарушаются ограничения (3) – (5), причем во множестве точек $S_1^{(k)}$ будут накапливаться точки, в которых нарушаются жесткие ограничения, а во множестве $S_2^{(k)}$ – точки, в которых нарушаются мягкие ограничения. Кроме того, мы будем использовать вспомогательную задачу нелинейного программирования (А):

$$\begin{aligned} F^* &= \min_{d, u, z^i} u; \\ \bar{g}_j(d, u, z^i, \xi^i) &\leq 0, \quad j \in J_1, \quad i \in I^{(k)}; \\ g_j(d, u, z^i, \xi^i) &\leq 0, \quad j \in J_2. \end{aligned} \quad (\text{А})$$

Решение задачи (А) заключается в нахождении минимального значения скалярной переменной u при условии выполнения всех ограничений задачи в заданном наборе точек $\xi^i, i \in I^{(k)}$.

Алгоритм.

Шаг 1. Принять $k = 1$. Выбрать начальное множество $S^{(k-1)}$ из условия наилучшей аппроксимации функций $z(\xi)$. Задать начальные приближения $d^{(k-1)}, u^{(k-1)}, z^{i, (k-1)}$.

Шаг 2. Решить вспомогательную задачу (А) и пусть $d^{(k)}, u^{(k)}, z^{i, (k)}$ есть решение этой задачи.

$$\text{Шаг 3. Вычислить } \chi_1(d^{(k)}) = \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J_1} g_j(d^{(k)}, z, \xi) \leq 0. \quad (6)$$

Для решения задачи (6) был использован алгоритм внешней аппроксимации [1], и пусть $\bar{\xi}^{(k)}$ есть решение этой задачи.

$$\text{Проверить выполнение условия } \chi_1(d^{(k)}) \leq 0. \quad (7)$$

Если условие (7) не выполняется, то перейти к шагу 4, в противном случае – к шагу 5.

Шаг 4. Дополнить множество точек $S_1^{(k)}$, в которых нарушаются жесткие ограничения, т.е.

$$S_1^{(k)} = S_1^{(k-1)} \cup \bar{\xi}^{(k)} ; I_1^{(k)} = I_1^{(k-1)} \cup (n+1) ; n := n+1 .$$

Шаг 5. Проверить выполнение мягких (вероятностных) ограничений

$$\Pr\{g_j(d^{(k)}, z(\xi), \xi) \leq 0\} \geq \rho_j , \quad j \in J_2 . \quad (8)$$

На данном шаге мы не имеем функций $z = z(\theta)$, а известны только значения этих функций в дискретных точках $\theta^i, i \in I^{(k)}$. Поэтому эти точки будем использовать для аппроксимации функций $z = z(\theta)$. Если мягкие ограничения выполняются, то перейти к шагу 7, в противном случае – к шагу 6.

$$\text{Шаг 6. Вычислить } \chi_2(d^{(k)}) = \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J_2} \bar{g}_j(d^{(k)}, u^{(k)}, z, \xi) \leq 0, \quad (9)$$

и пусть $\bar{\xi}^{(k)}$ есть решение задачи (9). Дополнить множество точек S_2^k , в которых нарушаются мягкие ограничения, т.е.

$$S_2^{(k)} = S_2^{(k-1)} \cup \bar{\theta}^{(k)} ; I_2^{(k)} = I_1^{(k-1)} \cup (n+1) ; n := n+1 .$$

Шаг 7. Сформировать множества $S^{(k)} = S_1^{(k)} \cup S_2^{(k)}$, $I^{(k)} = I_1^{(k)} \cup I_2^{(k)}$, положить $k := k+1$ и перейти к шагу 2.

Результаты решения двухэтапной задачи оптимального проектирования реактора diaзотирования:

– Конструктивные переменные, $d : D = 0,04$ м; $L = 94,4$ м; $m = 5$ шт.; $l_1 = 11,8$ м; $l_2 = 23,6$ м; $l_3 = 35,4$ м; $l_4 = 47,2$ м; $l_5 = 59$ м.

– Режимные (управляющие) переменные, $z : T^{(0)} = 305,5$ °С; $G_N^{(1)} = 83,5\%$; $G_N^{(2)} = 11,6\%$; $G_N^{(3)} = 4,9\%$.

– Приведенные затраты, $u = 2278,3$ у.е. Функция гибкости, $\chi = -0,087$. Значения вероятности выполнения «мягких» ограничений, $\Pr\{\bullet\} = 97\%$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дворецкий, Д.С. Компьютерное моделирование турбулентных реакторных установок тонкого органического синтеза в условиях неопределенности / Д.С. Дворецкий, С.И. Дворецкий, Е.В. Пешкова // Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология. –2007. – Т. 50, вып. 8. – С. 70 – 75.

2. Островский, Г.М. Технические системы в условиях неопределенности: анализ гибкости и оптимизация : учебное пособие / Г.М. Островский, Ю.М. Волин. –М. : Бином, 2008. – 318 с.

Кафедра «Технологии продовольственных продуктов» ГОУ ВПО ТГТУ