

Д.С. ДВОРЕЦКИЙ, С.И. ДВОРЕЦКИЙ,
Г.М. ОСТРОВСКИЙ

**НОВЫЕ ПОДХОДЫ К ПРОЕКТИРОВАНИЮ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ, АППАРАТОВ И СИСТЕМ
В УСЛОВИЯХ ИНТЕРВАЛЬНОЙ
НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ**



Москва, 2012

УДК 66.012-52
ББК Л11-1с116
Д243

Р е ц е н з е н т ы:

Доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой
«Компьютерно-интегрированные системы в химической технологии»
Российского химико-технологического университета
им. Д.И. Менделеева
А.Ф. Егоров

Доктор технических наук, профессор
Национального исследовательского университета
«Казанский государственный технологический университет»
Н.Н. Зиятдинов

Дворецкий Д.С., Дворецкий С.И., Островский Г.М.
Д243 Новые подходы к проектированию химико-технологических процессов, аппаратов и систем в условиях интервальной неопределенности / Д.С. Дворецкий, С.И. Дворецкий, Г.М. Островский. – М.: Издательский дом «Спектр», 2012. – 344 с. – 400 экз. – ISBN 978-5-444-2001-17.

Изложены теоретические основы интегрированного проектирования гибких энерго- и ресурсосберегающих химико-технологических процессов, аппаратов и систем с использованием методов системного анализа, математического моделирования и оптимизации сложных ХТС в условиях интервальной неопределенности исходных данных.

Излагаются основные понятия теории гибкости и формулируются задачи интегрированного проектирования гибких энерго- и ресурсосберегающих ХТС в зависимости от уровня доступной экспериментальной информации о технологическом процессе во время его реализации и возможных средств управления.

Предназначена для химиков-технологов и инженеров-конструкторов химико-технологической аппаратуры, научных работников, аспирантов и преподавателей технических вузов в области системного анализа, математического моделирования, оптимизации и проектирования ХТС.

УДК 66.012-52
ББК Л11-1с116

ISBN 978-5-444-2001-17

© Д.С. Дворецкий, С.И. Дворецкий,
Г.М. Островский, 2012

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
1. МЕТОДОЛОГИЯ ИНТЕГРИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ЭНЕРГО- И РЕСУРСΟΣБЕРЕГАЮЩИХ ГИБКИХ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ	8
1.1. Общая характеристика проблемы интегрированного проектирования ХТС в условиях интервальной неопределенности	8
1.2. Основные понятия интегрированного проектирования ХТС в условиях интервальной неопределенности	30
1.3. Средства и методы интегрированного проектирования	36
1.4. Методология интегрированного проектирования ХТС в условиях интервальной неопределенности	44
1.5. Организация процесса интегрированного проектирования ...	53
1.6. Управление процессом интегрированного проектирования ...	61
2. НОВЫЕ ПОДХОДЫ К АППАРАТУРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОМУ ОФОРМЛЕНИЮ ЭНЕРГО- И РЕСУРСΟΣБЕРЕГАЮЩИХ ГИБКИХ АВТОМАТИЗИРОВАННЫХ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ	70
2.1. Формулировка задач оценки гибкости и интегрированного проектирования ХТС в условиях интервальной неопределенности исходных данных	70
2.2. Вычисление и анализ свойств функции гибкости ХТС	85
2.3. Алгоритмы решения одно- и двухстадийных задач интегрированного проектирования ХТС с «жесткими» ограничениями	101
2.4. Алгоритмы решения одно- и двухстадийных задач интегрированного проектирования ХТС с «мягкими» ограничениями	128
2.5. Алгоритмы решения одно- и двухстадийных задач оптимизации со смешанными ограничениями	140
2.6. Динамическая оптимизация ХТС в условиях неопределенности	144

3. ПРИМЕРЫ ИНТЕГРИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ АППАРАТУРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ОФОРМЛЕНИЯ ГИБКИХ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И СИСТЕМ	154
3.1. Энерго- и ресурсосберегающее производство азопигментов	154
3.2. Ресурсосберегающий непрерывный процесс получения надпероксида калия в аппарате распылительного типа	211
3.3. Энергосберегающие установки короткоцикловой адсорбции для обогащения воздуха кислородом	242
3.4. Энергосберегающий процесс прессования твердосплавных материалов с использованием метода самораспространяющегося высокотемпературного синтеза	283
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	330
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	332

ВВЕДЕНИЕ

Проблема интегрированного (совместного) проектирования химико-технологических процессов (ХТП), аппаратов, систем (ХТС) и систем автоматического управления (САУ) режимами их функционирования ставилась и частично решалась на протяжении многих десятилетий в работах Кафарова В.В., Девятова Б.Н., Grossmann I.E., Pistikopoulos E.N., Mogari M., Островского Г.М., Бодрова В.И., Егорова А.Ф., Зиятдинова Н.Н. и др. [1 – 10]. Однако до настоящего времени нет законченной теории и сравнительно простых (инженерных) вычислительных алгоритмов для комплексного решения этой сложной многокритериальной проблемы.

Целью интегрированного проектирования ХТП, аппаратов, ХТС и САУ является обеспечение устойчивого и безопасного производства качественной конкурентоспособной химической продукции. Для этого необходимо обеспечить выполнение заданных регламентом производства технологических условий осуществления ХТП, норм технико-экономической эффективности функционирования технологического оборудования производства, норм экологической безопасности и безопасности жизнедеятельности обслуживающего персонала.

Достижение цели интегрированного проектирования возможно только при создании работоспособных (гибких) ХТП, аппаратов, ХТС и САУ. Под гибкостью ХТС здесь понимается ее способность к управлению и сохранению своего функционального назначения при случайном изменении внутренних и внешних неопределенных параметров. На стадии эксплуатации гибкого ХТП условия его осуществления, задаваемые технологическим регламентом производства, должны выполняться независимо от случайного изменения неопределенных параметров в заданной области за счет соответствующего выбора управляющих воздействий (режимов функционирования ХТС), реализуемых в САУ.

Анализ традиционных подходов к проектированию ХТС показывает, что стремление добиться максимальной эффективности функционирования ХТС в статических режимах (в статике) с точки зрения энерго- и ресурсосбережения, как правило, приводит к выбору таких конструктивных параметров технологических аппаратов ХТС, при которых ухудшаются их динамические характеристики. В этом случае для обеспечения гибкости ХТС требуется использование сложных, а следовательно, дорогостоящих САУ. В то же время для улучшения динамических свойств ХТС и снижения общей стоимости проекта час-

то оказывается достаточно небольших изменений в конструкции технологического оборудования ХТП или конструктивных параметров его аппаратурно-технологического оформления.

Таким образом, при интегрированном проектировании гибких ХТП, аппаратов, ХТС и САУ оптимальные конструктивные параметры аппаратурного оформления ХТП, режимы функционирования ХТС и настроечные параметры САУ должны выбираться из условия разумного компромисса между эффективной работой ХТС с точки зрения энерго- и ресурсосбережения (в статике) и качеством управления режимами ее функционирования в динамике.

Особо следует выделить вопросы, касающиеся условий эксплуатации гибких ХТС и требований к технико-экономическим показателям производства, качеству выпускаемой продукции, интересующих потребителя. Наряду с качественными характеристиками (представленными в вербальной форме) можно выделить числовые показатели, для которых указаны области допустимых значений.

Требования к переменным состояниям ХТС выражаются, как правило, в виде условий работоспособности:

$$y_i R y_i^H,$$

где y_i – i -я переменная состояния ХТС; R – вид отношения ($=$, $<$, $>$, \leq , \geq); y_i^H – норма i -й переменной состояния.

Фактически условия работоспособности ХТС представляют собой ограничения по спецификации качества производимой продукции, производительности, экологической безопасности производства и др. Проблема выполнения условий работоспособности ХТС сильно осложняется наличием неопределенности в физической, химической и экономической информации, используемой при ее проектировании.

В связи с этим принципиально важно рассматривать на стадии проектирования влияние неопределенных параметров на работоспособность и оптимальность функционирования ХТС.

Традиционно при проектировании ХТС решается задача оптимизации в статике: для заданных структуры производства и типов аппаратурно-технологического оформления требуется определить конструктивные и режимные (управляющие) переменные, при которых достигается минимум целевой функции проектирования при связях в форме уравнений материального и теплового балансов и ограничениях, связанных с безопасностью ХТС и экологической безопасностью, обеспечением заданных значений производительности, качественных и технико-экономических показателей выпускаемой продукции и ХТС, соответственно.

Учет неопределенности при традиционном проектировании ХТС осуществляется введением эмпирического коэффициента запаса $\gamma_{\text{зап}}$ (обычно принимают $\gamma_{\text{зап}} = 1,25$) к размерам оборудования, полученным в результате решения сформулированной задачи нелинейного программирования. Понятно, что традиционная процедура не имеет рациональной основы для выбора коэффициента запаса $\gamma_{\text{зап}}$, что зачастую приводит к неработоспособности спроектированной ХТС, например, неустойчивости найденных оптимальных режимов функционирования ХТС в статике, и необходимости ее перепроектирования, а это сопряжено с дополнительными затратами.

Таким образом, задача интегрированного проектирования ХТП, аппаратов, ХТС и САУ режимами их функционирования должна ставиться с учетом наличия неопределенности в исходной информации, триаде «модель–алгоритм–программа» ХТС, устойчивости оптимальных статических режимов функционирования, оптимального уровня необходимой экспериментальной информации, гибкости и управляемости ХТС.

1. МЕТОДОЛОГИЯ ИНТЕГРИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ЭНЕРГО- И РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИХ ГИБКИХ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

1.1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ПРОБЛЕМЫ ИНТЕГРИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ХТС В УСЛОВИЯХ ИНТЕРВАЛЬНОЙ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ

Цикл процесса разработки проекта сложной химико-технологической системы (ХТС) включает в себя три фазы: интегрированного проектирования, технологическую и рефлексивную.

Приведем самое общее определение системы, которое дает Энциклопедический словарь [11]: – «система – множество элементов, находящихся в отношениях и связях друг с другом, образующих определенную целостность, единство».

С этих позиций под сложной технической системой можно понимать такие сложные объекты, как химическое производство, ХТС, химико-технологический процесс (ХТП), отдельный химический реактор или химико-технологический аппарат. Все эти объекты упорядочены по отношениям и характеризуются единством общих целей функционирования. Таким образом, мы имеем дело с иерархией систем. Для каждой системы существует более общая система – надсистема; в то же время каждая система состоит из целой совокупности систем более низкого уровня – подсистем. Главным, системообразующим элементом любой проектируемой ХТС является ее цель. Как и сами ХТС, цели также образуют сложную иерархию.

Так, цель проектируемого химического производства заключается в выпуске заданного ассортимента продукции с требуемым качеством, в заданном количестве, с наименьшими затратами сырья и энергии; цель проектируемой ХТС – в выпуске одного продукта с требуемым качеством, в заданном количестве, с наименьшими затратами сырья и энергии; цель проектируемого аппарата – осуществление типового химико-технологического процесса с заданным уровнем энерго- и ресурсосбережения.

Интегрированное проектирование рассматривается в последовательных стадиях и этапах его проведения. При этом выстраивается структура стадий и этапов фазы проектирования, подчиненная общей логике организации процесса продуктивной практической деятельности. Эта структура выстраивается как бы в двойной логике одновременно: как последовательность действий проектирования, с одной стороны; и по уровням абстракции и конкретизации (сверху вниз) – с дру-

гой стороны. Фаза интегрированного проектирования включает следующие стадии [12]:

- концептуальную (состоит из этапов выявления противоречий, формулирования проблемы, определения цели и выбора критериев);
- моделирования ХТС (состоит из этапов построения моделей, разработки триады «модель–алгоритм–программа», оптимизации, выбора (принятия решений));
- конструирования технической системы (состоит из этапов декомпозиции, агрегирования, исследования условий, построения программы);
- технологической подготовки.

Процесс интегрированного проектирования ХТС на концептуальной стадии начинается с этапа выявления противоречий: что мешает системе достичь высоких показателей эффективности функционирования, или по крайней мере удовлетворительных результатов?

Детальный анализ наличной ситуации позволяет, как правило, выявить целый клубок, комплекс противоречий. Среди них надо выделить основное, главное звено. Оно и составляет проблемную ситуацию, т.е. такую ситуацию, когда недостаточно высокая эффективность функционирования ХТС уже осознана, но пока неясно, что следует сделать для повышения эффективности ее функционирования (этап формулирования проблемы).

Следующий этап концептуальной стадии интегрированного проектирования – на основе сформулированной проблемы определяются цели интегрированного проектирования сложной ХТС и ее элементов. На данном важнейшем этапе определяется, что надо сделать для снятия проблемы – все последующие стадии и этапы интегрированного проектирования будут определять – как это сделать. Та или иная техническая система создается или совершенствуется для решения выявленной проблемы. При формулировании проблемы определяется, что является неудовлетворительным. При этом указывается направление, в котором следует двигаться от существующего и нас не устраивающего положения дел. Но таких возможных направлений много. А выбрать надо одно – правильное, рациональное из-за ограниченности ресурсов (временных, материальных, интеллектуальных и т.д.), «гнаться за двумя зайцами» чаще всего не удастся.

Определение целей – чрезвычайно сложный и тонкий процесс. Это сочетание логики и интуиции. Д. Джонс, известный специалист по проектированию, отмечает, что в этом случае «пути ... сочетания интуитивного с рациональным не установлены; пожалуй, их и невозможно установить в общем виде, в отрыве от конкретной проблемы и конкретного человека, так как они зависят от того, какое количество объ-

ективной информации имеется в распоряжении проектировщика, а также от его квалификации и опыта» [13] и, добавим еще, от его личных склонностей и вкусов.

Правильно заданная цель – это половина успеха в решении проблемы. Если цели, как правило, задаются на качественном уровне, то замещением их на количественном уровне являются критерии. Поэтому следующим этапом на концептуальной стадии интегрированного проектирования является выбор критериев.

В процессе интегрированного проектирования одним из наиболее острых и сложных вопросов является выбор целевых функций (критериев). Содержание вопроса перехода от целей к критериям становится ясным, если рассматривать целевые функции (критерии) как количественные модели качественных целей. Действительно, сформированные критерии в дальнейшем в некотором смысле замещают цели. От критериев требуется возможно большее соответствие целям, сходство с ними. Но в то же время критерии не могут полностью совпадать с целями, поскольку они фиксируются по-разному. Цели просто называются, а целевые функции (критерии) должны быть выражены в тех или иных шкалах измерения.

Целевые функции (критерии эффективности) – важнейшая проблема вообще в любой деятельности. Из-за ошибочного выбора критериев неоднократно происходили аварии на крупных производственных объектах. Критерии, по сути дела, отображают системы ценностей, которые несводимы друг к другу, и чаще всего несравнимы между собой. Отсюда вытекает многокритериальность большинства практических задач интегрированного проектирования, и, таким образом, при решении практических проблем построение критериев является скорее искусством, чем наукой. Многокритериальность реальных задач связана с тем, что одну цель, как правило, не удастся выразить одним критерием. Возможны, конечно, случаи, когда единственный критерий отвечает требованиям практики. В целом случаи, когда единственный критерий удачно отображает цель, весьма редки.

Зачастую критерии бывает целесообразно разнести по трем составляющим: цель проектируемой ХТС; средства и способы ее реализации; отношения ХТС с внешней средой. Причем нередко критерии могут входить в противоположные отношения. Наиболее распространенными при анализе технической системы являются следующие критерии: финансовые (прибыль, рентабельность, себестоимость продукции и т.д.), объемные показатели (измеряющие количество продукта), технические качества: устойчивость и эффективность функционирования, надежность и т.д., живучесть, совместимость с уже существующими системами, приспособляемость, гибкость, стойкость против морального старения, безопасность и т.д. Такие критерии, безусловно,

полезны. Но их следует рассматривать скорее как основу для конкретного поиска в каждом конкретном случае. Отметим, что термин «оценка» используется в двух значениях – как результат «измерения», и как процесс. Процесс оценки вкратце заключается в следующем. Состояние системы описывается некоторыми показателями, измеряемыми в соответствующих шкалах. Эффективность функционирования системы оценивается по некоторым критериям, оценки по которым («оценка» – как результат) также измеряются в соответствующих шкалах. Процесс оценки заключается в переходе из пространства состояний технической системы в критериальное пространство, т.е. в установлении зависимости между значениями оценок по критериям и значениями показателей состояния технической системы (в частном случае критерии могут совпадать с показателями).

Следующей стадией интегрированного проектирования технической системы является моделирование ее функционирования, заключающееся в построении, анализе и оптимизации моделей [14].

Можно выделить следующие функции моделирования: дескриптивную, прогностическую и нормативную.

Дескриптивная функция заключается в том, что за счет абстрагирования модели достаточно просто объяснить наблюдаемые на практике явления и процессы. Успешные в этом отношении модели становятся компонентами научных теорий и являются эффективным средством отражения содержания последних (поэтому познавательную функцию моделирования можно рассматривать как составляющую дескриптивной функции).

Прогностическая функция моделирования отражает его возможность предсказывать будущие свойства и состояния моделируемых систем, т.е. отвечать на вопрос «что будет?».

Нормативная функция моделирования заключается в получении ответа на вопрос «как должно быть?» – если, помимо состояния системы, заданы критерии оценки ее состояния, то, формулируя задачу оптимизации, возможно не только описать существующую систему, но и построить ее нормативный образ – желательный с точки зрения субъекта, интересы и предпочтения которого отражены используемыми критериями. Нормативная функция моделирования тесно связана с формулировкой и решением задач управления для ответа на вопрос «как добиться желаемого (состояния, свойств системы и т.д.)?».

Для того чтобы создаваемая модель соответствовала своему назначению, недостаточно создать просто модель. Необходимо, чтобы она отвечала ряду требований, обеспечивающих ее функционирование. Невыполнение этих требований лишает модель ее модельных свойств. Первым таким требованием является ее ингерентность, т.е. достаточная степень согласованности создаваемой модели с внешней средой, в

которой ей предстоит функционировать, входила бы в эту среду не как чужеродный элемент, а как естественная составная часть [15].

Другой аспект ингерентности модели состоит в том, что в ней должны быть предусмотрены не только «стыковочные узлы» с внешней средой (интерфейсы), но и, что не менее важно, в самой среде должны быть созданы предпосылки, обеспечивающие функционирование будущей системы. То есть не только модель должна приспосабливаться к среде, но и среду необходимо приспособлять к модели будущей системы.

Второе требование – простота модели. С одной стороны, простота модели – ее неизбежное свойство: в модели невозможно зафиксировать все многообразие реальной ситуации. С другой стороны, простота модели неизбежна из-за необходимости оперирования с ней, использования ее как рабочего инструмента, который должен быть обозрим и понятен, доступен каждому, кто будет участвовать в реализации модели.

Третье требование, предъявляемое к модели, – ее адекватность, т.е. соответствие реальной системе с заданной точностью. Адекватность модели означает возможность с ее помощью достичь поставленной цели проекта в соответствии со сформулированными критериями. Адекватность модели означает, что она достаточно полна, точна и истинна. Достаточно не вообще, а именно в той мере, которая позволяет достичь поставленной цели. Иногда удается (и это желательно) ввести некоторую меру адекватности модели, т.е. определить способ сравнения разных моделей по степени успешности достижения цели с их помощью.

Рассмотрим некоторые качественные методы моделирования. Наиболее распространенным «качественным» методом моделирования, применяемым, в том числе в рамках интегрированного проектирования, является метод сценариев.

Метод «сценариев». Метод подготовки и согласования представлений о проектируемой технической системе, изложенных в письменном виде, получил название метода «сценариев». Первоначально этот метод предполагал подготовку текста, содержащего логическую последовательность событий или возможные варианты решения проблемы, развернутые во времени. Однако позднее обязательное требование временных координат было снято, и сценарием стал называться любой документ, содержащий анализ рассматриваемой проблемы и предложения по ее решению, по развитию технической системы, независимо от того, в какой форме он представлен. Как правило, на практике предложения для подготовки подобных документов пишутся экспертами вначале индивидуально, а затем формируется согласованный текст.

Сценарий требует не только содержательных рассуждений, помогающих не упустить детали, но и содержит, как правило, результаты количественного технико-экономического и/или статистического анализа с предварительными выводами. Группа экспертов, подготавливающая сценарий, пользуется обычно правом получения необходимых сведений от тех или иных организаций, необходимых консультаций. Роль специалистов при подготовке сценария – выявить общие закономерности развития технической системы; проанализировать внешние и внутренние факторы, влияющие на ее развитие и формулирование целей; провести анализ высказываний ведущих специалистов в периодической печати, научных публикациях и других источниках информации; создать вспомогательные информационные фонды, способствующие решению соответствующей проблемы.

Сценарии представляют ценность для лиц, принимающих решения только тогда, когда они не просто являются плодом фантазии, а представляют собой логически обоснованные модели будущего, которые после принятия решения можно рассматривать как прогноз, как приемлемый рассказ о том, «что случится, если...». Создание сценариев представляет собой творческую работу. В этой области накоплен определенный опыт, имеются свои эвристики. Например, рекомендуется разрабатывать «верхний» и «нижний» (или «оптимистический» и «пессимистический») сценарии – как бы крайние случаи, между которыми может находиться возможное будущее. Такой прием позволяет отчасти компенсировать или явно выразить неопределенности, связанные с предсказанием будущего. Иногда полезно включать в сценарий воображаемый активно противодействующий элемент, моделируя тем самым «наихудший случай». Кроме того, рекомендуется не разрабатывать детально (как ненадежные и непрактичные) сценарии, слишком «чувствительные» к небольшим отклонениям на ранних стадиях. Важными этапами создания сценариев являются: составление перечня факторов, влияющих на ход событий, со специальным выделением лиц, которые контролируют эти факторы прямо или косвенно.

В последнее время понятие сценария расширяется в направлении как областей применения, так и форм представления и методов их разработки: в сценарий вводятся количественные параметры и устанавливаются их взаимозависимости, предлагаются методики подготовки сценария с использованием компьютеров, методики целевого управления подготовкой сценария [16]. Сценарий позволяет создать предварительное представление о технической системе.

Графические методы. Графические представления позволяют наглядно отработать структуру моделируемых систем и процессов, происходящих в них. В этих целях используются графики, схемы, диаграммы, гистограммы, древовидные структуры и т.д. Дальнейшим раз-

витиём графических методов стало использование, в частности, теории графов и возникших на ее основе методов календарно-сетевое планирования и управления.

Метод структуризации. Структурные представления разного рода позволяют разделить сложную проблему с большой неопределенностью на более мелкие, лучше поддающиеся анализу, что само по себе можно рассматривать как некоторый метод моделирования, именуемый иногда системно-структурным. Виды структур, получаемые путем расчленения сложной технической системы во времени, – сетевые структуры или в «пространстве» – иерархические структуры, матричные структуры. В качестве особого метода структуризации можно выделить метод «дерева целей». Термин «дерево» подразумевает использование иерархической структуры, получаемой путем расчленения общей цели на подцели, а их, в свою очередь, на более детальные составляющие, которые в конкретных приложениях называют подцелями нижележащих уровней, направлениями, задачами, проблемами, а начиная с некоторого уровня – функциями. Как правило, термин «дерево целей» используется для иерархических структур, имеющих отношения строгого (древовидного) порядка, но иногда применяется и в случае «слабых» иерархий.

Морфологический метод. Термином «морфология» в биологии и языкознании определяется учение о внутренней структуре исследуемых систем (организмов, языков) или сама внутренняя структура этих систем. Основная идея морфологического подхода – систематически находить наибольшее количество допустимых вариантов; а в пределе все возможные варианты реализации технической системы путем комбинирования основных выделенных структурных элементов или их признаков. При этом система или проблема может разбиваться на части разными способами и рассматриваться в различных аспектах. Все вышеперечисленные методы могут использоваться как отдельными специалистами, так и коллективами. Следующая группа методов относится к методам коллективного (группового) моделирования. Как правило, они направлены на то, чтобы включить в рассмотрение на этом этапе как можно больше возможных вариантов построения моделей – так называемое генерирование альтернатив.

Деловые игры. Деловыми играми называется имитационное моделирование реальных ситуаций, в процессе которого участники игры ведут себя так, будто они в реальности выполняют порученную им роль, причем сама реальность заменяется некоторой моделью. Примерами являются штабные игры и маневры военных, работа на тренажерах различных операторов технических систем (летчиков, операторов химических производств, диспетчеров электростанций и т.д.), административные игры и т.п. Несмотря на то что чаще всего деловые игры

используются для обучения, их можно использовать и для экспериментального генерирования альтернатив создаваемых моделей. Важную роль в деловых играх кроме участников играют контрольно-арбитражные группы, управляющие созданием моделей, регистрирующие ход игры и обобщающие ее результаты. К методам коллективного моделирования также можно отнести метод мозгового штурма, метод «Делфи» и метод синектики .

Метод мозгового штурма специально разработан для получения максимального количества предложений при создании моделей. Техника мозгового штурма такова. Собирается группа лиц, отобранных для генерации альтернатив: главный принцип отбора – разнообразие профессий, квалификации, опыта – такой принцип поможет расширить фонд априорной информации, которой располагает группа. Сообщается, что приветствуются любые идеи, возникшие как индивидуально, так и по ассоциации при выслушивании предложений других участников, в том числе и лишь частично улучшающие чужие идеи. Категорически запрещается любая критика – это важнейшее условие мозгового штурма: сама возможность критики тормозит воображение. Каждый по очереди зачитывает свою идею, остальные слушают и записывают на карточки новые мысли, возникшие под влиянием услышанного. Затем все карточки собираются, сортируются и анализируются, обычно другой группой экспертов. Общий «выход» такой группы, где идея одного может навести другого на что-то еще, часто оказывается больше, чем общее число идей, выдвинутых тем же количеством людей, но работающих в одиночку. Число альтернатив можно впоследствии увеличить, комбинируя сгенерированные идеи. Среди полученных в результате мозгового штурма идей может оказаться много неосуществимых, но «глупые» идеи легко исключаются последующей критикой, ибо компетентная критика проще, чем компетентное творчество. Метод мозгового штурма известен также под названием «мозговой атаки», коллективной генерации идей, конференции идей, метода обмена мнениями. В зависимости от принятых правил и жесткости их выполнения различают прямую мозговую атаку, метод обмена мнениями, метод типа комиссий, судов (в последнем случае создаются две группы: одна вносит как можно больше предложений, а вторая старается максимально их раскритиковать). Мозговую атаку можно проводить в форме деловой игры, с применением тренировочной методики «стимулирования наблюдения», в соответствии с которой группа формирует представление о проблемной ситуации, а эксперту предлагается найти наиболее логичные способы решения проблемы.

На практике подобием мозгового штурма могут явиться заседания совещательных органов разного рода – директораты, заседания

ученых и научных советов, педагогические советы, специально создаваемые комиссии и т.д.

Метод «Делфи» или метод «дельфийского оракула» является итеративной (повторяющейся) процедурой при проведении мозговой атаки, которая способствует снижению влияния психологических факторов и повышению объективности результатов. Основные средства повышения объективности результатов при применении метода «Делфи» – использование обратной связи, ознакомление экспертов с результатами предшествующего тура опроса и учет этих результатов при оценке значимости мнений экспертов. В конкретных методиках, реализующих процедуру «Делфи», эта идея используется в разной степени. Так, в упрощенном виде организуется последовательность итеративных циклов мозговой атаки. В более сложном варианте разрабатывается программа последовательных процедур анкетирования, исключая контакты между экспертами, но предусматривающих ознакомление их с мнениями друг друга между турами. В силу трудоемкости обработки результатов и значительных временных затрат первоначально предусматриваемые методики «Делфи» не всегда удается реализовать на практике. В последнее время процедура «Делфи» в той или иной форме обычно сопутствует другим методам моделирования систем – методу «дерева целей», морфологическому и т.п.

Метод синектики предназначен для генерирования альтернатив путем ассоциативного мышления, поиска аналогий поставленной задаче. В противоположность мозговому штурму здесь целью является не количество альтернатив, а генерирование небольшого числа альтернатив (даже единственной альтернативы), разрешающих данную проблему. Суть метода синектики заключается в том, что формируется группа из 5 – 7 человек, отобранных по признакам гибкости мышления, практического опыта (предпочтение отдается людям, менявшим профессии и специальности), психологической совместимости, общительности. Группа ведет систематическое направленное обсуждение любых аналогий с подлежащей решению проблемой, спонтанно возникающих в ходе бесед. Перебираются и чисто фантастические аналогии. Особое значение синектика придает аналогиям, порождаемым двигательными ощущениями. Это вызвано тем, что наши природные двигательные рефлексy сами по себе высокоорганизованы и их осмысление может подсказать хорошую системную идею. Предлагается, например, поставить себя на место фантастического организма, выполняющего функцию проектируемой системы и т.п. Раскрепощенность воображения, интенсивный творческий труд создают атмосферу душевного подъема, характерную для синектики. Успеху работы синектических групп способствует соблюдение определенных правил, в частности: 1) запрещено обсуждать достоинства и недостатки членов группы; 2) каждый имеет право прекратить работу без каких-либо объ-

яснений при малейших признаках утомления; 3) роль ведущего периодически переходит к разным членам группы и т.д.

Выделим этапы построения математической модели.

1. Определение предмета и цели моделирования, включая границы исследуемой ХТС и те основные свойства, которые должны быть отражены моделью.

2. Выбор языка (аппарата) моделирования. На сегодняшний день не существует общепризнанной классификации методов математического моделирования. Существуют несколько десятков «аппаратов» моделирования, каждый из которых представляет собой разветвленный раздел прикладной математики.

Оптимизационные модели могут использовать аппарат теории вероятностей (теория надежности, теория массового обслуживания, теория статистических решений), теории оптимизации (линейное и нелинейное, стохастическое, целочисленное, динамическое и другое программирование, многокритериальная оптимизация), дифференциальных уравнений и оптимального управления, дискретной математики (теория графов, теория расписаний и т.д.).

Теоретико-игровые модели могут использовать аппарат некооперативных игр, кооперативных игр, повторяющихся игр, иерархических игр, рефлексивных игр. Теория игр – раздел прикладной математики, исследующий модели принятия решений в условиях несовпадения интересов сторон (игроков), когда каждая сторона стремится воздействовать на развитие ситуации в собственных интересах. Под игрой при этом понимается взаимодействие сторон, интересы которых не совпадают.

Теория графов – раздел дискретной математики. Неформальное определение графа таково: графом называется совокупность вершин (изображаемых кружками) и связей между ними, изображаемых ориентированными дугами (со стрелками) или неориентированными ребрами (без стрелок). Язык графов оказывается удобным для моделирования многих физических, технических, экономических, биологических, социальных и других систем.

3. Выбор переменных, описывающих состояние ХТС и существенные параметры внешней среды, а также шкал их измерения и критериев оценки.

4. Выбор ограничений, т.е. множеств возможных значений переменных, и начальных условий (начальных значений переменных).

5. Определение связей между переменными с учетом всей имеющейся о моделируемой ХТС информации, а также известных законов, закономерностей и т.п., описывающих данную техническую систему. Именно этот этап иногда называют «построение модели» (в узком смысле).

6. Изучение устойчивости и адекватности модели.

Оптимизация заключается в том, чтобы среди множества возможных вариантов (моделей проектируемой ХТС) найти наилучшие в заданных условиях, при заданных ограничениях, т.е. оптимальные альтернативы. В этой фразе важное значение имеет каждое слово. Говоря «наилучшие», мы предполагаем, что у нас имеется целевая функция (критерий или ряд критериев), способ (способы) сравнения альтернативных вариантов. При этом важно учесть имеющиеся условия, ограничения, так как их изменение может привести к тому, что при одном и том же критерии (критериях) наилучшими окажутся другие варианты.

От этого недостатка свободны аналитические модели, но они редко могут быть построены и исследованы для достаточно сложных ХТС.

Понятие оптимальности получило строгое и точное представление в различных математических теориях, прочно вошло в практику проектирования и эксплуатации ХТС, сыграло важную роль в формировании современных системных представлений, широко используется в административной и общественной практике, стало понятием, известным практически каждому человеку. Это и понятно: стремление к повышению эффективности труда, любой целенаправленной деятельности как бы нашло свое выражение, свою ясную и понятную форму в идее оптимизации.

Различие между строго научным, математизированным и «общепринятым», житейским пониманием оптимальности, в общем-то, невелико. Если не вдаваться в подробности теории оптимизации с использованием математических моделей, то интуитивно оптимизация сводится в основном к сокращению числа альтернатив. Если специально стремиться к тому, чтобы на начальной стадии было получено как можно больше альтернатив, то для некоторых проблем их количество может достичь достаточно большого числа. Очевидно, что подробное изучение каждой из них приведет к неприемлемым затратам времени и средств. На этапе неформализованной оптимизации рекомендуется проводить «грубое отсеивание» альтернатив, проверяя их на присутствие некоторых качеств, желательных для любой приемлемой альтернативы. К признакам «хороших» альтернатив относятся надежность, многоцелевая пригодность, адаптивность, другие признаки «практичности». В отсеве могут помочь также обнаружение отрицательных побочных эффектов, недостижение контрольных уровней по некоторым важным показателям (например, слишком высокая стоимость) и пр. Предварительный анализ не рекомендуется проводить слишком жестко; для детального анализа и дальнейшего выбора необходимы хотя бы несколько альтернативных вариантов.

Важным требованием, предъявляемым к моделям, является требование их устойчивости при возможных изменениях внешних и внут-

ренных условий, а также устойчивости по отношению к тем или иным возможным изменениям параметров самой модели проектируемой ХТС. Для того чтобы понять роль устойчивости, обратимся к рассмотрению процесса построения математической модели некоторой реальной технической системы и проанализируем возможные «ошибки моделирования». Первым шагом является выбор того «языка», на котором формулируется модель, т.е. того математического аппарата, который будет использоваться. Как правило, этот этап характеризуется высоким уровнем абстрагирования – выбираемый класс моделей намного шире, чем моделируемый объект. Возможной ошибкой, которую можно совершить на этом шаге, является выбор неадекватного языка описания.

Когда для конкретной модели решается задача выбора оптимальных решений, то, если существует аналитическое решение для множества частных моделей, тогда, как правило, частные значения параметров, соответствующие конкретной модели, подставляются в это решение. Если аналитического решения не существует, то оптимальное решение ищется посредством имитационных экспериментов с привлечением вычислительной техники. На этом этапе – при численных расчетах – возникают вычислительные ошибки. Изучение устойчивости решений в большинстве случаев сводится к исследованию зависимости оптимального решения от параметров модели. Если эта зависимость является непрерывной, то малые ошибки в исходных данных приведут к небольшим изменениям оптимального решения. Тогда, решая задачу выбора по приближенным данным, можно обоснованно говорить о нахождении приближенного решения.

Обсудим теперь, что следует понимать под адекватностью модели. Оптимальное решение, полученное для конкретной модели, является оптимальным в том смысле, что при его использовании поведение модели соответствует предъявляемым требованиям. Рассмотрим насколько обоснованным является использование этого решения в реальной технической системе – моделируемом объекте. Наблюдаемое поведение модели является с точки зрения субъекта, осуществляющего моделирование, предполагаемым поведением реальной технической системы. Понятно, что в общем случае наблюдаемое поведение реальной системы и ее предполагаемое поведение могут различаться достаточно сильно. Следовательно, необходимо исследование адекватности модели, т.е. – устойчивости поведения не модели, а реальной системы относительно ошибок моделирования.

Действительно, представим себе следующую ситуацию. Пусть построена модель и найдено оптимальное в ее рамках решение. А что будет, если параметры модели «немного» отличаются от параметров реальной технической системы? Получается, что задача выбора реша-

лась не для «той» технической системы. Отрицать такую возможность, естественно, нельзя. Поэтому необходимо получить ответы на следующие вопросы:

– насколько оптимальное решение чувствительно к ошибкам описания модели, т.е. будут ли малые «возмущения» модели приводить к столь же малым изменениям оптимального решения (задача анализа устойчивости);

– будут ли решения, обладающие определенными свойствами в рамках модели (например, оптимальность, эффективность не ниже заданной и т.д.), обладать этими же свойствами и в реальной системе, и насколько широк класс реальных систем, в которых данное решение еще обладает этими свойствами (задача анализа адекватности).

Качественно, основная идея, используемая на сегодняшний день в математическом моделировании, заключается в следующем. Применение оптимальных решений приводит к тому, что они, как правило, оказываются неоптимальными при малых вариациях параметров модели. Возможным путем преодоления этого недостатка является расширение множества «оптимальных» решений за счет включения в него так называемых приближенных решений (т.е. «немного худших», чем оптимальные). Оказывается, что ослабление определения «оптимальность» позволяет, установив взаимосвязь между возможной неточностью описания модели и величиной потерь в эффективности решения, гарантировать некоторый уровень эффективности множества решений в заданном классе реальных систем, т.е. расширить область применимости решений за счет использования менее эффективных из них. Иными словами, вместо рассмотрения фиксированной модели реальной системы необходимо исследовать семейство моделей. Приведенные качественные рассуждения свидетельствуют, что существует определенный дуализм между эффективностью решения и областью его применимости (областью его устойчивости и/или областью адекватности).

Отобранные и проверенные на устойчивость и адекватность модели становятся основой для последнего, решающего этапа стадии моделирования – выбора модели для дальнейшей реализации. В системном анализе выбор (принятие решения) определяется как действие над множеством альтернатив, в результате которого получается подмножество выбранных альтернатив (обычно это один вариант, одна альтернатива, но не обязательно). При этом выбор тесно связан с оптимизацией, так как последняя есть ни что иное, как выбор оптимальной альтернативы.

Следующей стадией фазы проектирования ХТС является стадия конструирования, которая заключается в определении конкретных способов и средств реализации выбранной модели в рамках имеющихся

ся условий. Этот этап при создании ХТС будет заключаться в том, что на основе созданной концептуальной модели проекта начинается конструирование ее конкретных машин, аппаратов, узлов и механизмов, увязанных, согласованных между собой и в совокупности своей позволяющих в дальнейшем реализовать «в металле» концептуальную модель. Процесс конструирования включает в себя этапы: декомпозиции, агрегирования, исследования условий, построения программы.

Декомпозиция – это процесс разделения общей цели проектируемой ХТС на отдельные подцели-задачи в соответствии с выбранной моделью. В этом отношении декомпозиция аналогична процессу формулирования задач в научном исследовании: там задачи формулируются как цели решения отдельных подпроблем в соответствии с определенной общей целью исследования и построенной гипотезой. В то же время имеется и принципиальное отличие: исследователь манипулирует с объектом, предметом своего исследования один (даже при коллективной форме организации исследований у него есть, как правило, собственный предмет исследования), и исследователь обладает определенной свободой выбора, свободой маневра. В практической же деятельности дело обстоит гораздо сложнее – специалистам-практикам приходится решать весь комплекс возникающих задач, что называется, «в лоб».

Декомпозиция в иерархических системах предусматривает разделение общей цели на подцели (задачи), те, в свою очередь, разделяются на подзадачи и т.д. [17]. Декомпозиция позволяет расчленивть всю работу по реализации модели на пакет детальных работ, что делает возможным решение вопросов их рациональной организации, мониторинга, контроля и т.д. Основные правила декомпозиции заключаются в следующем.

1. Как правило, реализуется два противоположных подхода:

- подход «сверху» – целевой (целенаправленный) – для определения, как конкретная задача отвечает, согласуется с общей целью проекта (в соответствии с выбранной моделью);
- подход «снизу» – морфологический – для определения конкретных возможностей реализации задачи: по ресурсному обеспечению, по временным и пространственным возможностям, по квалификации работников и т.п.

2. Число задач в индивидуальном проекте или число компонентов каждой задачи коллективного проекта не должно быть больше так называемого числа Миллера 7 ± 2 . Содержание этого требования можно объяснить ограничением возможностей оперативной памяти человека, его способностью анализировать в оперативной памяти не более 5 – 9 составляющих и связей между ними.

3. Для каждой части проекта, соответствующей каждой задаче, определяются имеющие к ней отношение данные: продолжительность, объемы работ, необходимая информация, оборудование и т.д. и т.п.

4. По каждой задаче проводится критический анализ для подтверждения правильности и выполнимости поставленной задачи.

Процесс, в определенном смысле противоположный декомпозиции, – это агрегирование (дословно – соединение частей в целое). Для пояснения его сути приведем такой пример. Допустим, мы задумали создать самый современный автомобиль. Для этого возьмем самую лучшую и современную конструкцию инжектора, самую лучшую систему зажигания, самую лучшую коробку передач и т.д. А в результате не то что самого современного автомобиля, а даже просто автомобиля не получим – эти части, пусть самые лучшие и современные, не взаимосвязаны между собой. Таким образом, агрегирование – это процесс согласования отдельных задач реализации проекта между собой.

Основными методами агрегирования, если не брать в рассмотрение формальных математических моделей, являются определение конфигуратора и использование классификаций. Конфигуратором называется минимально достаточный набор различных языков описания процесса решения проблемы. Действительно, всякое сложное явление требует разностороннего, многопланового описания, рассмотрения с различных точек зрения. Только совместное (агрегированное) описание в понятиях нескольких качественно различающихся языков позволяет охарактеризовать явление с достаточной полнотой. Это соображение приводит к понятию агрегата, состоящего из качественно различных языков описания проектируемой системы и обладающего тем свойством, что число этих языков минимально, но необходимо для заданной цели. Этот агрегат и является конфигуратором [17].

Поясним на примерах [12].

1. В химической технологии для создания химического производства используется конфигуратор: принципиальная технологическая схема, схема компоновки оборудования и монтажно-технологическая схема. Технологическая схема определяется теми единицами оборудования, которые выпускаются промышленностью. Она должна объяснить во всех подробностях функционирование химического производства. Схема компоновки технологического оборудования и монтажно-технологическая схема является результатом расчленения производства в зависимости от геометрии объемов технологического оборудования и трубопроводов. Здесь главное в конфигураторе то, что синтез, проектирование и эксплуатация химического производства возможны только при наличии всех трех его описаний – любые два без третьего не имеют смысла.

2. В связи с идеей непрерывного образования – «образования через всю жизнь» возникает вопрос – какую языковую подготовку должна дать выпускнику общеобразовательная школа, чтобы он в дальнейшем имел возможность осваивать любую науку, любую деятельность? Общее образование должно дать ему знание языков:

- родного языка, русского языка и иностранных языков как средства получения и переработки любой информации и как средства общения;

- языка математики как универсального языка построения формальных моделей окружающей действительности, который может быть использован при изучении любой отрасли научного знания или при овладении любой профессиональной деятельностью;

- языка информатики, который сегодня необходим любому человеку в любой сфере человеческой деятельности.

Вот этот набор языков и является конфигуратором для построения содержания общего среднего образования в аспекте системы непрерывного образования. Отметим, что конфигуратор является содержательной моделью высшего возможного уровня. Перечислив языки, на которых мы будем говорить о системе, мы тем самым определяем, синтезируем тип системы, фиксируем наше понимание природы системы. Как всякая модель, конфигуратор имеет целевой характер и при смене цели может утратить свойства конфигуратора.

Простейший способ агрегирования состоит в установлении отношений эквивалентности между агрегируемыми элементами, т.е. в образовании классов. Классификация и рассматривается как систематизация классов объектов, как средство установления связей между ними. При этом класс может интерпретироваться как агрегированный представитель входящих в него элементов. Применение классификаций в целях упорядочения задач реализации проектируемой системы (а при иерархической их структуре – задач, подзадач и т.д.) позволяет выделить задачи как рядоположенные, равнозначные компоненты, поскольку они будут иметь общее основание классификации, сделав понятными связи между ними. Естественно, основания классификаций могут быть в каждом случае различными: по «пространственной» и временной структуре процесса реализации проекта, по составу, структуре и функциям (три основные характеристики, определяющие систему, если рассматривать каждую задачу как подсистему) и т.д.

Существуют и другие методы агрегирования, основывающиеся на математических моделях. Так, существенным эффектом, возникающим в сложных иерархических системах, является агрегирование информации. Наличие агрегирования (сжатия) информации неизбежно присуще сложным ХТС, в управлении проектами возникает необходимость агрегированного описания подпроектов, в задачах управления нельзя

обойтись без агрегированного описания состояний управляемой системы (так называемая задача комплексного оценивания) и т.д.

Таким образом, когда определена и выстроена вся взаимосвязанная совокупность задач реализации проекта (можно сказать, и это будет достаточно строго – система задач), начинается следующий этап конструирования системы – исследование условий.

Любая модель проектируемой системы может быть реализована в практике лишь при наличии определенных условий. Естественно, необходимо детальный анализ по каждой задаче (по всей системе задач) и по каждой группе условий: какие конкретные условия имеются для решения каждой конкретной задачи, какие условия необходимо выполнить, создать дополнительно.

Следует отметить, что в управлении проектами процедура исследования условий обычно именуется и рассматривается как исследование ресурсных возможностей. Как известно, ресурсами называются средства, запасы, возможности, источники чего-либо. При этом выделяется семь видов ресурсов:

- трудовые ресурсы;
- деньги;
- оборудование;
- техническая оснастка;
- материалы;
- информация;
- технологии.

Думается, понятие «условия», во-первых, более общее и поглощает понятие «ресурсы». Кроме того, условия, очевидно, и более широкое понятие. Например, мотивационные условия вряд ли можно рассматривать как вид ресурсов. Естественно, такое разделение процесса конструирования ХТС на последовательные этапы: декомпозиция, агрегирование, исследование условий, несколько условно. Процесс осуществляется как бы «последовательно-параллельно»: и выделение задач, и их агрегирование постоянно соотносятся с реальными условиями их решения, агрегирование задач вызывает зачастую необходимость пересмотра их состава и т.д.

Наконец, когда выстроена вся система задач реализации системы и исследованы условия ее реализации, приступают к последнему этапу конструирования системы – этапу построения программы реализации модели.

Программа реализации модели ХТС на практике – это конкретный план действий по реализации модели в определенных условиях и в установленные (определенные) сроки. Построение программы начинается с операции «определения основных шагов». Определение шагов

составляет начальную, наиболее обобщенную часть программы, которая потом разворачивается в укрупненный и, наконец, в детальный план.

Детальное планирование – это разработка детального графика (графиков в случае сложного проекта) выполнения работ по реализации ХТС. Детальный график, независимо от размеров проекта и его сложности, должен включать: все ключевые события и даты; точную последовательность работ. Логика их выполнения должна быть зафиксирована с помощью сетевого графика (сетевой диаграммы). Сетевой график позволяет проследить все виды зависимостей между работами и взаимосвязь событий реализации. График служит основой для определения этапов и прочих временных интервалов по реализации технической системы. Кроме того, он позволяет при необходимости определять потребности в ресурсах для каждой из частей, фрагментов или событий процесса реализации технической системы.

Сетевые графики строятся в виде графа – множества вершин, соответствующих работам, и связывающих их линий, представляющих взаимосвязи между работами: например, работа «Б» не может начаться раньше, чем завершится работа «А».

Основная цель работы с сетевым графиком заключается в том, чтобы сократить до минимума продолжительность проекта (время реализации ХТС), в первую очередь – за счет выделения и минимизации так называемого «критического пути». Максимальный по продолжительности путь в сети, связывающий начальную и конечную вершину графа, называется критическим. Работы, лежащие на этом пути, также называются критическими. Именно длительность критического пути определяет наименьшую общую продолжительность реализации системы в целом. Длительность процесса реализации проекта может быть сокращена за счет сокращения длительности работ, лежащих на критическом пути. Соответственно, любая задержка выполнения работ критического пути повлечет увеличение длительности процесса реализации технической системы. При этом анализу подлежат не только работы критического пути, но в той или иной степени близкие к нему, так как подобные работы даже при самом незначительном изменении графика могут стать критическими и существенно изменить сроки реализации системы. Для оптимизации сетевых графиков применяют методы календарно-сетевого планирования и управления, позволяющие распределить ограниченные ресурсы между работами проекта таким образом, чтобы он был завершен за минимальное время.

При разработке детального графика реализации спроектированной системы удобно также использовать так называемую диаграмму Ганта – горизонтальную линейную диаграмму, на которой задачи реализации системы представляются протяженными во времени отрезка-

ми, характеризующимися календарными датами начала и окончания выполнения работ, а также, возможно, другими временными параметрами и, быть может, указанием взаимосвязи работ, используемых в них ресурсов и т.д. Здесь важно подчеркнуть то обстоятельство, что исполнители по тем работам, которые невозможно начать сразу, не дождавшись результатов предыдущих работ, не должны ждать, ничего не предпринимая. Они могут плодотворно использовать это время для планирования своей деятельности. Кроме того, несколько работ могут выполняться параллельно, если для этого хватает ресурсов. Существенная особенность составления сетевого графика заключается в том, что он планируется с обеих сторон – и с начала, и с конца. Руководитель проекта, определив список работ (обеспечивающих достижение цели проекта), первым делом задается вопросами: когда следует получить все необходимые результаты (с учетом взаимозависимости работ), и когда могут быть реально получены эти результаты. И затем от баланса этих сроков в первом приближении прикидывается, в какой последовательности выполнять работы, когда следует начинать ту или иную работу, и когда она должны закончиться. Разработкой детального плана-графика работ по реализации завершается стадия конструирования системы.

Последняя стадия фазы проектирования ХТС – стадия технологической подготовки процесса реализации спроектированной системы на практике. Она заключается в подготовке рабочих материалов, необходимых для реализации спроектированной системы: учебно-программной документации, методических разработок, программного обеспечения и т.д., а также, например, должностных инструкций исполнителей при реализации сложного проекта и т.п. Поскольку технологическая подготовка процесса реализации технической системы целиком определяется его конкретным содержанием и в каждом конкретном случае она специфична, подробно описать эту стадию в общем виде вряд ли возможно.

Таким образом, мы рассмотрели всю последовательность проектирования ХТС во всей ее полноте. Естественно, в простых случаях вовсе необязательно выполнять весь этот набор процедур. Но чем сложнее проект, чем больше заинтересованных участников он охватывает, тем все больше проектирование будет «вписываться» в эту общую схему.

Технологическая фаза проекта заключается в практической реализации спроектированной системы. Реализуется она посредством технологий. Переходя к разговору о технологиях практической профессиональной деятельности, приходится констатировать, что общих подходов к описанию технологий, общих принципов, правил их построения пока не существует, а применение тех или иных технологий

целиком определяется конкретным содержанием каждого проекта. Традиционно технология определяется как совокупность методов обработки, изготовления, изменения состояния, свойств, формы сырья, материала или полуфабриката, осуществляемых в процессе производства продукции.

В последние десятилетия понятие «технология» стало применяться в более широком смысле. Сегодня наметились два подхода в трактовании этих понятий. В первом, следующем традиции – технология рассматривается как «совокупность приемов и способов переработки различных сред». В другом подходе, очевидно, больше соответствующем современному проектно-технологическому типу организационной культуры: «Под технологией понимается совокупность методов, операций, приемов и т.д., последовательное осуществление которых обеспечивает решение поставленной задачи». В этом определении важно то, что технологии направлены на решение той или иной определенной задачи.

Напомним, что задача – это цель (подцель), заданная в конкретных условиях. Это принципиально новый подход к определению технологий. В то же время и это определение нуждается в уточнении. Во-первых, в нем отсутствует понятие средств. Ведь если мы говорим о технологии, допустим, вытачивания болта, то одними операциями и т.д. мы не обойдемся. Нужен еще токарный станок, резцы к нему, т.е. средства. Или информационные технологии немислимы без компьютера и программных средств. Во-вторых, операции и приемы относятся к более общему понятию метода. В-третьих, речь должна идти не просто о совокупности методов и средств, а об определенном образом упорядоченной их совокупности, т.е. фактически о системе. В-четвертых, любая задача решается в определенных конкретных условиях. В-пятых, необходимы определенные формы организации деятельности. С учетом сказанного, можно предложить следующее определение технологии: технология – это система условий, форм, методов и средств решения поставленной задачи.

Последней, завершающей фазой любого проекта является его рефлексивная фаза. Технологическая фаза проекта завершилась реализацией спроектированной ХТС на практике. Теперь специалист-практик (или коллектив) должен отрефлексировать – «обратиться назад»: осмыслить, сравнить, оценить исходные и конечные состояния:

- объекта своей продуктивной деятельности – итоговая оценка (самооценка результатов) реализации проекта;
- субъекта деятельности, т.е. самого себя – самооценка и рефлексия.

Как известно, оценка рассматривается как сопоставление полученного результата с поставленной целью по заранее установленным

критериям. Содержание, структура, порядок оценки эффективности реализации проекта зависит, естественно, от самой системы, ее специфики, масштабов и т.д. Тем не менее можно сформулировать некоторые общие группы вопросов, на которые необходимо ответить по итогам реализации проекта:

- достигнута ли цель проекта? Если нет, то почему? Какова тогда степень частичного достижения цели? Если результаты превзошли поставленную цель – то опять же – почему? И в какой степени?

- удалось ли реализовать все задачи, составляющие в совокупности поставленную цель? Какие задачи оказались нерешенными? Почему?

- как были переструктурированы задачи в процессе реализации проекта для достижения поставленной цели (а это, в общем-то, как правило, неизбежно в ходе реализации проекта)? Какой опыт переструктурирования задач можно использовать в дальнейшем?

- к каким последствиям (как непосредственным, так и опосредованным) привела реализация проекта: социальным, экономическим, культурным, экологическим? В чем эти последствия положительны, а в чем – отрицательны (ведь, как известно, любое более или менее крупное действие имеет и положительные, и отрицательные последствия)? Каковы могут быть отдаленные последствия реализации проекта (также непосредственные и опосредованные)?

- как повлияла реализация проекта на внешнюю среду? Чьи интересы она затронула, деформировала?

- какова дальнейшая «судьба» реализованной системы? Подлежит ли она совершенствованию? В чем? Созданию в перспективе на ее основе новой системы? и т.д.;

- могут ли быть тиражированы (где? как?) полученные результаты?

- какой опыт приобрели участники в проектировании, реализации, оценке, рефлексии проекта? В чем он заключается? Как его можно использовать в дальнейшем?

- и т.д.

При оценке эффективности реализации проекта следует иметь в виду ряд особенностей. Во-первых, трудности оценки эффективности большинства проектов связаны с тем, что они не имеют зачастую аналогов в предыстории, и, в связи с этим их как бы не с чем сравнивать. Во-вторых, реализация проекта может не дать немедленного положительного результата, результаты могут проявляться впоследствии. А ведь и участники проекта, и представители как «внутренней», так и «внешней» среды чаще всего ожидают немедленной «отдачи».

В-третьих, в силу того обстоятельства, что критерии оценки зачастую слабы, недостаточно объективны и используют слабые шкалы измерений или не используют таковых вовсе, мнения как участников проекта, так и представителей «среды» могут быть различными, подчас противоположными. Поэтому общая оценка в таких случаях вырабатывается в обсуждениях, в дискуссии. Основными методами оценки эффективности реализации проекта являются самооценка и экспертиза.

Кроме того, существуют формальные методы оценки с использованием математического аппарата. Помимо экспертных оценок, в качестве «точек отсчета» при оценке эффективности реализации проекта могут выступать: первоначальные цели проекта, результаты реализации аналогичных проектов, нормативные (устанавливаемые нормативными документами) показатели. Итоговые документы – отчеты и т.п. по реализации проекта во многих случаях могут и не требоваться. Тем не менее даже в этих случаях лучше оформить отчет, пусть даже «для себя». Письменный документ позволяет систематизировать и мысли участников, и сами результаты. А если проект того заслуживает, то результаты его реализации целесообразно либо опубликовать – в виде тезисов докладов, статей или отдельных брошюр и т.п., либо сохранить в той или иной информационной системе – чтобы накопленный опыт и знания могли в дальнейшем использовать и другие.

Естественно, для проведения рефлексивного анализа в соответствии с приведенной выше схемой движения в рефлексивном плане от специалиста-практика требуется целый комплекс умений:

- умение осуществлять контроль своих действий – как проективных, так и технологических;
- контролировать логику развертывания своей мысли (суждения);
- определять последовательность и иерархию этапов деятельности, опираясь на рефлексию над опытом своей прошлой деятельности через поиск ее оснований, причин, смысла;
- умение видеть в известном – неизвестное, в очевидном – неочевидное, в привычном – непривычное, т.е. умение видеть противоречие, которое только и является причиной движения мысли;
- умение осуществлять диалектический подход к анализу ситуации, встать на позиции разных «наблюдателей»;
- преобразовывать объяснение наблюдаемого или анализируемого явления в зависимости от цели и условий.

При построении и реализации коллективных проектов широко применяется метод рефлексивных по своей природе организационно-деятельностных игр. Рефлексивные процессы, естественно, постоянно пронизывают всю деятельность специалиста-практика, коллектива и т.д. по проектированию и реализации сложной ХТС.

1.2. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ ИНТЕГРИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ХТС В УСЛОВИЯХ ИНТЕРВАЛЬНОЙ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ

Химическое производство представляет последовательность трех основных переделов: подготовки сырья, собственно химического превращения и выделения целевых продуктов. Эта последовательность переделов воплощается в единую сложную ХТС. Под ХТС (объектом) далее в книге понимается либо химико-технологический аппарат, либо отдельный агрегат или технологическая схема химического производства, а также физико-химические процессы, осуществляемые в конкретном объекте.

Современное химическое предприятие как ХТС большого масштаба состоит из большого числа взаимосвязанных подсистем (производств, цехов, отделений, отдельных агрегатов, реакторов, технологических машин и аппаратов, систем автоматического и автоматизированного управления технологическими процессами и производством), между которыми существуют отношения соподчиненности в виде иерархической структуры с тремя уровнями (рис. 1.1).

Отдельная подсистема химического предприятия представляет собой совокупность технологических процессов, аппаратов и систем автоматического управления, действующих как одно целое для достижения заданной цели.

Первую низшую ступень иерархической структуры химического предприятия как сложной ХТС образуют типовые процессы химической технологии, осуществляемые в определенном аппаратурном оформлении (механические, гидродинамические, тепловые, диффузионные и химические процессы), и локальные системы управления (стабилизации) ими. Каждый типовой ХТП, осуществляемый в том или ином аппаратурном оформлении, или определенную взаимосвязанную совокупность типовых ХТП рассматривают как ХТС или ее подсистему, имеющую некоторые определенные входы (количественные характеристики потоков сырья и полупродуктов, конструктивные и режимные параметры, возмущающие воздействия) и выходы (переменные состояния ХТС, количественные характеристики потока готовой продукции, технико-экономические показатели ХТС, показатели энерго- и ресурсосбережения, экологической безопасности ХТС и т.п.).

Введем обозначения: $C(\bullet)$ или $I(\bullet)$ – критерий эффективности проектируемой ХТС; $\omega \in \Omega$ – ассортимент выпускаемой продукции; \mathfrak{X} – структура ХТС (совокупность технологических стадий химического производства и связей между ними); $a \in A$ – тип аппаратурного оформления технологических стадий производства; $z \in Z$ – вектор режимных (управляющих) переменных функционирования технологиче-

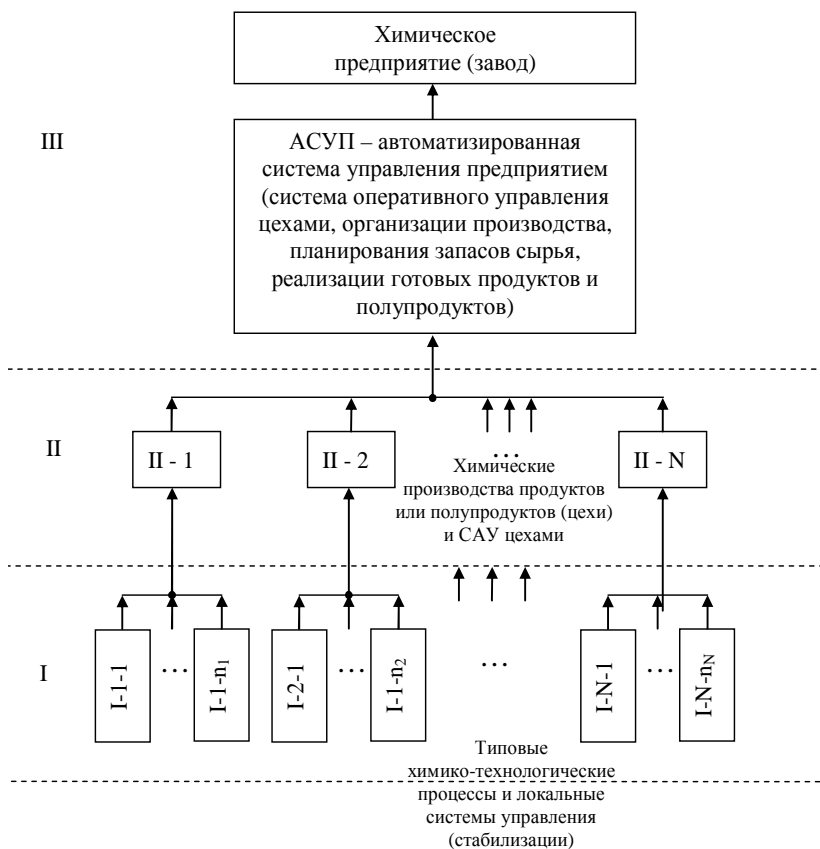


Рис. 1.1. Иерархическая структура химического производства

ских стадий производства; $d \in D$ – вектор конструктивных параметров технологического оборудования производства; $b \in B$ – класс системы автоматического управления (автоматические системы регулирования, системы статической оптимизации, системы динамической оптимизации и т.п.); $h \in H$ – структура системы управления; $s \in S$ – вектор настроечных параметров системы управления; $\xi \in \Xi$ – вектор внешних и внутренних неопределенных параметров ХТС.

Структурная схема ХТС представлена на рис. 1.2.

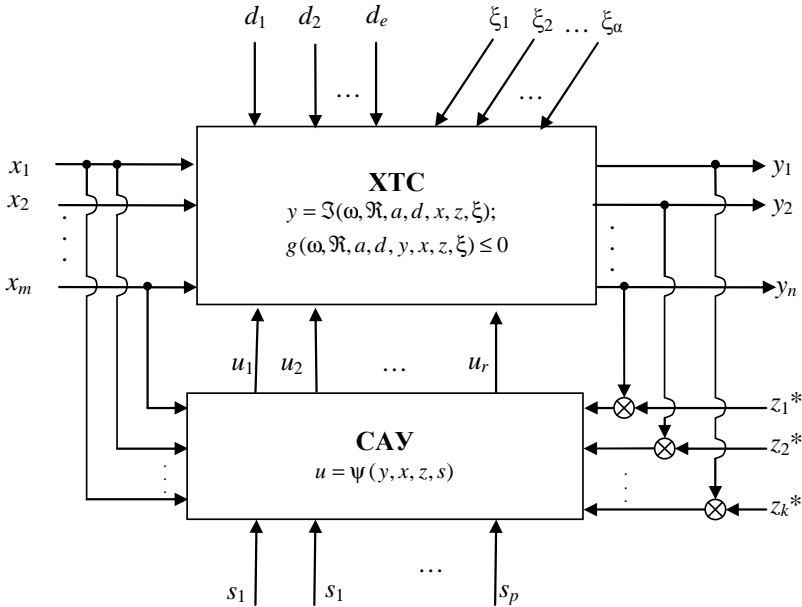


Рис. 1.2. Структурная схема автоматизированной ХТС:

$\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_\alpha)$ – вектор неопределенных параметров (возмущающих воздействий) объекта; $z = (z_1, z_2, \dots, z_k)$ – вектор режимных переменных состояния ХТС (оптимальных заданий регуляторам);
 $u = (u_1, u_2, \dots, u_k)$ – вектор управляющих переменных (управлений) объекта;
 $s = (s_1, s_2, \dots, s_p)$ – вектор настроечных параметров системы автоматического управления; $\mathfrak{S}(\bullet)$ – оператор модели ХТС; $\Psi(\bullet)$ – оператор системы управления ХТС; $g(\bullet)$ – оператор технологических ограничений функционирования объекта;
 $x = (x_1, x_2, \dots, x_m)$ – вектор входных переменных объекта;
 $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ – вектор выходных переменных объекта;
 $d = (d_1, d_2, \dots, d_l)$ – вектор конструктивных параметров объекта

Операторы математических моделей технологических процессов химического производства и системы управления имеют вид

$$\mathfrak{S} : \Omega \times \mathfrak{R} \times A \times D \times Z \times U \times X \times \Xi \rightarrow Y$$

$$\text{или } Y = \mathfrak{S}(\omega, a, d, z, u, x, \xi),$$

$$\Psi : B \times Y \times X \times Z \times S \times \Xi \rightarrow U$$

$$\text{или } U = \Psi(b, y, x, z, s, \xi).$$

При анализе функционирования ХТС входные переменные разделяют на возмущающие и режимные (управляющие) переменные (воз-

действия). Возмущающие переменные, являющиеся количественной характеристикой внешних и внутренних возмущений, которым всегда подвержена любая ХТС (изменение расхода и состава сырья, изменение температуры в аппаратах и т.д.), стремятся противодействовать целенаправленному осуществлению ХТП, отклоняя их от заданного направления. Для того чтобы при функционировании ХТС выходные переменные соответствовали заданным (целевым) значениям и не отклонялись от них под влиянием возмущающих переменных, на ХТС необходимо воздействовать управляющими переменными, являющимися количественной характеристикой управляющих воздействий ХТС (изменение расхода, состава или других характеристик исходного сырья).

Типовые ХТП, осуществляемые в определенном аппаратурном оформлении, чаще всего представляют собой детерминированные системы, для которых выходные и все входные переменные заранее известны и между ними существует однозначная функциональная зависимость.

На нижней ступени иерархии химического предприятия происходит структурное обогащение информации, характеризующей функционирование подсистем, а задачу управления подсистемами в основном сводят к локальной стабилизации технологических параметров типовых ХТП.

Основу второго уровня иерархии химического предприятия составляют производственные цеха и системы автоматического управления цехами. Цех – это взаимосвязанная совокупность отдельных типовых технологических процессов, систем, машин и аппаратов, при взаимодействии которых возникают статистические распределенные по времени возмущения, т.е. существуют стохастические взаимосвязи между входными и выходными переменными подсистем. Для анализа функционирования подсистем второго уровня иерархии необходимо использовать статистико-вероятностные математические методы. На этой ступени иерархии происходит статистическое обогащение информации, а при управлении подсистемами возникают задачи оптимизации и программирования для оптимальной координации работы аппаратов и оптимального распределения нагрузок между ними.

Третий, высший уровень иерархической структуры химического предприятия – это системы оперативного управления совокупностью цехов, системы организации производства, планирования запасов сырья и реализации готовых продуктов. На этой ступени иерархии происходит семантическое обогащение информации и возникают задачи ситуационного анализа и оптимального управления всем предприятием, для решения которых применяют математические модели системотехники – теории игр, исследования операций, теории массового об-

служивания и др., требующие привлечения различных специалистов в области экономики, организации производства и управления.

Современные химические производства отличаются многостадийностью получения целевых продуктов, сложностью технологических решений, высокой энергонасыщенностью и материалоемкостью, большой протяженностью и сложностью трубопроводных и кабельных коммуникаций, глубокой функциональной взаимозависимостью по материальным, энергетическим и информационным потокам отдельных стадий. Для размещения таких сложных производств, коммуникаций и всех служб возникает необходимость в создании специализированных зданий, подземных сооружений и эстакад.

Строительство и пуск промышленных производств связаны со значительными затратами денежных средств, материальных и трудовых ресурсов и поэтому они должны вестись по проектам, обеспечивающим:

- реализацию последних достижений науки и техники, передового отечественного и зарубежного опыта;
- внедрение высокопроизводительного энергосберегающего оборудования, установок и агрегатов большой единичной мощности;
- рациональное использование природных ресурсов, комплексное использование сырья и материалов, организацию малоотходной энергосберегающей технологии производства;
- автоматизацию и механизацию ХТП, отдельных технологических машин и аппаратов.

Развитие современных химических производств сопровождается значительным усложнением их структуры, созданием энерготехнологических циклов, машин и аппаратов сложных конструкций, работающих в условиях агрессивных сред, высоких температур и давлений. В связи с этим при интегрированном проектировании необходимо решать также и проблемы охраны окружающей среды, обоснованного применения конструкционных материалов, обеспечения надежности технологического оборудования, безопасности производства. Все это требует совершенствования процесса интегрированного проектирования, повышения качества рабочей документации, четкого определения совокупности нормативных документов по отдельным стадиям проекта.

Структурно-параметрическое описание химического производства изображено на рис. 1.3. В зависимости от производимого ассортимента ω оно включает в себя различные совокупности технологий (технологических стадий производства), может иметь альтернативные варианты аппаратурно-технологического оформления стадий a_1, a_2, a_3, \dots , которые фиксируются на уровне параметрического описания множествами D_1, D_2, D_3, \dots конструктивных параметров, и ха-

рактируется множеством режимных (управляющих) переменных Z_1, Z_2, Z_3, \dots (U_1, U_2, U_3, \dots). Для управления технологическими процессами (аппаратами) могут быть выбраны различные классы систем автоматического управления b_1, b_2, b_3, \dots , фиксация параметров которых осуществляется на уровне множеств настроечных параметров S_1, S_2, S_3, \dots .

Помимо структурно-параметрического описания, представляющего собой множество проектных параметров и ограничений, при проектировании ХТС необходимо иметь в наличии математические модели (статики и динамики) технологических процессов (аппаратов), отражающие связи показателей эффективности функционирования проектируемого производства, конструктивных и режимных (управляющих) переменных с входными переменными ХТС и исходными данными для проектирования.

Структурно-параметрическое описание проектируемого многоассортиментного химического производства удобно интерпретировать И/ИЛИ графом, в котором множество вершин разбито на два класса (рис. 1.3): И-вершины (изображенные в виде кругов) и ИЛИ-вершины (изображенные в виде квадратов).

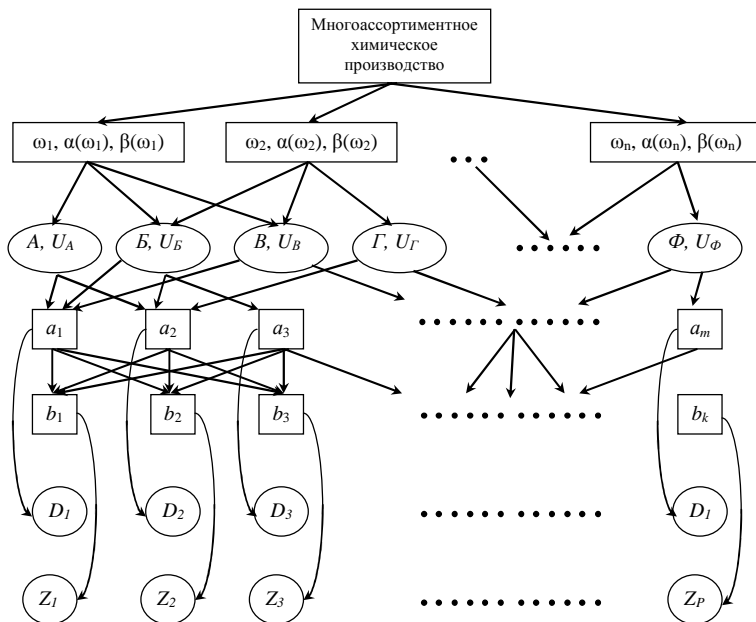


Рис. 1.3. Структурно-параметрическое описание многоассортиментного химического производства

Первый ярус – И-вершины (ω , $\alpha(\omega)$, $\beta(\omega)$) интерпретируются как исходные данные для проектирования; здесь задаются ассортимент, спецификация качества выпускаемой продукции и требования к проектируемому производству в соответствии с техническим заданием.

Второй ярус – ИЛИ-вершины содержательно интерпретируются как совокупность технологий (технологических стадий) проектируемого химического производства и структур управления производством.

Третий ярус – также ИЛИ-вершины соответствуют альтернативным вариантам аппаратурного оформления технологических стадий и систем автоматизации (управления) этими стадиями. Конкретный вариант структурно-параметрического описания дается деревом и получается отождествлением каждой И-вершины с одной из ее подвершин (фиксация параметрического описания), выделением из каждой группы ИЛИ-вершин, имеющих И-вершину (родителя), одной ИЛИ-вершины и отождествлением последней с одной из подвершин (фиксация структурного описания). Формализацию структурно-параметрического описания завершает его отождествление с вершинами конструктивных $d \in D$ и настроечных параметров $s \in S$ системы управления химическим производством.

С использованием графа, оценочных функций $I(\bullet)$ эффективности функционирования проектируемого химического производства, эвристических и экспертных оценок выбирается наиболее перспективный вариант аппаратурного оформления и системы управления технологическими процессами химического производства.

1.3. СРЕДСТВА И МЕТОДЫ ИНТЕГРИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ

Общим для задач принятия оптимальных решений, которые возникают на разных стадиях и этапах интегрированного проектирования ХТС, является то, что они могут быть сформулированы математически в форме задач нелинейного или стохастического программирования. К сожалению, среди численных методов оптимизации не существует универсального. Как правило, решение задач оптимизации на различных этапах проектирования требует индивидуального подхода и связано с применением нескольких методов поиска оптимальных решений, и даже в этом случае успех во многом будет зависеть от квалификации и опыта проектировщика. В связи с этим в интегрированных САПР ХТС большое внимание отводится вопросам принятия оптимальных решений в интерактивном режиме, когда проектировщик имеет возможность оперативно взаимодействовать с ЭВМ на любом этапе решения задачи. При этом в результате диалога он может изменять как число, так и тип варьируемых (оптимизируемых) переменных,

выбирать наиболее эффективный в сложившейся ситуации метод поиска, подстраивать численные параметры методов к конкретным особенностям целевой функции (критерия эффективности) оптимального проектирования ХТС.

Такой подход к принятию оптимальных решений в интегрированных САПР ХТС позволяет осуществлять адаптацию методов оптимизации к особенностям и трудностям конкретной практической задачи, но для этого проектировщик должен понимать, в каких случаях и какие методы оптимизации необходимо применять для того или иного класса экстремальных задач, возникающих на различных этапах проектирования ХТС.

Количественную информацию об эффективности функционирования и о характеристиках свойств проектируемой ХТС можно получить методом компьютерного моделирования. Для этого многомерные массивы количественной информации о состоянии ХТС в различные моменты времени и при различных условиях должны быть сведены к ограниченному числу некоторых агрегированных переменных (обобщенных оценок эффективности функционирования и характеристических свойств проектируемой ХТС). Указанные обобщенные оценки представляют собой числовые функциональные характеристики химического производства.

Критерий эффективности (целевая функция) функционирования ХТС – это числовая функциональная характеристика, оценивающая степень приспособления ХТС к выполнению поставленных перед ней задач (см. п. 1.1). Критерии эффективности широко используют для сравнительной оценки альтернативных вариантов при проектировании ХТС, оптимизации конструктивных и режимных переменных ХТС, сравнительной оценки алгоритмов управления технологическими режимами функционирования ХТС. В общем случае критерий эффективности функционирования ХТС зависит от конструктивных и режимных переменных, структуры ХТС и управления ею, внешних и внутренних случайных или неопределенных факторов (параметров) $\xi \in \Xi$. Пусть критерий эффективности $I(\bullet)$ химического производства представляет собой векторную целевую функцию. Введем также множества $I \in E^p$ показателей эффективности функционирования производства и $Q \in E^q$ показателей технологических условий (ограничений), соответствующих технологическому регламенту эксплуатации производства и определяющих наряду с критерием $I(\bullet)$ достижение целей, указанных в техническом задании на проектирование ХТС. Будем считать, что на множествах I и Q заданы функциональные зависимости $\alpha: \Omega \rightarrow I$, $\beta: \Omega \rightarrow Q$.

Заметим, что вектор $\xi \in \Xi$ помимо части входных переменных (расходов, концентраций, температуры, гранулометрического состава и т.п.) включает также известные с некоторой степенью неопределенности физико-химические и термодинамические характеристики перерабатываемых веществ, свойства конструкционных материалов технологического оборудования, коэффициенты тепло- и массопереноса, кинетические константы химических реакций и т.п. Неопределенные параметры могут быть заданы некоторыми априори известными интервалами значений, что необходимо учитывать при расчете процессов и аппаратов проектируемой ХТС.

Решение задачи оптимального проектирования сложной ХТС невозможно простым перебором возможных структур (технологий) получения заданных ассортиментов продукции, типов аппаратурно-технологического оформления процессов, классов и структур систем управления, векторов конструктивных и режимных переменных из-за высокой размерности задачи (см. рис. 1.3), нелинейности технологических процессов, сложности алгоритмов вычисления компонент векторной целевой функции $I(\bullet)$. Требуется декомпозиция задачи, разработка стратегии применения методов автоматизированного проектирования, поскольку допустимая область проектных параметров $\Omega \times \mathfrak{R} \times A \times D \times Z \times X \times \Xi$ строится в ходе самого процесса проектирования.

Сформулируем в общем виде задачу проектирования энерго- и ресурсосберегающей ХТС в статике. Требуется определить такие \mathfrak{R}^* , $a^* \in A$, $b^* \in B$, $d^* \in D$, $z^* \in Z$, при которых для заданного $\omega \in \Omega$ выполняются соотношения

$$M_{\xi} \left\{ I(\omega, \mathfrak{R}^*, a^*, b^*, d^*, z^*, \xi) \right\} \succ \alpha(\omega); \quad (1.1)$$

$$\text{Вер}_{\xi} \left\{ g(\omega, \mathfrak{R}^*, a^*, b^*, d^*, z^*, \xi) \leq \beta(\omega) \right\} \geq \rho_{\text{зад}}, \quad (1.2)$$

где \succ – знак частичного упорядочения на множестве I показателей эффективности функционирования ХТС; $M_{\xi} \{ \bullet \}$ – математическое ожидание величины $\{ \bullet \}$ на множестве Ξ , $\Xi = \left\{ \xi \mid \xi_k^{\min} \leq \xi_k \leq \xi_k^{\max}, k = \overline{1, n} \right\}$; $\text{Вер}_{\xi} \{ \bullet \}$ – вероятность выполнения технологических условий (ограничений) $g(\omega, \mathfrak{R}^*, a^*, b^*, d^*, z^*, \xi) \leq \beta(\omega)$; $\rho_{\text{зад}}$ – значение гарантированной вероятности выполнения технологических условий (ограничений).

Сформулированная задача (1.1), (1.2) заключается в определении такой структуры \mathfrak{R}^* ХТС, системы машин и аппаратов, технологиче-

ских трубопроводов a^* и автоматического управления технологическими процессами b^* , z^* , вектора конструктивных d^* параметров ХТС, варианта компоновки технологического оборудования и т.п., для которых усредненные показатели эффективности производства $M_{\xi}\{I(\bullet)\}$ для заданного ассортимента ω не хуже заданных $\alpha(\omega)$, а технологические условия (ограничения) $g(\omega, \mathcal{R}^*, a^*, b^*, d^*, z^*, \xi) \leq \beta(\omega)$ выполняются с заданной (гарантированной) вероятностью $\rho_{\text{зад}}$. При $\rho_{\text{зад}} < 1$ получаем задачу с мягкими (вероятностными) ограничениями, при $\rho_{\text{зад}} = 1$ – задачу с жесткими ограничениями.

Используя системный подход, нами предложена декомпозиция задачи стохастического программирования (1.1), (1.2) в виде последовательности итерационно детерминированных задач нелинейного программирования и оптимального управления, решаемых высокоэффективными традиционными методами. При этом обеспечивается поэтапное сужение множеств A , D , B и Z . Блок-схема многостадийной стратегии интегрированного проектирования химических производств и систем автоматического управления показана на рис. 1.4.

В соответствии с разработанной методологией интегрированного проектирования итерационно решаются три основные задачи: 1) генерирование альтернативных вариантов ХТС, удовлетворяющих условиям гибкости (в жесткой, мягкой или смешанной форме); 2) выбор альтернативных классов и структур САУ ХТС, удовлетворяющих условиям структурной наблюдаемости и управляемости ХТС с заданными динамическими свойствами по каналам управления; 3) решение одной или двухэтапной задач оптимизации конструктивных и режимных (управляющих) переменных комплекса «ХТС–САУ» в условиях неопределенности по векторному критерию, включающему показатели качества производимой продукции, энерго- и ресурсосбережения, а также технико-экономические показатели производства.

В качестве альтернативных классов систем автоматического управления будем рассматривать замкнутые (с обратной отрицательной связью) и разомкнутые системы, предназначенные для решения задач стабилизации режимов, адаптивной статической оптимизации, динамической оптимизации (определение программы управления), программного управления (реализации известной программы управления) и оптимального управления нестационарными режимами ХТС (для полунепрерывных и периодических процессов).

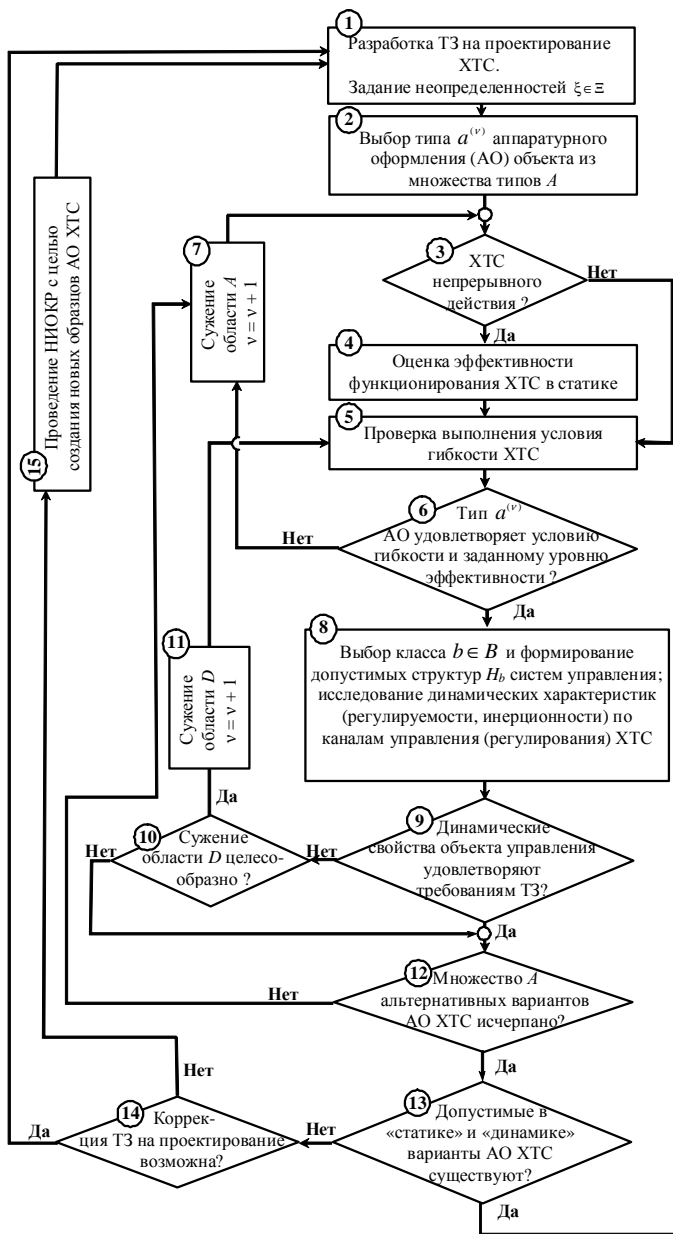
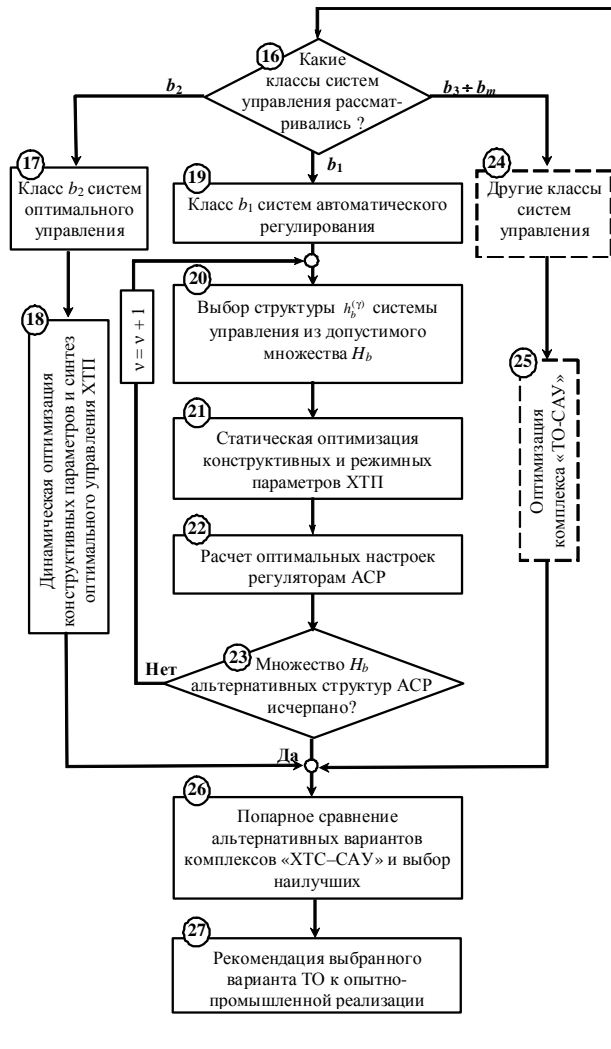


Рис. 1.4. Блок-схема принятия решений при интегрированном ТЗ – техническое задание; АО – аппаратное



проектировании автоматизированных ХТС:
 оформлении; САУ – система автоматического управления

Выбор класса и структуры САУ осуществляется с использованием множества регулируемых (наблюдаемых) переменных и управляющих воздействий, полученных из анализа структурной матрицы уравнений динамики ХТС. При этом учитываются наблюдаемость выходных переменных ХТС, оценка затрат на разработку необходимых датчиков, приборов, возможность и точность прогноза выходных переменных по косвенным показателям, управляемость ХТС с той или иной комбинацией управляющих воздействий. Альтернативные классы и структуры САУ исследуются методом имитационного моделирования в порядке их ранжирования по критерию экономической целесообразности. Для допустимых структур САУ проводится исследование динамических показателей (регулируемости, инерционности и др.) ХТС по каналам управления (регулирования). В том случае, если управляемые в статике ХТС имеют неудовлетворительные динамические характеристики, то производится коррекция конструктивных и режимных параметров ХТС (найденных на первом этапе), либо выбираются новые типы аппаратурного оформления ХТС.

Для решения задач синтеза энерго- и ресурсосберегающего управления нелинейными (по фазовым координатам) ХТС в замкнутой САУ применяются высокоэффективные методы АКОР по критерию обобщенной работы академика А.А. Красовского [18].

На завершающем этапе интегрированного проектирования осуществляется решение многокритериальной задачи оптимизации для альтернативных комплексов «ХТС–САУ». В ходе имитационных исследований помимо вычисления оценок показателей энерго- и ресурсосбережения, экономической целесообразности также определяется техническое задание на точность и быстродействие информационно-измерительной подсистемы, алгоритмов оптимального управления, исполнительных механизмов и устройств управления, на разработку подсистем адаптации моделей и алгоритмов управления. По результатам имитационных исследований проверяется достижимость поставленных целей функционирования ХТС и осуществимость требований технического задания. В том случае, если эти требования не достижимы, осуществляется переход к новым обликам аппаратурного оформления ХТС или выбору новой структуры ХТС.

Из рисунка 1.4 следует, что при проектировании автоматизированной ХТС решается комплекс сложнейших задач: выбор способа (технологии) и структуры ХТС, расчет и выбор технологического оборудования с заданными статическими и динамическими характеристиками, определение оптимальных режимов его функционирования, разработка системы автоматического управления (регулирования) и (или) автоматизированного управления отдельными технологическими стадиями (процессами) и производством в целом, составление оперативного-производственных планов и др. Проектирование ХТС включает в

себя разработку технического задания (ТЗ), отражающего потребности общества в продукции этого производства, и реализацию ТЗ в виде проектной документации. Обычно ТЗ представляют в виде некоторых документов и оно является исходным (первичным) описанием проектируемого химического производства. Результатом проектирования служит полный комплект документации, соединяющий достаточные сведения для воспроизводства (реализации объекта проектирования). Эта документация и есть проект, точнее окончательное описание проектируемой ХТС.

В ТЗ на проектирование ХТС указывают следующие сведения:

- назначение ХТС;
- литературные данные о технологии производства и сведения об аналогичных ХТС за рубежом;
- обзор научно-исследовательских работ по отдельным технологическим стадиям производства; описание технологических схем опытных и полупромышленных установок, на которых отработывался технологический процесс;
- основные технико-экономические показатели объекта, в том числе мощность, производительность, производственная программа (план);
- требования к качеству, конкурентной способности и экологическим параметрам продукции;
- требования к технологии;
- технические характеристики исходного сырья, основных продуктов и вспомогательных материалов (включая воду, азот для технических целей, теплоносители и хладагенты); области применения основных продуктов;
- физико-химические свойства исходных, получаемых промежуточных и конечных продуктов;
- химизм процесса по стадиям; физико-химические основы процесса, предварительная (эскизная) технологическая схема производства;
- рабочие (номинальные) технологические параметры (режимы) производства;
- материальный баланс производства по стадиям процесса;
- характеристики побочных продуктов и отходов; рекомендации по их утилизации;
- математическое описание технологических стадий;
- рекомендации по автоматизации производства;
- методы очистки сточных вод и обезвреживания газовых выбросов;
- экономическое обоснование производства, включающее прогнозы потребности в товарном продукте и обеспечение производства сырьем на перспективу.

Из приведенного перечня требований (рекомендаций) ТЗ следует особо выделить вопросы, касающиеся условий эксплуатации химического производства и требований к выходным переменным производства (химико-технологических процессов и аппаратов), интересующим потребителя. Наряду с качественными характеристиками (представленными в вербальной форме) можно выделить числовые параметры, для которых указаны области допустимых значений.

1.4. МЕТОДОЛОГИЯ ИНТЕГРИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ХТС В УСЛОВИЯХ ИНТЕРВАЛЬНОЙ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ

Методология интегрированного проектирования сложных ХТС, как следует из вышестоящих разделов книги, отражает характерную для сложных систем невозможность полной централизации в одном звене обработки информации и принятия решений по управлению процессом проектирования. Это приводит к необходимости формирования иерархической структуры системы автоматизированного проектирования, соответствующей уровневой декомпозиции объекта проектирования и этапной декомпозиции самого процесса проектирования.

Процесс интегрированного проектирования сложного химико-технологического объекта протекает преимущественно «сверху вниз», т.е. имеет нисходящий характер. При этом по мере «проработки» проекта «сверху вниз» увеличивается подробность описания (детализации) проектируемой ХТС. Цель выполняемых на различных этапах проектирования расчетных и экспериментальных исследований – уточнить параметры и характеристики проектируемого объекта, принять наиболее рациональные проектно-конструкторские решения. Отсюда следует итерационно-циклический характер процесса проектирования, выражающийся в чередовании процедур синтеза и анализа проектно-конструкторских решений.

Проектно-конструкторские решения принимаются в условиях неопределенности (противоречий), связанных с неполнотой имеющейся информации на ранних этапах проектирования, с грубым (неточным) описанием (моделированием) отдельных стадий проектируемой ХТС, использованием упрощенных методик оценки его показателей и т.п. Таким образом, весь ход разработки проекта ХТС можно интерпретировать как последовательный процесс снятия неопределенностей (разрешения противоречий).

Интегрированное проектирование занимает особое место среди информационных технологий. Во-первых, интегрированное проектирование – синтетическая дисциплина, ее составными частями являются многие другие современные информационные технологии. Так,

техническое обеспечение интегрированных САПР основано на использовании вычислительных сетей и телекоммуникационных технологий, в интегрированных САПР используются персональные компьютеры и рабочие станции. Математическое обеспечение интегрированных САПР отличается богатством и разнообразием используемых методов вычислительной математики, статистики, математического программирования, дискретной математики, искусственного интеллекта. Программные комплексы интегрированных САПР относятся к числу наиболее сложных современных программных систем, основанных на операционных системах *Unix*, *Windows-95NT*, языках программирования *C*, *C++*, *Java* и других современных CASE-технологиях, реляционных и объектно-ориентированных системах управления базами данных (СУБД), стандартах открытых систем и обмена данными в компьютерных средах.

Во-вторых, знание основ интегрированного проектирования и умение работать со средствами интегрированных САПР требуется практически любому инженеру-разработчику сложных технических объектов. Компьютерами насыщены проектные фирмы, конструкторские бюро и офисы. Предприятия, ведущие разработки без интегрированных САПР или лишь с малой степенью их использования, оказываются неконкурентоспособными как вследствие больших материальных и временных затрат на проектирование, так и из-за невысокого качества проектов.

Принципиально важно при интегрированном проектировании рассматривать влияние неопределенных параметров на работоспособность и оптимальность функционирования ХТС.

При проектировании ХТС всегда присутствуют неопределенности двух родов. Одни из них, такие как параметры сырья и температура окружающей среды, могут изменяться во время их работы, оставаясь в пределах некоторого диапазона изменений. Для них принципиально невозможно указать единственное значение. Другие могут быть в реальности постоянными для данного промышленного аппарата, но их значения известны с точностью до определенного интервала, например некоторые коэффициенты в кинетических уравнениях и уравнениях тепло- и массопереноса. Чтобы учесть неопределенности в математическом описании проектируемого объекта, достаточно их выделить в зависимости для целевой функции (критерия оптимальности) I и функций-ограничений g_j задачи оптимального проектирования, считая, что $I = I(a, d, z, \xi)$, $g_j = g_j(a, d, z, \xi)$, $j = 1, \dots, m$, где ξ – вектор неопределенных параметров, принимающих любые значения из заданной области Ξ .

Все переменные в задаче оптимального проектирования ХТС в условиях неопределенности параметров могут быть разделены на следующие категории. Вектор a проектных параметров ассоциируется со структурой ХТС и типом технологического оборудования, а вектор d – размерами оборудования. Эти переменные, как правило, считаются неизменными, когда проект реализован, и не меняются в процессе функционирования ХТС.

Вектор z ассоциируется с режимами функционирования ХТС и обозначает управляющие переменные, точнее оптимальные задания регуляторам САУ, которыми можно манипулировать в процессе функционирования химико-технологического объекта таким образом, чтобы, во-первых, выполнялись требования ТЗ и обеспечивалась работоспособность о объекта, и во вторых, минимизировались эксплуатационные затраты.

Вектор ξ задает неопределенные параметры. Предположим, что нам задано номинальное значение вектора неопределенных параметров ξ^N и ожидаемые отклонения $\Delta\xi^+$, $\Delta\xi^-$ от номинального значения $\xi^L = \xi^N - \Delta\xi^-$, $\xi^U = \xi^N + \Delta\xi^+$. Тогда область Ξ , содержащую все возможные значения неопределенных параметров, можно представить в следующем виде:

$$\Xi = \{ \xi \mid \xi^L \leq \xi \leq \xi^U \}.$$

Традиционно при проектировании ХТС решается более простая, в отличие от (1.1), (1.2), задача оптимизации:

$$\min_{d,z} \bar{I}(d, y, z, \xi^N), \quad (1.3)$$

при связях и ограничениях:

$$y = \mathfrak{S}(d, z, \xi); \quad (1.4)$$

$$\bar{g}_j(d, z, \xi) \equiv y_{j\text{зад}} - y_j \leq 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad (1.5)$$

где $\bar{I}(\bullet)$ – критерий оптимального проектирования; y, d, z, ξ – векторы выходных, конструктивных, режимных (управляющих) переменных и неопределенных параметров проектируемого объекта соответственно; $y = \mathfrak{S}(d, z, \xi)$ – оператор математической модели химико-технологического объекта; $y_{j\text{зад}}$ – предельно допустимое значение j -й выходной переменной химико-технологического объекта; $g_j(d, z, \xi) \leq 0$, $j = 1, \dots, m$ – функции ограничений; ξ^N – номинальное значение вектора неопределенных параметров.

Если вектор выходных переменных (или переменных состояния) y выразить (может быть неявно) как функцию d, z, ξ^N из уравнений материального и теплового балансов $Q(d, z, y, \xi) = 0 \Rightarrow y = \mathfrak{S}(d, z, \xi)$ и подставить в зависимости $\bar{I}(d, y, z, \xi^N)$ и $\bar{g}(d, y, z, \xi^N)$, то получим известную «приведенную» постановку задачи оптимизации конструктивных и режимных переменных химико-технологического объекта при интегрированном проектировании:

$$\min_{d, z} I(d, z, \xi^N) \quad (1.6)$$

при ограничениях

$$g_j(d, z, \xi^N) \leq 0, \quad j \in J. \quad (1.7)$$

В этом случае решение задачи оптимального проектирования по критерию $I = I(d, z, \xi)$ и с функциями-ограничениями $g_j = g_j(d, z, \xi)$, $j = 1, \dots, m$, оказывается неопределенным и зависит от значения, которое принял вектор ξ .

Ограничения в задаче оптимального проектирования могут быть «жесткими» (безусловными) и «мягкими» (вероятностными). Жесткие ограничения не должны нарушаться ни при каких условиях. Мягкие ограничения должны выполняться с заданной вероятностью. Большинство реальных задач относится к случаю, когда часть ограничений является «жесткими», другая часть – «мягкими». Например, ограничения по безопасности промышленного аппарата относятся к разделу «жестких», а ограничения на производительность и селективность могут быть отнесены к разделу «мягких».

Традиционный путь преодоления данного затруднения состоит в следующем. Вектору неопределенных параметров приписывают некое «номинальное» значение $\xi = \xi^N$ и решают задачу проектирования при номинальном ξ^N с получением номинального значения вектора конструктивных переменных d^N при заданном типе аппаратного оформления. После этого на основе имеющихся знаний о проектируемом объекте и интуиции вводят так называемые коэффициенты запаса $k_i (k_i > 1)$ и принимают при проектировании $d_i = k_i d_i^N$, где d_i – i -я компонента вектора d , $i = 1, \dots, n$ (длина и диаметр реактора, поверхность теплообмена в теплообменнике, число тарелок в ректификационной колонне и т.п.).

Недостатки данного подхода очевидны, так как он не гарантирует ни оптимальности полученного решения, ни того, что все ограничения будут выполнены во время эксплуатации промышленного аппарата. Если коэффициенты запаса окажутся недостаточными, то ограничения будут нарушены, если слишком большими, то проект не будет экономичным.

Существенно более правильным и научно обоснованным является подход, когда неопределенность в коэффициентах математического описания и технологических параметрах учитывается в самой постановке задачи интегрированного проектирования.

Важнейшим компонентом работоспособности проектируемой ХТС является «гибкость» – способность ХТС иметь допустимую рабочую точку (режим) функционирования для всего диапазона Ξ неопределенных условий, которые могут возникать в процессе эксплуатации ХТС. Понятно, что и другие компоненты работоспособности ХТС, такие как управляемость, надежность, безопасность и другие в равной степени важны. Тем не менее исследование гибкости проектируемой ХТС – это первый шаг, который должен быть сделан для оценки работоспособности проекта.

Можно сформулировать две задачи, связанные с анализом гибкости проектируемой ХТС: А – оценка работоспособности ХТС для априори заданного интервала неопределенности; Б – количественная оценка индекса гибкости проекта и определение максимально достижимого уровня индекса гибкости проекта.

Задача анализа работоспособности проектируемой ХТС, определяемой вектором проектных (конструктивных) параметров d , будет заключаться в определении управляющих переменных z таких, чтобы выполнить ограничения (требования по спецификации качества выпускаемой продукции, производительности, надежности технологического оборудования, безопасности производства и др.):

$$g_j(d, z, \xi) \leq 0, \quad j \in J \quad (1.8)$$

для всех $\xi \in \Xi$.

Рассмотрим при фиксированном ξ следующую задачу:

$$\eta(d, \xi) = \min_z \max_{j \in J} g_j(d, z, \xi), \quad (1.9)$$

где $\eta(d, \xi)$ – функция выполнимости ограничений (1.8). Если $\eta(d, \xi) \leq 0$, то проектируемый технический объект, описываемый вектором d , работоспособен при фиксированном ξ ; в противном случае, при $\eta(d, \xi) > 0$ – неработоспособен при фиксированном ξ .

При $\eta(d, \xi) = 0$ проектируемый технический объект с вектором d находится на границе допустимой области функционирования, поскольку в этом случае $g_j(d, z, \xi) = 0$ хотя бы для одного номера $j \in J$. Задачу (1.9) можно переформулировать в форме стандартной задачи математического программирования, определяя скалярную величину α такую, что

$$\eta(d, \xi) = \min_{z, \alpha} \alpha \quad (1.10)$$

при ограничениях

$$g_j(d, z, \xi) \leq \alpha, \quad j \in J. \quad (1.11)$$

Если $g_j(\bullet)$ – нелинейные функции по z , то задача (1.10)–(1.11) представляет собой задачу нелинейного программирования.

Для установления работоспособности проектируемой ХТС необходимо убедиться в том, что $\eta(d, \xi) \leq 0$ для всех $\xi \in \Xi$. В этом случае задача анализа гибкости проектируемой ХТС, описываемой вектором проектных параметров d , может быть сформулирована в следующем виде:

$$\chi(d) = \max_{\xi \in \Xi} \eta(d, \xi), \quad (1.12)$$

где $\chi(d)$ – соответствует функции гибкости проекта ХТС с вектором d .

При $\chi(d) \leq 0$ допустимое функционирование (работоспособность) ХТС может быть достигнуто для всей области Ξ возможных изменений вектора неопределенных параметров ξ .

При $\chi(d) > 0$ допустимое функционирование ХТС невозможно для некоторой подобласти Ξ .

Математическая постановка задачи (А) анализа гибкости проектируемой ХТС может быть сформулирована в следующем виде:

$$\chi(d) = \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J} g_j(d, z, \xi). \quad (А)$$

Введем количественную оценку гибкости проекта, определяемого вектором конструктивных параметров d .

Для этого запишем область изменения неопределенных параметров в виде

$$\Xi(\delta) = \{\xi \mid \xi^N - \delta \Delta \xi^- \leq \xi \leq \xi^N + \delta \Delta \xi^+\},$$

где δ – неотрицательная скалярная переменная: при $\delta = 1$ имеем $\Xi(1) = \Xi$; при $\delta < 1$ – $\Xi(\delta) \subset \Xi$; при $\delta > 1$ – $\Xi \subset \Xi(\delta)$.

Определение. Будем называть индексом гибкости F наибольшее значение δ , для которого выполняются ограничения (1.8) для всей области $\Xi(F)$.

Сформулируем математическую постановку задачи (Б) определения индекса гибкости F проектируемой ХТС, описываемого вектором проектных параметров d

$$F = \max \delta$$

при ограничениях

$$\begin{aligned} \chi(d) &= \max_{\xi \in \Xi(\delta)} \min_z \max_{j \in J} g_j(d, z, \xi) \leq 0, \\ \Xi(\delta) &= \left\{ \xi \mid \xi^N - \delta \Delta \xi^- \leq \xi \leq \xi^N + \delta \Delta \xi^+ \right\}, \\ \Xi(F) &= \left\{ \xi \mid \xi^N - F \Delta \xi^- \leq \xi \leq \xi^N + F \Delta \xi^+ \right\}. \end{aligned} \quad (\text{Б})$$

Значения неопределенных параметров $\xi^c \in \Xi(F)$, соответствующие решению задачи (Б), называются критическими точками.

Если удастся установить, что критические точки соответствуют вершинам многогранника $\Xi(F)$, то решение задач (А) и (Б) может быть значительно упрощено. Рассмотрим задачу анализа гибкости проекта в предположении, что ξ^k , $k \in K$ представляют вершины многогранника Ξ . В этом случае можно записать, что

$$\chi(d) = \max_{k \in K} \eta(d, \xi^k),$$

где $\eta(d, \xi^k)$ находится из решения задачи оптимизации (1.9).

Следует заметить, что в задаче (Б) величина $\chi(d)$ достигает нулевого значения, $\chi(d) = 0$, в точке оптимального решения, поскольку критическая точка всегда будет находиться на границе допустимой области функционирования ХТС. Пусть $\Delta \xi^k$, $k \in K$ обозначает направление от номинальной точки ξ^N до k -й вершины многогранника Ξ . Тогда максимальное отклонение δ^k от границы вдоль $\Delta \xi^k$ мы получим из решения следующей экстремальной задачи:

$$\delta^k = \max_{z, \delta} \delta, \quad k \in K$$

при ограничениях

$$\begin{aligned} g(d, z, \xi^k) &\leq 0, \quad j \in J, \\ \xi^k &= \xi^N + \delta \Delta \xi^k. \end{aligned}$$

Анализ полученных прямоугольных областей изменения ξ показывает, что только наименьший прямоугольник может быть вписан в допустимую область, который определяет индекс гибкости

$$F = \min_{k \in K} \{ \delta^k \}.$$

На рисунке 1.5 изображен диапазон изменения вектора неопределенных параметров ξ , который ассоциируется с индексом гибкости для данного проекта ХТС [3, 33].

Следует заметить, что только при условии выпуклости функций $g_j(\bullet)$ по переменным z и ξ критические точки ξ^c будут соответствовать вершинам многогранника Ξ .

Это условие существенно ограничивает применение рассмотренных выше постановок задач анализа гибкости (А) и определение индекса гибкости (Б) при проектировании ХТС, поскольку возникают определенные трудности в проверке условий выпуклости функций ограничений $g_j(\bullet)$.

Вторая проблема, возникающая при решении сформулированных выше задач (А) и (Б) методом анализа вершин многогранника Ξ , – проблема размерности решаемой задачи. Так при $n_p = 10$ требуется решение экстремальных задач типа (1.9) в количестве $2^{10} = 1024$, а при $n_p = 20 - 2^{20} = 1\,048\,576$, где n_p – размерность вектора $\xi \in \Xi$.

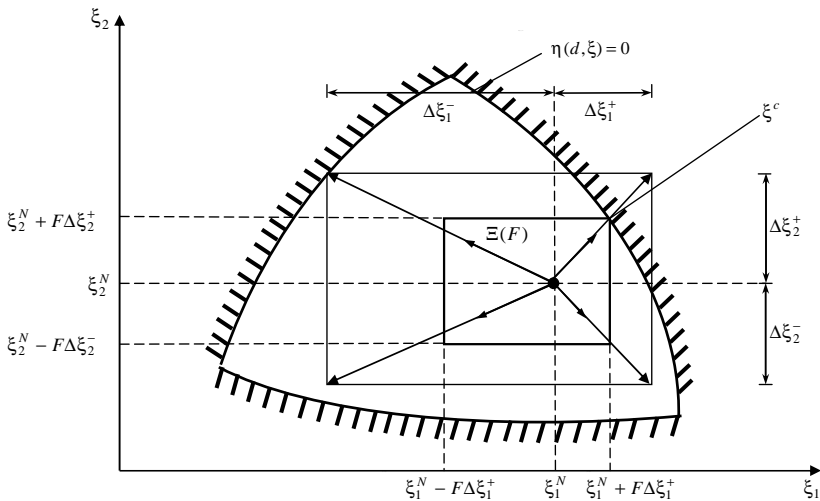


Рис. 1.5. Наибольшая допустимая область изменения параметров ξ

В задаче интегрированного проектирования ХТС проектные переменные d должны быть выбраны таким образом, чтобы минимизировать математическое ожидание стоимости $C(d, z, \xi)$ проекта ХТС:

$$\min_d M_{\xi} \left[\min_z C(d, z, \xi) \mid g(d, z, \xi) \leq 0 \right], \quad (1.13)$$

или

$$\min_d M_{\xi \in \Xi(F)} \left[\min_z C(d, z, \xi) \mid g(d, z, \xi) \leq 0 \right]$$

при ограничении

$$\max_{\xi \in \Xi(F)} \eta(d, \xi) \leq 0,$$

где $M_{\xi}\{\bullet\}$ – символ математического ожидания случайной величины ξ ; F – индекс гибкости ХТС.

Бесконечное число точек $\Xi(F)$ может быть аппроксимировано дискретным множеством точек ξ^k , $k = 1, 2, \dots, K$, которое выбирается из условия наилучшего покрытия множества $\Xi(F)$ сеткой. В результате можно получить конечномерную по ξ задачу оптимального проектирования:

$$\min_{d, z^1, z^2, \dots, z^K} \sum_{k=1}^K w_k C(d, z^k, \xi^k) \quad (1.14)$$

при ограничении

$$g(d, z^k, \xi^k) \leq 0, \quad k = \overline{1, K},$$

где w^k – веса, которые присвоены каждой точке ξ^k ; $\sum_{k=1}^K w_k = 1$. Весовые

коэффициенты в формуле (1.14) являются коэффициентами квадратной формулы.

Алгоритм аппроксимации задачи (1.11) с помощью задачи (1.14) включает следующие шаги.

Шаг 1. Выбирается априори начальное множество точек ξ^k , $k = \overline{1, K}$.

Шаг 2. Решается многомерная задача оптимизации (1.14) с целью определения вектора проектных переменных параметров d .

Шаг 3. Проверяется работоспособность проекта ХТС в области $\Xi(F)$, определяемого вектором d , через решение задачи

$$F = \max \delta$$

при ограничении

$$\chi(d) = \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J} g_j(d, z, \xi) \leq 0.$$

Если проект ХТС осуществим, то процедура прерывается, иначе находится критическая точка ξ^c из оценки гибкости, которая добавляется в дискретный ряд ξ -точек и осуществляется переход к шагу 2.

Заметим, что при решении практических задач проектирования требуется максимум одна-две итерации для нахождения работоспособного проекта ХТС этим методом и определения области $\Xi(F)$.

1.5. ОРГАНИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ИНТЕГРИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ

Научно-технологичное развитие и технологическая модернизация химического комплекса должны в полной мере учитывать тенденции развития мировой экономики. По мнению ведущих экспертов, основные направления исследований и разработок в промышленно развитых странах в ближайшие годы будут сконцентрированы на решении следующих крупных стратегических проблем [19]:

- оборона и техногенная безопасность (в том числе химическая и биологическая безопасность);

- технологии материалов – создание новых классов материалов, пригодных для эксплуатации в экстремальных условиях, сочетающих высокую прочность с легким весом;

- энергетика и ее распределение – разработки, ориентированные на получение энергии из возобновляемых источников, достижение оптимальных соотношений в применении природного газа, нефтепродуктов, угля, атомной энергии, биоэнергии, водорода, топливных элементов;

- медицинские технологии – создание быстрых и совершенных средств диагностики и терапии;

- информационные ресурсы – разработка эффективных методов сбора, обработки, накопления, доступа к информации по широкой тематике с обеспечением возможности быстрого анализа ее содержания;

- охрана окружающей среды.

В целях обеспечения перспективного развития российского химико-технологического комплекса предлагается обеспечить реализацию мер, направленных на повышение эффективности НИОКР, стимулирование инновационной активности, технического перевооружения и модернизации действующих производств, применение средств автоматизации интегрированного проектирования сложных химико-технологических объектов (систем).

Автоматизация интегрированного проектирования сложных ХТС в настоящее время занимает ведущее положение среди других процессов, поддерживаемых информационными технологиями, поскольку знание основ автоматизации проектирования и умение работать со

средствами систем автоматизированного проектирования (САПР) требуется практически любому химику-технологу.

Исследование затрат времени работы проектировщиков в процессе создания проекта сложных ХТС показали, что 30..40% времени тратится на согласование отдельных частей проекта, около 50...60% – на выполнение эскизов, чертежей, расчетов, составление проектной документации, и только 10...20% – на творческое осмысление задачи. Кроме того, при традиционном проектировании решения принимаются без многовариантной проработки, а в основе расчетов и согласований обычно лежат укрупненные показатели, на базе которых и выполняется корректировка решений по совокупности показателей. При такой практике проектирования получение технологически и экономически оптимального проекта сложной ХТС проблематично.

В самом широком понимании, которое мы приняли выше в настоящей работе, *проект* – это ограниченное во времени целенаправленное изменение отдельной ХТС с установленными требованиями к качеству результатов, возможными рамками расхода средств и ресурсов и специфической организацией. Под термином «*организация*» понимается объединение людей, совместно реализующих некоторую программу или цель и действующих на основе определенных процедур и правил. Примерами являются предприятие, фирма, корпорация и т.д. Под *управлением проектами* будем понимать совокупность процессов по планированию, координации и контролю работ для реализации целей проектов с учетом ограничений на ресурсы, бюджет и требований качества. В более широком смысле под управлением проектами понимается применение знаний, практического опыта, инструментальных средств и методов для удовлетворения потребностей заинтересованных лиц проекта.

Участники проекта – это физические лица и организации, которые непосредственно вовлечены в проект или чьи интересы могут быть затронуты при осуществлении проекта. Состав участников проекта, их роли, распределение функций и ответственности зависят от типа, вида, масштаба и сложности проекта и от того, на какой стадии/фазе жизненного цикла находится проект в данный момент времени. Как правило, основными (ключевыми) участниками проекта являются:

Заказчик – главная сторона, заинтересованная в осуществлении проекта и достижении его результатов, будущий владелец и пользователь результатов проекта. Заказчик определяет основные требования и масштабы проекта, обеспечивает финансирование проекта за счет своих средств или средств привлекаемых инвесторов, заключает контракты с основными исполнителями проекта, несет ответственность по этим контрактам, управляет процессом взаимодействия между всеми участниками проекта.

Руководитель (менеджер) проекта – физическое лицо, которому делегируются полномочия по руководству всеми работами по осуществлению проекта: планированию, контролю и координации работ всех участников проекта. Он является персонально ответственным за осуществление проекта. *Команда проекта* – специфическая организационная структура, совокупность отдельных лиц, групп и/или организаций, привлеченных к выполнению работ проекта и ответственных перед руководителем проекта за их выполнение. Создается целевым образом на период осуществления проекта. Главная задача команды проекта – выполнение работ по проекту, осуществление функций координации действий и согласование интересов всех участников проекта для достижения целей проекта. Подчеркнем отличие команды от коллектива. Под *командой* понимается «коллектив (объединение людей, осуществляющих совместную деятельность и обладающих общими интересами), способный достигать цели автономно и согласованно, при минимальных управляющих воздействиях» [20].

Существенными в определении команды являются два аспекта. Первый – достижение цели, т.е. конечный результат совместной деятельности является для команды объединяющим фактором. Второй аспект – автономность и согласованность деятельности – означает, что каждый из членов команды не только демонстрирует поведение, требуемое в данных условиях (позволяющее достичь поставленной цели), но это есть именно то поведение, которого от него ожидают другие члены команды.

По организации деятельности проекты отличаются от *технологических операций*. Операции постоянны и повторяемы, в то время как проекты временны и уникальны. Деятельность любой организации может состоять как из проектов, так и из операций, причем те и другие могут частично совпадать, перекрываться. Характерными *признаками проекта* являются: 1) направленность на достижение конечных целей, определенных уникальных результатов; 2) координированное выполнение многочисленных взаимосвязанных работ с поуровневой детализацией по видам деятельности, ответственности, объемам и ресурсам; 3) ограниченная протяженность во времени, с определенными моментами начала и завершения; 4) ограниченность требуемых ресурсов; 5) специфическая организация управления.

Таким образом, ключевым отличием проектной деятельности от процессной деятельности (процесс – совокупность технологических операций, пример – предприятие, осуществляющее регулярную, повторяющуюся, цикличную деятельность, выпуская одну и ту же продукцию) является однократность, т.е. нецикличность, проектной дея-

тельности. Естественно, некоторые частные виды деятельности внутри проекта могут носить циклический характер. С другой стороны, нарушение «регулярного» функционирования предприятия или организации может рассматриваться как совокупность проектов (например, увеличение объема производства, установка нового оборудования, захват новых рынков сбыта, реструктуризация и т.д.). Так как проект – целенаправленное изменение некоторой системы, протекающее во времени, то для его описания можно использовать «проектную нотацию», делающую акцент на динамике, и «процессную нотацию», делающую акцент на устойчивых состояниях – выполнении стабильных работ, причем «стыковка» процессов в моменты начала и завершения процессов (соответствующие точки называются событиями, вехами) определяется логикой и технологией проекта (например – сетевым графиком). Руководителей любого уровня смущает, а иногда и раздражает противопоставление процессного и проектного подхода в управлении. И тот, и другой нацелен на достижение результата с помощью выполнения некоторого набора работ (действий). Но в процессном подходе действия совершаются до достижения результата, а содержание и технология (последовательность действий), как правило, не меняются (деятельность осуществляется в практически неизменных внешних условиях). Так как процесс предполагает повторяемость и регулярность достижения результата, вероятность каких-то изменений минимальна. В проектном же подходе и технология, и содержание работ может меняться, если результат недостижим или велика вероятность срыва графика. Кроме того, результаты предыдущих этапов могут стать основанием для разработки и изменения, не только графика, но и содержания последующих работ, что характерно для высокотехнологичных или научных проектов. Если использовать эти подходы грамотно, то они только дополняют и усиливают, а не исключают друг друга. Тем не менее их совместное использование предполагает нацеленность действий на разные по своей природе объекты, например, на систему управления проектами для процессного подхода и на сами проекты для проектного. Возможных вариантов их совместного использования много, и каждый зависит от специфики проектов и организаций, их реализующих.

Любая организация или фирма, чтобы быть успешной на рынке, ставит перед собой стратегические цели обеспечения конкурентоспособности своих товаров, услуг, технологий и бизнес-процессов. Переход от стратегии к конкретным тактикам и действиям исполнителей в проектах может «пробуксовывать» из-за отсутствия регулярного механизма, который бы устанавливал нужные приоритеты. Эта проблема

может быть успешно решена в рамках управления *портфелем проектов* – набором проектов (не обязательно технологически зависимых), реализуемым организацией в условиях ресурсных ограничений и обеспечивающим достижение стратегических целей. При формировании портфеля удастся учесть стратегические цели и расставить нужные приоритеты для проектов, пакетов работ и самих работ, используя процессный подход. А затем успешно реализовать включенную в портфель совокупность проектов, также используя оба подхода.

Современная концепция управления проектами заключается в создании организации, развитие, изменение деятельности, а иногда и сама деятельность которых может быть представлена как совокупность различных проектов, обеспечивающих достижение именно в совокупности стратегических целей организации. Такие организации становятся более конкурентоспособными по отношению к вертикально интегрированным предприятиям с их функциональной организацией деятельности, т.е. ориентированной на стабильные специализированные процессы. Эта концепция ставит на одно из главных мест в системе управления предприятием так называемый *офис управления проектами* (ОУП) [21], который координирует работу подразделений, отвечающих за обеспечение проектов критическими ресурсами, руководствуясь при этом корпоративными стратегией и политикой. ОУП – это «офис» (физический или виртуальный) – в состав которого входят специалисты в области управления проектами, выполняющие функции управления проектами в своей организации. Также ОУП является центром накопления знаний организации в области управления проектами. ОУП участвует в отборе проектов, помогает в определении приоритетов в портфелях проектов и т.д.

Таким образом, проектный и процессный подход не противоречат друг другу. С одной стороны, в рамках современного проектно-технологического типа организационной культуры все больший приоритет приобретают проекты как завершенные циклы деятельности. С другой стороны, в условиях динамично меняющихся требований к результатам организации ее деятельность приобретает вид процесса постоянной реализации проектов. Иллюстрацией этой тенденции является смещение акцентов в теории управления проектами с проблем управления отдельными проектами на проблемы управления портфелями проектов. Диалектическая смена акцентов с проекта на процесс и наоборот (на качественно новом уровне) как раз и характеризует один из аспектов смены организационных культур. С этой точки зрения следующим типом организационной культуры будет, наверное, знаковый тип организационной культуры, в рамках которого именно

знания (индивидуальные и коллективные) об организации деятельности будут способом нормирования и трансляции деятельности, а формой общественного устройства будет общество знаний (сейчас распространен термин «экономика знаний»).

Проект промышленной ХТС – это комплекс технической документации, необходимый для сооружения этого объекта. В проект входят пояснительные записки, инженерно-технические расчеты, чертежи, технологические регламенты, сведения о поставке сырья и удалении отходов химического производства, информация об организации труда, сметы на все производственные и культурно-бытовые сооружения будущего химического предприятия.

Проектная документация предназначена для так называемого *заказчика*. В качестве заказчика могут выступать юридические и частные лица, т.е. организации и лица, заинтересованные в выпуске продукции будущим производством. Проектная документация разрабатывается *проектировщиком*. Проектировщиком считается организация, имеющая лицензию на проектную деятельность.

В разработке и реализации проекта кроме проектной организации (*генеральный подрядчик*) принимают участие специализированные предприятия: строительные, монтажные, пусконаладочные и другие, которые называются *субподрядчиками*.

Отношения между заказчиком и подрядчиками регламентируются инструкциями о порядке разработки, согласовании, утверждении и составе проектной документации на строительство предприятий, например, Строительные Нормы и Правила (СНиП) 11-01–95.

Отправным пунктом разработки проектной документации является утвержденное *обоснование инвестиций* в строительство химического производства (предприятия). Это технико-экономическое доказательство необходимости создания промышленного химико-технологического объекта. Обоснование инвестиций делает заказчик, а точнее служба маркетинга организации-заказчика.

Обоснование инвестиций составляется по специальной форме и раскрывает технический, кадровый, финансовый потенциал заказчика и ориентировочно оценивает технико-экономические показатели будущего химического производства. Обоснование инвестиций утверждается руководителем предприятия-заказчика. Затем после рассмотрения государственной экспертизой обоснование инвестиций согласовывается с *инвестором*, которым чаще всего является банк.

Проектная документация разрабатывается после утверждения инвестиций, как правило, на конкурсной основе через торги подряда (*тендер*). В проекте детализируются принятые в обосновании инве-

стиций решения и уточняются основные технико-экономические показатели проектируемого химико-технологического объекта. Проектировщик в своей деятельности руководствуется законодательными нормативными актами Российской Федерации и ее субъектов.

После конкурсных торгов заказчик и проектировщик заключают *договор* (контракт), регулирующий правовые и финансовые отношения, взаимные обязательства и ответственность сторон. Неотъемлемой частью договора является *задание на проектирование и исходные материалы*. Предварительно заказчик с проектировщиком и другими заинтересованными организациями выбирают *площадку строительства*, т.е. место расположения будущего химического производства.

Проектная документация на строительство промышленных химических предприятий может разрабатываться в одну или две стадии. Для технически несложных химико-технологических объектов, а также строящихся по проектам массового и повторного применения документация разрабатывается в одну стадию: *рабочий проект*. Для технически сложных химико-технологических объектов с целью исключения ошибок и улучшения качества технической документации используют двухстадийное проектирование. На первой стадии разрабатывается *проект*, а затем на его основе *рабочая документация* для возведения промышленного химико-технологического объекта.

Проект подвергается *государственной экспертизе* и согласовывается с другими заинтересованными организациями. На основании утвержденного проекта подготавливается при необходимости тендерная документация и проводятся торги подряда на строительство химико-технологического объекта. Затем заключается договор, открывается финансирование строительства и разрабатывается рабочая документация.

Оценка результатов проектирования с развитием техники и общества менялась. Вначале от проектировщика требовалась абсолютная эффективность будущего химико-технологического объекта, затем относительная, а впоследствии удельная и, наконец, экономическая эффективность. Такие оценки и принципы проектирования приводили к негативным последствиям: тяжелым условиям труда, напряженности в обществе, необратимым изменениям в окружающей среде и т.п. Поэтому необходимо ориентироваться на социальную эффективность проектируемого химико-технологического объекта и, приступая к разработке технической документации, инженер-проектировщик должен помнить о высокой мере ответственности перед обществом.

В проектировании сложной ХТС ведущая роль принадлежит химику-технологу, который выбирает метод (технологию) получения продукта, рассчитывает и выбирает основное технологическое оборудо-

дование, разрабатывает технологическую схему производства, выдает задания специалистам-смежникам проектной организации на разработку общепромышленных разделов проекта (строительного, монтажного, электротехнического, КИПиА, сантехнического и т.д.), согласовывает результаты выполнения этих заданий с основными решениями по технологическому разделу. Для координации и увязки всех разделов назначается главный инженер проекта. Он является техническим руководителем проекта в период разработки и реализации его (*авторский надзор*) и несет ответственность за правильность решений, сроки выполнения и технико-экономические показатели.

Взаимосвязь отделов проектной организации и главного инженера проекта можно проиллюстрировать схемой, представленной на рис. 1.6.

В целом методику разработки проектной документации можно иллюстрировать блок-схемой, представленной на рис. 1.7.

Как показывает эта блок-схема, процесс интегрированного проектирования является итерационным процессом. Принятые решения при обосновании инвестиций не только уточняются, но и могут измениться. В процессе подготовки задания на проектирование обосновывается



Рис. 1.6. Схема взаимосвязей отделов проектной организации



Рис. 1.7. Блок-схема принятия решений в процессе проектирования и создания промышленного объекта

принятый метод (технология) производства, уточняется ассортимент и мощность будущего промышленного объекта. Далее решения, принятые при подготовке задания на проектирование, корректируются при разработке проекта и рабочей документации.

1.6. УПРАВЛЕНИЕ ПРОЦЕССОМ ИНТЕГРИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ

На сегодняшний день выделяют четыре обширных раздела теории управления проектами:

- *календарно-сетевое планирование и управление*, использующее методы теории графов для построения и оптимизации *сетевого графика* проекта [22 – 24];
- *«методологию» управления проектами*, отражающую сложившуюся на сегодняшний день терминологию и успешный опыт реализации проектов [25 – 27];

– *механизмы управления проектами* – процедуры принятия управленческих решений, основывающиеся на разработке и анализе математических моделей организационного управления проектами [28, 29];

– *методы и средства автоматизации* управления проектами, позволяющие получать, хранить, перерабатывать и использовать для принятия решений информацию о проекте и его окружении [30].

Накопление опыта по управлению проектами позволило выделить ряд процессов управления проектами, считающихся успешной практикой. Успешная практика предполагает, что существует общее мнение относительно того, что применение этих процессов управления проектом в соответствующих внешних условиях повышает шансы на успех. Также для этих процессов определена последовательность их выполнения, необходимая входная информация, инструменты, с помощью которых реализуется каждый процесс, методы реализации, а также результаты каждого процесса. Эти процессы относятся к управлению: 1) содержанием проекта; 2) сроками проекта; 3) стоимостью проекта; 4) качеством проекта; 5) человеческими ресурсами проекта; 6) коммуникациями проекта; 7) рисками проекта; 8) поставками проекта.

Успешная реализация любого проекта требует последовательного решения следующих общих задач: определение и анализ целей проекта; построение, оценка и выбор альтернативных решений по реализации проекта (вариантов проекта); формирование структуры проекта, выбор состава исполнителей, ресурсов, сроков и стоимости работ; управление взаимодействием с внешней средой; управление исполнителями (персоналом); регулирование хода работ (оперативное управление, внесение корректив). Решение этих задач должно осуществляться в комплексе с решением *задач управления проектами* (см. рис. 1.8): прогнозирование и оценка результатов; планирование; распределение ресурсов; стимулирование исполнителей; оперативное управление.

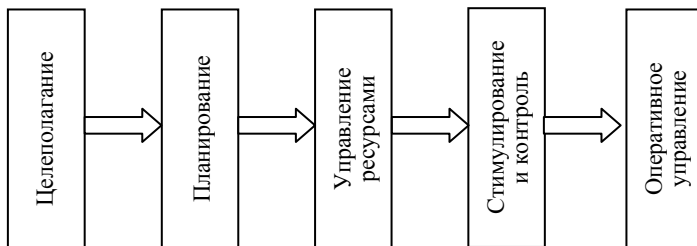


Рис. 1.8. Основные этапы управления проектами

Каждый проект от зарождения идеи до завершения проходит ряд последовательных фаз, стадий и этапов. Их совокупность называется *жизненным циклом* проекта. С точки зрения управления проектами структура проекта включает:

- *структуру работ*, под которой понимают иерархическую структуру, позволяющую разделить проект на отдельно либо совместно управляемые части – *пакеты работ*;

- *организационную структуру*, которая отражает иерархическую взаимную подчиненность участников проекта (руководителя проекта в целом, руководителей подпроектов/работ, исполнителей). Для проектной деятельности характерны матричные организационные структуры, в рамках которых каждый исполнитель одновременно подчинен нескольким руководителям – например, своему функциональному руководителю и руководителю проекта;

- *структуру ресурсов* (условий осуществления деятельности: мотивационных, кадровых, материально-технических, научно-методических, финансовых, организационных, нормативно-правовых, информационных);

- *сетевой график*, который отражает логику и технологию выполнения работ.

Перечисленные структуры взаимосвязаны – см. рис. 1.9: установление соответствия между структурой работ и организационной структурой дает распределение ответственности тех или иных элементов оргструктуры за определенные работы (кто отвечает за выполнение каких работ), структурой работ и структурой ресурсов – распределение ресурсов (какие ресурсы задействуются при выполнении каких работ), организационной структурой и структурой ресурсов – распределение полномочий (кто какими ресурсами распоряжается). Ответы на перечисленные вопросы необходимы для управления любым проектом.

Механизмы управления проектами. Общее определение *механизма* таково – «система, устройство, определяющее порядок какого-либо вида деятельности». Применительно к организационным системам *механизм функционирования* – это совокупность правил, законов и процедур, регламентирующих взаимодействие участников организационной системы. Более узким является понятие организационного *механизма управления* – совокупности процедур принятия управленческих решений. Таким образом, механизмы функционирования и механизмы управления определяют как ведут себя члены организации, и как они принимают решения.

Для того чтобы управляющий орган (например, главный инженер проекта) выбрал ту или иную процедуру принятия решений (тот или иной механизм управления, т.е. зависимость своих действий от целей организации и действий управляемых субъектов – исполнителей в

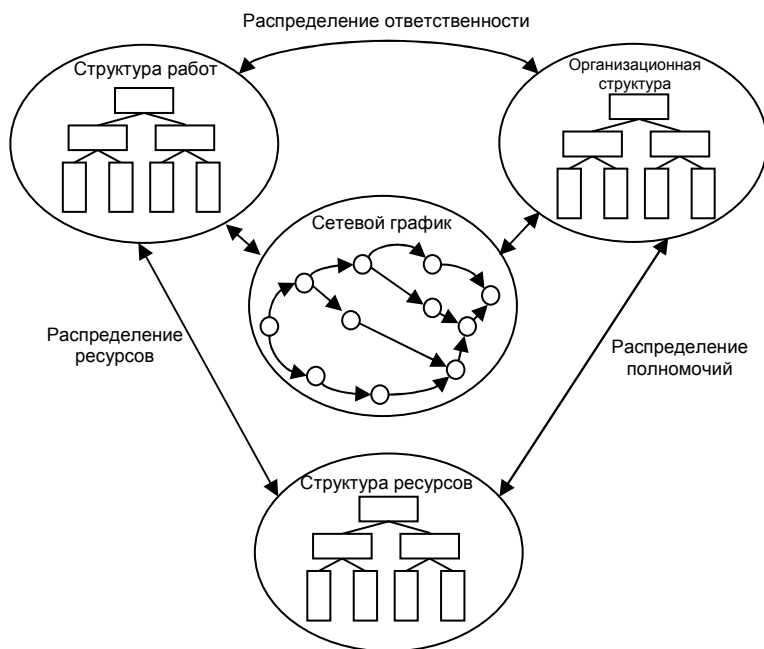


Рис. 1.9. Структуры проекта

случае управления проектами), он должен уметь предсказывать поведение исполнителей – их реакцию на те или иные управляющие воздействия. Экспериментировать в жизни, применяя различные управляющие воздействия и изучая реакцию подчиненных, не эффективно и практически никогда не представляется возможным. Здесь на помощь приходит *моделирование* – метод исследования, заключающийся в построении и анализе *моделей* – аналогов исследуемых технических систем. Имея адекватную модель, можно с ее помощью проанализировать реакции управляемой системы (этап *анализа*), а затем выбрать (на этапе *синтеза*) и использовать на практике то управляющее воздействие, которое приводит к требуемой реакции.

Наличие в организации определенной совокупности конкретных механизмов управления привлекательно, как с точки зрения управляющего органа – так как позволяет предсказать поведение управляемых субъектов, так и с точки зрения управляемых субъектов – так как делает предсказуемым поведение управляющего органа. То есть снижение неопределенности за счет использования механизмов управления является одним из существенных свойств любой организации как социального института.

Корпоративные информационные системы обеспечивают поддержку принятия управленческих решений на основе автоматизации процессов, процедур и других способов осуществления деятельности крупной компании, организации или корпорации. Целью информационной системы поддержки принятия решений является информационное обеспечение принятия решений при разработке и реализации проектов ХТС на основе современных технологий обработки информации. Основными функциями этих систем являются: сбор, передача и хранение данных; содержательная обработка данных в процессе решения функциональных задач управления проектами; представление информации в форме, удобной для принятия решений; доведение принятых решений до исполнителей. В качестве основных потребителей информации проекта выступают: проект-менеджер (для анализа расхождений фактических показателей выполнения работ от запланированных и принятия решений по проекту); заказчик (для осведомленности о ходе выполнения работ проекта); поставщики (при возникновении потребности в материалах, оборудовании и т.п., необходимых для выполнения работ); проектировщики (когда необходимо внести изменения в проектную документацию); непосредственные исполнители работ на местах.

Информационная система управления проектом – организационно-технологический комплекс методических, технических, программных и информационных средств, направленный на поддержку и повышение эффективности процессов управления проектом. В частности, выделяют: персональные компьютерные системы и распределенные интегрированные системы. Персональные компьютерные системы, оснащенные программным обеспечением для управления проектами, должны обеспечивать выполнение следующих функций: работа в многопроектной среде; разработка календарно-сетевых графиков выполнения работ; оптимизация распределения и учет ограниченных ресурсов; проведение анализа «что-если»; сбор и учет фактической информации о сроках, ресурсах и затратах, автоматизированной генерации отчетов; планирование и контроль договорных обязательств; централизованное хранение информации по реализуемым и завершенным проектам и т.д.

Распределенные интегрированные системы в качестве основных инструментов используют: системы телекоммуникаций (передача цифровых данных по оптоволоконным кабелям, локально-вычислительные сети и т.д.); портативные компьютеры; программное обеспечение поддержки групповой работы, обеспечивающее: обмен электронной почтой; документооборот; групповое планирование деятельности; участие удаленных членов команды в интерактивных дискуссиях средствами поддержки и ведения обсуждений; проведение «мозгового штурма», давая возможность его участникам высказывать свои мнения с помощью компьютеров, подключенных к одному большому экрану.

Интегрированная информационная система управления проектами объединяет данные из различных подразделений и организаций, относящихся к конкретному проекту; обеспечивает хранение, сбор, и анализ управленческой информации относительно степени достижения целей проекта; должна обеспечивать алгоритмы разрешения конфликтующих требований, возникающих по ходу обеспечения проекта; обеспечивает поддержку деловых взаимоотношений между исполнителями, временно объединенными в команду.

Структуру интегрированной информационной системы поддержки принятия решений во многом определяет структура принятых в рамках проекта и организации процессов управления. Как следствие, она может быть структурирована по: этапам проектного цикла; функциям; уровням управления. На рисунке 1.10 показан обобщенный жизненный цикл проекта и управленческие функции, связанные с различными стадиями и этапами проекта. Для поддержки различных управленческих функций используется разное информационное и *программное обеспечение* (ПО).

Для описания и анализа проекта на предынвестиционной стадии применяется специализированное ПО финансового анализа проектов, которое позволяет выполнить оценки основных показателей проекта в целом и обосновать эффективность капиталовложений.

Для детального планирования и контроля графика выполнения работ, отслеживания ресурсов и затрат проекта необходимо использовать ПО для управления проектами. На стадии выполнения проекта необходимо обеспечить сбор фактических данных о состоянии работ, оптимально представить их для анализа, обеспечить обмен информацией и взаимодействие между участниками проекта. Для выполнения этих функций применяется ПО для управления проектами, ПО поддержки групповой работы, документооборота и формирования отчетов. Основными функциональными элементами интегрированной информационной системы поддержки принятия решений на стадии выполнения проекта являются: модуль календарно-сетевое планирования и контроля работ проекта; модуль ведения бухгалтерии проекта; модуль финансового контроля и прогнозирования. Важнейшим компонентом интегрированных информационных систем поддержки принятия решений являются системы управления базами данных. Их основными функциями являются поддержка целостности, защищенности, архивации и синхронизации данных в условиях многопользовательской работы.

Опыт, полученный в результате реализации проекта и формализованный в виде содержания компьютерной базы соответствующих *знаний организации*, может быть использован в дальнейшем при реализации новых проектов. Проблема обобщения опыта, обработки, хранения и использования знаний о содержании, формах и методах организационного управления (в том числе – управления проектами) занимается такой раздел современной теории управления, как *управление знаниями*.



Рис. 1.10. Обобщенный жизненный цикл проекта

В настоящее время все более актуальным для эффективного функционирования организаций и/или реализации проектов становится управление знаниями. Действительно, в динамично изменяющихся внешних условиях, характерных для проектного типа управления, существенными становятся знания и опыт, накопленный сотрудниками

организации. Одной из основ систематизации опыта является выделение типовых ситуаций и управленческих решений, оптимальных (или рациональных) в этих ситуациях. Так как число возможных ситуаций огромно, то «запоминание» всех ситуаций невозможно, да и нецелесообразно – следует выделять множества «похожих» ситуаций и использовать одинаковые решения для ситуаций из одного и того же множества. В теории управления такой подход получил название «*унифицированного управления*», а соответствующие управленческие решения – «*типовых решений*».

В проектах в силу их специфики (каждый проект уникален) проблема унификации управления обретает еще большую значимость. Понятно, что априорное ограничение класса возможных управлений, с одной стороны, снижает эффективность управления, а с другой стороны, – позволяет уменьшить информационную нагрузку на руководителя проекта и дать ему возможность максимально использовать в новой ситуации, как свой собственный опыт, так и опыт реализации проектов, накопленный другими руководителями проектов.

В общем случае управление знаниями определяется как процесс систематического и целенаправленного создания, распространения и применения знаний (информации), имеющих критическое значение для стратегии и целей организации. Управление знаниями подразумевает две составляющие: организационную и технологическую. Организационная часть – это политика компании в отношении управления знаниями, т.е. разнообразные управленческие процедуры, которые позволяют компании сохранять, структурировать, анализировать информацию для того, чтобы эффективно ее использовать в настоящем и будущем. Технологии (в основном – информационные) помогают осуществить эти управленческие процедуры, но не могут их заменить.

Под *базой знаний* (по управлению проектами) понимают формализованную и специальным образом организованную в информационной системе управления проектами информацию по типовым фрагментам календарно-сетевых графиков проектов, механизмам управления проектами и т.д. Содержимое базы знаний оформляется, связывается между собой и представляется таким образом, чтобы с помощью специальных программных средств его можно было использовать для генерации новых знаний и решений для управления конкретным проектом. Помимо графиков проведения работ, объектами типизации в управлении проектами выступают: процедуры принятия решений, роли участников проектов, структуры проектов, этапы жизненного цикла проектов, процессы взаимодействия и результаты деятельности исполнителей. Типовые роли участников проектов – выделенные образы типовых элементов организационной системы (например, главный инженер проекта, исполнитель и т.д.), имеющие свою стратегию и выполняющие определенные действия в рамках реализации проекта.

График реализации работ каждого проекта по-своему уникален, но может состоять во многом из уже отработанных фрагментов, сохраненных в базе знаний по управлению проектами. Под типовыми структурами проектов понимаются базовые структуры: структура декомпозиции работ, организационная структура, структура ресурсов (см. выше), а также множественные вспомогательные структуры, например, структура статей затрат проекта, структуры кодирования. Типизация структур проекта – важнейший элемент организации управления проектами в любой современной компании, позволяющий сокращать затраты на планирование и контроль проектов, сравнивать разнородные проекты между собой, готовить необходимые аналитические отчеты по ходу выполнения проектов и т.д.

Выделение стандартных этапов жизненного цикла проектов и условий переходов между ними позволяют компании принимать обоснованные управленческие решения на всех этапах жизненного цикла проектов, оптимизируя ресурсы, сохраняя накопленный опыт. Наличие типовых процессов позволяет организовывать взаимодействие множества участников проектов, устанавливая необходимую последовательность их действий и результатов, стандартные входящие и исходящие документы и т.д. Важный шаг на пути использования типовых решений в управлении проектами – единая *терминология*, позволяющая всем участникам проекта одинаково трактовать термины и определения управления проектами. Еще одним средством типизации служит *классификация*.

Описание *успешных практик* по управлению проектами помогает оценить возможность использования тех или иных методов и механизмов при реализации подобных проектов и с успехом применять их. *Обучение* – один из способов внедрения типовых решений. Обучение на примере типового решения пройдет быстрее, и участник проекта будет готов применять полученные навыки на практике для всех подобных проектов. Содержательно, задача выбора типовых ситуаций заключается в следующем: требуется обучить менеджера принимать решения в таких ситуациях, которые являются «типичными» для множества возможных ситуаций в смысле критерия минимальности потерь эффективности при использовании наиболее «близкого» типового решения.

Современные *информационные системы* управления проектами также являются способом внедрения типовых решений в управлении проектами. Настроив информационную систему соответствующим образом, прописав в ней процедуры, внося типовые структуры проектов, разработав специализированные аналитические отчеты, сужают круг допустимых решений для участников, побуждая их использовать готовые типовые решения.

2. НОВЫЕ ПОДХОДЫ К АППАРАТУРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОМУ ОФОРМЛЕНИЮ ЭНЕРГО- И РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИХ ГИБКИХ АВТОМАТИЗИРОВАННЫХ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

2.1. ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧ ОЦЕНКИ ГИБКОСТИ И ИНТЕГРИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ХТС В УСЛОВИЯХ ИНТЕРВАЛЬНОЙ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ИСХОДНЫХ ДАННЫХ

При интегрированном проектировании ХТС должны быть удовлетворены регламентные и проектные ограничения, связанные: 1) с *безопасностью ХТС* (например, температура, давление в химическом реакторе или концентрации некоторых веществ в выходных потоках химического производства не должны превышать максимально допустимых величин); 2) с *экологической безопасностью* (ограничения на максимальную величину выходных потоков вредных веществ); 3) с *обеспечением заданных значений производительности, качественных и технико-экономических показателей* выпускаемой продукции и ХТС, соответственно.

Удовлетворение регламентных ограничений осложняется наличием неопределенности (неточности) в математических моделях или в исходных данных задач моделирования, оптимизации и проектирования. Источниками неопределенности, как правило, являются:

1. Неточность математических моделей, используемых для целей анализа, оптимизации и интегрированного проектирования ХТС. Она порождается: а) неточностью эксперимента, с помощью которого были получены коэффициенты в математических моделях (константы скоростей реакций, коэффициенты межфазного обмена, тепло- и массопереноса и т.д.); б) неточностью химических и физических закономерностей, положенных в основу математических моделей.

2. Изменение внутренних факторов ХТС на стадии ее функционирования, что приводит к изменению некоторых коэффициентов в математических моделях во время эксплуатации ХТС. Так, изменение активности катализатора приводит к изменению констант скорости реакций, а загрязнение поверхности теплообмена в теплообменнике – к изменению коэффициентов теплоотдачи и, соответственно, теплопередачи.

3. Случайное изменение внешних факторов функционирования ХТС на стадии ее эксплуатации.

4. Конструктивная неточность, т.е. неточность в реализации некоторых размеров технологического оборудования при его изготовлении.

Обычно неполнота наших знаний о ХТС сводится к тому, что некоторые параметры в математических моделях и исходных данных при решении задач моделирования, оптимизации и интегрированного проектирования известны неточно. О них известно только то, что они принадлежат некоторой области неопределенности Ξ .

Таким образом, при оптимизации и интегрированном проектировании ХТС мы вынуждены использовать неточные математические модели, и в этом случае возникает закономерный вопрос: каким образом мы можем гарантировать выполнение всех регламентных и проектных ограничений на стадии функционирования ХТС, несмотря на использование неточных математических моделей?

Задачи оптимизации и интегрированного проектирования ХТС формулируются при следующих предположениях:

1) в жизненном цикле ХТС выделяются две стадии: *проектирования* и *функционирования*;

2) имеются регламентные требования и проектные ограничения, связанные с экономикой производства, взрывобезопасностью, экологией, качеством выпускаемой продукции, которые записываются в форме (1.8);

3) имеются два типа переменных – конструктивные переменные a, d (структура ХТС, тип аппарата, размеры оборудования и т.п.) и режимные (управляющие) переменные z (температура, давление, расход и др.). На стадии функционирования, как правило, конструктивные переменные остаются постоянными, а управляющие переменные, вообще говоря, могут изменяться. Это позволяет учесть на стадии проектирования возможность настройки управляющих переменных (на стадии функционирования) для выполнения регламентных требований и проектных ограничений.

На стадии функционирования ХТС будем выделять три группы неопределенных параметров. К первой группе относятся параметры, значения которых могут быть определены (измерены) достаточно точно на стадии функционирования ХТС. Другими словами, на стадии функционирования имеется достаточный объем экспериментальной информации, позволяющий определить «точные» значения неопределенных параметров. Ко второй группе относятся параметры, которые не могут быть измерены (уточнены) на стадии функционирования. Другими словами, область неопределенности для этих параметров остается такой же, как и на стадии проектирования. К третьей группе относятся параметры, значения которых могут быть уточнены на стадии функционирования, однако при этом некоторая ошибка при определении этих параметров остается.

Следуя работе [31], на стадии проектирования будем различать два случая. В первом случае нам неизвестны плотности распределения вероятностей неопределенных параметров. В этом случае интервалы неопределенности измеряемых параметров могут быть найдены, если известны максимальные ошибки измерения используемых приборов.

Пусть мы провели N экспериментов. Обозначим через $[x^j, \xi^j]$ измеренные значения $[x, \xi]$ в j -м эксперименте. Пусть

$$\bar{x}^j = x^j \pm \delta x^j,$$

$$\bar{\xi}^j = \xi^j \pm \delta \xi^j,$$

где $[\bar{x}^j, \bar{\xi}^j]$ – неизвестные точные значения величин $[x^j, \xi^j]$, а $[\delta x^j, \delta \xi^j]$ – ошибки измерения. Из характеристик приборов мы знаем максимальные значения δ_1, δ_2 ошибок $\delta x^j, \delta \xi^j$:

$$|\delta x^j| \leq \delta_1, \quad |\delta \xi^j| \leq \delta_2.$$

Пусть теперь нам известны плотности распределения вероятностей неопределенных параметров. Рассмотрим вначале случай, когда все параметры ξ_j независимы и каждый из них имеет плотность распределения вероятности $P_j(\xi_j)$. Тогда для каждого параметра ξ_j можно найти интервал $\Xi_j^{p_j}$, удовлетворяющий условию

$$\Pr[\xi_j \in \Xi_j^{p_j}] = \rho_j,$$

где $\Pr[\xi_j \in \Xi_j^{p_j}]$ – вероятность принадлежности параметра ξ_j интервалу $\Xi_j^{p_j}$. Это условие может быть записано в виде $\int_{\Xi_j^{p_j}} P_j(\xi_j) d\xi_j = \rho_j$.

В этом случае область неопределенности есть n_ξ -мерный прямоугольник Ξ^p со сторонами $\Xi_j^{p_j}$; вероятность попадания ξ в прямоугольник Ξ^p равна $\rho = \rho_1 \rho_2 \dots \rho_{n_\xi}$. В случае нормального распределения имеем формулу

$$P_i(\xi_i) = \frac{1}{\sigma_i \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(\xi_i - \mu_i)^2}{2\sigma_i^2} \right],$$

где $\mu_i = M\{\xi_i\}$ – среднее значение (математическое ожидание) параметра ξ_i , σ_i – среднеквадратичное отклонение.

В этом случае интервал $\Xi_j^{p_j}$ имеет вид

$$\Xi_j^{p_j} = [\xi : \mu_j - k_j \sigma_j \leq \xi_j \leq \mu_j + k_j \sigma_j, j = 1, \dots, n_\xi].$$

Уровень неопределенности зависит от полноты и точности экспериментальных данных, доступных на стадии функционирования ХТС, т.е. зависит от контрольно-измерительной системы сбора экспериментальной информации на этой стадии (наличия датчиков и приборов, их точности).

При формулировании задач оптимизации и интегрированного проектирования ХТС в условиях неопределенности мы будем рассматривать два случая:

а) одностадийная формулировка, в которой неопределенные параметры ξ (или их часть) не могут быть идентифицированы на стадии функционирования ХТС, и в этом случае управляющие переменные определяются одновременно с определением конструктивных переменных для всей области неопределенности Ξ ;

б) двухстадийная формулировка, в которой неопределенные параметры (или их часть) могут быть идентифицированы на стадии функционирования ХТС, и в этом случае управляющие переменные могут быть использованы на этапе функционирования ХТС для выполнения регламентных требований и проектных ограничений.

Ограничения в задаче интегрированного проектирования могут быть жесткими, если они должны безусловно выполняться на стадии функционирования ХТС для любых значений ξ . Нарушение этих условий может привести к аварии, нанести вред окружающей среде, обслуживающему персоналу и т.д. Мягкие ограничения могут выполняться с некоторой заданной вероятностью или в среднем.

Мы будем называть химико-технологическую систему *гибкой*, а соответствующую ей конструкцию *допустимой*, если на стадии функционирования мы можем удовлетворить все ограничения (жесткие и мягкие) при условии, что неопределенные параметры могут принимать любые значения из области неопределенности Ξ .

При формулировании задач оптимизации и интегрированного проектирования ХТС в условиях неопределенности необходимо ввести целевую функцию и условия выполнения регламентных требований и проектных ограничений (далее ограничения). В качестве целевой функции мы будем использовать некоторую оценку эффективности функционирования (будущей работы) проектируемой ХТС, а в качестве ограничений – условия, гарантирующие гибкость ХТС на стадии

функционирования. Для оценки эффективности функционирования ХТС будем использовать одну из следующих величин:

1) среднее значение, которое может принять целевая функция (критерий) оптимизации или интегрированного проектирования;

2) наихудшее значение критерия оптимизации или интегрированного проектирования, которое она может принять (стратегия наилучшего случая);

3) верхнюю границу для критерия оптимизации или интегрированного проектирования, которая не может быть нарушена с заданной вероятностью.

Одностадийная задача интегрированного проектирования.

Рассмотрим формулировку одностадийной задачи интегрированного проектирования (ОЗИП) для случаев с жесткими и мягкими ограничениями, полной и неполной информации относительно функций распределения неопределенных параметров ξ .

Поскольку математическое ожидание $M_{\xi}\{C(a, d, z, \xi)\}$ дает среднее значение критерия интегрированного проектирования на стадии функционирования ХТС, то естественно использовать эту величину как целевую функцию задачи интегрированного проектирования в условиях неопределенности. Объединяя целевую функцию и условие гибкости ХТС – $\max_{\xi \in \Xi} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m$, мы можем сформулировать

ОЗИП с жесткими ограничениями в условиях неопределенности:

$$\min_{a, d, z} M_{\xi}\{C(a, d, z, \xi)\}, \quad (2.1)$$

$$\max_{\xi \in \Xi} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m. \quad (2.2)$$

Если функции распределения вероятностей для ξ неизвестны, то можно использовать одну из следующих формулировок задачи:

$$I^* = \min_{a, d, z} I(a, d, z),$$

$$\max_{\xi \in \Xi} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m,$$

где $I(a, d, z) = \sum_{i \in I_1} w_i C(a, d, z, \xi^i)$ или

$$I(a, d, z) = \max_{\xi \in \Xi} C(a, d, z, \xi), \quad (2.3)$$

w_i – весовые коэффициенты, $\xi^i (i \in I_1)$ – аппроксимационные точки, I_1 – множество индексов аппроксимационных точек.

ОЗИП (2.1), (2.2) имеет решение, если выполняется условие гибкости проектируемой ХТС

$$\chi(a, d) = \min_{a, d, z} \max_{\xi \in \Xi} \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0. \quad (2.4)$$

Условие гибкости (2.4) гарантирует возможность удовлетворения всех ограничений (2.2) для всех значений ξ из области Ξ .

При формулировании ОЗИП с мягкими (вероятностными) ограничениями предположим, что мы имеем полную информацию относительно функции распределения вероятностей для ξ . В этом случае ОЗИП имеет вид

$$\begin{aligned} & \min_{a, d, z} I(a, d, z), \\ & \Pr \left\{ g_j(a, d, z, \xi) \leq 0 \right\} = \int_{\Omega_j} P(\xi) d\xi \geq \rho_j, \quad j = 1, \dots, m, \quad (2.5) \\ & \Omega_j = \left\{ \xi : g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, \xi \in \Xi \right\}, \end{aligned}$$

где $P(\xi)$ – функция плотности вероятности.

В качестве целевой функции $I(a, d, z)$ можно использовать (2.3), т.е. либо среднее значение целевой функции $C(a, d, z, \xi)$ на стадии функционирования ХТС, либо наихудшее значение целевой функции интегрированного проектирования.

Главная трудность решения сформулированной ОЗИП состоит в необходимости вычисления многомерных интегралов $M_{\xi} \{C(a, d, z, \xi)\}$ и $\int_{\Omega_j} P(\xi) d\xi$.

Возможна и другая формулировка ОЗИП, в которой в качестве критерия будет использоваться его верхняя граница, которая не может быть нарушена с заданной вероятностью:

$$\begin{aligned} & \min_{a, d, z, \alpha} \alpha, \\ & \Pr \left\{ C(a, d, z, \xi) - \alpha \leq 0 \right\} \geq \rho_0, \quad (2.6) \\ & \Pr \left\{ g_j(a, d, z, \xi) \leq 0 \right\} \geq \rho_j, \quad j = 1, \dots, m. \end{aligned}$$

Здесь α – новая переменная, ограничивающая целевую функцию $C(a, d, z, \xi)$. Сравним формулировку ОЗИП (2.6) с постановкой ОЗИП (2.5). В задаче (2.6) мы ищем наименьшее значение α^* переменной α , для которой условие $C(a, d, z, \xi) - \alpha \leq 0$ удовлетворяется с заданной вероятностью ρ_0 . Таким образом, решив задачу ОЗИП (2.6), мы нахо-

дим конструкцию ХТС a^* , d^* и режим z^* , которые гарантируют, что в процессе функционирования ХТС целевая функция $C(a^*, d^*, z^*, \xi)$ будет меньше, чем α^* с вероятностью ρ_0 .

Используя ту же целевую функцию, мы можем свести задачу с жесткими ограничениями к следующей задаче:

$$\begin{aligned} & \min_{a, d, z, \alpha} \alpha, \\ & \Pr \{C(a, d, z, \xi) - \alpha \leq 0\} \geq \rho_0, \\ & \max_{\xi \in \Xi} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m. \end{aligned}$$

Предположим, что мы решили ОЗИП и получили решение $[a^*, d^*, z^*]$. Для его реализации мы должны обеспечить выполнение условий $z = z^*$ на стадии функционирования ХТС. Это означает, что мы лишены возможности подстраивать управляющие переменные z на стадии функционирования ХТС для выполнения регламентных требований и проектных ограничений. Ясно, что постановка и решение одностадийной задачи при проектировании приводят к не вполне экономичным конструкциям аппаратов ХТС, так как не допускается использование настройки управляющих переменных z на стадии функционирования ХТС.

Двухстадийная задача интегрированного проектирования. Все формулировки двухстадийных задач интегрированного проектирования (ДЗИП) будут учитывать возможность уточнения неопределенных параметров ξ и настройки управляющих переменных z на стадии функционирования ХТС. В этом состоит принципиальная разница между ДЗИП и ОЗИП [31]. В ОЗИП (см. задачи (2.1), (2.2) и (2.5)) переменные a, d, z равноправны в том смысле, что они не изменяются на стадии функционирования ХТС. В двухстадийной задаче возможны два случая: а) переменные a, d по-прежнему постоянны на этапе функционирования ХТС, в то время как переменные z могут изменяться; б) переменная a и одна часть конструктивных переменных d^k , $k = 1, 2, \dots, k_1$ постоянны на стадии функционирования ХТС, в то время как другая часть конструктивных переменных d^k , $k = k_1 + 1, \dots, K$, и управляющие переменные z могут изменяться. В частности, это свойство позволяет настраивать конструктивные d^k параметры наряду с управляющими z переменными для удовлетворения ограничений задачи.

При формулировке ДЗИП мы будем использовать следующее предположение – на стадии функционирования ХТС в каждый момент времени:

а) выполняется уточнение всех или части неопределенных параметров ξ на основе доступной экспериментальной информации;

б) решается ДЗИП с использованием математической модели с уточненными неопределенными параметрами ξ и найденный оптимальный режим реализуется на стадии функционирования ХТС.

Введем понятие области гибкости ХТС. Она состоит из точек области неопределенности Ξ , для которых можно найти такие значения управляющих переменных z , при которых все ограничения задачи интегрированного проектирования $g_j(a, d, z, \xi) \leq 0$ будут выполняться.

Случай 1. На стадии функционирования ХТС определяются точные значения всех неопределенных параметров, при этом все ограничения являются жесткими.

Рассмотрим условие работоспособности (гибкости) ХТС: ХТС является гибкой, если для каждого $\xi \in \Xi$ можно найти такие значения (режимных) управляющих переменных z , что все ограничения задачи будут удовлетворены.

Задачу оптимизации в ДЗИП ХТС с использованием математической модели $y = \mathfrak{S}(a, d, z, \xi)$ с уточненными неопределенными параметрами на стадии функционирования ХТС будем называть внутренней задачей интегрированного проектирования. В данном случае она имеет вид

$$C^*(a, d, \xi) = \min_z C(a, d, z, \xi), \quad (2.7)$$

$$g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m.$$

Условие гибкости для задачи ДЗИП имеет вид

$$\chi_1(a, d) = \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0.$$

Предположим, что функция плотности распределения вероятности $P(\xi)$ известна. Поскольку в каждый момент времени на стадии функционирования ХТС значение критерия оптимизации будет равно $C^*(a, d, \xi)$, то на стадии проектирования ХТС мы можем оценить будущую работу ХТС, подсчитав математическое ожидание $M\{\bullet\}$ величины $C^*(a, d, \xi)$:

$$M_{\xi} \{C^*(a, d, \xi)\} = \int_{\Xi} C^*(a, d, \xi) P(\xi) d\xi.$$

Эта величина будет использоваться как целевая функция в задаче интегрированного проектирования в условиях неопределенности. Ре-

зультирующая двухстадийная задача есть задача стохастического программирования с рекурсией [32, 34]:

$$\min_{a,d} M_{\xi} \left\{ C^*(a, d, \xi) \right\}. \quad (2.8)$$

Предположим, что внутренняя задача интегрированного проектирования (2.7) имеет решение во всех точках ξ и функция плотности распределения вероятности $P(\xi)$ известна. Тогда имеем

$$\min_{a,d} \int_{\Xi} \min_z \left\{ C(a, d, z, \xi) \mid g_j(a, d, z, \xi) \leq 0 \right\} P(\xi) d\xi.$$

Поскольку интеграл есть бесконечная сумма и переменные z , соответствующие различным ξ , независимы друг от друга, то мы можем изменить порядок операторов интегрирования и минимизации:

$$\min_{a,d} \min_{z(\xi)} \int_{\Xi} C(a, d, z, \xi) P(\xi) d\xi, \quad (2.9)$$

$$g_j(a, d, z(\xi), \xi) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad \xi \in \Xi.$$

Так как оптимальное значение z во внутренней задаче ДЗИП (2.7) зависит от ξ , то z есть многомерная функция $z(\xi)$. Таким образом, в задаче (2.9) мы ищем оптимальные векторы a , d и оптимальную многомерную функцию $z(\xi)$, доставляющую функционалу $\int_{\Xi} C(a, d, z(\xi), \xi) P(\xi) d\xi$

минимальное значение. Объединяя оба оператора минимизации по a , d и $z(\xi)$, мы получим ДЗИП для случая 1 (ДЗИП1):

$$\min_{a,d,z(\xi)} \int_{\Xi} C(a, d, z(\xi), \xi) P(\xi) d\xi, \quad (2.10)$$

$$g_j(a, d, z(\xi), \xi) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad \xi \in \Xi. \quad (2.11)$$

Задача (2.10), (2.11) имеет бесконечное число ограничений и поисковых переменных (одна многомерная функция $z(\xi)$ эквивалентна бесконечному числу обычных поисковых переменных). Решение задачи (2.8) a^* , d^* гарантирует гибкость ХТС, так как внутренняя задача (2.7) ДЗИП1 решается во всех точках $\xi \in \Xi$. При этом нельзя гарантировать, что задача (2.7) имеет решение для каждого $a \in A$, $d \in D$ и $\xi \in \Xi$. Поэтому задача (2.8) должна быть дополнена условием гибкости $\chi_1(a, d) = \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0$, т.е.

$$C_1 = \min_{a,d} M_{\xi} \left\{ C^*(a, d, \xi) \right\},$$

$$\chi_1(a, d) \leq 0.$$

В результате мы получаем другую постановку задачи ДЗИП1:

$$C_1 = \min_{a,d,z(\xi)} \int_{\Xi} C(a, d, z(\xi), \xi) P(\xi) d\xi,$$

$$g_j(a, d, z(\xi), \xi) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad \xi \in \Xi,$$

$$\chi_1(a, d) = \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0.$$

Заменяем многомерный интеграл в целевой функции C_1 некоторой конечной суммой с помощью соответствующей квадратурной формулы [35]:

$$\int_{\Xi} C(a, d, z(\xi), \xi) P(\xi) d\xi = \sum_{i \in I_1} \gamma_i C(a, d, z^i, \xi^i),$$

где ξ^i ($i \in I_1$) – аппроксимационные (узловые) точки; $z^i = z(\xi^i)$ – вектор режимных (управляющих) переменных, соответствующий аппроксимационной точке ξ^i ; γ_i ($i \in I_1$) – весовые коэффициенты, удовлетворяющие условиям $\gamma_i \geq 0$; $\sum_{i \in I_1} \gamma_i = 1$. Кроме того, заменим бесконечное число ограничений конечным числом ограничений только в аппроксимационных точках ξ^i ($i \in I_1$). Таким образом, получим дискретный вариант ДЗИП1:

$$C_1 = \min_{a,d,z^i} \sum_{i \in I_1} \gamma_i C(a, d, z^i, \xi^i),$$

$$g(a, d, z^i, \xi^i) \leq 0, \quad i \in I_1,$$

$$\chi_1(a, d) = \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0.$$

В случае если функции распределения неопределенных параметров неизвестны, аппроксимационные точки желательно выбирать таким образом, чтобы они попадали в область наиболее вероятных значений, которые параметры ξ могут принимать при функционировании ХТС, и

достаточно плотно покрывали область Ξ . В некоторых случаях ДЗИП решается без ограничений $\chi_1(a, d) = \max_{\xi \in \Xi} \min_z \min_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0$:

$$C_1 = \min_{a, d, z^i} \sum_{i \in I_2} \gamma_i C(a, d, z^i, \xi^i),$$

$$g(a, d, z^i, \xi^i) \leq 0, \quad i \in I_2.$$

Здесь множество I_2 содержит аппроксимационные и некоторые дополнительные (критические) точки. Эта постановка задачи оправдана только в случае, когда аппроксимационные точки достаточно плотно покрывают область Ξ .

Это требует большого числа аппроксимационных точек даже для сравнительно малой размерности n_ξ вектора ξ . Если число узловых точек по каждой компоненте вектора ξ равно p , то число аппроксимационных точек будет равно p^{n_ξ} . В этом случае размерность задачи будет равна $n_a + n_d + p^{n_\xi} n_z$. В случае когда число аппроксимационных точек невелико, использование ограничения $\chi_1(a, d) \leq 0$ совершенно необходимо, так как это гарантирует выполнение ограничений задачи не только в аппроксимационных точках $\xi^i, i \in I_1$, но и во всех других точках области Ξ .

При интегрированном проектировании возможно оценить средние потери энергии, связанные с необходимостью выполнения регламентных требований, проектных ограничений и неточности исходной математической модели ХТС $- y = \mathfrak{F}(a, d, z, \xi)$. Пусть a^*, d^* – решение ДЗИП, а $z^*(a^*, d^*, \xi)$ – решение внутренней задачи (2.7) при фиксированных a^*, d^* и параметре ξ . Чтобы поддерживать значение управляющей переменной на уровне $z^*(a^*, d^*, \xi)$, необходимо расходовать энергию. Например, если z_l – температура, то необходимо тепло, чтобы поддерживать температуру z_l^* ; если z_l – расход некоторого потока, то необходима энергия для насоса или компрессора, поддерживающего требуемое значение потока. Таким образом, величина $z^*(a^*, d^*, \xi)$ непосредственно связана с потребляемой энергией. Предположим, что потребляемая энергия пропорциональна величине $z^*(a^*, d^*, \xi)$ с коэффициентом пропорциональности k_i . Тогда среднее

потребление энергии, связанное с реализацией оптимального значения i -й управляющей переменной, будет определяться величиной

$$\bar{I}^* = \int_{\Xi} \sum_{i=1}^{n_z} k_i z_i^*(a^*, d^*, \xi) P(\xi) d\xi.$$

В этом случае аналогично коэффициентам запаса конструктивных переменных можно ввести понятие энергетического коэффициента запаса η_E :

$$\eta_E = (\bar{I}^* - I_N) / I_N,$$

где I_N – потребляемая энергия при номинальных значениях неопределенных параметров.

Случай 2. На стадии функционирования ХТС определяются точные значения только части неопределенных параметров, все ограничения в задаче интегрированного проектирования являются жесткими.

В этом случае вектор неопределенных параметров ξ состоит из двух подвекторов ξ^1 и ξ^2 . Пусть при этом $\xi^1 \in \Xi^1$ и $\xi^2 \in \Xi^2$ ($\Xi = \Xi^1 \cup \Xi^2$).

На стадии функционирования ХТС значения компонентов вектора ξ^1 могут быть измерены (определены) достаточно точно. В то же время компоненты вектора ξ^2 не могут быть уточнены.

Условие гибкости для данного случая имеет вид [8]

$$\chi_2(a, d) = \max_{\xi^1 \in \Xi^1} \min_z \max_{\xi^2 \in \Xi^2} \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi^1, \xi^2) \leq 0, \quad (2.12)$$

причем $\chi_1(a, d) \leq \chi_2(a, d)$.

Рассмотрим формулировку ДЗИП2 ХТС. Мы предполагаем, что векторы ξ^1 и ξ^2 независимы. Для фиксированного момента времени на этапе функционирования ХТС значение ξ^1 известно, а ξ^2 может принимать любые значения из области Ξ^2 . Эта ситуация соответствует ОЗИП с жесткими ограничениями. В этом случае формулировка внутренней задачи интегрированного проектирования имеет вид

$$\begin{aligned} C^*(a, d, \xi^1) &= \min_z E_{\xi^2} \{ C(a, d, z, \xi^1, \xi^2) \}, \\ \max_{\xi^2 \in \Xi^2} g_j(a, d, z, \xi^1, \xi^2) &\leq 0, \quad j = 1, \dots, m, \\ E_{\xi^2} \{ C(a, d, z, \xi^1, \xi^2) \} &= \int_{\Xi^2} C(a, d, z, \xi^1, \xi^2) P_2(\xi^2) d\xi^2, \end{aligned} \quad (2.13)$$

где $E_{\xi^2} \{C(a, d, z, \xi^1, \xi^2)\}$ – математическое ожидание функции $C(a, d, z, \xi^1, \xi^2)$ по переменной ξ^2 при фиксированном $\xi^1 \in \Xi^1$. Условие $\chi_2(a, d) \leq 0$ гарантирует существование решения внутренней задачи интегрированного проектирования (2.13) для всех $\xi^1 \in \Xi^1$. Следовательно, оно должно быть использовано в постановке ДЗИП2 как ограничение. Так как величина

$$E_{\xi^1} \{C^*(a, d, \xi^1)\} = \int_{\Xi^1} C^*(a, d, \xi^1) P_1(\xi^1) d\xi^1$$

характеризует эффективность функционирования (будущую работу) ХТС, то она может служить в качестве целевой функции в ДЗИП2. Сформулируем эту задачу в виде

$$C_2 = \min_{a,d} E_{\xi^1} \{C^*(a, d, \xi^1)\}, \quad (2.14)$$

$$\chi_2(a, d) \leq 0. \quad (2.15)$$

Используя квадратурную для аппроксимации интеграла в целевой функции задачи и заменяя бесконечный набор ограничений конечным набором только в аппроксимационных точках, получим следующую задачу:

$$C_2 = \min_{a,d,z^i} \sum_{i \in I_1} w_i \sum_{k \in K} v_k C(a, d, z^i, \xi^{1,i}, \xi^{2,k}), \quad (2.16)$$

$$\max_{\xi^2 \in \Xi^2} g_j(a, d, z^i, \xi^{1,i}, \xi^2) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad i \in I_1, \quad (2.17)$$

$$\chi_2(a, d) \leq 0,$$

где $\xi^{1,i}, \xi^{2,k}$ – аппроксимационные точки для внешнего и внутреннего интегралов в критерии оптимизации, $z^i = z(\xi^{1,i})$, $w_i (i \in I_1)$ и $v_k (k \in K)$ – весовые коэффициенты, удовлетворяющие условию

$$w_i \geq 0; \quad \sum_{i \in I_1} w_i = 1; \quad v_k \geq 0; \quad \sum_{k \in K} v_k = 1.$$

Если функция плотности распределения неизвестна, весовые коэффициенты $w_i (i \in I_1)$ и $v_k (k \in K)$, а также множества аппроксимационных $S_1 = \{\xi^{1,i} : i \in I_1\}$ и критических $S_2 = \{\xi^{2,k} : k \in K\}$ точек должен назначать исследователь.

Следует заметить, что в ДЗИП1 вектор z^i , соответствующий аппроксимационной точке ξ^i , используется только в этой точке (см. квадратурную формулу (2.16)). С другой стороны, из (2.16), (2.17) видно, что в ДЗИП2 вектор z^i , соответствующий точке $\xi^{1,i}$, используется во всех аппроксимационных точках $\xi^{1,i}, \xi^{2,k}$ из области

$$\Xi(\xi^{1,i}) = \{\xi : \xi^{2,k} \in \Xi^2; \xi^1 = \xi^{1,i}\}.$$

В работе [31] показано, что справедливо следующее неравенство: $C_2 \geq C_1$.

Сравнивая ДЗИП1 и ДЗИП2, мы видим, что полнота экспериментальной информации на стадии функционирования влияет на экономичность конструкции аппаратов ХТС, и учет доступной информации позволяет синтезировать более экономичную ХТС.

Случай 3. На стадии функционирования ХТС можно определить точные значения неопределенных параметров, при этом все ограничения являются мягкими и должны быть удовлетворены с заданной вероятностью ρ .

Для данного случая двухстадийная задача интегрированного проектирования имеет следующий вид:

$$\min_{a,d} \left(I_1(a, d) = I_1^{(1)}(a, d) + I_1^{(2)}(a, d) \right),$$

$$\int_{\Omega_1} P(\xi) d\xi \geq \rho, \quad \Omega_1 = \left\{ \xi : h(a, d, \xi) = \min_z \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0 \right\},$$

где

$$I_1^{(1)}(a, d) = \left[\int_{\Omega_1} C^*(a, d, \xi) = \min_z C(a, d, z, \xi) \mid g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, \quad j = 1, 2, \dots, m \right] P(\xi) d\xi,$$

$$I_1^{(2)}(a, d) = \int_{\Xi \setminus \Omega_1} \min_{z \in Z} C(a, d, z, \xi) P(\xi) d\xi,$$

$\Xi \setminus \Omega_1$ – теоретико-множественная разность.

Недостаток сформулированной задачи состоит в том, что ограничения $g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m$ строго выполняются только для $\xi \in \Omega_1$, а вне области Ω_1 ограничения не должны выполняться. Поэтому можно получить решение ДЗИП, которому будет соответствовать большие нарушения ограничений. Более того, ДЗИП может вообще не иметь решения. Поэтому было бы лучше, если нарушение этих

ограничений было распределено равномерно по всей области Ξ . В связи с этим дадим другую формулировку задачи оптимизации с мягкими ограничениями.

Введем штрафную функцию

$$\bar{C}(a, d, \xi, \gamma) = C(a, d, z, \xi) + \gamma \sum_{j=1}^m p(g_j(a, d, z, \xi)),$$

где $p(g_j) = \begin{cases} 0, & \text{если } g_j \leq 0, \\ g_j^2, & \text{если } g_j > 0, \end{cases}$ γ – штрафной коэффициент.

Далее мы будем использовать следующую внутреннюю задачу оптимизации для всех значений ξ :

$$\bar{C}^*(a, d, \xi, \gamma) = \min_z \bar{C}(a, d, \xi, \gamma).$$

Ясно, что оптимальное значение целевой функции этой задачи зависит от a, d, ξ, γ , и пусть $z(a, d, \xi, \gamma)$ – решение этой задачи. Тогда переменные a, d, γ должны быть выбраны таким образом, чтобы ограничения удовлетворялись с заданной вероятностью ρ и среднее значение величины $\bar{C}^*(a, d, \xi, \gamma)$ принимало минимальное значение. ДЗИП в этом случае будет иметь вид

$$\begin{aligned} I^* &= \min_{a, d, \gamma} E_{\xi} \{ \bar{C}^*(a, d, \xi, \gamma) \}, \\ &\int_{\Omega_2} P(\xi) d\xi \geq \rho, \\ \Omega_2 &= \{ \xi : g_j(a, d, z(a, d, \xi, \gamma), \xi) \leq 0 \}. \end{aligned}$$

Заметим, что неравенство гарантирует удовлетворение ограничений с вероятностью, не меньшей ρ . В определении области Ω_2 используются значения $z(a, d, \xi, \gamma)$ управляющих переменных, полученных из решения внутренней задачи оптимизации, а штрафной коэффициент γ используется как дополнительная поисковая переменная.

Случай 4. На стадии функционирования ХТС можно определить точные значения неопределенных параметров, при этом имеются смешанные ограничения: ограничения с номерами $j \in J_1 = \{1, \dots, m_1\}$ являются жесткими, а ограничения с номерами $j \in J_2 = \{m_1 + 1, \dots, m\}$ – мягкими и должны быть удовлетворены с заданной вероятностью ρ .

В этом случае ДЗИП будет иметь вид

$$\begin{aligned} \min_{a,d} I(a, d) &= I_1(a, d) + I_2(a, d), \\ \Pr[\xi \in \Omega_1] &\geq \rho, \\ \chi_1(a, d; J_1) &= \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J_1} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} I_1(a, d) &= \int_{\Omega_1} C^*(a, d, \xi) P(\xi) d\xi, \\ I_2(a, d) &= \int_{\Xi \setminus \Omega_1} C^*(a, d, \xi; J_1) P(\xi) d\xi; \end{aligned}$$

$$C^*(a, d, \xi) - \text{решение задачи} \Rightarrow \begin{aligned} C^*(a, d, \xi) &= \min_z C(a, d, z, \xi), \\ g_j(a, d, z, \xi) &\leq 0, \quad j = 1, \dots, m; \end{aligned}$$

и

$$C^*(a, d, \xi; J_1) - \text{решение задачи} \Rightarrow \begin{aligned} C^*(a, d, \xi; J_1) &= \min_z C(a, d, z, \xi), \\ g_j(a, d, z, \xi) &\leq 0, \quad j \in J_1. \end{aligned}$$

Заметим, что задача с критерием $I_1(\bullet)$ решается только для $\xi \in \Omega_1$, а задача с критерием $I_2(\bullet)$ – в остающейся части области Ξ . Ограничение $\Pr[\xi \in \Omega_1] \geq \rho$ гарантирует удовлетворение всех ограничений с вероятностью ρ . Кроме того, дополнительное ограничение $\chi_1(a, d; J_1) = \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J_1} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0$ гарантирует жесткое удовлетворение ограничений с номерами $j = 1, \dots, m_1$ для всех точек области Ξ .

2.2. ВЫЧИСЛЕНИЕ И АНАЛИЗ СВОЙСТВ ФУНКЦИИ ГИБКОСТИ ХТС

Функция гибкости ХТС позволяет оценить ее работоспособность и является важнейшей характеристикой ХТС. Вычисление ее значений связано с решением сложной оптимизационной задачи. Для оценки гибкости ХТС достаточно знать только знак функции гибкости, поэтому далее будем различать следующие две задачи: 1) определение знака функции гибкости; 2) вычисление значений функции гибкости.

Для вычисления значений функций гибкости $\chi_1(a, d)$ и $\chi_2(a, d)$ будем применять методы верхней и нижней оценок функций гибкости с использованием схемы метода ветвей и границ, описанной в книге [31]. Метод ветвей и границ является итерационной процедурой

[36, 37], которая, разбивая область Ξ на подобласти Ξ_l , позволяет определить положение глобального минимума задачи:

$$\begin{aligned} I^* &= \min_{\xi \in \Xi} C(\xi), \\ g_j(\xi) &\leq 0, \quad j = 1, \dots, m, \\ \Xi &= \left\{ \xi_i : \xi_i^L \leq \xi_i \leq \xi_i^U \right\}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

где I^* – глобальный минимум функции $C(\xi)$ в допустимой области $D = \{ \xi : \xi \in \Xi, g_j(\xi) \leq 0, j = 1, \dots, m \}$ задачи (2.18), функции $g_j(\xi)$ – непрерывно дифференцируемы.

Далее запишем задачу (2.18) для некоторой подобласти

$$\begin{aligned} \Xi_l &= \left\{ \xi_i : \xi_i^{L,l} \leq \xi_i \leq \xi_i^{U,l}, \quad i = 1, \dots, n \right\}, \\ I_l^* &= \min_{\xi \in \Xi_l} C(\xi), \\ g_j(\xi) &\leq 0, \quad j = 1, \dots, m, \end{aligned} \quad (2.19)$$

где I_l^* – глобальный минимум функции $C(\xi)$ в допустимой области $D_l = \{ \xi : \xi \in \Xi_l, g_j(\xi) \leq 0, j = 1, \dots, m \}$.

Будем называть величину μ_l нижней оценкой (границей) оптимального значения I_l^* целевой функции задачи (2.19), если выполняется неравенство

$$\mu_l \leq I_l^* \quad (2.20)$$

или $\mu_l \leq C(\xi)$ для всех $\xi \in \Xi_l$.

Желательно, чтобы нижняя оценка обладала следующими свойствами.

Свойство 1. Нижняя оценка μ_l должна быть близка к I_l^* .

Свойство 2. Если $\Xi_l \subset \Xi_q$, то $\mu_l \leq \mu_q$, и если $\Xi_l = \Xi_{l_1} \cup \Xi_{l_2} \cup \dots \cup \Xi_{l_N}$, то $\exists \Xi_{l_i}, \mu_{l_i} < \mu_l$, для всех $l \neq l_i$. Другими словами, здесь требуется, чтобы разбиение приводило к улучшению нижней оценки.

Свойство 3. Должно выполняться следующее соотношение:

$$\lim_{r(\Xi_l) \rightarrow 0} \mu_l = C(\xi^l), \quad (2.21)$$

если $\lim_{r(\Xi_l) \rightarrow 0} \Xi_l = \xi^l$,

где ξ^l – точка, принадлежащая Ξ_l , в которую стягивается Ξ_l при $r(\Xi_l) \rightarrow 0$, а $r(\Xi_l)$ – величина, характеризующая размер подобласти Ξ_l . Например, $r(\Xi_l)$ может иметь вид $r(\Xi_l) = \max(\xi_i^{U,l} - \xi_i^{L,l})$.

Свойство 4. Трудоемкость вычисления нижней оценки должна быть существенно меньше трудоемкости решения задачи глобальной оптимизации (2.18).

Аналогично можно ввести понятие верхней оценки η_l величины I_l^* :

$$\eta_l \geq I_l^*. \quad (2.22)$$

Следует заметить, что оценки μ_l и η_l дают глобальную информацию относительно функции I_l^* в области Ξ_l .

Предположим, что на v -й итерации область Ξ разбита на N_v подобластей Ξ_l ($l = 1, \dots, N_v$). Обозначим множество подобластей Ξ_l через $\Xi^{(v)}$. Какие подобласти должны выбираться для разбиения? Как уменьшить число подобластей, которые должны рассматриваться?

Большинство процедур метода ветвей и границ основывается на следующих правилах.

1. На v -й итерации область Ξ_p исключается из рассмотрения, если найдется такая подобласть Ξ_l , что выполняется соотношение $\mu_p > \eta_l$. В этом случае не имеет смысла сохранять область Ξ_p , поскольку глобальный минимум заведомо не принадлежит этой области.

2. На v -й итерации подобласть Ξ_l исключается из рассмотрения, если выполняется условие $\exists j \forall \xi \in \Xi_l \ g_j(\xi) \geq 0$. В этом случае вся подобласть Ξ_l принадлежит недопустимой области задачи (2.18).

3. На v -й итерации разбивается область Ξ_{l_k} , в которой нижняя граница принимает наименьшее значение, т.е. имеет место соотношение [36 – 38]:

$$\mu_{l_v} = \min_{l \in L_v} \mu_l, \quad (2.23)$$

где $L_v = (1, \dots, N_v)$ – множество номеров подобластей Ξ_l на v -й итерации.

Правило 3 основывается на следующем предположении: если $\mu_p > \mu_l$, то $I_p^* > I_l^*$. Это правило является эвристическим. Ясно, что если нижняя оценка близка к минимальному значению целевой функ-

ции задачи (2.19) во всех подобластях Ξ_l , то последнее предположение будет выполняться в большинстве случаев. Однако, если нижняя оценка является грубой, то предположение может нарушиться. В этом случае использование этого правила приводит к дроблению подобласти Ξ_l , не содержащей глобальный минимум. Поэтому все подобласти за исключением подобласти Ξ_{l_v} и подобластей, для которых условие $\mu_p > \eta_l$ выполняется, должны сохраняться как потенциальные кандидаты, которые, вообще говоря, могут содержать глобальный минимум. Таким образом, на каждой итерации имеется три группы подобластей.

Первая группа состоит из одной подобласти, имеющей наименьшую нижнюю оценку.

Вторая группа состоит из подобластей, для которых выполняется условие $\mu_p > \eta_l$. Эти области могут быть удалены из дальнейшего рассмотрения.

Третья группа содержит оставшиеся подобласти.

Наименьшая из верхних оценок на v -й итерации находится из решения задачи

$$\eta^v = \min_{l \in L_v} \eta_l, \quad (2.24)$$

где $L_v = (1, \dots, N_v)$.

Основанный на приведенных выше правилах алгоритм метода ветвей и границ имеет следующий вид [31].

Алгоритм 2.1

Шаг 1. Задаем $\delta_i (i = 1, \dots, n)$, ε , начальное разбиение $\Xi^{(1)}$ на подобласти $\Xi_i (i = 1, \dots, N_1)$. В частности, N_1 может быть равно 1. В этом случае $\Xi^{(1)} = (\Xi_1) = (\Xi)$. Полагаем $v = 1$.

Шаг 2. Рассчитываем нижние μ_l и верхние $\eta_l (l = 1, \dots, N_1)$ оценки всех подобластей $\Xi_i (i = 1, \dots, N_1)$.

Шаг 3. Определим подобласть с наименьшим значением нижней оценки. Номер этой подобласти равен l_v . Таким образом, $\mu_{l_v} \leq \mu_l$ для всех $l \neq l_v$.

Шаг 4. Прекращаем поиск, если выполняется одно из следующих условий:

$$\begin{aligned} 1) \quad & \xi_i^{U, l_v} - \xi_i^{L, l_v} \leq \delta_i, i = 1, \dots, n; \\ 2) \quad & \eta_{l_v} - \mu_{l_v} \leq \varepsilon. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Шаг 5. Разбиваем подобласть Ξ_{l_v} на две подобласти Ξ_{p_v} и Ξ_{q_v} ($\Xi_{l_v} = \Xi_{p_v} \cup \Xi_{q_v}$), ввести переменную ξ_s и точку c_s ветвления:

$$\Xi_{p_v} = \{ \xi : \xi \in \Xi_{l_v}, \xi_s \leq c_s \},$$

$$\Xi_{q_v} = \{ \xi : \xi \in \Xi_{l_v}, \xi_s > c_s \}.$$

Можно использовать различные способы выбора переменной ветвления и точки ветвления. В частности, в качестве переменных ветвления можно поочередно использовать все переменные или выбирать переменную, соответствующую наибольшему ребру подобласти Ξ_{l_v} .

Шаг 6. Определим нижние μ_{p_v}, μ_{q_v} и верхние оценки η_{p_v}, η_{q_v} для подобластей Ξ_{p_v} и Ξ_{q_v} .

Шаг 7. Рассчитываем $\eta^v = \min(\eta^{v-1}, \eta_{p_v}^p, \eta_{q_v}^q)$.

Шаг 8. Проверяем выполнение условия $\mu_j > \eta^v$, $j = p_v, q_v$. Подобласть, для которой это условие выполняется, удаляем из рассмотрения.

Шаг 9. Образует множество Ξ^{v+1} . Для этого удаляем Ξ_{l_v} из множества подобластей Ξ_{p_v} и Ξ_{q_v} , если они не были удалены на шаге 8.

Шаг 10. Полагаем $v := v + 1$ и переходим к шагу 3.

Сделаем некоторые пояснения.

На шаге 4 условие 2) гарантирует, что с точностью до ε глобальный минимум $C(\xi)$ находится в подобласти Ξ_{l_v} . Действительно, пусть выполняется условие $\mu_l - \mu_{l_v} > \varepsilon$ для всех $l \neq l_v$. Из этого условия и условия (2.25) вытекает следующее условие: $\mu_l > I_{l_v}^* > \varepsilon$ для всех $l \neq l_v$, а также условие $I_l > I_{l_v}$ для всех $l \neq l_v$. Таким образом, глобальный минимум $C(\xi)$ находится в подобласти Ξ_{l_v} , причем с точностью до ε он равен μ_{l_v} .

Для более точного определения глобального минимума в этой подобласти можно выполнить локальную минимизацию после окончания работы алгоритма.

На v -й итерации возможны следующие два случая.

1. $\mu_{l_v} \leq \mu_l$ для всех $l \neq l_v$, где $\mu_{l_v} = \min(\mu_{p_v}, \mu_{q_v})$. (2.26)

На $(v+1)$ -й итерации в соответствии с алгоритмом метода ветвей и границ будет разбиваться подобласть $\Xi_{l_{v+1}} (l_{v+1} = r_v)$ (полученная разбиением подобласти Ξ_{l_k} на данной итерации). Это желательный результат, и в этом случае будем говорить, что итерация является успешной. Условие (2.26) будет выполняться, если в каждой подобласти нижняя оценка совпадает с глобальным минимумом. Поэтому итерация всегда будет успешной, если в каждой подобласти мы можем найти такую нижнюю оценку. В этом случае алгоритм метода ветвей и границ будет всегда разбивать подобласть, содержащую глобальный минимум.

2. $\mu_{r_v} > \min_{l: l \neq l_v} \mu_l$. В этом случае на $(v+1)$ -й итерации в соответствии с алгоритмом будет разбиваться подобласть, которая была образована на одной из предыдущих итераций. Это так называемый «обратный ход» алгоритма. Обратный ход будет встречаться тем чаще, чем более грубо с помощью нижней оценки оценивается глобальный минимум задачи (2.19). В худшем случае алгоритм метода ветвей и границ может превратиться в процедуру простого перебора.

Анализ алгоритма метода ветвей и границ показывает, что при его использовании размер подобласти, содержащей глобальный минимум, стремится к нулю. Поэтому свойство 3 нижней оценки (см. выше) гарантирует, что по крайней мере в конце поиска нижняя оценка будет близка к глобальному минимуму.

Пусть в ходе выполнения алгоритма метода ветвей и границ было сделано v итераций. Процедуру метода до v -й может быть представлена в виде дерева-графа (рис. 2.1.), у которого каждая вершина A_i^j соответствует некоторой подобласти Ξ_i^j области Ξ .

Здесь верхний индекс j есть номер итерации (при $j \geq 1$), на которой была получена эта вершина (подобласть), а нижний индекс есть номер подобласти, полученной на j -й итерации (в отличие от предыдущего текста на рисунке подобласти Ξ обозначаются через Ξ_i^j). Область Ξ_i^0 ($\Xi_1^0 = \Xi$) соответствует вершина A_1^0 . Вершину, не имеющую потомков, будем называть висячей (на рис. 2.1 это вершины $(A_1^2, A_1^3, A_2^3, A_1^4, A_2^4)$). Каждая вершина A_i^j является либо висячей, либо имеет два потомка A_1^v, A_2^v , соответствующих подобластям, которые были получены из области Ξ_i^j , соответствующей самой вершине A_i^j . Если вершины A_1^k, A_2^k являются потомками вершины A_i^j и полу-

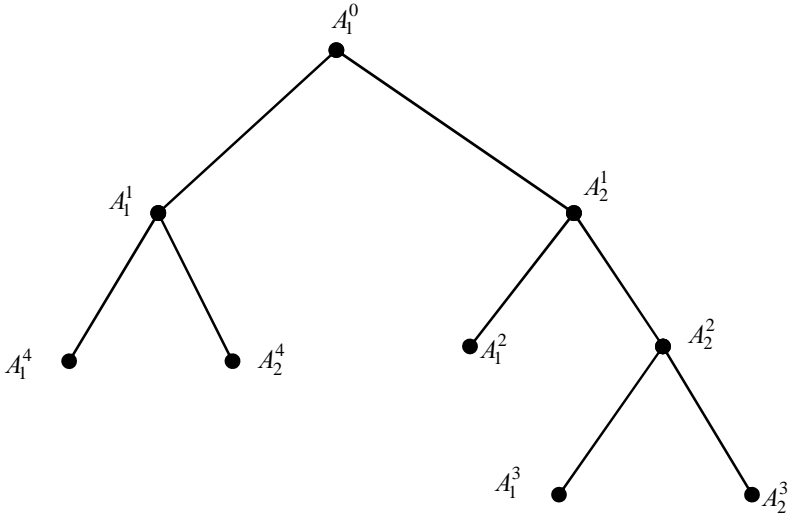


Рис. 2.1. Представление метода ветвей и границ в виде дерева-графа

чены на следующей итерации, то $v = j + 1$. Нижнюю оценку, соответствующую области Ξ_i^j , мы будем обозначать через μ_i^j .

На рисунке 2.1 представлено дерево-граф, соответствующее четырем шагам метода ветвей и границ. Пусть на первом шаге первой итерации имеется только одна подобласть Ξ_1^0 , совпадающая с Ξ (рис. 2.2, а), и пусть на первой итерации область Ξ_1^0 разбита на подобласти Ξ_1^1, Ξ_2^1 (рис. 2.2, б). Вершины A_1^1, A_2^1 соответствуют подобластям Ξ_1^1 и Ξ_2^1 .

Предположим, мы вычислили нижние оценки μ_1^1, μ_2^1 для этих подобластей. Пусть $\mu_2^1 < \mu_1^1$. Тогда согласно стратегии метода ветвей и границ (шаги 3, 4 и 5 алгоритма 2.1) на второй итерации мы должны разбить область Ξ_2^1 на две подобласти Ξ_1^2 и Ξ_2^2 . Таким образом, после второй итерации имеется три подобласти $\Xi_1^2, \Xi_2^2, \Xi_3^2$ (рис. 2.2, в), которым соответствуют вершины A_1^2, A_2^2, A_1^1 (причем $\Xi_3^2 = \Xi_1^1$).

Пусть выполняются соотношения $\mu_2^2 < \mu_1^2, \mu_2^2 < \mu_3^2$. Тогда на третьей итерации мы должны разбить подобласть Ξ_2^2 на подобласти Ξ_2^3 и Ξ_3^3 .

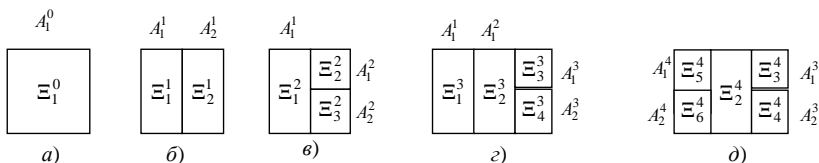


Рис. 2.2. Разбиение области Ξ на подобласти на итерациях 1, 2, 3, 4

Таким образом, после третьей итерации область Ξ будет разбита на 4 подобласти: $\Xi_1^3, \Xi_2^3, \Xi_3^3, \Xi_4^3$ (рис. 2.2, з), которым соответствуют вершины $A_1^1, A_1^2, A_1^3, A_2^3$. Область Ξ_4^3 соответствует вершине A_2^3 . Пусть $\mu_1^3 < \mu_i^3, i = 2, 3, 4$, тогда на 4-й итерации должна быть разбита область Ξ_1^3 на подобласти Ξ_4^4, Ξ_5^4 , т.е. вершина A_1^1 будет иметь два потомка A_1^4, A_2^4 . Таким образом, после 4-й итерации мы будем иметь 5 подобластей $\Xi_i^4, i = 2, \dots, 6$ (рис. 2.2, д), которым отвечают вершины $A_1^2, A_1^3, A_2^3, A_1^4, A_2^4$, соответственно.

Из рассмотрения видно, что на каждой итерации среди всех висячих вершин мы ищем висячую вершину, имеющую наименьшую нижнюю оценку.

Далее рассмотрим некоторые подходы к определению основных величин метода ветвей и границ. Построение эффективной и точной процедуры для вычисления нижней границы (в задаче минимизации) имеет непосредственное отношение к созданию эффективного алгоритма метода ветвей и границ. Рассмотрим наиболее широко применяемый подход к вычислению нижней оценки, который использует понятие выпуклой нижней оценочной функции.

Функцию $\tilde{L}(C; \Xi)$ будем называть нижней оценочной функцией C в области Ξ , если во всех точках области Ξ выполняется неравенство $\tilde{L}(C; \Xi) \leq C(\xi)$. Если нижняя оценочная функция $\tilde{L}(C; \Xi)$ является выпуклой функцией, будем называть ее выпуклой нижней оценочной функцией и обозначать через $L(C; \Xi)$. Требуется, чтобы выпуклая нижняя оценочная функция удовлетворяла следующим условиям:

- 1) $L(C; \Xi)$ должна быть дважды дифференцируемой функцией.

Это требование связано с тем, что для решения задачи получения нижней оценки обычно используются квазиньютоновские методы оптимизации, которые основаны на предположении, что в малой окрестности минимума функция близка к квадратичной;

2) должно удовлетворяться следующее условие:

$$\lim_{r(\Xi) \rightarrow 0} \max_{\xi \in \Xi} |L(C; \Xi) - C| = 0.$$

Аналогично можно ввести понятие вогнутой верхней оценочной функции $U(C; \Xi)$, удовлетворяющей условиям:

- 1) $U(C; \Xi) \geq C(\xi)$ для всех $\xi \in \Xi$;
- 2) $U(C; \Xi)$ – вогнутая функция в области Ξ .

Выпуклые нижние оценочные функции могут быть использованы для вычисления нижних оценок. Действительно, рассмотрим задачу

$$\mu_l = \min_{\xi \in \Xi_l} L[C(\xi); \Xi_l], \quad (2.27)$$

$$L[g_j(\xi); \Xi_l] \leq 0, \quad j = 1, \dots, m.$$

Пусть ξ^l – решение этой задачи. Поскольку функции $L[C(\xi); \Xi_l]$, $L[g_j(\xi); \Xi_l]$ ($j = 1, \dots, m$) выпуклы, то локальный минимум задачи (2.27) совпадает с глобальным минимумом этой задачи. Поэтому решение может быть получено с использованием обычных методов нелинейного программирования. Поскольку выполняются условия $L[C(\xi); \Xi_l] \leq C(\xi)$, $L[g_j(\xi); \Xi_l] \leq g_j(\xi)$, $j = 1, \dots, m$ для всех $\xi \in \Xi_l$, то решение задачи (2.27) дает нижнюю оценку оптимального значения критерия задачи (2.19), т.е. $\mu_l \leq \rho_l$. При этом нижняя оценка не становится хуже при дроблении области (обычно она улучшается) [31].

Простейший способ выбора переменной разбиения состоит в очередном выборе поисковых переменных в качестве переменных разбиения. Однако такой способ может оказаться недостаточно эффективным. В связи с этим рассмотрим другой подход.

Пусть l_k -я подобласть разбиается на p -ю и q -ю подобласти и $\mu_p > \mu_q$. В соответствии с шагом 3 для разбиения мы должны выбрать подобласть Ξ_q . Это разбиение будет успешным, если $I_p^* > I_q^*$. Поэтому желательно выбрать в качестве переменной разбиения переменную, для которой $(\mu_p - \mu_q)$ является наибольшей величиной. Однако до разбиения нам неизвестны величины μ_p и μ_q . Поэтому необходимо выбрать косвенную оценку величины $(\mu_p - \mu_q)$. Такой оценкой может быть чувствительность целевой функции $C(\xi)$ по отношению к переменным ξ_i в точке ξ^l решения задачи (2.27).

Функция гибкости $\chi_1(a, d)$ может быть представлена в виде

$$\chi_1(a, d) = \max_{\xi \in \Xi} h(a, d, \xi),$$

где
$$h(a, d, \xi) = \min_{z \in Z} \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi). \quad (2.28)$$

Таким образом, вычисление функции гибкости сводится к максимизации функции $h(a, d, \xi)$ по переменным ξ . Поскольку метод ветвей и границ изложен применительно к задаче минимизации, мы будем рассматривать задачу поиска минимума функции

$$I = -h(a, d, \xi).$$

Следуя книге [31], рассмотрим методы вычисления верхней и нижней оценок функции гибкости $\chi_1(a, d)$. Изменяя порядок выполнения операторов \max и \min , получим некоторую функцию $\chi_1^U(a, d) = \min_{z \in Z} \max_{\xi \in \Xi} \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi)$. Согласно равенству

$\max_x \max_y f(x, y) = \max_y \max_x f(x, y) = \max_{x, y} f(x, y)$ операторы $\max_{j \in J}$ и $\max_{\xi \in \Xi}$ перестановочны, поэтому имеем:

$$\chi_1^U(a, d) = \min_{z \in Z} \max_{j \in J} \max_{\xi \in \Xi} g_j(a, d, z, \xi). \quad (2.29)$$

Свойство 1. Функция $\chi_1^U(a, d)$ определяет некоторую верхнюю границу функции $\chi_1(a, d)$ в области Ξ :

$$\chi_1(a, d) \leq \chi_1^U(a, d). \quad (2.30)$$

Это свойство непосредственно следует из неравенства $\min_x \max_y f(x, y) \geq \max_y \min_x f(x, y)$. Из соотношений (2.28) и (2.30) получаем $h(a, d, \xi) \leq \chi_1^U(a, d)$, $\xi \in \Xi$. Так как последнее неравенство справедливо для любой области Ξ , то оно справедливо для любой подобласти $\Xi_i \subset \Xi$. Отсюда получаем

$$h(a, d, \xi) \leq \chi_{1,i}^U(a, d), \quad \xi \in \Xi_i, \quad (2.31)$$

где $\chi_{1,i}^U(a, d) = \min_{z \in Z} \max_{j \in J} \max_{\xi \in \Xi_i} g_j(a, d, z, \xi)$,

и
$$\chi_{1,i}(a, d) = \max_{\xi \in \Xi_i} h(a, d, \xi) \leq \chi_{1,i}^U(a, d). \quad (2.32)$$

Свойство 2. Пусть область Ξ разбита на N_k подобластей $\Xi_i^{(k)}$ ($i = 1, \dots, N_k$). Справедливы следующие неравенства [31]:

$$\chi_1^{U,(k)}(a, d) \leq \chi_1^U(a, d), \quad (2.33)$$

$$\chi_1^{U,(k)}(a, d) \geq \chi_1(a, d), \quad (2.34)$$

где

$$\chi_1^{U,(k)}(a, d) = \max_{i \in L} \chi_{1,i}^U(a, d) = \max_{i \in L} \min_{z^i} \max_{j \in J} \max_{\xi \in \Xi_i} g_j(a, d, z^i, \xi), \quad (2.35)$$

$L = (1, \dots, N_k)$, k – номер итерации в методе ветвей и границ.

Свойство 3. Величина $\chi_1^{U,(k)}(a, d)$ может быть получена решением задачи

$$\begin{aligned} \chi_{1,i}^U(a, d) &= \min_{z, u} u, \\ \max_{\xi \in \Xi_i} g_j(a, d, z, \xi) &\leq u, \quad j = 1, \dots, m. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Пусть $[z^i, u^i]$ – решение этой задачи и $\bar{g}_j(a, d, z) = \max_{\xi \in \Xi_i} g_j(a, d, z, \xi)$. Тогда выражение для $\chi_{1,i}^U(a, d)$ может быть переписано в виде $\chi_{1,i}^U(a, d) = \min_z \max_{j \in J} \bar{g}_j(a, d, z)$, что эквивалентно следующей задаче:

$$\begin{aligned} \chi_{1,i}^U(a, d) &= \min_{z, u} u, \\ \bar{g}_j(a, d, z) &\leq u, \quad j = 1, \dots, m. \end{aligned}$$

Свойство 4. Имеет место следующее соотношение:

$$\lim_{r(\Xi_i^{(k)}) \rightarrow 0} \chi_{1,i}^U(a, d) = h(a, d, \xi^i), \quad (2.37)$$

где $r(\Xi_i^{(k)})$ – некоторая мера размера подобласти $\Xi_i^{(k)}$; ξ^i – такая точка подобласти $\Xi_i^{(k)}$, в которую стягивается $\Xi_i^{(k)}$ при $r(\Xi_i^{(k)}) \rightarrow 0$ ($\Xi_i^{(k)} \rightarrow \xi^i$).

Равенство (2.37) следует непосредственно из вида функции $\chi_{1,i}^U(a, d)$. Таким образом, если подобласть Ξ_i достаточно мала (т.е. $r(\Xi_i) \leq \varepsilon$, где ε достаточно малая величина), то

$$\chi_{1,i}^U \approx h(a, d, \xi^i), \quad \xi^i \in \Xi_i, \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} h(a, d, \xi^i) &= \min_{z, u} u, \\ g_j(a, d, z, \xi^i) &\leq u, \quad j = 1, \dots, m. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Поскольку функция $\chi_{1,i}^U(a, d)$ есть решение задачи

$$\chi_{1,i}^U(a, d) = \min_z u,$$

$$\max_{\xi \in \Xi_i} g_j(a, d, z, \xi) = u, \quad j \in J_A(a, d; \Xi_i),$$

то функция $h(a, d, \xi^i)$ определяется только множеством $J_A(a, d; \Xi_i)$ активных ограничений задачи (2.39).

Свойство 5. Пусть область разбита на N_k подобластей $\Xi_i^{(k)}$ ($i = 1, \dots, N_k$). Обозначим через $\Xi^{(k)}$ множество подобластей $\Xi_i^{(k)}$ ($i = 1, \dots, N_k$) и через $\Xi'^{(k)}$ некоторое подмножество множества $\Xi^{(k)}$, которое содержит подобласть с наибольшей верхней границей $\chi_{1,i}^U(a, d)$. Пусть на k -й итерации разбиваются все подобласти подмножества $\Xi'^{(k)}$. В результате получаем подмножество $\Xi''^{(k)}$. Таким образом, на $(k + 1)$ -й итерации мы получим новое подмножество подобластей:

$$\Xi^{(k+1)} = \left\{ \Xi_i^{(k+1)}, i = 1, \dots, N_{k+1} \right\} \quad \left(\Xi^{(k+1)} = \Xi''^{(k)} \cup (\Xi^{(k)} / \Xi'^{(k)}) \right).$$

Тогда выполняется следующее неравенство:

$$\chi_1^{U,(k)} \geq \chi_1^{U,(k+1)}. \quad (2.40)$$

Действительно, новое множество подобластей $\Xi_i^{(k+1)}$ обладает следующим свойством:

$$\forall \Xi_i^{(k+1)} \in \Xi''^{(k)} \quad \exists \Xi_j^{(k)} \in \Xi'^{(k)} : \Xi_i^{(k+1)} \subseteq \Xi_j^{(k)}.$$

Поскольку $\Xi_i^{(k+1)} \subseteq \Xi_j^{(k)}$, то из вида функции $\chi_{1,i}^U(a, d)$ следует неравенство $\chi_{1,i}^U(a, d) \leq \chi_{1,j}^U(a, d)$. Поскольку подмножество $\Xi'^{(k)}$ содержит подобласть с наибольшей верхней границей $\chi_{1,i}^U$, то получим

$$\chi_1^{U,(k)} = \max_j \chi_{1,j}^U(a, d) \geq \max_i \chi_{1,i}^U(a, d) = \chi_1^{U,(k+1)}.$$

На практике соотношение (2.40) за исключением особых случаев является строгим неравенством, поэтому дробление таких подмножеств улучшает верхнюю границу $\chi_1^{U,(k)}$.

Рассмотрим теперь метод вычисления нижней границы функции $\chi_{1,i}(a, d)$ в подобласти Ξ_i . Запишем следующее неравенство

$$\chi_{1,i}(a, d) = \max_{\xi \in \Xi_i} h(a, d, \xi) \geq \max_{l \in S^i} h(a, d, \xi^l),$$

где S^i – произвольное множество точек из подобласти Ξ_i ($S^i \subset \Xi_i$).

Таким образом, величина $\chi_{1,i}^L(a, d) = \max_{l \in S^i} h(a, d, \xi^l)$ есть нижняя граница функции $\chi_{1,i}(a, d)$ для любого множества S^i . Правая часть этого равенства – решение задачи

$$\min v,$$

$$\max_{l \in S^i} h(a, d, \xi^l) \leq v,$$

которую можно путем последовательных преобразований свести к окончательному виду задачи вычисления нижней границы функции $\chi_{1,i}(a, d)$:

$$\chi_{1,i}^L(a, d) = \min_{z^l, v} v,$$

$$g_j(a, d, z^l, \xi^l) \leq v, \quad j = 1, \dots, m, \quad \xi^l \in S^i, \quad (2.41)$$

где z^l – новые поисковые переменные.

Множество S^i желательно выбирать таким образом, чтобы нижняя граница $\chi_{1,i}^L(a, d)$ была по возможности ближе к величине $h(a, d, \xi^i)$, где точка ξ^i – точка максимума функции $h(a, d, \xi)$ по переменной ξ в подобласти Ξ_i .

Отметим следующие факты:

1) в соответствии с методом ветвей и границ дробятся подобласти, которые могут содержать максимум функции $h(a, d, \xi)$, и поэтому теоретически размер подобласти, содержащей максимум функции, должен стремиться к нулю;

2) величина $h(a, d, \xi^i)$ определяется только множеством активных точек S_{AP}^i ;

3) множество $J_A(a, d; \Xi_i)$ стремится к $J_A(a, d; \xi^i)$, если $r(\Xi_i) \rightarrow 0$ и $\lim_{r(\Xi_i) \rightarrow 0} \Xi_i = \xi^i$.

Поэтому в качестве множества S^i разумно использовать множество S_{AP}^i , которое состоит из точек, соответствующих активным ограничениям задачи (2.36).

Поскольку для каждой подобласти верно неравенство $\chi_{1,i}(a, d) \geq \chi_{1,i}^L(a, d)$, то мы получаем

$$\max_i \chi_{1,i}^L(a, d) \leq \max_i \chi_{1,i}(a, d) \leq \chi_1(a, d).$$

Таким образом, величина

$$\chi_1^{L,(k)}(a, d) = \max_i \chi_{1,i}^L \quad (2.42)$$

является нижней границей функции $\chi_1(a, d)$.

Функция гибкости $\chi_2(a, d)$ может быть представлена в виде

$$\chi_2(a, d) = \max_{\xi^1 \in \Xi^1} h^{(2)}(a, d, \xi^1), \quad (2.43)$$

где $h^{(2)}(a, d, \xi^1) = \min_z \max_{\xi^2 \in \Xi^2} \max_{j \in J} g_j(a, d, \xi^1, \xi^2)$. Вычисление функции

гибкости $\chi_2(a, d)$ сводится к максимизации функции $h^{(2)}(a, d, \xi^1)$ в области Ξ^1 по переменным ξ^1 . Сведем задачу (2.43) к виду

$$h^{(2)}(a, d, \xi^1) = \min_{z, v} v, \quad (2.44)$$

$$\max_{\xi^2 \in \Xi^2} g_j(a, d, z, \xi^1, \xi^2) \leq v, \quad j = 1, \dots, m.$$

Подобно функции $\chi_2(a, d)$ можно ввести функцию гибкости $\chi_{2,i}(a, d)$ для подобласти Ξ_i^1 области Ξ^1

$$\chi_{2,i}(a, d) = \max_{\xi^1 \in \Xi_i^1} \min_z \max_{\xi^2 \in \Xi^2} \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi^1, \xi^2). \quad (2.45)$$

Аналогично формуле (2.43) эта функция может быть представлена в виде

$$\chi_{2,i}(a, d) = \max_{\xi^1 \in \Xi_i^1} h^{(2)}(a, d, \xi^1). \quad (2.46)$$

Введем вспомогательные функции $\chi_2^U(a, d)$ и $\chi_{2,i}^U(a, d)$, соответствующие всей области Ξ^1 и любой ее подобласти Ξ_i^1 :

$$\chi_2^U(a, d) = \min_z \max_{\xi^1 \in \Xi^1} \max_{\xi^2 \in \Xi^2} \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi),$$

$$\chi_{2,i}^U(a, d) = \min_z \max_{\xi^1 \in \Xi_i^1} \max_{\xi^2 \in \Xi^2} \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi).$$

Эти функции получены изменением порядка выполнения двух операторов в функциях $\chi_2(a, d)$ и $\chi_{2,i}(a, d)$. Свойства функций $\chi_2^U(a, d)$ и $\chi_{2,i}^U(a, d)$ аналогичны свойствам функций $\chi_1^U(a, d)$ и $\chi_{1,i}^U(a, d)$ [31].

Рассмотрим теперь проблему вычисления нижней границы функции гибкости $\chi_2(a, d)$ в некоторой подобласти $\Xi_i^1 \subset \Xi^1$. Используя те же самые рассуждения, которые мы применяли для определения нижней границы функции гибкости $\chi_1(a, d)$, мы получим следующую задачу для определения нижней границы функции гибкости $\chi_2(a, d)$ в подобласти Ξ_i^1 :

$$\chi_{2,i}^L(a, d) = \min_{z^l, u} u,$$

$$\max_{\xi^2 \in \Xi^2} g_j(a, d, z^l, \xi^{1,l}, \xi^2) \leq u, \quad j = 1, \dots, m, \quad \xi^{1,l} \in S^i,$$

где S^i – произвольное множество точек $\xi^{1,l}$ в области Ξ^1 . Разумно брать точки $\xi^{j,i}$ ($j \in J_A(a, d; \Xi_i^1)$) в качестве множества S^i в сформулированной выше задаче. Имея алгоритмы для вычисления верхней и нижней границы функции гибкости $\chi_2(a, d)$, мы можем вычислять значения функции гибкости, применяя метод ветвей и границ для максимизации функции $h^{(2)}(a, d, \xi^1)$ в области Ξ^1 по переменным ξ^1 .

Рассмотрим модификацию метода ветвей и границ, которая будет доставлять глобальное решение задачи оценки функции гибкости при меньших требованиях к выпуклости (вогнутости) функций g_j .

Будем предполагать, что выполняется следующее условие: функции $g_j(a, d, z^l, \xi^{lj*}) \leq 0$ для всех j, l являются строго квазивыпуклыми по переменным z . Для вычисления функции гибкости будем использовать метод ветвей и границ со следующими изменениями. Вместо задачи (2.36) для вычисления верхней границы функции $h(a, d, \xi)$ мы будем решать следующую задачу [6]:

$$\hat{\chi}_{1,i}^U = \min_{z \in Z, u} u,$$

$$\max_{\xi \in \Xi_i} U(g_i; \Xi_i) \leq u, \quad j = 1, \dots, m, \quad (2.47)$$

где $U(g_j; \Xi_i)$ является строго квазивыпуклой функцией по переменным z и верхней оценочной вогнутой функцией для $g_j(a, d, z, \xi)$ по переменным ξ , удовлетворяющей условиям

$$U(g_j; \Xi_i) \geq g_j, \quad \xi \in \Xi_i,$$

$$\lim_{r(\Xi_i) \rightarrow 0} \max_{\xi \in \Xi_i} [U(g_j; \Xi_i) - g_j(a, d, z, \xi)] = 0, \quad z \in Z, \quad a \in A, \quad d \in D. \quad (2.48)$$

Для определения нижней границы будем решать задачу (2.41), локальный минимум которой совпадает с глобальным минимумом. Сравнивая задачу (2.36) и (2.47) и учитывая условие (2.48), получим следующее неравенство: $\hat{\chi}_{1,i}^U \geq \chi_{1,i}^U \geq h(a, d, \xi)$, $\xi \in \Xi_i$. Из условия (2.48) и задачи (2.47) следует, что имеет место следующее равенство:

$$\lim_{r(\Xi_i) \rightarrow 0} \hat{\chi}_{1,i}^U = h(a, d, \xi^i), \quad (2.49)$$

где Ξ_i стягивается в точку ξ^i . Это означает, что, когда подобласть Ξ_i уменьшается, величина $\hat{\chi}_{1,i}^U$ становится все более точной верхней оценкой значения $h(a, d, \xi)$. Из (2.36) следует равенство

$\lim_{r(\Xi_i) \rightarrow 0} \chi_{1,i}^U = h(a, d, \xi^i)$, где $\Xi_i \rightarrow \xi^i$ при $r(\Xi_i) \rightarrow 0$. Следовательно, получаем

$$\lim_{r(\Xi_i) \rightarrow 0} \hat{\chi}_{1,i}^U = \lim_{r(\Xi_i) \rightarrow 0} \chi_{1,i}^U = h(a, d, \xi^i).$$

Обозначим через $\Xi_i^{(k)}$ подобласть, имеющую наибольшую верхнюю границу на k -й итерации. Так как на каждой итерации в соответствии с методом ветвей и границ дробится подобласть $\Xi_i^{(k)}$, то при $r(\Xi_i^{(k)}) \rightarrow 0$ значение $\hat{\chi}_{1,i}^U$ стремится к $\chi_{1,i}^U$. Следовательно, в пределе в задаче (2.47) мы будем получать то же решение, что и в задаче (2.36).

Таким образом, метод ветвей и границ, использующий в качестве нижней и верхней границы решения задач (2.41) и (2.47) позволяет получить глобальное решение задачи вычисления значения функции гибкости $\chi_1(a, d)$.

Описанная модификация метода ветвей и границ для определения глобального решения задачи вычисления значения функции гибкости $\chi_1(a, d)$ сравнительно легко обобщается для вычисления функции гибкости $\chi_2(a, d)$. Однако для этого необходимо, чтобы функции $g_j(a, d, z, \xi)$ ($j=1, \dots, m$) были строго квазивогнутыми по параметрам ξ^2 .

2.3. АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ ОДНО- И ДВУХСТАДИЙНЫХ ЗАДАЧ ИНТЕГРИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ХТС С «ЖЕСТКИМИ» ОГРАНИЧЕНИЯМИ

Как и ранее, здесь будем использовать следующие обозначения:

$\xi \in \Xi, \Xi = \{ \xi \mid \xi^L \leq \xi \leq \xi^U \}$, ξ – вектор неопределенных параметров, принадлежащих области Ξ ; причем $\xi = \{ \xi^1, \xi^2 \}$, где $\xi^1 \in \Xi_1$ – подвектор компонентов ξ , которые могут быть с достаточной точностью определены (измерены) на стадии эксплуатации химико-технологической системы; $\xi^2 \in \Xi_2$ – подвектор компонентов ξ , которые не удастся идентифицировать даже на стадии эксплуатации ХТС; $\Omega = \{ \omega_i \mid i = \overline{1, \rho} \}$ – множество производимых продуктов (ассортимент); $d \in D$ – вектор проектных (конструктивных) параметров (множество D определяется типом $a \in A$ аппаратурного оформления химического производства); $z \in Z$ – вектор режимных (управляющих) переменных ХТС; $C(\bullet)$ – критерий оптимального проектирования ХТС.

Перейдем к рассмотрению задачи интегрированного проектирования ХТС, в которой конструктивные переменные $a \in A, d \in D$ и режимные (управляющие) переменные $z \in Z$ должны быть выбраны таким образом, чтобы минимизировать приведенные затраты $C(\bullet)$, включающие стоимость реализуемого проекта (капитальные затраты) и затраты на эксплуатацию ХТС.

Эксплуатационные затраты включают в себя: 1) стоимость сырья и материалов; 2) стоимость потребляемой технологическим оборудованием электро- и тепловой энергии; 3) заработную плату обслуживающего персонала; 4) затраты на социальные нужды; 5) затраты на содержание и эксплуатацию технологического оборудования.

Отметим, что основной составляющей эксплуатационных затрат химического производства являются затраты на сырье и энергию. Поэтому, при минимизации этой составляющей затрат при интегрированном проектировании фактически добиваются энерго- и ресурсосбережения новой ХТС. При проектировании многоассортиментных химических производств особенно важно учитывать гибкость (работоспособность) проекта. При этом у нас есть два выбора:

1) убедиться в гибкости проекта при найденных векторах a^*, d^* в задаче интегрированного проектирования, т.е. показать, что $\chi_1(a^*, d^*) \leq 0$;

2) максимизировать меру гибкости многоассортиментного производства и в то же время минимизировать стоимость проекта.

Формулировку условия гибкости (задающего ограничения задачи) определяют следующие факторы.

1. Характер информации, содержащей неопределенность. Неопределенность может быть параметрической или модельной. В первом случае известна форма математической модели, но неизвестны точные значения некоторых ее параметров. Во втором случае предполагают, что нет точного знания о «модели» (триаде «модель–алгоритм–программа») ХТС. Имеется ряд альтернативных «моделей» (триад «модель–алгоритм–программа»), одна из которых соответствует действительности.

2. Существование и величина неопределенности информации на второй стадии (на первой стадии неопределенность присутствует практически всегда).

3. Способ обеспечения гибкости ХТС:

- имеются конструктивные и управляющие переменные;
- имеются только конструктивные переменные;
- имеются только управляющие переменные.

4. Тип ограничений: ограничения могут быть «жесткими» (безусловными) и «мягкими» (вероятностными). Жесткие ограничения не должны нарушаться ни при каких условиях. Мягкие ограничения должны выполняться с заданной вероятностью. В нашей работе мы будем рассматривать следующие случаи:

- все ограничения являются «жесткими»;
- все ограничения являются «мягкими»;
- часть ограничений является – «жесткими», другая часть – «мягкими».

Большинство реальных задач относится к третьему случаю. Например, ограничения по безопасности химического производства относятся к разделу «жестких», а ограничения на производительность и селективность часто могут быть отнесены к разделу «мягких».

Отметим, что при формулировании задачи интегрированного проектирования необходимым требованием является согласованность a , d и z в критериях для двух стадий «жизни» химико-технологической системы (требование реализуемости режимов функционирования ХТС).

Запишем постановку задачи ОЗИП в следующем виде (см. п. 2.1):

$$I^* = \min_{a, d, z} M_{\xi} \{C(a, d, z, \xi)\}, \quad (2.50)$$

при связях в форме уравнений математической модели статики химико-технологической системы

$$y = \mathfrak{F}(a, d, z, \xi) \quad (2.51)$$

и ограничениях

$$\max_{\xi} \max_j [g_j(a, d, z, \xi)] \leq 0, \quad j \in J,$$

где $g_j(a, d, z, \xi) \equiv y_{j \text{ зад}} - y_j$ или

$$\max_{\xi} [g_j(a, d, z, \xi) \equiv y_{j \text{ зад}} - y_j] \leq 0, \quad j \in J. \quad (2.52)$$

Заменим математическое ожидание с помощью квадратурной формулы некоторой суммой

$$M_{\xi} \{C(a, d, z, \xi)\} \approx \sum_{i \in I_1} \gamma_i C(a, d, z, \xi^i),$$

где γ_i – весовые коэффициенты, $\sum_{i \in I_1} \gamma_i = 1$; I_1 – множество аппроксимационных точек в области Ξ ; $y_j, y_{j \text{ зад}}$ – текущее и предельно допустимое значения j -й выходной переменной.

Обозначим совокупность аппроксимационных точек $\xi^i, i \in I_1$ через S_1 , а множество критических точек на v -м шаге – через $S_2^{(v)} = \{\xi^l : j \in I_2^{(l)}\}$. Алгоритм решения задачи (2.50), (2.51) основывается на методе внешней аппроксимации и его можно записать в следующем виде.

Алгоритм 2.2

Шаг 1. Полагаем число итераций $v=1$ и выбираем совокупность аппроксимационных точек S_1 , начальную совокупность критических точек $S_2^{(0)}$ и начальные приближения $a^{(0)}, d^{(0)}, z^{(0)}$.

Шаг 2. Решаем вспомогательную задачу

$$\min_{a, d, z} \sum_{i \in I_1} \gamma_i C(a, d, z, \xi^i),$$

$$g_j(a, d, z, \xi^l) \leq 0, \quad j = \overline{1, m}; \quad \xi^l \in S_2^{(v-1)}; \quad l \in I_2^{(v-1)},$$

и определяем $a^{(v)}, d^{(v)}, z^{(v)}$.

Шаг 3. Решаем m -задач

$$\max_{\xi \in \Xi} g_j(a^{(v)}, d^{(v)}, z^{(v)}, \xi), \quad j = \overline{1, m},$$

и определяем m точек $\xi^{l(v)}, l = \overline{1, m}$.

Шаг 4. Образует множество новых критических точек на v -й итерации

$$R^{(v)} = \left\{ \xi^{l(v)} : g_j(a^{(v)}, d^{(v)}, z^{(v)}, \xi^{l(v)}) > 0 \right\}.$$

Если это множество пустое, то решение задачи получено. В противном случае переходим к шагу 5.

Шаг 5. Формируем новое множество критических точек $S_2^{(v+1)} = S_2^{(v-1)} \cup R^{(v)}$ и, полагая $v := v + 1$, переходим к шагу 2.

Характерной чертой алгоритма 2.2 является увеличение числа критических точек на каждом шаге и, соответственно, увеличение числа ограничений. Это является определенным недостатком, поскольку в некоторых случаях при большом числе критических точек число ограничений может стать слишком большим.

Остановимся подробнее на шаге 3. Как правило, характер функций g_j неизвестен. В этом случае можно использовать такой подход. Предполагаем на первом этапе, что функции g_j выпуклы. В этом случае решение задачи

$$\max_{\xi \in \Xi} g_j(a^{(v)}, d^{(v)}, z^{(v)}, \xi), \quad j = \overline{1, m}$$

находится в одной из вершин параллелепипеда Ξ . В начальное множество критических точек $S_2^{(0)}$ включается некоторое количество угловых точек куба Ξ , а на шаге 3 рассчитываются значения функций $g_j(a^{(v)}, d^{(v)}, z^{(v)}, \xi)$, $j = \overline{1, m}$ во всех угловых точках куба Ξ , не принадлежащих множествам $S_2^{(v)}$ и S_1 . Среди этих точек выбираются m точек, в которых функции $g_j(a^{(v)}, d^{(v)}, z^{(v)}, \xi^l)$, $j, l = \overline{1, m}$ принимают наибольшие значения. Далее формируем новое множество критических точек $S_2^{(v+1)} = S_2^{(v)} \cup R^{(v)}$ и переходим к шагу 2 алгоритма 2.2.

Рассмотрим методы решения двухстадийных задач интегрированного проектирования в условиях интервальной неопределенности. Имеются следующие трудности при решении задачи ДЗИП: 1) недифференцируемость функции $h(a, d, \xi)$ по переменной ξ и функций гибкости $\chi_1(a, d)$ и $\chi_2(a, d)$ по переменной d ; 2) многоэкстремальность задачи ДЗИП, связанная с невыпуклостью (невогнутостью) функций $C(a, d, z, \xi)$, $g_j(a, d, z, \xi)$ и видом функции $h(a, d, \xi)$.

Прямой подход к решению ДЗИП1 требует использования методов глобальной недифференцируемой оптимизации. Известно, что эти методы очень трудоемки и существенно менее эффективны, чем хорошо разработанные методы дифференцируемой оптимизации (методы нелинейного программирования). Методы дифференцируемой оп-

тимизации при выполнении некоторых условий выпуклости (вогнуто-сти) будут доставлять глобальное решение ДЗИП.

Запишем дискретный вариант ДЗИП1:

$$C_1 = \min_{a,d,z^i} \sum_{i \in I_1} \gamma_i C(a, d, z^i, \xi^i),$$

$$g(a, d, z^i, \xi^i) \leq 0, \quad i \in I_1,$$

$$\chi_1(a, d) = \max_{\xi \in \Xi} \min_{z \in Z} \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0.$$

Рассмотрим метод внешней аппроксимации и метод разбиений и границ для решения дискретного варианта ДЗИП1 [31, 152]. Перепишем эту задачу в виде

$$C_1 = \min_{a,d,z^i} \sum_{i \in I_1} \gamma_i C(a, d, z^i, \xi^i),$$

$$g(a, d, z^i, \xi^i) \leq 0, \quad i \in I_1,$$

$$h(a, d, \xi) \leq 0, \quad \xi \in \Xi,$$

и пусть $[a^*, d^*, z^{i*}]$ – решение этой задачи. Обозначим бесконечное множество точек, содержащихся в области Ξ , через S_{Ξ} и множество точек ξ^p , которым соответствуют активные ограничения в точке решения задачи, через $S_{A,P}$:

$$S_{A,P} = \{ \xi^p : h(a^*, d^*, \xi^p) = 0; \xi^p \in \Xi \}. \quad (2.53)$$

Будем называть эти точки активными. Решение $[a^*, d^*, z^{i*}]$ задачи ДЗИП1 есть решение (локальный минимум) следующей задачи:

$$C_1 = \min_{a,d,z^i \in Z} \sum_{i \in I_1} \gamma_i C(a, d, z^i, \xi^i),$$

$$g(a, d, z^i, \xi^i) \leq 0, \quad i \in I_1,$$

$$h(a, d, \xi^p) \leq 0, \quad \xi^p \in S_{A,P}.$$

Нижняя граница для ДЗИП1. Введем некоторое произвольное множество $S_2^{(v)} = \{ \xi^l : l \in I_2^{(v)}, \xi^l \in \Xi \}$ точек из области неопределенности, где $I_2^{(v)}$ – множество индексов точек в $S_2^{(v)}$ ($I_1 \cap I_2^{(v)} = \emptyset$), и v – номер итерации алгоритма решения ДЗИП1. Точки множества $S_2^{(v)}$ будут называться критическими точками. Далее рассмотрим задачу

$$C_1^{L,(v)} = \min_{a,d,z^i} \sum_{i \in I_1} \gamma_i C(a, d, z^i, \xi^i), \quad (2.54)$$

$$g(a, d, z^i, \xi^i) \leq 0, \quad i \in I_1, \quad (2.55)$$

$$h(a, d, \xi^l) \leq 0, \quad \xi^l \in S_2^{(v)}. \quad (2.56)$$

Эта задача имеет следующие свойства: 1) величина $C_1^{L,(v)}$ является нижней границей оптимального значения целевой функции задачи ДЗИП1; 2) добавление точек к множеству критических точек не ухудшает нижнюю границу; 3) если множество критических точек ξ^i , принадлежащих множеству $S_2^{(v)}$, достаточно плотно покрывает область Ξ , то решение задачи (2.54) – (2.56) достаточно близко к решению задачи ДЗИП1: $C_1 - C_1^{L,(v)} \leq \varepsilon$, где ε – достаточно малая положительная величина (точность решения ДЗИП1); 4) если решение $a^{(v)}, d^{(v)}$ задачи (2.54) – (2.56) удовлетворяет условию $\chi_1(a, d) \leq 0$, то $a^{(v)}, d^{(v)}$ есть решение дискретного варианта задачи ДЗИП1.

Задачу (2.54) – (2.56) перепишем в виде

$$C_1^{L,(v)} = \min_{a,d,z^i,\xi^i} \sum_{i \in I_1} \gamma_i C(a, d, z^i, \xi^i), \quad (2.57)$$

$$g_j(a, d, z^i, \xi^i) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad i \in I_1, \quad (2.58)$$

$$g_j(a, d, z^l, \xi^l) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad \xi^l \in S_2^{(v)}. \quad (2.59)$$

Сравнительный анализ задач (2.54) – (2.56) и (2.57) – (2.59) показывает, что прямое решение задачи (2.54) – (2.56) требует использования методов недифференцируемой оптимизации, поскольку функция $h(a, d, \xi)$ недифференцируема. Кроме того, алгоритм решения этой задачи должен быть двухуровневым, так как в каждой точке $[a, d, z^i]$ необходимо решать задачу нелинейного программирования $\chi_1(a, d) = \max_{\xi \in \Xi} h(a, d, \xi)$, где $h(a, d, \xi) = \min_z \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi)$. Задача (2.57) – (2.59) имеет больше поисковых переменных, однако она является более простой задачей: 1) она является одноуровневой задачей оптимизации; 2) она является задачей дифференцируемой оптимизации и для ее решения можно использовать хорошо разработанные методы нелинейного программирования.

Верхняя граница для ДЗИП1. Пусть область Ξ разбита на N_v подобластей $\Xi_i^{(v)}$ ($\Xi_i^{(v)} = \{\xi : \xi^{L,i,(v)} \leq \xi \leq \xi^{U,i,(v)}\}$), причем $\Xi = \Xi_1^{(v)} \cup \dots \cup \Xi_{N_v}^{(v)}$, где v – номер итерации алгоритма решения задачи ДЗИП1. Заменяем в задаче ДЗИП1 одно ограничение по гибкости N_v ограничениями $\chi_{1,i}^U(a, d) \leq 0$ ($i = 1, \dots, N_v$) [6]:

$$C_1^{U,(v)} = \min_{a,d,z^i} \sum_{i \in I_1} \gamma_i C(a, d, z^i, \xi^i), \quad (2.60)$$

$$g_j(a, d, z^i, \xi^i) \leq 0, \quad j=1, \dots, m, \quad i \in I_1, \quad (2.61)$$

$$\chi_{1,1}^U(a, d) \leq 0, \dots, \chi_{1,N_v}^U(a, d) \leq 0, \quad (2.62)$$

где функция $\chi_{1,i}^U(a, d)$ описывается формулой (2.29). В частности, когда $N_v = 1$, ограничение $\chi_1(a, d) \leq 0$ заменяется ограничением $\chi_1^U(a, d) \leq 0$.

Подставляя выражение (2.29) вместо $\chi_{1,i}^U(a, d)$ в неравенства (2.62) и используя ряд теорем из работ [31, 150], задачу (2.60) – (2.62) можно преобразовать к виду

$$C_1^{U,(v)} = \min_{a,d,z^i,z^l} \sum_{i \in I_1} \gamma_i C(a, d, z^i, \xi^i), \quad (2.63)$$

$$g_j(a, d, z^i, \xi^i) \leq 0, \quad j=1, \dots, m, \quad i \in I_1, \quad (2.64)$$

$$\max_{\xi \in \Xi_l^{(v)}} g_j(a, d, z^l, \xi) \leq 0, \quad j=1, \dots, m, \quad l=1, \dots, N_v. \quad (2.65)$$

Пусть $[a^{(v)}, z^{i,(v)}, z^{l,(v)}]$ – решение задачи (2.63) – (2.65), тогда $[a^{(v)}, z^{i,(v)}]$ – решение задачи (2.60) – (2.62).

Обозначим через $\xi^{j,(l)}$ решение задачи $\max_{\xi \in \Xi_l^{(v)}} g_j(a^{(v)}, d^{(v)}, z^{l,(v)}, \xi)$. Будем называть точку $\xi^{j,(l)}$ активной, если соответствующее неравенство (2.65) является активным в точке решения задачи (2.63), т.е. $g_j(a^{(v)}, d^{(v)}, z^{l,(v)}, \xi^{j,(l)}) = 0$.

Введем множество активных точек $S_{A,P}^{(v)}$ задачи (2.63) – (2.65):

$$S_{A,P}^{(v)} = \left\{ z^{l,j} : g_j(a^{(v)}, d^{(v)}, z^{l,(v)}, \xi^{j,(l)}) = 0, \quad l=1, \dots, N_v, \quad j=1, \dots, m \right\}.$$

Будем называть область $\Xi_l^{(v)}$ активной, если ей соответствует хотя бы одно равенство $g_j(a^{(v)}, d^{(v)}, z^{l,(v)}, \xi^{j,(l)}) = 0$. Активной области с номером l соответствует условие $\chi_{1,l}^U(a, d) = 0$. Ясно, что число активных областей не может быть больше размерности вектора конструктивных параметров. Используя теорему П.6 [31, 150], можно записать задачу (2.63) – (2.65) в виде

$$C_1^{U,(v)} = \min_{a,d,z^i,z^l} \sum_{i \in I_1} \gamma_i C(a, d, z^i, \xi^i),$$

$$g_j(a, d, z^i, \xi^i) \leq 0, \quad j=1, \dots, m, \quad i \in I_1,$$

$$g_j(a, d, z^l, \xi^{j,(l)}) \leq 0, \quad j=1, \dots, m, \quad l=1, \dots, N_v, \quad \xi^{j,(l)} \in S_{A,P}^{(v)}.$$

Задача (2.60) – (2.62) имеет следующие свойства: 1) величина $C_1^{U,(v)}$ является верхней границей оптимального значения целевой функции ДЗИП1; 2) дробление некоторых подобластей множества $\Xi^{(p)}$ не ухудшает верхнюю границу ДЗИП1, а в большинстве случаев даже ее улучшает; 3) если разбить область Ξ на достаточно малые подобласти $\Xi_i^{(v)}$, то решение задачи (2.60) – (2.62) будет достаточно близко к решению задачи ДЗИП1: $\lim_{r(\Xi_i^{(v)}) \rightarrow 0} C_1^{U,(v)} = C_1$; 4) если размеры всех по-

добластей $\Xi_i^{(v)}$ стремятся к нулю, то согласно свойству 3 задача (2.60) – (2.62) стремится к ДЗИП1 и ограничения (2.62) превращаются в ограничения $h(a, d, \xi) \leq 0, \xi \in \Xi$. Поэтому множество активных точек $S_{A,P}^{(v)}$ задачи (2.60) – (2.62) стремится к множеству активных точек ДЗИП1.

Рассмотрим алгоритм вычисления верхней границы оптимального значения целевой функции ДЗИП1 (решения задачи (2.63) – (2.65)). Обозначим через $S_{2l}^{(k,p)}$ множество критических точек, принадлежащих подобласти $\Xi_l^{(v)}$, где p – номер итерации в алгоритме внешней аппроксимации решения задачи (2.63) – (2.65), v – номер итерации в алгоритме решения задачи ДЗИП1.

Множество $S_{2l}^{(k,p)}$ будет образовываться автоматически при решении задачи (2.60) – (2.62). Пусть $S_2^{(v,p)} = S_{2,1}^{(v,p)} \cup S_{2,2}^{(v,p)} \cup \dots \cup S_{2,N_v}^{(v,p)}$.

В алгоритме мы будем использовать решение следующей вспомогательной задачи:

$$C_1^{UL,(v)} = \min_{a,d,z^i,z^l} \sum_{i \in I_1} \gamma_i C(a, d, z^i, \xi^i), \quad (2.66)$$

$$g_j(a, d, z^i, \xi^i) \leq 0, \quad j=1, \dots, m, \quad i \in I_1, \quad (2.67)$$

$$g(a, d, z^l, \xi^{l,q}) \leq 0, \quad \xi^{l,q} \in S_{2,l}^{(v,p)}, \quad l=1, \dots, N_v. \quad (2.68)$$

Задача (2.66) – (2.68) дает нижнюю границу оптимального значения целевой функции задачи (2.63) – (2.65). Сравним задачу (2.66) –

(2.68) с задачей, дающей нижнюю границу оптимального значения целевой функции ДЗИП1 (см. задачу (2.57) – (2.59)). В задаче (2.66) – (2.68) один вектор z^l соответствует всем точкам $\xi^{l,q}$, принадлежащим множеству $S_{2,l}^{(v,p)}$, в то время как в задаче (2.57) – (2.59) каждой точке ξ^i соответствует единственный вектор z^i . Приведем описание алгоритма вычисления верхней границы оптимального значения целевой функции ДЗИП1 (решения задачи (2.63) – (2.65)).

Алгоритм 2.3

Шаг 1. Положим $p = 1$. Зададим множество подобластей $\Xi_l^{(v)}$ ($l = 1, \dots, N_v$) (число v фиксировано, следовательно, число подобластей и их размеры остаются постоянными в этом алгоритме). Зададим начальные значения $z^{i,(0)}, z^{l,(0)}, a^{(0)}, d^{(0)}$ ($i \in I_1, l = 1, \dots, N_v$) соответствующих переменных и достаточно малое число $\varepsilon > 0$.

Шаг 2. Сформируем начальное множество $S_{2,l}^{(v,1)}$ критических точек для всех подобластей Ξ_l ($l = 1, \dots, N_1$)

$$S_{2,l}^{(v,1)} = \{\xi^{l,j,(1)}, j = 1, \dots, m : g_j(a^{(0)}, d^{(0)}, z^{i,(0)}, \xi^{l,j,(1)}) > 0\},$$

где $\xi^{l,j,(1)}$ есть решение задачи

$$\max_{\xi \in \Xi_l^{(v)}} g_j(a^{(0)}, d^{(0)}, z^{i,(0)}, \xi).$$

Шаг 3. Решим задачу (2.66) – (2.68) и определим нижнюю границу $C_1^{UL,(v)}$ величины $C_1^{U,(v)}$. Пусть $[a^{(p)}, d^{(p)}, z^{i,(p)}, z^{l,(p)}]$ – решение этой задачи.

Шаг 4. Решим mN_v задач $\max_{\xi \in \Xi_l^{(v)}} g_j(a^{(p)}, d^{(p)}, z^{i,(p)}, \xi)$, где $\Xi_l^{(v)} = \{\xi : \xi^{L,l,(v)} \leq \xi \leq \xi^{U,l,(v)}\}$. Обозначим через $\xi^{l,j,(p)}$ решение этой задачи при фиксированных $[l, j]$.

Шаг 5. Проверим выполнение условия

$$g_j(a^{(p)}, d^{(p)}, z^{i,(p)}, \xi^{l,j,(p)}) \leq \varepsilon, \quad j = 1, \dots, m; \quad l = 1, \dots, N_v.$$

Если все неравенства выполняются, решение задачи (2.63) – (2.65) получено, перейти к шагу 9; в противном случае перейти к шагу 6.

Шаг 6. Создадим множества $R^{l,(p)}$ ($l = 1, \dots, N_v$) точек $\xi^{l,j,(p)}$, для которых ограничения нарушаются.

$$R^{l,(p)} = \{\xi^{l,j,(p)} : g_j(a^{(p)}, d^{(p)}, z^{i,(p)}, \xi^{l,j,(p)}) > 0, \quad j = 1, \dots, m, l = 1, \dots, N_v\}.$$

Шаг 7. Сформируем новые множества критических точек

$$S_{2l}^{(v,p+l)} = S_{2l}^{(v,p)} \cup R^{l,(p)} \quad (l = 1, \dots, N_v),$$

которые будут использоваться на следующей итерации.

Шаг 8. Положим $p := p + 1$ и перейдем к шагу 3.

Шаг 9. Сформируем и запомним множество активных точек

$$S_{A,P}^{(v)} = \{ \xi^{l,j,(\hat{p})} : g_j(a^{(p)}, d^{(p)}, z^{i,(p)}, \xi^{l,j,(\hat{p})}) = 0, l = 1, \dots, N_v, j = 1, \dots, m \},$$

где \hat{p} – есть номер последней итерации этого алгоритма.

Перейдем к описанию алгоритма решения ДЗИП1 в следующей постановке:

$$C_1 = \min_{a, d, z^i} \sum_{i \in I_1} \gamma_i C(a, d, z^i, \xi^i), \quad (2.69)$$

$$g(a, d, z^i, \xi^i) \leq 0, \quad i \in I_1, \quad (2.70)$$

$$\max_{\xi \in \Xi} h(a, d, \xi) \leq 0. \quad (2.71)$$

Задача (2.69) – (2.71) имеет вид задачи полубесконечного программирования и для ее решения можно использовать алгоритм внешней аппроксимации [40 – 42].

Вначале рассмотрим упрощенную задачу полубесконечного программирования:

$$\bar{C} = \min_{x \in X} C(x), \quad (2.72)$$

$$\max_{\xi \in \Xi} g_j(x, \xi) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m,$$

где $\Xi = \{ \xi : \xi^L \leq \xi \leq \xi^U \}$. Преобразуя ограничения задачи с помощью соотношения $\max_{x \in X} g(x) \leq 0 \Leftrightarrow g(x) \leq 0, x \in X$, получим задачу

$$\bar{C} = \min_{x \in X} C(x),$$

$$g_j(x, \xi) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad \xi \in \Xi,$$

в которой число поисковых переменных конечно, а число ограничений бесконечно. Введем понятие множества критических точек $S^{(p)} = \{ \xi^i : \xi^i \in \Xi, i \in I^{(p)} \}$, где $I^{(p)}$ – множество индексов точек ξ^i . Оно используется в алгоритме для построения некоторой аппроксимации ограничений в задаче полубесконечного программирования (2.72).

Алгоритм внешней аппроксимации

Шаг 1. Положим $p=1$. Задаем начальное значение $x^{(0)}$ и начальное множество критических точек $S^{(0)}$.

Шаг 2. Решаем задачу

$$C^{(p)} = \min_{x \in X} C(x),$$
$$g_j(x, \xi^i) \leq 0, \quad j=1, \dots, m, \quad \xi^i \in S^{(p-1)}.$$

Пусть $x^{(p)}$ – решение этой задачи.

Шаг 3. Решаем m задач

$$\max_{\xi \in \Xi} g_j(x^{(p)}, \xi) \quad (2.73)$$

и пусть $\xi_j^{(p)}$ ($j=1, \dots, m$) – решения этих задач.

Шаг 4. Проверяем выполнение условий

$$g_j(x^{(p)}, \xi_j^{(p)}) \leq 0, \quad j=1, \dots, m. \quad (2.74)$$

Если все эти условия выполняются, то решение найдено.

Шаг 5. Сформируем множество $R^{(p)}$, которое содержит все точки $\xi_j^{(p)}$, в которых условия нарушаются:

$$R^{(p)} = \{ \xi_j^{(p)} : g_j(x^{(p)}, \xi_j^{(p)}) > 0, \quad j=1, \dots, m \}.$$

Шаг 6. Сформируем новое множество критических точек

$$S^{(p)} = S^{(p-1)} \cup R^{(p)}.$$

Шаг 7. Полагаем $p = p+1$ и переходим к шагу 2.

Этот алгоритм дает решение задачи (2.72), если операции на шагах 2 и 3 выполняются в глобальном смысле.

На каждой итерации этот алгоритм выполняет две основные операции. Первая операция связана с определением нижней границы целевой функции задачи (2.72). Вторая операция связана с проверкой, является ли точка $x^{(p)}$ решением задачи (2.72). Здесь алгоритм решает задачу (2.73) m раз. Если условие (2.74) удовлетворяется, то решение задачи (2.72) найдено. В противном случае точки $\xi_j^{(p)}$, в которых условия (2.74) нарушаются, добавляются в множество $S^{(p)}$.

Заметим, что ОЗИП (2.50) с жесткими ограничениями имеет вид (2.72), поэтому для ее решения также можно использовать описанный алгоритм внешней аппроксимации. Существенный недостаток описанного алгоритма состоит в необходимости решения m задач (2.73) на каждой итерации. Авторы работы [43] предложили заменить m задач максимизации (2.73) одной задачей максимизации функции $F(g)$:

$$\max_{\xi} F(g),$$

$$F(g) = \frac{1}{\rho} \ln \left[\sum_{j=1}^m e^{\rho g_j} \right],$$

где ρ – некоторый параметр. В работе доказано, что

$$F(x, \rho) \geq \max_j (g_j(x)), \quad \rho \geq 0,$$

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} F(x, \rho) \rightarrow \max_j (g_j(x)).$$

Теперь вернемся к решению задачи (2.69) – (2.71). Она имеет вид задачи полубесконечного программирования и для ее решения можно использовать описанный выше алгоритм внешней аппроксимации. Поскольку $\max_{\xi \in \Xi} h(a, d, \theta) = \chi_1(a, d)$, то на каждой итерации будет необходимо вычислять функцию гибкости $\chi_1(a, d)$ (шаг 3 алгоритма внешней аппроксимации).

Совокупность аппроксимационных точек $\xi^i, i \in I_1$, будем обозначать через S_1 , а множество критических точек на v -м шаге – через $S_2^{(v)} = \{\xi^i : i \in I_2^{(v)}\}$.

Алгоритм 2.4

Шаг 1. Положим $v = 1$. Задаем множество аппроксимационных точек S_1 , начальное множество критических точек $S_2^{(0)}$, начальные приближения $a^{(0)}, d^{(0)}$ и достаточно малое число $\varepsilon > 0$.

Шаг 2. Решаем задачу (2.57) – (2.59) для определения нижней границы $C_1^{L,(v)}$ оптимального значения величины C_1 . Пусть $a^{(v)}, d^{(v)}$ – решение этой задачи.

Шаг 3. Находим значение $\chi_1(a^{(v)}, d^{(v)})$, и пусть $\xi^{(v)}$ – решение этой задачи.

Шаг 4. Если выполняется условие $\chi_1(a^{(v)}, d^{(v)}) \leq 0$, то решение найдено. В противном случае находим точку $\xi^{(v)}$, для которой нарушаются ограничения $g_j(a^{(v)}, d^{(v)}, \xi^{(v)}) > 0$, $j = 1, \dots, m$, и переходим к шагу 5.

Шаг 5. Образует новое множество критических точек $S_2^{(v+1)}$, добавляя точку $\xi^{(v)}$ к множеству $S_2^{(v)}$: $S_2^{(v+1)} = S_2^{(v)} \cup \{\xi^{(v)}\}$.

Шаг 6. Полагаем $v = v + 1$ и переходим к шагу 2.

Для вычисления значения $\chi_1(a^{(v)}, d^{(v)})$ функции гибкости можно использовать метод ветвей и границ. В статье [44] было предложено использовать на шаге 3 следующее приближение $\tilde{\chi}_1(a^{(v)}, d^{(v)})$ значения $\chi_1(a^{(v)}, d^{(v)})$:

$$\tilde{\chi}_1(a^{(v)}, d^{(v)}) = \begin{cases} \chi_1^{U,(v)}, & \text{если } \chi_1^{U,(v)} < 0; \\ \bar{\chi}_1 = \frac{\chi_1^{U,(v)} + \chi_1^{L,(v)}}{2}, & \text{если } \left| \chi_1^{U,(v)} - \chi_1^{L,(v)} \right| < \varepsilon; \\ \chi_1^{L,(v)}, & \text{если } \chi_1^{L,(v)} \geq \varepsilon, \end{cases}$$

где $\chi_1^{U,(v)}$, $\chi_1^{L,(v)}$ являются верхней и нижней границей функции гибкости $\chi_1(a^{(v)}, d^{(v)})$. В случае использования метода ветвей и границ величина $\chi_1^{U,(v)}$ определяется по формуле (2.35), в которой на каждой итерации величины $\chi_{1,i}^{U,(v)}$ известны для каждой подобласти. Величина $\chi_1^{L,(v)}$ получается с помощью формулы (2.42). Заметим, что если условие $\chi_1^{U,(v)} \leq 0$ выполняется, то тем более выполняется условие $\chi_1(a^{(v)}, d^{(v)}) \leq 0$. Следовательно, если выполняется либо условие $\chi_1^{U,(v)} \leq 0$, либо условие $\left| \chi_1^{U,(v)} - \chi_1^{L,(v)} \right| < \varepsilon$, где ε мало, то решение ДЗИП1 получено. Выполнение условия $\chi_1^{L,(v)}(a, d) > 0$ означает, что имеет место условие $\chi_1(a, d) > 0$.

Описанная модификация позволяет использовать в алгоритме внешней аппроксимации только верхнюю и нижнюю границы функции гибкости $\chi_1(a, d)$ вместо вычисления самой этой функции, что приводит к существенному уменьшению вычислительных затрат.

Далее рассмотрим метод разбиений и границ для решения ДЗИП1 [6, 7], представляющий двухуровневую итерационную процедуру (рис. 2.3).

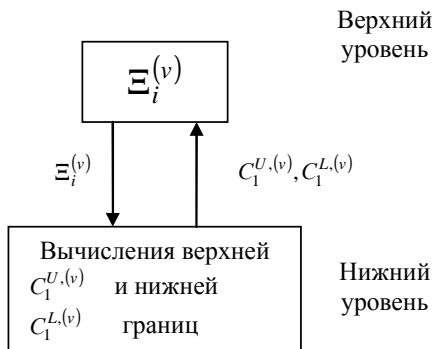


Рис. 2.3. Блок-схема метода разбиений и границ

Он состоит из следующих блоков: 1) вычисление верхней границы $C_1^{U,(v)}$ (см. задачу (2.60) – (2.62)) целевой функции задачи

$$C_1 = \min_{a,d,z^i} \sum_{i \in I_1} \gamma_i C(a, d, z^i, \xi^i), \quad (2.75)$$

$$g(a, d, z^i, \xi^i) \leq 0, \quad i \in I_1, \quad (2.76)$$

$$\chi_1(a, d) = \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0; \quad (2.77)$$

2) алгоритм вычисления нижней границы $C_1^{L,(v)}$ (см. задачу (2.57) – (2.59)) целевой функции задачи (2.75) – (2.77); 3) разбиение области неопределенности Ξ (правило разбиения); 4) формирование множества $S_2^{(v)}$ критических точек (правило выбора) в алгоритме вычисления нижней границы.

Верхний уровень алгоритма разбиения и границ (см. рис. 2.3) служит для проверки окончания процедуры решения и разбиения области Ξ на подобласти. На нижнем уровне вычисляются верхняя $C_1^{U,(v)}$ и нижняя $C_1^{L,(v)}$ границы.

Сформулируем правила разбиения области Ξ на подобласти $\Xi_i^{(v)}$ ($i = 1, \dots, N_v$). Прямой путь состоит в систематическом дроблении всех областей на каждой итерации, пока все подобласти не станут достаточно малыми (свойство 3 задачи (2.60) – (2.62)). Однако такая стратегия разбиения неэффективна, так как в этом случае размерность задач (2.57) – (2.59) и (2.63) – (2.65) достаточно быстро может стать очень высокой.

Рассмотрим более эффективный способ дробления, основанный на следующем эвристическом правиле: на ν -й итерации дробиться будут только те из областей $\Xi_i^{(\nu)}$ ($i = 1, \dots, N_\nu$), для которых соответствующие ограничения (2.61) задачи (2.60) – (2.62) будут активны. Так как задача (2.63) – (2.65) эквивалентна задаче (2.60) – (2.62), то это эвристическое правило может быть сформулировано следующим образом: на ν -й итерации подобласть $\Xi_i^{(\nu)}$ дробится, если выполняется условие $\exists j \in J \max_{\xi \in \Xi_i} g_j(a^{(\nu)}, d^{(\nu)}, z^{l,(\nu)}, \xi) = 0$, где $J = (1, \dots, m)$. Здесь $[a^{(\nu)}, d^{(\nu)}, z^{l,(\nu)}]$ – решение задачи (2.63) – (2.65).

В работе [31] показано, что дробление подобластей с неактивными ограничениями бесполезно, а удаление активных ограничений в задаче оптимизации улучшает оптимальное значение целевой функции.

В качестве множества $S_2^{(\nu)}$ можно использовать все критические точки, полученные при решении задачи (2.63) – (2.65) вычисления верхней границы целевой функции ДЗИП1. Однако в этом случае размерность задачи (2.57) – (2.59) может стать очень высокой. Необходимо выбирать это множество таким образом, чтобы нижняя граница $C_1^L(a, d)$ была как можно ближе к оптимальному значению C_1 целевой функции ДЗИП1. Как было показано ранее, $C_1^{U,(\nu)}(a, d)$ стремится к C_1 при $\max_l r(\Xi_l^{(\nu)}) \rightarrow 0$. Поэтому целесообразно, чтобы при $N_\nu \rightarrow \infty$ задача (2.57) – (2.59) вычисления нижней границы стремилась к задаче вычисления верхней границы:

$$C_1^{U,(\nu)} = \min_{a, d, z^i, \xi^i} \sum_{i \in I_1} \gamma_i C(a, d, z^i, \xi^i),$$

$$g_j(a, d, z^i, \xi^i) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad i \in I_1,$$

$$g_j(a, d, z^l, \xi^{jl}) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad l = 1, \dots, N_\nu, \quad \xi^{jl} \in S_{A,P}^{(\nu)}.$$

Следовательно, целесообразно выбрать множество $S_2^{(\nu)}$ следующим образом: $S_2^{(\nu)} = S_{A,P}^{(\nu)}$. При этом можно уменьшить число точек, используемых для формирования $S_2^{(\nu)}$. Действительно, при $N_\nu \rightarrow \infty$ все точки одной подобласти стягиваются в одну точку. Следовательно, во множество $S_2^{(\nu)}$ можно включать только одну активную точку из

всех точек, принадлежащих подобласти $\Xi_l^{(v)}$. В связи с этим образуем множество $\tilde{S}_{A.P}^{(v)}$ из множества $S_{A.P}^{(v)}$ следующим образом. В каждой подобласти $\Xi_l^{(v)}$ из всех активных точек $S_{A.P}^{l,(v)}$ будем оставлять только одну, которую будем обозначать через $\tilde{\xi}^l$. Кроме того, в качестве $\tilde{\xi}^l$ можно выбрать среднее арифметическое из всех активных точек подобласти $\Xi_l^{(v)}$:

$$\tilde{\xi}^l = \frac{1}{|S_{A.P}^{l,(v)}|} \sum_{j \in J_A^{l,(v)}} \xi^{l,j},$$

где $|S_{A.P}^{l,(v)}|$ – число точек во множестве $S_{A.P}^{l,(v)}$; $J_A^{l,(v)}$ – множество номеров активных точек подобласти $\Xi_l^{(v)}$.

Множество $\tilde{S}_{A.P}^{(v)}$ будет состоять из образованных таким образом точек $\tilde{\xi}^l$. В качестве множества $S_2^{(v)}$ будем использовать множество $\tilde{S}_{A.P}^{(v)}$, т.е. $S_2^{(v)} = \tilde{S}_{A.P}^{(v)}$.

Рассмотрим метод разбиений и границ решения задачи ДЗИП1. Введем множество $L^{(v)}$ подобластей $\Xi_i^{(v)}$ следующим образом:

$$L_1^{(v)} = \left\{ \Xi_i^{(v)}, (i = 1, \dots, N_v) : r(\Xi_i^{(v)}) > \delta_1 \right\},$$

где δ_1 – заранее заданное число.

Алгоритм 2.5

Шаг 1. Положим $v = 1$. Зададим начальное множество подобластей $\Xi_l^{(1)}$ ($l = 1, \dots, N_v$), множество аппроксимационных точек $S_1 = \{\xi^i : i \in I_1\}$, начальное множество критических точек $S_2^{(0)}$, начальные значения $z^{i,(0)}, z^{l,(0)}, a^{(0)}, d^{(0)}$ ($i \in I_1, l = 1, \dots, N_1$) соответствующих переменных, число $\delta_1 > 0$ и достаточно малые числа $\varepsilon_1 > 0, \varepsilon_2 > 0, \delta_2 > 0, (\varepsilon_2 > \varepsilon_1, \delta_1 > \delta_2)$. Положим $C_1^{U,(0)} = a, C_1^{L,(0)} = -a$, где a – достаточно большое число ($a > -C_1$).

Шаг 2. Вычислим верхнюю границу $C_1^{U,(v)}$ решением задачи (2.60) – (2.62) с помощью алгоритма 2.3. Пусть $[a^{(v)}, d^{(v)}, z^{i,(v)}, z^{l,(v)}]$ ($i \in I_1, l = 1, \dots, N_v$) – решение этой задачи.

Шаг 3. Определим множество $Q^{(v)} = \{\Xi_l^{(v)} : l \in I_Q^{(v)}\}$ подобластей $\Xi_i^{(v)}$, которым соответствуют активные ограничения в задаче (2.60) – (2.62):

$$\chi_{l,l}^U(a^{(v)}, d^{(v)}) = 0, \quad \Xi_l^{(v)} \in Q^{(v)}.$$

Шаг 4. Если $Q^{(v)}$ пустое множество, то решение ДЗИП1 найдено, алгоритм заканчивает свою работу.

Шаг 5. Если выполняется условие

$$C_1^{U,(v-1)} - C_1^{U,(v)} \leq \varepsilon_1 |C_1^{U,(v)}|,$$

то решение ДЗИП 1 найдено, алгоритм заканчивает свою работу.

В противном случае проверяем выполнение условия

$$C_1^{U,(v-1)} - C_1^{U,(v)} \leq \varepsilon_2 |C_1^{U,(v)}|,$$

и если оно нарушается, то переходим к шагу 8, в противном случае переходим к шагу 6.

Шаг 6. Находим нижнюю границу $C_1^{L,(v)}$, решая задачу (2.57) – (2.59). Здесь мы полагаем $S_2^{(v)} = S_{A,P}^{(v)}$ (см. шаг 9 алгоритма 2.3).

Шаг 7. Если выполняется условие

$$C_1^{U,(v-1)} - C_1^{U,(v)} \leq \varepsilon_1 |C_1^{U,(v)}|,$$

то решение ДЗИП1 найдено, алгоритм заканчивает свою работу.

Шаг 8. Если выполняется условие

$$r(\Xi_i^{(v)}) \leq \delta_2, \quad i = 1, \dots, N_v,$$

то решение ДЗИП1 найдено, алгоритм заканчивает свою работу.

Шаг 9. Если выполняется условие $r(\Xi_l^{(v)}) \leq \delta_1, l = 1, \dots, N_v$, то переходим к шагу 11.

Шаг 10. Сформировать множество $L^{(v)}$. Найти множество $V^{(v)}$ подобластей $\Xi_i^{(v)}$, принадлежащих одновременно множествам $L^{(v)}$ и $Q^{(v)}$, т.е.

$$V^{(v)} = L^{(v)} \cap Q^{(v)}.$$

Разбить каждую подобласть $\Xi_l^{(v)} \in V^{(v)}$ на две подобласти таким образом, что $\Xi_{l_1}^{(v+1)} \cup \Xi_{l_2}^{(v+1)} = \Xi_l^{(v)}$. Образовать новое множество

$\Xi^{(v+1)}$ подобластей из старого множества $\Xi^{(v)}$, заменяя подобласть $\Xi_l^{(v)}$ новыми подобластями $\Xi_{l_1}^{(v+1)}$ и $\Xi_{l_2}^{(v+1)}$. Переходим к шагу 12.

Шаг 11. Положим $\delta_1 = \delta_1 / 2$ и переходим к шагу 9.

Шаг 12. Положим $v = v + 1$ и переходим к шагу 2.

Алгоритм 2.5 позволяет получить локальный минимум.

Определение начального разбиения области Ξ на подобласти на шаге 1 является непростой задачей. Конечно, начальное разбиение может состоять из всей области Ξ . Однако в этом случае задача (2.60) – (2.62) может не иметь решения. В связи с этим на шаге 1 можно вычислять значение индекса гибкости γ_1 ХТС. Эта величина находится решением задачи

$$\gamma_1 = \min_{a, d} \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0$$

или

$$\gamma_1 = \min_{a \in A, d \in D} u, \quad (2.78)$$

$$\chi_1(a, d) = \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi) \leq u. \quad (2.79)$$

Ясно, что если $\gamma_1 > 0$, то ДЗИП1 не имеет решения. Если $\gamma_1 \leq 0$, то, решая задачу (2.78), (2.79), мы получаем некоторые значения a^* , d^* и некоторое разбиение области Ξ , для которой задача ДЗИП1

$$C_1 = \min_{a, d, z^i} \sum_{i \in I_1} \gamma_i C(a, d, z^i, \xi^i), \quad (2.80)$$

$$g(a, d, z^i, \xi^i) \leq 0, \quad i \in I_1, \quad (2.81)$$

$$\chi_1(a, d) = \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0 \quad (2.82)$$

имеет решение. Множество подобластей, найденное решением задачи (2.78), (2.79), может быть использовано как начальное разбиение области Ξ на подобласти $\Xi_i^{(1)}$ на шаге 1 алгоритма 2.5. Задача (2.78), (2.79) представляет собой частный случай ДЗИП1. Поэтому для ее решения можно использовать алгоритм 2.5.

До сих пор мы предполагали, что аппроксимационные точки в дискретном варианте ДЗИП1 (см. задачу (2.80)–(2.82)) задаются пользователем, и что число этих точек невелико. Здесь мы рассматриваем случай, когда необходимо решать задачу (2.14) – (2.15). В данном слу-

чае главной проблемой является вычисление значения критерия, т.е. вычисление многомерного интеграла. Для этого используются два подхода.

Первый подход основывается на использовании квадратурных формул Гаусса [35]. Предположим для простоты изложения, что вектор ξ имеет только две компоненты (т.е. область Ξ – прямоугольник); тогда, если все неопределенные параметры независимы, мы должны вычислить интеграл

$$I = \int_{\xi_2^L}^{\xi_2^U} \int_{\xi_1^L}^{\xi_1^U} C(a, d, z(\xi), (\xi)P(\xi)) d\xi_1 d\xi_2. \quad (2.83)$$

Введем p точек (ξ_1^k) и (ξ_2^k) на интервалах $[\xi_1^L, \xi_1^U]$ и $[\xi_2^L, \xi_2^U]$, соответственно:

$$\begin{aligned} \xi_1^k &= \xi_1^L + k\Delta\xi_1, \quad k = 0, 1, \dots, (p-1), \\ \xi_2^k &= \xi_2^L + k\Delta\xi_2, \end{aligned}$$

$$\text{где } \Delta\xi_1 = \frac{(\xi_1^U - \xi_1^L)}{p}, \quad \Delta\xi_2 = \frac{(\xi_2^U - \xi_2^L)}{p}.$$

Пересечения прямых (рис. 2.4): $\xi_1 = \xi_1^i$, $i = 0, 1, \dots, (p-1)$ и $\xi_2 = \xi_2^j$, $j = 0, 1, \dots, (p-1)$, образуют p^2 точек пересечения (узлов) $\xi^{ij} = (\xi_1^i, \xi_2^j)$ ($i = 0, \dots, p-1$, $j = 0, \dots, p-1$), где $\xi_2^j = \xi_2^L + j\Delta\xi_2$, $\xi_1^j = \xi_1^L + j\Delta\xi_1$, и квадратурная формула Гаусса приближенного значения интеграла (2.83) имеет вид

$$I \approx \frac{(\xi_1^U - \xi_1^L)}{2} \frac{(\xi_2^U - \xi_2^L)}{2} \sum_{i=0}^{p-1} \gamma_1^i \sum_{j=0}^{p-1} \gamma_2^j C(a, d, z^{ij}, \xi_1^i, \xi_2^j),$$

где z^{ij} – управляющая переменная, соответствующая точке ξ^{ij} . Квадратурная формула легко обобщается на n -мерный случай. В этом случае для аппроксимации многомерного интеграла в задаче (2.14) – (2.15) потребуется p^{n_ξ} узловых точек, где n_ξ – размерность вектора ξ . Заменяя в задаче (2.14) – (2.15) целевую функцию ее гауссовым приближением, получим дискретный вариант ДЗИП1 (2.80) – (2.82). Здесь узловые точки используются в качестве аппроксимационных точек. Следовательно, множество $S_1 = \{\xi^i : i \in I_1\}$ аппроксимационных точек в задаче (2.80)–(2.81) будет состоять из p^{n_ξ} точек. Для вычисления

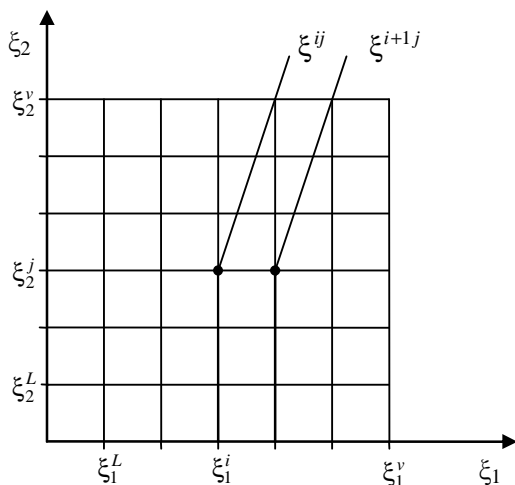


Рис. 2.4. Узловые точки двумерного интеграла

целевой функции в задаче (2.80)–(2.81) мы должны вычислить значение функции $C(a, d, z, \xi)$ p^{n_ξ} раз. Размерность задачи (2.57) – (2.59) вычисления нижней границы будет равна $n_d + (p^{n_\xi} + N_{c,p})n_z$, где n_d и n_z – размерности векторов d и z , соответственно, $N_{c,p}$ – число критических точек. Очевидно, что решение практических задач большой размерности может потребовать огромных вычислительных затрат.

Второй подход к вычислению интегралов основывается на процедуре Монте-Карло и близких к ней процедурах (латинского гиперкуба и последовательности проб Хаммерслея (HSS) [45, 46]. Для этих методов известно, что число аппроксимационных точек, необходимых для вычисления интеграла с заданной точностью, не зависит от размерности вектора ξ и техника HSS наиболее эффективна по сравнению со всеми подобными подходами. При этом даже метод HSS требует нескольких сотен аппроксимационных точек для получения разумной точности вычисления интеграла.

Техника Монте-Карло для оценки интеграла в задаче (2.14) – (2.15) достаточно проста. Пусть имеется последовательность, состоящая из N векторов ξ^i , имеющих плотность распределения вероятностей $P(\xi)$. Тогда интеграл можно вычислить по формуле

$$\int_{\Xi} C(a, d, z(\xi), P(\xi)) d\xi \approx \frac{1}{N} \sum_{i \in I} C(a, d, z(\xi^i), \xi^i).$$

В работе [32] в качестве аппроксимационных точек использовали номинальную точку и все критические точки, получаемые в итерациях этого метода. Весовой коэффициент, соответствующий номинальной точке, выбирался равным 0,5, остальные коэффициенты выбирались равными $0,5 / (n - 1)$.

Видно, что выбор множества аппроксимационных точек в данном случае достаточно субъективен. В связи с этим рассмотрим более объективный подход к построению целевой функции в ДЗИП1. В каждой задаче можно выделить три характерные точки. Первая точка – номинальная точка ξ^N . Если распределение (неизвестное) является симметричным, то это наиболее вероятная точка. Вторая и третья точки соответствуют точкам с наилучшим и наихудшим значениями функции при фиксированных a, d, z . На основе этих точек можно сформулировать три целевые функции и три внутренние задачи оптимизации ДЗИП:

$$C_1^*(a, d) = \min_z C(a, d, z, \xi^N),$$

$$g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m.$$

$$C_2^*(a, d) = \min_z \min_{\xi \in \Xi} C(a, d, z, \xi),$$

$$g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m.$$

$$C_3^*(a, d) = \min_z \max_{\xi \in \Xi} C(a, d, z, \xi),$$

$$g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m.$$

На основе этих внутренних задач сформируем следующие три варианта ДЗИП:

$$C_i = \min_{a, d} C_i^*(a, d), \quad i = 1, 2, 3,$$

$$\chi_1(a, d) \leq 0.$$

Существуют неравенства: $C_2^* \leq C \leq C_3^*$, где C получается решением ДЗИП1

$$C_1 = \min_{a, d, z^i \in Z} \sum_{i \in I_1} \gamma_i C(a, d, z^i, \xi^i),$$

$$g(a, d, z^i, \xi^i) \leq 0, \quad i \in I_1,$$

$$\chi_1(a, d) = \max_{\xi \in \Xi} \min_{z \in Z} \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0$$

для любого набора аппроксимационных точек и весовых коэффициентов. Таким образом, решив задачу ДЗИП для вариантов $i = 2, 3$, можно оценить диапазон, в котором будет лежать оптимальное значение целевой функции ДЗИП1.

Для устранения трудоемкой операции вычисления многомерного интеграла при решении задачи ДЗИП1 будем использовать формулировку двухэтапной задачи оптимизации, в которой минимизируется верхняя граница целевой функции. Введем семейство Ξ областей Ξ_α , обладающих свойством

$$\Pr\{\xi \in \Xi_\alpha\} = \alpha.$$

Тогда эта задача может быть записана следующим образом:

$$C = \min_{a,d,z(\xi),u,\Xi_\alpha} u, \quad (2.84)$$

$$\max_{\xi \in \Xi_\alpha} C(a, d, z(\xi), \xi) \leq u, \quad (2.85)$$

$$\chi_1(a, d) \leq 0. \quad (2.86)$$

Обозначим решение этой задачи через $a^*, d^*, z^*(\xi), u^*, \Xi_\alpha^*$. Поскольку ограничение $C(a^*, d^*, z^*(\xi), \xi) - u^* \leq 0$ удовлетворяется в каждой точке области Ξ_α^* , то вероятность удовлетворения этого неравенства равна α . Это означает, что с вероятностью α целевая функция будет меньше, чем u^* .

Рассмотрим задачу получения верхней оценки величины u^* . Для этого выберем какую-либо одну область Ξ_α^1 из семейства Ξ и решим задачу (2.84) – (2.86) при фиксированной области $\Xi_\alpha = \Xi_\alpha^1$

$$\min_{a,d,z(\xi),u} u,$$

$$\max C(a, d, z(\xi), \xi) \leq u,$$

$$\chi_1(a, d) \leq 0.$$

Пусть мы получили оптимальное значение u_1 . Поскольку взята произвольная область из семейства Ξ , то имеет место соотношение $u_1 \geq u^*$. Таким образом, с вероятностью α целевая функция будет меньше, чем u^1 . Поскольку при $\alpha = 1$ семейство Ξ состоит из одной

области Ξ , то в этом случае мы получаем точное решение. Отсюда ясно, что чем ближе α к единице, тем ближе u^1 к u^* .

Если все параметры ξ_i являются независимыми и имеют нормальное распределение, то область Ξ_α является многомерным прямоугольником вида

$$\Xi_\alpha = \{ \xi : \xi_i^N - k_i \sigma_i \leq \xi_i \leq \xi_i^N + k_i \sigma_i, I = 1, \dots, n_\xi \},$$

где ξ_i^N – номинальная точка и величина k_i определяются следующим образом: $\Pr \{ \xi_i^N - k_i \sigma_i \leq \xi_i \leq \xi_i^N + k_i \sigma_i \} = \alpha^{1/n_\xi}$.

Если параметры ξ_i не являются независимыми, но имеют нормальное распределение, то область Ξ_α является многомерным эллипсоидом.

Структура задачи (2.84) – (2.86) близка к структуре ДЗИП1 и не требует вычисления многомерных материалов, но трудоемкость ее решения будет намного меньше трудоемкости решения ДЗИП1.

Перейдем к рассмотрению метода решения ДЗИП2. Обобщим развитый в работе [47] метод разбиений и границ (алгоритм 2.5) для решения задачи ДЗИП2.

Рассмотрим алгоритм вычисления верхней границы оптимального значения целевой функции ДЗИП2 – решения задачи полубесконечно-го программирования вида:

$$C_2^{U,(v)} = \min_{a,d,z^l,z^l} \sum_{i \in I_1} \gamma_i \sum_{r \in Q_1} v_r C(a, d, z^i, \xi^{1,i}, \xi^{2,r}), \quad (2.87)$$

$$\max_{\xi^2 \in \Xi^2} g_j(a, d, z^i, \xi^{1,i}, \xi^2) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad i \in I_1, \quad (2.88)$$

$$\max_{\substack{\xi^1 \in \Xi_l^{1,(v)} \\ \xi^2 \in \Xi^2}} g_j(a, d, z^l, \xi^1, \xi^2) \leq 0, \quad l = 1, \dots, N_v, \quad j = 1, \dots, m. \quad (2.89)$$

Пусть $\Xi_l^{(v)} = \{ \xi^1, \xi^2 : \xi^1 \in \Xi_l^1; \xi^2 \in \Xi_l^2 \}$. Введем множество критических точек $S_{2l}^{(v,p)}$ для каждой подобласти Ξ_l :

$$S_{2l}^{(v,p)} = \{ \xi^{1,l,s}, \xi^{2,l,s} : (\xi^{1,l,s}, \xi^{2,l,s}) \in \Xi_l, \quad s \in I_{2l}^{(v,p)} \},$$

где $I_{2l}^{(v,p)}$ – множество номеров критических точек, принадлежащих подобласти $\Xi_l^{(v)}$, p – номер итерации в алгоритме внешней аппроксима-

ции решения задачи (2.87) – (2.89), v – номер итерации в алгоритме решения ДЗИП2. При решении задачи (2.87) – (2.89) номер итерации v фиксирован, а число подобластей и их размеры остаются постоянными.

Алгоритм вычисления верхней границы оптимального значения целевой функции ДЗИП2 (решения задачи (2.87) – (2.89)) имеет следующий вид.

Алгоритм 2.6

Шаг 1. Положим $p = 1$, зададим множество подобластей $\Xi_l^{(v)}$ ($l = 1, \dots, N_v$) и начальные значения $z^{i,(0)}, z^{l,(0)}, a^{(0)}, d^{(0)}$ ($i \in I_1, l = 1, \dots, N_v$) соответствующих переменных, множества I_1, Q_1 и $S_{2l}^{(v,1)}$, достаточно малое число $\varepsilon > 0$.

Шаг 2. Решаем задачу

$$\min_{a, d, z^i, z^l} \sum_{i \in I_1} \gamma_i \sum_{r \in Q_1} v_r C(a, d, z^i, \xi^{1,i}, \xi^{2,r}),$$

$$g_j(a, d, z^i, \xi^{1,i}, \xi^{2,i,q}) \leq 0, \quad i \in I_1, \quad \xi^{2,i,q} \in S_2^i, \quad j = 1, \dots, m,$$

$$g_j(a, d, z^l, \xi^{1,l,s}, \xi^{2,l,s}) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m,$$

$$(\xi^{1,l,s}, \xi^{2,l,s}) \in S_{2l}^{(v,p)}, \quad l = 1, \dots, N_v.$$

Пусть $[\bar{a}, \bar{d}, \bar{z}^i, \bar{z}^l]$ – решение этой задачи.

Шаг 3. Для каждой точки $L^{(v)}$ решаем задачу

$$\max_{\xi^2 \in \Xi^2} g_j(\bar{a}, \bar{d}, \bar{z}^{1,i}, \xi^{1,i}, \xi^2), \quad j = 1, \dots, m. \quad (2.90)$$

Шаг 4. Для каждой подобласти Ξ_l ($l = 1, \dots, N_v$) решаем задачу

$$\max_{\substack{\xi^1 \in \Xi_l^1 \\ \xi^2 \in \Xi^2}} g_j(\bar{a}, \bar{d}, \bar{z}^l, \xi^1, \xi^2), \quad j = 1, \dots, m. \quad (2.91)$$

Обозначим через $\bar{\xi}^{l,j} = (\bar{\xi}^{1,l,j}, \bar{\xi}^{2,l,j})$ решение задачи (2.91) и через $\bar{\xi}^{2,l,j}$ – решение задачи (2.90).

Шаг 5. Проверяем выполнение условий

$$g_j(\bar{a}, \bar{d}, \bar{z}^{1,i}, \xi^{1,i}, \bar{\xi}^{2,i,j}) \leq \varepsilon, \quad j = 1, \dots, m, \quad i \in I_1, \quad (2.92)$$

$$g_j(\bar{a}, \bar{d}, \bar{z}^l, \bar{\xi}^{1,l,j}, \bar{\xi}^{2,l,j}) \leq \varepsilon, \quad j = 1, \dots, m, \quad l = 1, \dots, N_v. \quad (2.93)$$

Если неравенства (2.92), (2.93) удовлетворяются, то решение найдено, переходим к шагу 9; в противном случае – к шагу 6.

Шаг 6. Сформируем множества

$$R^i = \left\{ \bar{\xi}^{2,i,j} : g_j(\bar{a}, \bar{d}, \bar{z}^i, \xi^{1,i}, \bar{\xi}^{2,i,j}) \geq \varepsilon \right\},$$

$$R^l = \left\{ \bar{\xi}^{1,l,j} : g_j(\bar{a}, \bar{d}, \bar{z}^l, \bar{\xi}^{1,l,j}, \bar{\xi}^{2,l,j}) \geq \varepsilon \right\}.$$

Множества R^i и R^l содержат точки, в которых ограничения нарушаются.

Шаг 7. Сформируем новые множества критических точек

$$S_{2l}^{(v,p+1)} = \left\{ S_{2l}^{(v,p)} \cup R^l \right\}, \quad S_2^i = \left\{ S_2^i \cup R^i \right\}.$$

Шаг 8. Положим $p := p + 1$ и переходим к шагу 2.

Шаг 9. Сформируем множество $R^{(v)}$, являющееся объединением всех множеств R^l , $l = 1, \dots, N_v$:

$$R^{(v)} = \left\{ \bar{\xi}^{1,l,j}, l = 1, \dots, N_v, j = 1, \dots, m \right\}.$$

Так как множество $R^{(v)}$ соответствует последней итерации, то точки этого множества соответствуют активным ограничениям, т.е. $S_{A,P}^{(v)} = R^{(v)}$. Множество $S_{A,P}^{(v)}$ будет использоваться в качестве $S_2^{(v)}$ в задаче вычисления нижней границы:

$$C_2^{L,(v)} = \min_{a,d,z^i,z^r} \sum_{i \in I_1} \gamma_i \sum_{r \in Q_1} \nu_r C(a, d, z^{1,i}, \xi^{1,i}, \xi^{2,r}), \quad (2.94)$$

$$\max_{\xi^2 \in \Xi^2} g_j(a, d, z^i, \xi^{1,i}, \xi^2) \leq 0, \quad j = i, \dots, m, \quad i \in I_1, \quad (2.95)$$

$$\max_{\xi^2 \in \Xi^2} g_j(a, d, z^{1,s}, \xi^{1,s}, \xi^2) \leq 0, \quad \xi^{1,s} \in S_2^{(v)}, \quad j = 1, \dots, m. \quad (2.96)$$

Приведем далее алгоритм решения ДЗИП2, реализующий метод разбиений и границ. Для реализации метода разбиений и границ необходимо иметь правило разбиения области Ξ^1 и правило выбора множества критических точек в задаче (2.94) – (2.96) вычисления нижней границы. Аналогично методу разбиения и границ для решения ДЗИП1 мы будем использовать следующее эвристическое правило разбиения области Ξ^1 : будут разбиваться только те подобласти

$\Xi_l^{1,(v)}$ ($l=1, \dots, N_v$), для которых ограничения (2.89) в задаче (2.87) – (2.89) вычисления верхней границы будут активны в точке решения, т.е. если выполняются следующие условия:

$$\exists j \in J \quad \max_{\xi \in \Xi_l^{1,(v)}} g_j(a^{(v)}, d^{(v)}, z^{l,(v)}, \xi) = 0,$$

где $[a^{(v)}, d^{(v)}, z^{l,(v)}]$ – решение задачи (2.87) – (2.89).

В качестве множества $S_2^{(v)}$ в задаче (2.94) – (2.96) необходимо использовать множество $S_{A,P}^{(v)}$ активных точек задачи (2.87) – (2.89) вычисления верхней границы.

Введем множество $L^{(v)}$ подобластей $\Xi_i^{1,(v)}$ следующим образом:

$$L^{(v)} = \left\{ \Xi_i^{1,(v)} : r(\Xi_i^{1,(v)}) > \delta \right\},$$

где δ – некоторое положительное число, которое будет настраиваться во время работы алгоритма решения ДЗИП2.

Алгоритм 2.7

Шаг 1. Положим $v=1$ и зададим начальное разбиение области Ξ^1 на подобласти $\Xi_l^{1,(1)}$, ($l=1, \dots, N_1$), множество аппроксимационных точек $\xi^{1,i}$, $\xi^{2,r}$, $i \in I_1$, $r \in Q_1$, начальное множество критических точек $S_2^{(0)}$, начальные значения $z^{i,(0)}$, $z^{l,(0)}$, $a^{(0)}$, $d^{(0)}$ ($i \in I_1$, $l=1, \dots, N_1$) соответствующих переменных, величины $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, $\delta_1 > 0$, $\delta_2 > 0$, ($\varepsilon_2 > \varepsilon_1$, $\delta_1 > \delta_2$), где ε_1 и δ_2 – малые величины. Положим $C_2^{U,(0)} = c$, $C_2^{L,(0)} = -c$, где c – достаточно большое число ($c > -C_2$).

Шаг 2. Вычислим верхнюю границу $C_2^{U,(v)}$ решением задачи (2.87) – (2.89) с использованием алгоритма 2.6. Пусть $[a^{(v)}, d^{(v)}, z^{i,(v)}, z^{l,(v)}]$ ($i \in I_1$, $l=1, \dots, N_v$) – решение этой задачи.

Шаг 3. Определим множество $Q^{(v)} = \left\{ \Xi_l^{1,(v)} : l \in I_Q^{(v)} \right\}$ подобластей $\Xi_i^{1,(v)}$, которым соответствуют активные ограничения в задаче (2.87) – (2.89)

$$\chi_{2,l}^U(a^{(v)}, d^{(v)}) = 0, \quad \Xi_l^{1,(v)} \in Q^{(v)}.$$

Шаг 4. Если $Q^{(v)}$ – пустое множество, то решение ДЗИП2 найдено, алгоритм останавливает свою работу.

Шаг 5. Если выполняется условие

$$C_2^{U,(v-1)} - C_2^{U,(v)} \leq \varepsilon_1 \left| C_2^{U,(v)} \right|,$$

то решение ДЗИП2 найдено, алгоритм останавливает свою работу. В противном случае проверяем выполнение условия

$$C_2^{U,(v-1)} - C_2^{U,(v)} \leq \varepsilon_2 \left| C_2^{U,(v)} \right|,$$

и если оно нарушается, то переходим к шагу 8.

Шаг 6. Определяем нижнюю границу $C_2^{L,(v)}$, решая задачу (2.94) – (2.96). Здесь мы полагаем $S_2^{(v)} = S_{A.P}^{(v)}$.

Шаг 7. Если выполняется условие

$$C_2^{U,(v)} - C_2^{L,(v)} \leq \varepsilon_1 \left| C_2^{U,(v)} \right|,$$

то решение ДЗИП2 найдено, алгоритм останавливает свою работу.

Шаг 8. Если выполняется условие $r(\Xi_i^{1,(v)}) \leq \delta_2$, $i = 1, \dots, N_v$, то решение ДЗИП 2 найдено, алгоритм заканчивает свою работу.

Шаг 9. Если выполняется условие $r(\Xi_l^{(v)}) \leq \delta_1$, $l = 1, \dots, N_v$, то переходим к шагу 11.

Шаг 10. Формируем множество $L^{(v)}$ и находим множество $V^{(v)}$ подобластей $\Xi_i^{1,(v+1)}$, принадлежащих одновременно множествам $L^{(v)}$ и $Q^{(v)}$, т.е. $V^{(v)} = L^{(v)} \cap Q^{(v)}$.

Разбиваем каждую подобласть $\Xi_i^{1,(v)} \in V^{(v)}$ на две подобласти $\Xi_i^{1,(v)} = \Xi_{i_1}^{1,(v+1)} \cup \Xi_{i_2}^{1,(v+1)}$, образуем новое множество $\Xi^{(v+1)}$ подобластей из старого множества $\Xi^{(v)}$, заменяя каждую подобласть $\Xi_i^{1,(v)}$ ($\Xi_i^{1,(v)} \in V^{(v)}$) новыми подобластями $\Xi_{i_1}^{(v+1)}$ и $\Xi_{i_2}^{(v+1)}$, и переходим к шагу 12.

Шаг 11. Положим $\delta_1 := \delta_1 / 2$ и переходим к шагу 9.

Шаг 12. Положим $v := v + 1$ и переходим к шагу 2.

В работе [31] доказано, что: 1) решение ДЗИП2 найдено, если множество $Q^{(v)}$ пусто; 2) алгоритм 2.7 сходится. Конечно, это утверждение верно в локальном смысле, т.е. метод разбиений и границ дает по крайней мере локальный минимум ДЗИП2.

2.4. АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ ОДНО- И ДВУХСТАДИЙНЫХ ЗАДАЧ ИНТЕГРИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ХТС С «МЯГКИМИ» ОГРАНИЧЕНИЯМИ

При формулировании ОЗИП для случая 3 предположим, что мы имеем полную информацию относительно функции распределения вероятностей для ξ .

В качестве функции $I(a, d, z)$ мы будем использовать среднее значение первоначальной целевой функции $C(a, d, z, \xi)$, т.е. $I(a, d, z) = M_{\xi}\{C(a, d, z, \xi)\}$, либо верхнюю границу исходного критерия $C(a, d, z, \xi)$ с доверительной вероятностью ρ_0 . В этом случае одностадийная задача интегрированного проектирования имеет вид

$$\min_{a, d, z} M_{\xi}\{C(a, d, z, \xi)\},$$

$$\text{Вер}\{g_j(a, d, z, \xi) \leq 0\} = \int_{\Omega_j} P(\xi) d\xi \geq \rho_j, \quad j = 1, \dots, m,$$

$$\Omega_j = \{\xi : g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, \xi \in \Xi\},$$

где $P(\xi)$ – функция плотности вероятности; ρ_j – заданная вероятность выполнения j -го ограничения.

Можно записать другую формулировку ОЗИП, в которой в качестве критерия будет использоваться его верхняя граница, которая не может быть нарушена с заданной вероятностью ρ_0 . Перепишем задачу ОЗИП для случая 3 в виде

$$\min_{a, d, z, u} u,$$

$$\text{Вер}\{C(a, d, z, \xi) - u \leq 0\} \geq \rho_0,$$

$$\text{Вер}\{g_j(a, d, z, \xi) \leq 0\} \geq \rho_j, \quad j = 1, \dots, m.$$

Здесь u – новая переменная, ограничивающая целевую функцию $C(a, d, z, \xi)$, каждое ограничение должно удовлетворяться с вероятностью не меньшей, чем ρ_j .

Пусть $[a^*, d^*, z^*, u^*]$ – решение этой задачи. Тогда конструкция ХТС (a^*, d^*) и режим z^* гарантируют, что в течение всего этапа функционирования ХТС целевая функция $C(a^*, d^*, z^*)$ будет меньше,

чем u^* с вероятностью ρ_0 . Используя ту же целевую функцию, можно свести задачу с жесткими ограничениями (2.50) – (2.52) к следующей задаче с жесткими и мягкими ограничениями:

$$\begin{aligned} & \min_{a,d,z,u} u, \\ & \text{Вер}\{C(a, d, z, \xi) - u \leq 0\} \geq \rho_0, \\ & \max_{\xi \in \Xi} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m. \end{aligned}$$

Мы рассмотрим две формулировки ОЗИП для случая 3, которые часто встречаются на практике.

1. В стохастическом программировании обычно предполагают, что функции распределения вероятностей известны. Однако на практике это предположение не выполняется, и функции распределения вероятностей зачастую неизвестны. В этом случае принимают допущение о равномерном (равновероятном) законе распределения вероятностей неопределенных параметров и формулировка ОЗИП имеет следующий вид: требуется определить тип a^* аппаратного оформления ХТС, векторы конструктивных параметров d^* технологического оборудования и режимных (управляющих) переменных z^* такие, что

$$C^*(a^*, d^*, z^*) = \min_{a,d,z} M_{\xi} \{C(a, d, z, y(a, d, z, \xi), \xi)\} \quad (2.97)$$

при связях в форме уравнений математической модели химико-технологического объекта

$$y = \mathfrak{F}(a, d, z, \xi) \quad (2.98)$$

и ограничениях

$$\text{Вер}_{\xi} \{g_j(a, d, z, \xi) \equiv y_{j\text{зад}} - y_j \leq 0\} \geq \rho_j, \quad j \in J. \quad (2.99)$$

Перепишем задачу (2.97) – (2.99) в терминах А-задач стохастического программирования: требуется определить тип $a \in A$ аппаратного оформления ХТС, векторы конструктивных d_{α^*} и управляющих z_{α^*} переменных, а также m -мерный вектор постоянных величин $\alpha^* = (\alpha_1^*, \alpha_2^*, \dots, \alpha_m^*)$ такие, что

$$C(a_{\alpha^*}, d_{\alpha^*}, z_{\alpha^*}) = \min_{\alpha \in \Lambda} \left\{ \min_{a,d,z} \sum_{i=1}^m \omega_i C(a, d, z, \xi^i) \mid g_j(a, d, z, \xi) \leq \alpha_j, j \in J \right\}, \quad (2.100)$$

$$\Lambda = \{\alpha \mid \forall j \text{ Вер}_{\xi} [g_j(a_{\alpha}, d_{\alpha}, z_{\alpha}, \xi) \leq 0] \geq \rho_j\},$$

где ω_i – весовые коэффициенты, $\sum_{i \in I_1} \omega_i = 1$; I_1 – множество аппроксимационных точек в области Ξ .

Идея такого подхода, в сущности, очень проста. Поясим ее на примере одномерной задачи стохастического программирования с одним ограничением $g(a, d, z, \xi) \leq 0$. На рисунке 2.5, а заштрихована недопустимая область ограничения. Пусть соотношение между целевой функцией $M_\xi \{C(a, d, z, \xi)\}$ и $g(a, d, z, \xi)$ такое, как показано на рис. 2.5, б. Следует заметить, что такое соотношение (кроме, конечно, экзотических случаев) в оптимизационных задачах химической технологии бывает всегда, т.е. наиболее предпочтительные значения целевой функции лежат в недопустимой области (см. рис. 2.5), поскольку в противном случае ограничение было бы неактивным и его не следовало бы учитывать. В этом случае решение z' традиционной задачи оптимизации достигается при $g(a, d, z', \bar{\xi}) = 0$. Очевидно, при реализации этого решения z' значения $g(a, d, z', \xi)$ будут иметь случайный разброс вследствие наличия случайной величины ξ . На рисунке 2.5, в показан этот разброс, который может имитироваться на математической модели $\mathfrak{Z}(a, d, z', \xi)$.

В зависимости от вхождения случайной величины в функцию $g(a, d, z', \xi)$ закон распределения этой функции может изменяться. Следовательно, эта вероятность может быть как меньше, так и больше 0,5. Таким образом, при решении традиционной задачи при $\xi = \bar{\xi}$ мы даже не знаем, какова вероятность нарушения технологических ограничений.

В сформулированной выше задаче стохастической оптимизации мы требуем, чтобы эта вероятность была больше заданного значения вероятности $p_{\text{зад}}$ выполнения ограничений.

Идея А-задач стохастического программирования заключается в следующем: исходное ограничение задачи заменяется на ограничение вида $g(a, d, z, \xi) \leq \alpha$, где $\alpha < 0$, т.е. исходное ограничение как бы уже сточается (рис. 2.5, з). После этого решается детерминированная задача оптимизации с новыми ограничениями

$$\min_z \{C(a, d, z, \bar{\xi}) \mid g(a, d, z, \bar{\xi}) \leq \alpha_1\}.$$

При этом решение задачи z'' будет соответствовать тому, что технологические ограничения $g(a, d, z'', \bar{\xi})$ будут равными α_1 (см. рис. 2.5, з). Соответственно, вероятность нарушения ограничения

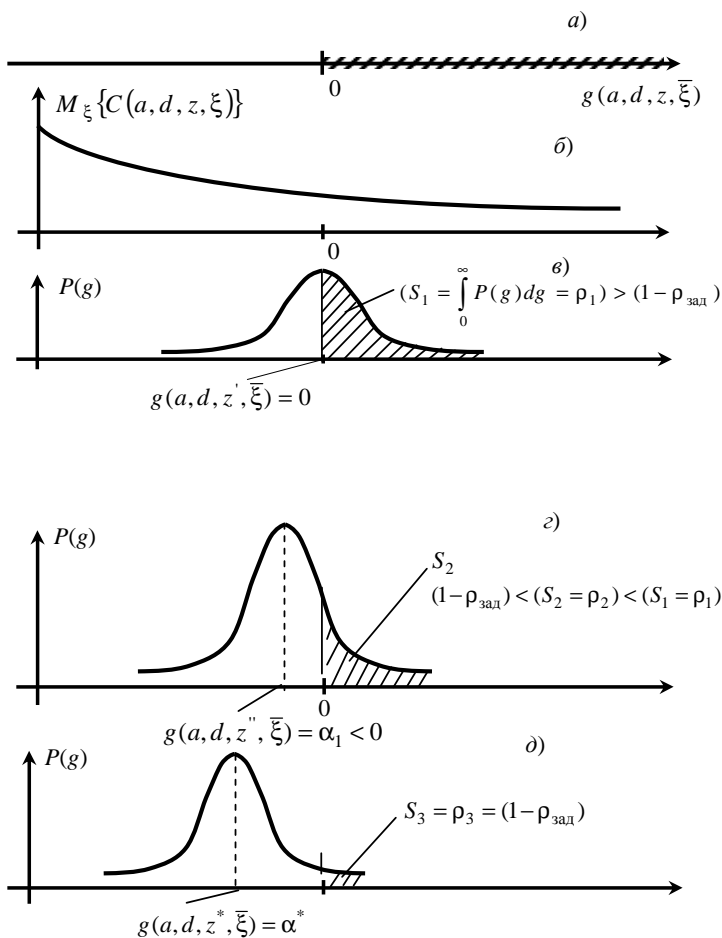


Рис. 2.5. Геометрическая иллюстрация идеи решения А-задачи стохастической оптимизации

уменьшается по сравнению с ρ_1 , т.е. $\rho_2 < \rho_1$, а значение целевой функции возрастает (см. рис. 2.5, б). Таким образом, мы приблизились к оптимальному решению задачи, которое изображено на рис. 2.5, д. Отметим, что при выполнении этой процедуры мы не вычисляли вероятность выполнения (нарушения) ограничения на каждом шаге поиска z^* . Вычисление $\text{Вер}_{\xi} [g(a, d, z, \xi) \leq 0]$ производится в оптимальной точке u^* для того, чтобы проверить выполнение условия $\text{Вер}_{\xi} [g(a, d, z, \xi) \leq 0] \geq \rho_{\text{зад}}$. В том случае, если эти условия не выполняются, выбирается новое

число $\alpha_2 < \alpha_1 < 0$ и вновь решается детерминированная задача оптимизации с ограничением $g(a, d, z, \bar{\xi}) \leq \alpha_2$. Процедура продолжается до тех пор, пока не будет найдено такое α^* , при котором технологическое ограничение $g(a, d, z, \xi) \leq 0$ выполняется с заданной вероятностью, т.е. $\text{Вер}_{\xi} [g(a, d, z, \xi) \leq 0] \geq \rho_{\text{зад}}$ или $\rho_3 \leq 1 - \rho_{\text{зад}}$.

Следует заметить, что возможность применения метода А-задач стохастического программирования должна всегда доказываться либо аналитическим доказательством выполнения достаточных условий, либо вычислительным экспериментом, подтверждающим выполнение достаточных условий.

В соответствии с методом А-задач стохастической оптимизации нами разработан следующий алгоритм решения задачи (2.100) [10].

Алгоритм 2.8

Шаг 1. Полагаем число итераций $v = 1$, задаем значения вектора гарантированной вероятности $\rho_j, j = 1, \dots, m$ и точности ε решения задачи ОЗИП, множество аппроксимационных точек $S_1 = \{\xi^i : i \in I_1\}$, начальное значение вектора $\alpha^{(0)} = (\alpha_1^{(0)}, \alpha_2^{(0)}, \dots, \alpha_m^{(0)})$ и начальные приближения $a^{(0)}, d^{(0)}, z^{(0)}$.

Шаг 2. Методом последовательного квадратичного программирования решаем задачу НЛП

$$I(a, d, z) = \min_{a, d, z} \sum_{i \in I_1} \omega_i C(a, d, z, y(a, d, z, \xi^i)) \quad (2.101)$$

при связях

$$y = \mathfrak{F}(a, d, z, \xi^i)$$

и ограничениях

$$g_j(a, d, z, y(a, d, z, \xi^i)) \leq \alpha_j^{(v)}, \quad \alpha_j^{(v)} < 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad i \in I_1. \quad (2.102)$$

Шаг 3. В точке $(a_{\alpha^{(0)}}, d_{\alpha^{(0)}}, z_{\alpha^{(0)}})$, которая является решением задачи (2.101)–(2.102), вычисляются вероятности выполнения ограничений $g_j(a, d, z, \xi) \equiv y_{j\text{зад}} - y_j \leq 0$ с использованием генератора случайных чисел $\xi^i, i \in I_1$ с равномерным законом распределения и математической модели

$$y = \mathfrak{F}(a, d, z, \xi^i), \quad i \in I_1$$

и проверяется выполнение условий

$$\text{Вер}_\xi \{g_j(a, d, z, \xi) \leq 0\} \geq \rho_j, \quad j = 1, \dots, m.$$

Шаг 4. Если вероятностные ограничения не выполняются, т.е. $\alpha^{(v)} \notin \Lambda$, включается алгоритм входа в допустимую область Λ . Простейшим алгоритмом такого типа является уменьшение $\alpha_j^{(v)}$ для нарушенных ограничений. Далее число v увеличивается на 1, т.е. $v = v + 1$ и следует переход к шагу 2.

Шаг 5. Если вероятностные ограничения выполняются, то вектор α^* находим из решения внешней Λ -задачи оптимизации

$$I(a_{\alpha^*}, d_{\alpha^*}, z_{\alpha^*}) = \min_{\alpha \in \Lambda} I(a_\alpha, d_\alpha, z_\alpha). \quad (2.103)$$

В общем случае задача (2.103) может быть решена подходящим методом нелинейного программирования. Однако нами применялся простейший алгоритм коррекции вектора $\alpha \in \Lambda$ путем увеличения его компонентов на величину

$$\Delta \alpha_j = \lambda^{(v)} (\text{Вер}_\xi [g_j(\bullet) \leq 0] - \rho_j),$$

где $\lambda^{(v)}$ – шаг коррекции на v -й итерации, подбираемый опытным путем. Поиск α^* прекращается, если $\Delta \alpha_j$ для \forall_j становится меньше заранее заданного малого числа ε (точность поиска α^*).

Вычисление вероятностных интегралов производится стандартными методами (HSS, Монте-Карло).

2. Пусть $\xi = (\xi^1, \xi^2)$. Для совокупности случайных параметров $\xi^1 \in \Xi^1$ функции распределения вероятностей известны, в то время как для совокупности случайных параметров $\xi^2 \in \Xi^2$ функции распределения вероятностей неизвестны, где Ξ^1 и Ξ^2 – области неопределенности параметров ξ^1 и ξ^2 соответственно. В этом случае формулировка ОЗИП имеет вид

$$\min_{a, d, z} \max_{\xi^2} M_{\xi^1} \{C(a, d, z, \xi^1, \xi^2)\},$$

$$\min_{\xi^2 \in \Xi^2} \text{Вер}_{\xi^1} \{g_j(a, d, z, \xi^1, \xi^2) \leq 0\} \geq \rho_j, \quad j = 1, \dots, m,$$

где

$$\text{Вер}_{\xi^1} \{g_j(a, d, z, \xi^1, \xi^2) \leq 0\} = \int_{\Omega_j(\xi^2)} P(\xi^1) d\xi^1,$$

$$\Omega_j(\xi^2) = \{\xi^1 : g_j(a, d, z, \xi^1, \xi^2) \leq 0, \xi^1 \in \Xi^1\}.$$

Можно также сформулировать одноэтапную задачу оптимизации с усредненными ограничениями:

$$\begin{aligned} \min_{a,d,z} M_{\xi} \{ C(a, d, y(\xi), z, \xi) \}, \\ y = \mathfrak{S}(a, d, z, \xi), \\ M_{\xi} \{ g_j(a, d, y(\xi), z, \xi) \} \leq 0, \quad j = 1, \dots, m, \end{aligned}$$

где $y(\xi)$ – многомерная функция неопределенных параметров ξ .

Сравнительный анализ результатов решения одноэтапных задач интегрированного проектирования с жесткими и усредненными ограничениями показывает, что

$$M_{\xi} \{ g_j(a, d, y(\xi), z, \xi) \} \leq \max_{\xi \in \Xi} (g_j(a, d, z, \xi)),$$

и оптимальное значение целевой функции ОЗИП с усредненными ограничениями лучше (меньше), чем оптимальное значение целевой функции ОЗИП (2.50) – (2.52) с жесткими ограничениями (теорема П2 [31]).

Предположим, что мы решили ОЗИП и получили решение $[a^*, d^*, z^*]$. Чтобы реализовать это решение, мы должны поддерживать выполнение условия $z = z^*$ на стадии функционирования ХТС. Это означает, что мы не можем настраивать управляющие переменные на стадии функционирования. Ясно, что постановка и решение ОЗИП на стадии проектирования приводит к неэкономичной конструкции ХТС, так как не используется настройка управляющих переменных. Предположим теперь, что мы используем ДЗИП1 для решения задачи с жесткими и мягкими ограничениями. Это означает, что задача

$$\begin{aligned} C^*(a^*, d^*, \xi) = \min_z C(a, d, z, \xi), \\ g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m, \end{aligned}$$

решается в каждой точке области Ξ . Отсюда следует, что все ограничения $g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, j = 1, \dots, m$, будут удовлетворяться в каждой точке области Ξ с вероятностью $p_i = 1$. Использование ДЗИП3 даст более экономичную конструкцию ХТС, так как мягкие ограничения могут удовлетворяться с вероятностью $p_i < 1$.

Далее мы дадим строгую формулировку двухстадийной задачи интегрированного проектирования в случае мягких ограничений. Мы будем предполагать, что функции распределения вероятностей известны, все ограничения являются мягкими и должны быть удовлетворены

с вероятностью $\rho_{\text{зад}}$. В качестве целевой функции этой задачи мы будем использовать среднее (ожидаемое) значение некоторой меры, характеризующей работу ХТС на стадии функционирования. В этом случае формулировка ДЗИП для случая 3 (ДЗИП3) имеет следующий вид:

$$\bar{I}_1 = \min_d \left(I_1^{(1)}(a, d) + I_1^{(2)}(a, d) \right), \quad (2.104)$$

$$\int_{\Omega_1} P(\xi) d\xi \geq \rho_{\text{зад}}, \quad (2.105)$$

где $I_1^{(1)}(a, d) = \int_{\Omega_1} C^*(a, d, \xi) P(\xi) d\xi$; $I_1^{(2)}(a, d) = \int_{\Xi \setminus \Omega_1} C(a, d, \xi) P(\xi) d\xi$;

$C^*(a, d, \xi)$ – решение задачи $\min_z C(a, d, z, \xi) | g_j(a, d, z, \xi) \leq 0$, $j = 1, \dots, m$; $\Omega_1 = \{\xi : h(a, d, \xi) \leq 0\}$; $\Xi \setminus \Omega_1$ – теоретико-множественная разность; функция $h(a, d, \xi)$ определяется формулой $h(a, d, \xi) = \min_z \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi)$.

Пусть $[a^1, d^1, z^1(\xi)]$ – решение этой задачи. В противоположность ДЗИП1 задача $(\min_z C(a, d, z, \xi) | g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, j = 1, \dots, m)$ решается только в точках области Ω_1 . Так как в каждой точке области выполняется условие $h(a, d, \xi) \leq 0$, то задача $(\min_z C(a, d, z, \xi) | g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, j = 1, \dots, m)$ имеет решение в каждой точке области Ω_1 , и в каждой точке области Ω_1 можно найти такие значения $z(\xi)$, что все ограничения будут выполняться. Вероятность попадания ξ в область Ω_1 больше или равна $\rho_{\text{зад}}$. Ясно, что в области Ω_1 выполняется условие $\max_{\xi \in \Omega_1} \min_z \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0$. Если $\rho_{\text{зад}} \rightarrow 1$, то $\Omega_1 \rightarrow \Xi$ и в пределе при $\rho_{\text{зад}} = 1$ (если существуют векторы a и d такие, что $\chi_1(a, d) \leq 0$) получаем $I_1^2(a, d) = 0$. При этом задача (2.104), (2.105) преобразуется в двухэтапную задачу интегрированного проектирования с жесткими ограничениями (2.10), (2.11) (ДЗИП1).

Для реализации найденного оптимального режима на стадии функционирования можно использовать следующий подход. Согласно задаче (2.104), (2.105) задача $\min_z C(a, d, z, \xi) | g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, j = 1, \dots, m$ должна решаться только внутри области

$\Omega_1^* = \{\xi: h(a, d^1, \xi) \leq 0\}$ (см. соотношение $\Omega_1 = \{\xi: h(a, d, \xi) \leq 0\}$). Будем использовать следующее правило: запомним уравнение поверхности области Ω_1^* и если на этапе функционирования измеренное значение ξ будет находиться внутри области Ω_1^* (т.е. $\xi \in \Omega_1^*$), то мы должны решать задачу $\min_z C(a, d, z, \xi) | g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, j = 1, \dots, m$, в противном случае ($\xi \notin \Omega_1^*$) – задачу $(\min_z C(a, d, z, \xi))$. В этом случае мы должны запоминать только одну многомерную функцию, хотя это тоже может потребовать огромного объема памяти.

В связи с этим введем штрафную функцию

$$\bar{C}(a, d, z, \xi, \beta) = C(a, d, z, \xi) + \beta \sum_{j=1}^m p(g_j(a, d, z, \xi)), \quad (2.106)$$

где

$$p(g_j) = \begin{cases} 0, & \text{если } g_j \leq 0, \\ g_j^2, & \text{если } g_j > 0. \end{cases} \quad (2.107)$$

Здесь $p(g_j(a, d, z, \xi))$ – штрафной член и β – штрафной коэффициент. Таким образом, для всех значений ξ мы будем использовать следующую внутреннюю задачу оптимизации:

$$\bar{C}^*(a, d, \xi, \beta) = \min_z \bar{C}(a, d, z, \xi, \beta). \quad (2.108)$$

Ясно, что оптимальное значение критерия этой задачи зависит от a, d, ξ, β . Пусть $z(a, d, \xi, \beta)$ – решение этой задачи. Переменные a, d, β должны быть выбраны таким образом, чтобы ограничения удовлетворялись с вероятностью $\rho_{\text{зад}}$ и среднее значение величины $\bar{C}^*(a, d, \xi, \beta)$ принимало минимальное значение. Поэтому формулировка ДЗИПЗ будет иметь вид

$$I^* = \min_{a, d, \beta} M_{\xi} \left\{ \bar{C}^*(a, d, \xi, \beta) \right\}, \quad (2.109)$$

$$\int_{\Omega_2} P(\xi) d\xi \geq \rho_{\text{зад}}, \quad (2.110)$$

где $\Omega_2 = \{\xi: g_j(a, d, z(a, d, \xi, \beta), \xi) \leq 0\}$.

Неравенство (2.110) гарантирует удовлетворение ограничений с вероятностью не меньшей $\rho_{\text{зад}}$. В определении области Ω_2 используются значения $z(a, d, \xi, \beta)$ управляющих переменных, полученных решением внутренней задачи оптимизации (2.108). В задаче (2.109) штрафной коэффициент β используется как дополнительная поисковая переменная.

Рассмотрим две формулировки ДЗИП с усредненными мягкими ограничениями. Первая формулировка имеет вид

$$I^* = \min_{a, d, z(\xi)} M_{\xi} \{ C(a, d, z(\xi), \xi) \}, \quad (2.111)$$

$$M_{\xi} \{ g_j(a, d, z(\xi), \xi) \} \leq 0, \quad j = 1, \dots, m.$$

Заметим, что здесь опять поисковые переменные $z(\xi)$ являются многомерными функциями.

Во второй формулировке мы будем использовать задачу (2.108) в качестве внутренней задачи оптимизации. Оптимальное значение критерия этой задачи зависит от a, d, ξ, β . Переменные a, d, β должны быть выбраны таким образом, чтобы ограничения удовлетворялись в среднем на этапе функционирования. В этом случае ДЗИП с усредненными мягкими ограничениями будет иметь вид

$$I_1^* = \min_{a, d, \beta} M_{\xi} \{ \bar{C}^*(a, d, \xi, \beta) \} \quad (2.112)$$

$$M_{\xi} \{ g_j(a, d, z(a, d, \xi, \beta), \xi) \} \leq 0, \quad j = 1, \dots, m.$$

Следует заметить, что решение $z^*(a, d, \xi, \beta)$ задачи (2.108) используется в ограничениях задачи (2.112). Используя задачу (2.108), мы можем преобразовать задачу (2.112) к виду

$$I_1^* = \min_{a, d} \int_{\Xi} \min_z \bar{C}(a, d, z, \xi, \beta) P(\xi) d\xi, \quad (2.113)$$

$$M_{\xi} \{ g_j(a, d, z(a, d, z(a, d, \beta)), \xi) \} \leq 0, \quad j = 1, \dots, m. \quad (2.114)$$

Изменим порядок операций интегрирования и минимизации в формуле (2.113):

$$I_2^* = \min_{a, d, z(\xi)} \int_{\Xi} C(a, d, z(\xi), \xi) P(\xi) d\xi, \quad (2.115)$$

$$M_{\xi} \{ g_j(a, d, z(a, d, \xi, \beta), \xi) \} \leq 0, \quad j = 1, \dots, m.$$

Задача (2.115) не эквивалентна задаче (2.113), поскольку переменные z в критерии (2.113), соответствующие разным значениям ξ ,

не независимы (они связаны условиями (2.114)): $I_2^* \geq I_1^*$. Это означает, что решение задачи (2.115) определяет только верхнюю границу оптимального значения задачи (2.113).

Следующая процедура последовательных приближений позволяет получить решение задачи (2.113).

Алгоритм 2.9

Шаг 1. Положим $v = 1$. Зададим начальное приближение $z^{(0)}(\xi)$ для управляющих переменных и малую величину $\varepsilon_1 > 0$.

Шаг 2. Решаем следующую задачу:

$$I_1^{(v)} = \min_{a,d} \int_{\Xi} \min_z \bar{C}(a, d, z, \xi, \beta) P(\xi) d\xi, \quad (2.116)$$

$$M_{\xi} \left\{ g_j(a, d, z^{(v-1)}(\xi), \xi) \right\} \leq 0, \quad j = 1, \dots, m. \quad (2.117)$$

Пусть $a^{(v)}, d^{(v)}, z^{(v)}(\xi)$ – решение этой задачи, а $z^{(v-1)}(\xi)$ есть значение вектора управляющих переменных, полученное на предыдущей итерации.

Поскольку ограничения (2.117) связывают только конструктивные переменные $a^{(v)}, d^{(v)}$, то в отличие от задачи (2.113) управляющие переменные z задачи (2.116), соответствующие разным значениям ξ , независимы. Поэтому мы можем изменить порядок операций интегрирования и минимизации в (2.116):

$$I_2^{(v)} = \min_{a,d,z(\xi)} \int_{\Xi} \bar{C}(a, d, z, \xi, \beta) P(\xi) d\xi,$$

$$M_{\xi} \left\{ g_j(a, d, z^{(v-1)}(\xi), \xi) \right\} \leq 0, \quad j = 1, \dots, m.$$

Шаг 3. Если $\left| I_1^{(v)} - I_1^{(v-1)} \right| \leq \varepsilon_1 \left| I_1^{(v)} \right|$, то решение задачи (2.113) найдено, и алгоритм останавливает свою работу.

Шаг 4. Положим $v = v + 1$ и переходим к шагу 2.

Далее рассмотрим методы решения ДЗИПЗ, когда каждое j -е ограничение должно выполняться с заданной вероятностью ρ_j [152]. В качестве целевой функции будем использовать математическое ожидание или верхнюю границу исходного критерия оптимизации с доверительной вероятностью ρ_0 .

$$C_1 = \min_{a,d,z(\xi)} \int_{\Xi} C(a, d, z(\xi), \xi) P(\xi) d\xi,$$

$$\Pr\{g_j(d, z(\xi), \xi) \leq 0\} \geq \rho_j, \quad j = 1, \dots, m + p,$$

где p – число ограничений $g_{m+l} \equiv h_l(a, d, z(\xi)) \leq 0, l = 1, \dots, p$; $h_l(a, d, z(\xi))$ – функции, образующие область H , которой принадлежат переменные d, z , т.е. $H = \{d, z : h_l(a, d, z) \leq 0, l = 1, \dots, p\}$.

Будем искать приближенное решение сформулированной задачи в предположении, что управляющие переменные $z(\xi)$ аппроксимируются линейными функциями $\tilde{z}^1(\xi) = b^0 + b^1 \xi_1 + \dots + b^{n_z} \xi_{n_z}$, где b^i – вектор размерности $n_z = \dim z$, компоненты которого будем обозначать через $b_k^i, k = 1, \dots, n_z$.

Поисковыми переменными теперь будут компоненты векторов b^i . Подставив $\tilde{z}^1(\xi)$ в исходную задачу, получим

$$C_1 = \min_{a, d, b} \int_{\Xi} C(a, d, b, \xi) P(\xi) d\xi,$$

$$\Pr\{g_j(d, b, \xi) \leq 0\} \geq \rho_j, \quad j = 1, \dots, m + p,$$

где

$$C(a, d, b, \xi) \equiv f_0(a, d, b^0 + b^1 \xi_1 + \dots + b^{n_z} \xi_{n_z}, \xi),$$

$$g_j(a, d, b, \xi) \equiv f_j(a, d, b^0 + b^1 \xi_1 + \dots + b^{n_z} \xi_{n_z}, \xi), \quad j = 1, \dots, m + p.$$

Вид задачи такой же, как у одноэтапной вероятностной задачи с мягкими ограничениями, только в данном случае роль переменных z играют переменные b . Поэтому для ее решения можно применить методы, разработанные для решения одноэтапных задач с мягкими ограничениями, и, в частности, алгоритм 2.8.

Рассмотрим теперь случай, когда в качестве целевой функции двухстадийной задачи используется верхняя граница исходной целевой функции с доверительной вероятностью ρ_0 . В этом случае двухстадийная задача с мягкими ограничениями имеет вид

$$\min_{a, d, z(\xi), u} u,$$

$$\Pr\{C(a, d, z(\xi), \xi) - u \leq 0\} \geq \rho_0,$$

$$\Pr\{g_j(a, d, z(\xi), \xi) \leq 0\} \geq \rho_j, \quad j = 1, \dots, m + p.$$

Опять будем искать приближенное решение задачи в предположении, что управляющие переменные $z(\xi)$ являются линейными функциями параметров ξ . В этом случае ДЗИПЗ имеет следующий вид:

$$\min_{a,d,b,u} u ,$$

$$\Pr\{C(a, d, b, \xi) - u \leq 0\} \geq \rho_0 ,$$

$$\Pr\{g_j(a, d, b, \xi) \leq 0\} \geq \rho_j, \quad j = 1, \dots, m + p .$$

Вид задачи такой же, как у одноэтапной вероятностной задачи с мягкими ограничениями.

2.5. АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ ОДНО- И ДВУХСТАДИЙНЫХ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ СО СМЕШАННЫМИ ОГРАНИЧЕНИЯМИ

При формулировании ДЗИП для случая 4 (ДЗИП4) предположим, что: 1) ограничения с номерами $j \in J_1 = (1, \dots, m_1)$ являются мягкими и должны удовлетворяться с вероятностью ρ_j , а ограничения с номерами $j \in J_2 = (m_1 + 1, \dots, m)$ – жесткими, $J \in J_1 \cap J_2 = (1, \dots, m)$. В этом случае формулировка ДЗИП4 будет иметь вид [31, 48]

$$\min_{a,d} I(a, d) = I_1(a, d) + I_2(a, d), \quad (2.118)$$

$$\text{Вер}[\xi \in \Omega_1] \geq \rho_{\text{зад}}, \quad (2.119)$$

$$\chi_1(a, d; J_2) \leq 0, \quad (2.120)$$

где, область Ω_1 определяется как

$$\Omega_1 = \left\{ \xi : \min_z \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0 \right\},$$

$$I_1(a, d) = \int_{\Omega_1} (\min_z C(a, d, z, \xi) | g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, j \in J) P(\xi) d\xi;$$

$$I_2(a, d) = \int_{\Xi \setminus \Omega_1} [\min_z C(a, d, z, \xi) + A \max\{\max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi), 0\} | g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, j \in J] P(\xi) d\xi;$$

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

A – штрафной коэффициент; $\text{Вер}[\xi \in \Omega_1] \geq \rho_{\text{зад}}$ – величина стохастической гибкости [151].

Здесь Ω_1 – множество тех значений ξ , для которых могут быть выполнены ограничения задачи, и $\text{Вер}[\xi \in \Omega_1] \geq \rho_{\text{зад}}$. В критерии оп-

тимизации для каждого $\xi \in \Omega_1$ переменная z должна выбираться из условия минимума $C(a, d, z, \xi)$ при выполнении ограничений $h(a, d, \xi) = \min_z \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0$, а при $\xi \notin \Omega_1$ – из условия минимизации функции, учитывающей величину $C(a, d, z, \xi)$ и штраф за нарушение ограничений $g_j(a, d, z, \xi) \leq 0$.

Ограничение (2.119) гарантирует удовлетворение всех ограничений с вероятностью $\rho_{\text{зад}}$. Кроме того, дополнительное ограничение (2.120) гарантирует жесткое удовлетворение ограничений с номерами $j \in J_2$ для всех точек области Ξ . Если существуют такие a, d , что $\chi_1(a, d; J_2) \leq 0$, то при $\rho_{\text{зад}} \rightarrow 1, \Omega_1 \rightarrow \Xi$, и в пределе при $\rho_{\text{зад}} = 1, I_2(a, d) = 0$ задача (2.118) – (2.120) превращается в ДЗИП1.

Пусть в качестве целевой функции двухстадийной задачи используется верхняя граница исходной целевой функции с доверительной вероятностью ρ_0 . В этом случае формулировка ДЗИП4 может быть представлена и в другом виде (см. п. 2.1):

$$I^* = \min_{a, d, u, z(\xi)} u, \quad (2.121)$$

$$\text{Вер}_\xi \{g_0 = C(a, d, z(\xi), \xi) - u \leq 0\} \geq \rho_0, \quad (2.122)$$

$$\text{Вер}_\xi \{g_j(a, d, z(\xi), \xi) \leq 0\} \geq \rho_j, \quad j \in J_1, \quad (2.123)$$

$$\chi_1(a, d) = \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J_2} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0. \quad (2.124)$$

В задаче (2.121) – (2.124) u – скалярная переменная (аналог конструктивных переменных); $\text{Вер}\{\bullet\}$ – вероятность выполнения ограничения $\{\bullet\}$; g_0, g_j – функции ограничений; $g_0(a, d, z(\xi), \xi) = C(a, d, z(\xi), \xi)$ – критерий интегрированного проектирования; $g_j(a, d, z, \xi) \equiv y_{j\text{зад}} - y_j \leq 0, j = 1, \dots, m$ – функции ограничений; $y_j = \mathfrak{F}(a, d, z, \xi), j = 1, \dots, m$; ρ_0, ρ_j – заданные значения вероятности выполнения ограничений; $\chi_1(d)$ – функция гибкости ХТС.

Введем обозначения

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

и множество $S^{(v)} = \{\xi^i : i \in I^{(v)}\}$ накопления точек ξ с индексами $i \in I^{(v)}$, в которых нарушаются ограничения (2.122) – (2.124), причем во множестве точек $S_1^{(v)}$ будут накапливаться точки, в которых нарушаются жесткие ограничения, а во множестве $S_2^{(v)}$ – точки, в которых нарушаются мягкие ограничения. Кроме того, мы будем использовать вспомогательную задачу нелинейного программирования (B):

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

Решение задачи (A) заключается в нахождении минимального значения скалярной переменной u при условии выполнения всех ограничений задачи в заданном наборе точек $\xi^i, i \in I^{(v)}$ и n – число номеров точек.

Алгоритм 2.10 [49]

Шаг 1. Принимаем $v = 1$, задаем начальные множества $S^{(0)}, I^{(0)}$ из условия наилучшей аппроксимации функций $z(\xi)$, число номеров n точек $\xi^i, i \in I^{(0)}$ и начальные приближения $a^{(0)}, d^{(0)}, u^{(0)}, z^{i(0)}, i \in I^{(0)}$.

Шаг 2. Решаем вспомогательную задачу (B)

$$\begin{aligned} I^* &= \min_{d, u, z^i} u; \\ \bar{g}_j(d, u, z^i, \xi^i) &\leq 0, \quad j \in J_1, \quad i \in I^{(v-1)}; \\ g_j(d, z^i, \xi^i) &\leq 0, \quad j \in J_2, \quad i \in I^{(v-1)}. \end{aligned}$$

И пусть $a^{(v)}, d^{(v)}, u^{(v)}, z^{(v)}$ есть решение этой задачи.

Шаг 3. Вычисляем

$$\chi_1(d^{(v)}) = \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J_2} g_j(a^{(v)}, d^{(v)}, z, \xi) \quad (2.125)$$

с использованием алгоритма внешней аппроксимации. Обозначим через $\bar{\xi}^{(v)}$ решение задачи (2.125) и проверяем выполнение условия

$$\chi_1(d^{(v)}) \leq 0. \quad (2.126)$$

в точке решения $\bar{\xi}^{(v)}$ задачи (2.125). Если условие (2.126) не выполняется, то переходим к шагу 4, в противном случае – к шагу 5.

Шаг 4. Дополним множество точек $S_1^{(v)}$, в которых нарушаются ограничения (2.126), точкой $\bar{\xi}^{(v)}$, т.е.

$$S_1^{(v)} = S_1^{(v-1)} \cup \bar{\xi}^{(v)},$$

$$I_1^{(v)} = I_1^{(v-1)} \cup (n+1); \quad n := n+1.$$

Шаг 5. Проверяем выполнение мягких (вероятностных) ограничений

$$\text{Вер} \left\{ \bar{g}_j(a^{(v)}, d^{(v)}, z(\xi), \xi) \leq 0 \right\} \geq p_j, \quad j \in J_1. \quad (2.127)$$

На данном шаге мы не имеем функций $z = z(\xi)$, а известны только значения этих функций в дискретных точках ξ^i , $i \in I^{(v-1)}$. Поэтому эти точки будем использовать для аппроксимации функций $z = z(\xi)$.

Если условие (2.126) выполняется, а условие (2.127) не выполняется, то переходим к шагу 6.

Если условия (2.126), (2.127) выполняются, то решение найдено $a^* = a^{(v)}$, $d^* = d^{(v)}$, $z^* = z^{i, (v)}$ и алгоритм останавливает свою работу.

Шаг 6. Вычисляем

$$\chi_2(a^{(v)}, d^{(v)}) = \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J_1} \bar{g}_j(a^{(v)}, d^{(v)}, u^{(v)}, z, \xi) \quad (2.128)$$

с использованием алгоритма внешней аппроксимации где $\bar{J}_1 = (0, 1, 2, \dots, m_1)$. Обозначим через $\bar{\xi}^{(v)}$ решение задачи (2.127) и дополним точкой $\bar{\xi}^{(v)}$ множество точек $S_2^{(k)}$, в которых нарушаются мягкие ограничения (2.128), т.е.

$$S_2^{(v)} = S_2^{(v-1)} \cup \bar{\xi}^{(v)},$$

$$I_2^{(v)} = I_2^{(v-1)} \cup (n+1); \quad n := n+1.$$

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

Дадим некоторые пояснения алгоритму.

На шаге 5 осуществляется многомерная интерполяция с помощью функций $z = z(\xi)$ по известным дискретным точкам ξ^i , z^i , $i \in I^{(v)}$. Это можно сделать с помощью многомерных кубических сплайнов или с использованием процедуры приближенной аппроксимации, суть ко-

торой заключается в следующем. При реализации имитационной модели для каждого полученного случайного значения ξ в качестве соответствующего $z(\xi)$ берем значение $z^l(\xi^l)$, $l \in I^{(v)}$, которое соответствует точке ξ^i , наиболее близкой к точке ξ , т.е.

$$r^i(\xi, \xi^i) = \sqrt{\sum_{j=1}^{n_\xi} (\xi_j - \xi_j^i)^2}, \quad i \in I^{(v)} = I_1^{(v)} \cup I_2^{(v)}, \quad n_\xi = \dim \xi,$$

$$\bar{\xi} = \min_{i \in I^{(k)}} r^i(\xi, \xi^i) \Rightarrow \hat{i} = \arg \min_{i \in I^{(k)}} r^i(\xi, \xi^i) \Rightarrow \hat{z} = z^{\hat{i}}.$$

Фактически в описанной процедуре мы используем здесь кусочно-постоянную аппроксимацию функций $z = z(\xi)$.

На шаге 6 неравенство $\chi_2(a^{(v)}, d^{(v)}) \leq 0$ означает, что мягкие ограничения выполняются с вероятностью 1. Поэтому, если не выполняется условие (2.127), то заведомо $\chi_2(a^{(v)}, d^{(v)}) > 0$ и, следовательно, мы получим точку $\bar{\xi}^{(k)}$, в которой нарушаются мягкие ограничения.

При использовании дополнительной переменной u проводим масштабирование поисковых переменных, чтобы диапазоны их изменения были примерно одинаковы.

2.6. ДИНАМИЧЕСКАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ ХТС В УСЛОВИЯХ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ

При интегрированном проектировании ХТС осуществляется совместное проектирование ХТС и системы автоматического управления [4, 54]. Дополнительное усложнение вносится наличием неопределенных параметров в математических моделях [55]. Это требует рассмотрения проблемы динамической оптимизации ХТС в условиях неопределенности. По аналогии с проблемой статической оптимизации требуется ввести понятие динамической гибкости, одноэтапной и двухэтапной задач оптимизации в условиях неопределенности.

Рассмотрим методы и алгоритмы оптимальной стабилизации переменных состояния ХТС, синтеза оптимального управления пусковыми режимами непрерывных ХТС и полунепрерывными (периодическими) нелинейными химическими процессами.

Сформулируем задачу оптимальной стабилизации для класса разомкнутых систем управления: требуется найти управление $u^*(t) \in U$, доставляющее минимум функционалу качества вида:

$$I(u^*(t), \bar{\xi}) = \min_{u \in U} \left[\frac{1}{2} \left\langle \left\langle y(t_k) - y_{\text{зад}}(t_k) \right\rangle \right\rangle, F \left\langle \left\langle y(t_k) - y_{\text{зад}}(t_k) \right\rangle \right\rangle + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_k} \left\langle \left\langle (y(t) - y_{\text{зад}}(t)), Q(t) (y(t) - y_{\text{зад}}(t)) \right\rangle \right\rangle + \left\langle u(t), G(t)u(t) \right\rangle dt \right] \quad (2.129)$$

при связях в форме уравнений математической модели динамики нелинейного химического процесса

$$\dot{x}(t) = f(x(t), u(t), \bar{\xi}); \\ x(t_0) = x_0; \quad (2.130)$$

и ограничениях на качественные показатели переходного процесса в системе автоматического управления.

Здесь $x(t)$, $x_{\text{зад}}(t)$ – n -мерные векторы текущего и заданного состояния (программы изменения) процесса, соответственно; $u(t)$ – m -мерный вектор управления; $f(\bullet)$ – нелинейная по x и u вектор-функция; F , $Q(t)$ – положительно полуопределенные матрицы ($n \times n$); $G(t)$ – симметричная положительно определенная матрица ($m \times m$); $\langle \bullet \rangle$ – скалярное произведение векторов.

Для решения задачи (2.129), (2.130) нами применялся метод «последовательной итерации», суть которого состоит в замене исходной нелинейной задачи сходящейся последовательностью линейных [56]. Каждая линейная задача последовательности получается путем линеаризации нелинейной вектор-функции $f(\bullet)$ в окрестности траектории состояния ХТП и управления, полученных при решении предыдущей линейной задачи. В первом приближении функция $f(\bullet)$ линеаризуется в окрестности траектории $x(t) = x_{\text{зад}}(t)$, $u(t) = u^{(0)}$ для задачи оптимальной стабилизации. В этом случае система линеаризованных уравнений имеет вид

$$\dot{x}^{(v+1)}(t) = A^{(v)} x^{(v+1)}(t) + B^{(v)}(t) u^{(v+1)}(t) + h^{(v)}(t); \\ x^{(v+1)}(t_0) = y_0; \quad (2.131)$$

$$A^{(v)}(t) = \left. \frac{\partial f(x, u, \bar{\xi})}{\partial x} \right|_{\substack{x=x^{(v)}(t) \\ u=u^{(v)}(t)}};$$

где

$$B^{(v)}(t) = \left. \frac{\partial f(x, u, \bar{\xi})}{\partial u} \right|_{\substack{x=x^{(v)}(t) \\ u=u^{(v)}(t)}};$$

$$h^{(v)}(t) = f(x^{(v)}, u^{(v)}, \bar{\xi}) - A^{(v)}(t)x^{(v)}(t) - B^{(v)}(t)u^{(v)}(t).$$

Задача (2.129), (2.131) линейна по переменным $x_{(t)}^{(v+1)}, u_{(t)}^{(v+1)}$ и ее решение определяется известным соотношением для оптимального управления [50]. Последовательность линейных задач решается до тех пор, пока при некотором $v = q$ выполняется неравенство $\|x^{(q)} - x^{(q-1)}\| \leq \varepsilon$.

При этом вектор управления $u^{(q)}$ принимается в качестве решения задачи (2.129), (2.131), т.е. $u^* = u^{(q)}$. Заметим, что сходимость итераций в сильной степени зависит от удачного выбора начального приближения $u^{(0)}$.

Решение задачи синтеза оптимального управления в замкнутой системе может быть получено на базе метода АКОР по критерию обобщенной работы А.А. Красовского [18]. В соответствии с этим методом для процесса, описываемого уравнениями

$$\dot{x}_i + f_i(x, \bar{\xi}) = \sum_{j=1}^r \varphi_{ij}(x, t)u_j \quad (i = \overline{1, n}),$$

оптимальными в смысле минимума функционала

$$I = V_3 x(t_k) + \int_{t_0}^{t_k} Q(x, t) dt + \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_k} \sum_{j=1}^m \frac{u_j^2 + u_{j \text{ on}}^2}{k_j^2} dt,$$

являются управления

$$u_j = u_{j \text{ on}} = -k_j^2 \sum_{k=1}^n \varphi_{kj}(x, t) \frac{\partial V}{\partial x_k},$$

где $V = V(x, t)$ – решение уравнения

$$\frac{\partial V}{\partial t} - \sum_{i=1}^n f_i \frac{\partial V}{\partial x_i} = -Q$$

при граничном условии $V_{t=t_k} = V_3$, $f_j, \varphi_{ij}, Q, V_3$ – заданные непрерывные функции, $k_j^2 > 0$ – заданные коэффициенты.

На решении уравнений свободного движения

$$\dot{x}_M + f(x_M, \bar{\xi}, t) = 0 \quad (2.132)$$

левая часть дифференциального уравнения обращается в полную производную по времени: $\dot{V} = -Q$.

Отсюда следует:
$$V(x_M(t_k)) - V(x_M(t_0)) = - \int_{t_0}^{t_k} Q(x_M(t)) dt .$$

По условию для терминальной задачи $V(x_M(t_k)) = V_3(x_M(t_k))$. Таким образом,
$$V(x_M(t_k)) = V_3(x_M(t_k)) + \int_t^{t_k} Q(x_M, t) dt .$$

Допустим, что текущее время и интервал оптимизации разбиты на достаточно короткие циклы длиной $\Delta t_{\text{ц}}$. Начало очередного цикла с точностью до $\Delta t_{\text{ц}}$ совпадает с текущим моментом t . Предположим, что в начале каждого цикла система контроля и оценивания реального управляемого процесса определяет вектор состояния $x(t)$ и задает его в качестве начального значения в модель (2.132) свободного движения, обеспечивая в начале каждого цикла равенство $x_M(t) = x(t)$. Таким образом, интегрируя уравнения (2.132) свободного движения на интервале от t до t_k , можно вычислить

$$V(x(t)) = V_3(x_M(t_k)) + \int_t^{t_k} Q(x_M, t) dt . \quad (2.133)$$

Однако оптимальные управления рассчитываются по формулам:

$$u_{j \text{ оп}} = -k_j^2 \sum_{k=1}^n \Phi_{k_j} \frac{\partial V}{\partial x_k}, \quad j = \overline{1, r}, \quad (2.134)$$

и конечной целью является вычисление частных производных $\frac{\partial V}{\partial x}$.

Точнее, как видно из (2.134), требуется определить r скалярных произведений вектора градиента $\left(\frac{\partial V}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial V}{\partial x_n} \right)$ на векторы $\Phi_{1j}, \dots, \Phi_{nj}$.

Обычно число управлений r меньше размерности пространства состояний n , и выгодно сразу определять проекции вектора градиента на $(\Phi_{1j}, \dots, \Phi_{nj})$, а не на координатные оси $\left(\text{т.е.} \frac{\partial V}{\partial x_k} \right)$. Применим для

вычисления компонент и проекций градиента схему правой разности. В результате получим выражение для расчета оптимальных управлений в виде

$$u_{j\text{оп}} = -\frac{k_j^2}{\varepsilon \|\varphi_j\|} \left\{ \left[V_3(x_M(t_k)) + \int_t^{t_k} Q dt \right]_{x_M(t)=x+\varepsilon\varphi_j} - \left[V_3(x_M(t_k)) + \int_t^{t_k} Q dt \right]_{x_M=x(t)} \right\}, \quad j = \overline{1, r}, \quad (2.135)$$

где φ_j – вектор (столбец) с компонентами $\varphi_{1j}, \dots, \varphi_{nj}$; $\|\varphi\|$ – норма этого вектора; ε – малая действительная величина.

Заданная функция V_3 и квадратура в квадратных скобках вычисляются на траекториях свободного движения объекта (2.135), возбуждаемого начальными условиями, которые для первой скобки соответствуют вектору $x(t) + \varepsilon\varphi_j$, для второй скобки – $x(t)$. Для определения значений всех r управлений согласно (2.138) проводим $r+1$ «запуск» прогнозирующей модели (2.135). Модель свободного движения объекта можно заставить работать в ускоренном времени, вводя масштаб по времени $\tau = t/\chi$, где $\chi = \text{const} \gg 1$. Тогда уравнения прогнозирующей модели имеют вид

$$\frac{dx_M}{d\tau} + \chi f(x_M, \bar{\xi}, \chi\tau) = 0.$$

Темп интегрирования, характеризуемый величиной χ , должен быть таков, чтобы за каждый цикл $\Delta t_{\text{ц}}$ осуществлялось достаточное число «прогонок» свободного движения на интервале $t_k - t$, необходимое для численного определения частных производных $\frac{\partial V}{\partial x_i}$. В этом случае

$$V(x(\tau)) = V_3(x_M(\tau_k)) + \chi \int_{\tau=t/\chi}^{\tau=t_2/\chi} Q(x_M, \chi\tau) d\tau.$$

Сформулированные согласно (2.135) управления подаются на объект

$$\dot{x} + f(x, \bar{\xi}, t) = \varphi u$$

и остаются неизменными в течение определенного цикла $\Delta t_{\text{ц}}$.

Описанный алгоритм с прогнозирующей моделью с точностью до ошибок, связанных с дискретизацией во времени, ошибок интегриро-

вания уравнений свободного движения (ошибок модели), ошибок датчиков и ошибок численного дифференцирования для определения проекций градиента, является точным алгоритмом. Это означает, что если указанные ошибки стремятся к нулю, то формируемые управления стремятся к строго оптимальным в смысле минимума критерия обобщенной работы. Однако при практическом осуществлении каждая из перечисленных ошибок играет определенную роль. В частности, при больших интервалах оптимизации существенное вредное влияние могут оказывать ошибки численного интегрирования уравнения свободного движения. При этом уровень этих ошибок может сильно зависеть от того, что принимается за свободное движение и каково, стало быть, уравнение прогнозирующей модели.

В описанном варианте алгоритма за свободное движение объекта принималось движение при $u = 0$, т.е. движение при нейтральных, нулевых положениях органов управления. Лучшие результаты в смысле точности моделирования свободного движения можно ожидать в том случае, когда под свободным движением понимается движение при фиксированных положениях органов управления, причем эти положения соответствуют управлениям, вычисленным на предшествующих циклах оптимизации.

Рассмотрим соответствующий вариант алгоритма оптимального управления с прогнозирующей моделью. Уравнения управляемого процесса записываются в виде

$$\begin{aligned} \dot{x}_i + f_i(x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_r, \bar{\xi}) &= 0, \quad i = \overline{1, n}, \\ \dot{y}_j &= u_j, \quad j = \overline{1, r}; \end{aligned}$$

где $y = (y_1, \dots, y_r)$ – вектор органов управления; $u = (u_1, \dots, u_r)$ – вектор управления. Таким образом, в данном случае осуществляется управление скоростями перемещения органов управления.

Отмечая, что свободное движение воспроизводится прогнозирующей моделью в ускоренном времени, записываем

$$\begin{aligned} \frac{dx_M}{d\tau} + \chi f(x_M, y_M, \bar{\xi}) &= 0, \\ \frac{dy_M}{d\tau} &= 0. \end{aligned}$$

В начале каждого цикла $\Delta t_{\text{ц}}$ переменные состояния процесса вводятся в прогнозирующую модель. В данной задаче имеем расширенный вектор состояния (x, y) . Для численного определения частных

производных $\frac{\partial V}{\partial y_j}$ осуществляем варьирование начальных условий по u_M в каждом запуске прогнозирующей модели.

Для преобразования данного алгоритма в алгоритм нетерминального управления необходимо осуществить переход к скользящему интервалу оптимизации, при котором $t_k = t + \Delta T$, где ΔT – заданная длина интервала оптимизации. При этом определение t_k осуществляется из условия достижения, например выхода целевых продуктов заданного (максимального) значения.

Наиболее трудоемкой операцией в алгоритме с прогнозирующей моделью является численное интегрирование уравнений свободного движения, выполняемое в каждом цикле $r+1$ раз. Предположим, что для численного интегрирования с достаточной точностью уравнений свободного движения (2.132) на начальном интервале оптимизации $t_k - t$ необходимо M операций. Интервал интегрирования с каждым тактом сокращается (при фиксированном моменте времени t_k) и среднее число операций однократного интегрирования (при достаточно большом числе циклов) будет равным $0,5M$. Обозначим общее число циклов, на которые разбит интервал оптимизации $(t_k - t)$, через $n_{ц}$. Тогда общее число операций, необходимых для решения задачи синтеза оптимального управления, выражается формулой $\sim \frac{1}{2} n_{ц} (r+1)M$.

Выше были рассмотрены алгоритмы решения задач оптимальной стабилизации режимов и синтеза оптимального управления ХТП при фиксированном значении вектора неопределенных параметров $\bar{\xi}$. Далее предполагается, что эффективность функционирования описанного выше алгоритма управления будет учитываться с учетом действия случайных возмущений ξ . При этом возможна коррекция оптимального управления для тех областей изменения неопределенных параметров оптимального управления ξ , для которых эффективность функционирования системы управления ХТП окажется недостаточно эффективной. В этом случае необходимо формулировать и решать задачу проектирования системы и алгоритма управления в условиях неопределенности. Для таких систем в работе [57] рассматривается постановка задачи оптимизации в виде

$$I(u) = M_{\xi} \left\{ \int_{t_0}^{t_k} Q(x(t, \xi), u(t)) dt \right\} \rightarrow \min_{u \in U} \quad (2.136)$$

при связях

$$\dot{x} = f(x, u(t), \xi), \quad t \in [t_0, t_k],$$

$$x(0) = x_0 \quad (2.137)$$

и ограничениях

$$\text{Вер}_{\xi} \{g_j(x(t, \xi), u(t)) \leq \alpha_j\} \geq \rho, \quad j \in J, \quad (2.138)$$

где $x \in E^n$ – вектор состояния ХТП; $\xi \in E^L$ – вектор неопределенных (случайных) параметров, имеющих известную функцию плотности распределения $P(\xi)$ с некоторой областью определения Ξ ; $f(\bullet)$ – n -мерная вектор-функция, имеющая l_i -ю непрерывную производную по $y_i, i = \overline{1, n}$, и m_j -ю производную по $\xi_j, j = \overline{1, L}$; $u(t)$ – вектор-функция управления из некоторого допустимого множества U ; α_j – заданные действительные числа; ρ – заданные вероятности; $Q(\bullet), g(\bullet)$ – достаточно гладкие функции своих аргументов.

Будем считать, что $f(\bullet)$ аналитична по x в E^n и по вектору параметров ξ в области Ξ . Тогда решение $x(t, u(t), \xi)$ также будет аналитично в Ξ и может быть представлено сходящимся рядом Тейлора:

$$\begin{aligned} x^{(q)}(t, u(t), \xi) = & x^{(q)}(t, u(t), \bar{\xi}^2) + \sum_{i=1}^n \frac{\partial x^{(q)}(t, u(t), \bar{\xi})}{\partial \xi^{2(i)}} \Delta \xi^{(i)} + \\ & + \sum_{i, j=1}^L \frac{1}{2} \frac{\partial^2 x^{(q)}(t, u(t), \bar{\xi})}{\partial \xi^{(i)} \partial \xi^{(j)}} \Delta \xi^{(i)} \Delta \xi^{(j)} + \dots; \quad q = \overline{1, n}, \end{aligned} \quad (2.139)$$

где $x^{(q)}$ – q -я координата вектора решения системы дифференциальных уравнений состояния ХТП (2.137); $\Delta \xi - (\bar{\xi} - \xi)$ – случайный вектор отклонений от номинального (среднего) значения вектора неопределенных параметров $\bar{\xi} = \int_{\Xi} \xi P(\xi) d\xi$; обозначим производные решения

$x(t, u(t), \xi)$ по координатам вектора ξ через $x_{\xi^{(i)}\xi^{(j)}}^{(q)}$ и предположим, что подинтегральная функция $Q(x(t, \xi), u(t))$ имеет все непрерывные

частные производные по x порядка $n \leq m$. Если теперь воспользоваться свойством линейности оператора математического ожидания, то можно получить для функционала $I(u)$ новое выражение

$$\begin{aligned} \tilde{I}(u) = & \int_{t_0}^{t_k} \left\{ Q(x(t, \bar{\xi})) + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^L \frac{\partial Q(x(t, \bar{\xi}))}{\partial x^{(i)}} \frac{\partial x^{(i)}}{\partial \xi^{(j)}} M \{ \Delta \xi^{(j)} \} + \right. \\ & + \sum_{r=1}^L \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^L \sum_{q=1}^n \frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q(x(t, \bar{\xi}))}{\partial x^{(i)} \partial x^{(q)}} \frac{\partial x^{(q)}}{\partial \xi^{(r)}} \frac{\partial x^{(i)}}{\partial \xi^{(j)}} M \{ \Delta \xi^{(j)} \Delta \xi^{(r)} \} + \\ & \left. + \sum_{r=1}^L \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^L \frac{1}{2} \frac{\partial Q(x(t, \bar{\xi}))}{\partial x^{(i)}} \frac{\partial^2 x^{(i)}}{\partial \xi^{(j)} \partial \xi^{(r)}} M \{ \Delta \xi^{(j)} \Delta \xi^{(r)} \} + \dots + R(Q^{(m)}) \right\} dt. \end{aligned} \quad (2.140)$$

Члены вида $M \{ (\Delta \xi^{(1)})^{n_1} \times \dots \times (\Delta \xi^{(L)})^{n_L} \}$, где $n_r, r = \overline{1, L}$ – некоторые степени, являются центральными моментами соответствующего порядка и легко считаются, поскольку предполагается известной функция $P(\xi)$ – плотность распределения случайного вектора ξ неопределенных параметров. Однако, если случайная величина $\Delta \xi^{(i)}$ при каждом значении других случайных величин $\Delta \xi^{(j)}, j = 1, \dots, i-1, i+1, \dots, L$ имеет симметричное распределение, то член $M \{ (\Delta \xi^{(1)})^{n_1} \times \dots \times (\Delta \xi^{(L)})^{n_L} \}$ равен нулю, как только $\Delta \xi^{(i)}$ входит в него в нечетной степени. Так, например, если вектор ξ имеет симметричное относительно своего математического ожидания распределение (нормальное, равномерное и т.п.), то ненулевыми будут лишь такие $M \{ (\Delta \xi^{(1)})^{n_1} \times \dots \times (\Delta \xi^{(L)})^{n_L} \}$, в которых все степени n_r четные.

Если теперь ограничиться конечным числом членов в разложении (2.140), то мы получим детерминированный функционал $\tilde{I}(u)$. Таким образом можно перейти от стохастической задачи к детерминированной задаче минимизации функционала $\tilde{I}(u)$ с уравнениями связи (2.137).

Далее в терминах теории А-задач стохастической оптимизации исходную задачу (2.139) – (2.141) с учетом (2.139), (2.140) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \tilde{I}(u_{A^*}) = \min_{A \in \Lambda} \{ \min_{u \in U} \tilde{I}(x(t, \bar{\xi}), u), \dot{x} = f(x, u, \bar{\xi}), g_j(x(t, \bar{\xi}), u, t) \leq A_j(t), \\ j \in J, t \in [t_0, t_k] \}, \end{aligned} \quad (2.141)$$

где

$$\Lambda = \left\{ A \mid \forall_j, \text{Вер}_{\bar{\xi}} [g_j(x(t, \bar{\xi}), u_A, t) \leq 0] \geq \rho, j \in J, t \in [t_0, t_k] \right\}.$$

Для определения вектора $A^*(t)$ можно построить минимизирующую последовательность A -задач оптимизации: $\{A_S\} \in \Lambda : m(A_S) \rightarrow m(A^*)$, где $m(A) = \min_{u \in U} \tilde{I}(u)$.

Алгоритм ее построения сводится к следующему.

Шаг 1. Задается начальное приближение при $v=0$ для вектор-функции, $A(t)$ – некоторые кусочно-постоянные функции $\tilde{A}_j^{(v)}(t_i)$, $j \in J$, аппроксимирующие $A_j(t)$, $\tilde{A}_j^{(v)}(t) = A_j(t_i)$ при $t \in [t_i, t_{i+1}]$, $i = \overline{0, k-1}$.

Шаг 2. Методами АКОР или Крылова–Черноусько [58] решается задача оптимального управления, записанная в фигурных скобках (2.141).

Шаг 3. При найденном управлении $u_A(t)$ производится проверка выполнения вероятностных ограничений (2.138) на каждом отрезке $t \in [t_i, t_{i+1}]$, $i = \overline{0, k-1}$.

Шаг 4. Если вероятностные ограничения на каком-либо промежутке (t_i, t_{i+1}) не выполняются, т.е. $\tilde{A}^{(v)}(t) \notin \Lambda$, то для нарушенных ограничений проводится уменьшение значений $\tilde{A}^{(v)}(t_i)$ при $t \in [t_i, t_{i+1}]$, $v_i = v+1$, и следует переход к шагу 2. В противном случае переходят к шагу 5.

Шаг 5. Кусочно-постоянные вектор-функции $\tilde{A}_j^{(v)}(t)$, $j \in J$, и соответствующие им управления $u_{A^{(v)}}$ находятся из решения задачи:

$$\tilde{I}(u_{A^*}) = \min_{A \in \Lambda} \{ \bullet \}. \quad (2.142)$$

В общем случае задача (2.142) при условии кусочно-постоянной аппроксимации функции $A(t)$ может быть решена эффективным методом последовательного квадратичного программирования.

Таким образом, все описанные выше алгоритмы оптимальной стабилизации и оптимального управления для детерминированных и стохастических объектов управления будут использоваться нами при интегрированном проектировании ХТП, аппаратов и систем.

3. ПРИМЕРЫ ИНТЕГРИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ АППАРАТУРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ОФОРМЛЕНИЯ ГИБКИХ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И СИСТЕМ

3.1. ЭНЕРГО- И РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩЕЕ НЕПРЕРЫВНОЕ ПРОИЗВОДСТВО АЗОПИГМЕНТОВ

Азопигменты получают при последовательном проведении процессов тонкого органического синтеза (диазотирования и азосочетания), фильтрация, сушки и диспергирования пигмента. Процессы тонкого органического синтеза – химические реакции диазотирования и азосочетания осуществляются в действующих производствах периодического действия в емкостных аппаратах большого объема с механическими перемешивающими устройствами, в которых невозможно обеспечить достаточную степень однородности полей концентраций и температуры в аппарате, а следовательно, и требуемое качество органических полу-продуктов и красителей [59].

В качестве примера интегрированного проектирования рассмотрим аппаратно-технологическое оформление непрерывного процесса диазотирования, при котором обеспечиваются энерго- и ресурсосбережения производства, высокие технико-экономические показатели производства и наибольшие возможности повышения качества азопигментов.

3.1.1. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕПРЕРЫВНОГО ПРОЦЕССА ДИАЗОТИРОВАНИЯ АРОМАТИЧЕСКИХ АМИНОВ

Обзор литературных данных и результатов экспериментальных исследований, проведенных в работах [60 – 67], позволил установить перечень наиболее вероятных реакций, протекающих при синтезе азокрасителей, кинетические уравнения и константы химических процессов диазотирования (табл. 3.1) и азосочетания, математические модели этих процессов, осуществляемых в многоступенчатых проточных аппаратах смешения. В меньшей степени были исследованы непрерывные процессы диазотирования и азосочетания, осуществляемые в турбулентных аппаратах трубчатого и комбинированного типов. В последние годы интенсивно развивается новый энерго- и ресурсосберегающий непрерывный способ получения целого ряда химических продуктов с использованием малогабаритных трубчатых турбулентных аппаратов [68 – 71].

На рисунках 3.1, 3.2 представлены трубчатые турбулентные аппараты, позволяющие осуществлять химические процессы в высокотурбулентных потоках.

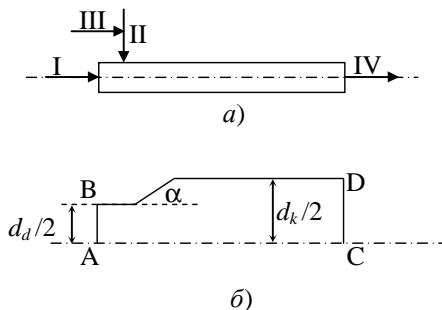


Рис. 3.1. Малогабаритный турбулентный трубчатый реактор:

- a* – цилиндрического типа;
б – диффузор конфузорного типа;
d_d – диаметр диффузора,
d_k – диаметр конфузора

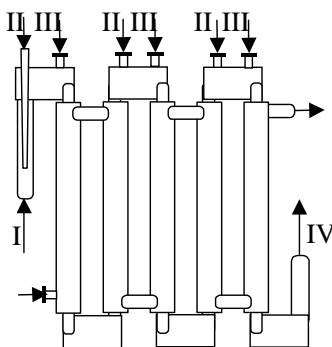
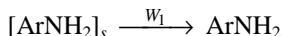


Рис. 3.2. Турбулентный трубчатый реактор комбинированного типа:
 I, II, III, IV – потоки веществ

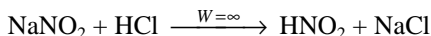
3.1. Перечень наиболее вероятных реакций, протекающих при диазотировании ароматических аминов нитритом натрия, и уравнения кинетики процесса диазотирования

Диазотирование (реакция экзотермическая)

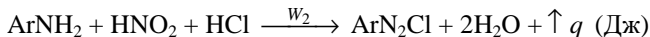
растворение твердой фазы амина в среде соляной кислоты



образование диазотирующего агента (HNO_2)



целевая реакция диазотирования



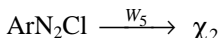
разложение азотистой кислоты



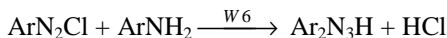
образование диазосмол



разложение диазосоединения с образованием диазосмол



образование диазоаминосоединений



**Уравнения кинетики и
кинетические константы процесса диазотирования**

Кинетическое уравнение	Порядок реакции	Предэкспоненциальный множитель, $(\text{м}^3)^{n-1}/\text{моль}^{n-1}/\text{с}$	Энергия активации, Дж/моль
$W_2 = k_2 [\text{ArNH}_2] [\text{HNO}_2]$	2	$3,75 \cdot 10^5$	$46,82 \cdot 10^3$
$W_3 = k_3 [\text{HNO}_2]^4 / P_{\text{NO}}^2$	4	$7,17 \cdot 10^{21} / (9,81 \cdot 10^4)^2$	$119,65 \cdot 10^3$
$W_4 = k_4 [\text{ArN}_2\text{Cl}] [\text{HNO}_2]$	2	$0,32 \cdot 10^5$	$63,69 \cdot 10^3$
$W_5 = k_5 [\text{ArN}_2\text{Cl}]$	1	$1,10 \cdot 10^{10}$	$87,15 \cdot 10^3$

Обозначения: А – ArNH_2 (амин); АК – HNO_2 ; СК – HCl ; σ – NO ; D – ArN_2Cl (диазосоединение); $\chi = (\chi_1, \chi_2)$; P_{NO} – парциальное давление нитрозных газов; r – радиус частицы амина; l – текущая координата длины реактора; c_A^* – равновесная концентрация амина; ρ_A, M_A – плотность и молекулярная масса амина; $\hat{\psi}(r, l)$ – ненормированная плотность распределения числа N частиц амина по размеру, т.е. $\hat{\psi} = dN / dr$; G_l, G_s, G_N – расходы жидкой и твердой фаз суспензии амина и нитрита натрия; $S_{\text{тр}}$ – площадь поперечного сечения трубы реактора; c_p – теплоемкость; ϑ – скорость потока; K – коэффициент теплопередачи; q – тепловой эффект реакции; индексы: (0) – вход в реактор; х – хладагент; (i) – точка распределенного по длине ввода реагентов в реактор.

Такие аппараты весьма эффективны не только для проведения химических процессов, но и для интенсивного смешения компонентов с целью гомогенизации жидкости. Они успешно используются в качестве смесителей (для получения целевого продукта), предреакторов (для приготовления исходной реакционной смеси), малогабаритных реакторов (для проведения быстрых химических реакций), а также осуществления массообменных процессов [71 – 74].

Основными элементами (модулями) турбулентных аппаратов трубчатого типа являются смеситель на входе в трубчатый аппарат, реактор цилиндрического типа, диффузор-конфузоры и камеры смешения в аппаратах комбинированного типа. Таким образом, при моделировании процесса диазотирования необходимо учитывать процессы: 1) смешения дозируемых в аппарат исходных реагентов в камере смешения, установленной на входе в аппарат; 2) химического взаимодей-

ствия ароматического амина с диазотирующим агентом (азотистой кислотой) в трубчатой части аппарата и в камерах смешения (в аппаратах комбинированного типа); 3) изменения условий протекания элементарных процессов химического взаимодействия при наличии в аппарате устройства турбулизации потока (например, диффузор-конфузора).

Рассмотрим основные этапы построения математической модели процесса диазотирования, осуществляемого в турбулентных аппаратах трубчатого типа в среде соляной кислоты. Исходное сырье – ароматический амин (например, 3-нитро-4-амонотолуол) – непрерывно подается в реактор в виде солянокислой суспензии. Одновременно в реактор вводится водный раствор нитрита натрия, подача которого может распределяться по длине трубчатой части реактора или по секциям комбинированного реактора (см. рис. 3.1, 3.2).

Работоспособность трубчатого реактора определяется условиями обеспечения заданной производительности аппарата, неосаждения твердой фазы амина в вертикальных трубах и турбулентности гидродинамического режима течения в трубчатой части реактора. Основными параметрами, определяющими эти условия, являются диаметр трубы реактора и концентрация амина в питании реактора.

Допустимый диаметр трубы реактора по условию неосаждения агрегатов твердой фазы амина определяется как

$$d \leq d_{\text{кр}}^1,$$

где $d_{\text{кр}}^1$ – первый критический диаметр трубы реактора рассчитывается по формуле

$$d_{\text{кр}}^1 = \frac{\text{Re} \bar{\mu}_c}{K \vartheta_{\text{ос}} \bar{\rho}_c}, \quad (3.1)$$

где $\bar{\mu}_c$ – средний динамический коэффициент вязкости суспензии; $\vartheta_{\text{ос}}$ – скорость осаждения агрегатов амина; $\bar{\rho}_c$ – средняя плотность суспензии; $K = \vartheta_{\text{п}} / \vartheta_{\text{ос}}$, $\vartheta_{\text{п}}$ – скорость потока.

Средняя плотность суспензии при заданной плотности твердой фазы ρ_{T} и массовая доля кислоты в водном растворе $\bar{X}_{\text{СК}}$ рассчитываются по формулам:

$$\bar{\rho}_c = \frac{1}{\frac{\bar{X}_{\text{T}}}{\rho_{\text{T}}} + \frac{1 - \bar{X}_{\text{T}}}{\bar{\rho}}}; \quad \bar{\rho} = \frac{1}{\frac{\bar{X}_{\text{СК}}}{\rho_{\text{СК}}} + \frac{1 - \bar{X}_{\text{СК}}}{\bar{\rho}_{\text{В}}}};$$

$$\bar{X}_{\text{СК}} = \frac{c_{\text{СК}} M_{\text{СК}}}{(1-\phi)\bar{\rho}}; \quad \phi = \frac{c_{\text{А}}^{(0)} M_{\text{А}}}{\rho_{\text{T}}}, \quad (3.2)$$

где $\bar{X}_{\text{СК}}, \bar{X}_{\text{T}}$ – массовые доли концентрированной соляной кислоты в растворе и твердой фазы амина в суспензии; $\rho_{\text{T}}, \rho_{\text{СК}}, \rho_{\text{В}}$ – плотности твердой фазы амина, концентрированной соляной кислоты и воды соответственно, $c_{\text{А}}^{(0)}, c_{\text{СК}} = 2,5c_{\text{А}}^{(0)}$ – концентрация амина и соляной кислоты в суспензии на входе в реактор.

Из условий надежной работы клапанов и насосов, питающих реактор, концентрация амина в суспензии на входе в реактор не должна превышать 800 моль/м³. Отсюда максимальная объемная доля твердой фазы амина в суспензии будет равна $\phi = 8,4\%$, и этому значению ϕ соответствует следующая формула для расчета вязкости суспензии:

$$\bar{\mu}_{\text{с}} = \bar{\mu} (1 + 2,5\phi), \quad (3.3)$$

где $\bar{\mu}_{\text{с}} = \frac{1}{\frac{\bar{X}_{\text{СК}}}{\mu_{\text{СК}}} + \frac{1 - \bar{X}_{\text{СК}}}{\mu_{\text{В}}}}$, $\bar{\mu}, \mu_{\text{СК}}, \mu_{\text{В}}$ – средние динамические коэф-

фициенты вязкости жидкой фазы, соляной кислоты и воды соответственно.

Среднюю скорость свободного осаждения твердой фазы можно рассчитать по формуле

$$\vartheta_{\text{ос}} = 5,46 \sqrt{\frac{d_{\text{T}}^{\text{max}} (\rho_{\text{T}} - \bar{\rho})}{\bar{\rho}}}. \quad (3.4)$$

После подстановки формул (3.2) – (3.4) в выражение (3.1) получим, что $d_{\text{кр}}^1$ зависит от концентрации амина в суспензии на входе в реактор, т.е.

$$d_{\text{кр}}^1 = f(c_{\text{А}}^{(0)}). \quad (3.5)$$

Вторым условием работоспособности реактора диазотирования является обеспечение турбулентного режима течения суспензии амина – $\text{Re} = 10^4$. Определяемый с учетом этого условия диаметр будем находить из следующего выражения:

$$d_{\text{кр}}^2 = \frac{4G_l^{(0)} \bar{\rho}_{\text{с}}}{\pi \text{Re} \bar{\mu}_{\text{с}}},$$

где $d_{кр}^2$ – второй критический диаметр труб реактора; $G_l^{(0)}$ – расход жидкой фазы на входе в реактор.

Общий расход солянокислой суспензии амина в питании реактора определяется из уравнений материального баланса по стадиям технологического процесса получения азокрасителей:

$$G_l^{(0)} = \frac{Q \cdot 10^6}{c_A^{(0)} T_{эфф} K_D K_{Az} M_{\Pi}},$$

где $K_D, K_{Az}, T_{эфф}$ – выходы по стадиям диазотирования, азосочетания и эффективный фонд рабочего времени реакторной установки синтеза азопигментов соответственно; M_{Π} – молекулярный вес пигмента.

Диаметр $d_{кр}^2$ зависит от концентрации амина в питании реактора и производительности

$$d_{кр}^2 = f(c_A^{(0)}, Q), \quad (3.6)$$

где Q – производительность реактора по пигменту.

На рисунке 3.3, *a* представлены графики, соответствующие уравнениям (3.5) и (3.6), из которых видно, что при производительности меньше 1000 т/год диаметр трубы реактора определяется условием турбулентности.

Задаваясь максимально возможным диаметром трубы реактора (~40 мм), можно определить максимальную концентрацию амина $c_A^{(0)}$ в питании реактора. Минимальную концентрацию амина можно определить по точке перегиба кривой для каждой производительности Q (см. рис. 3.3, *a*). Соответственно такими концентрациями будут:

- для производительности 500 т/год – $c_A^{(0)} \in [130, 210]$ моль/м³;
- для производительности 1000 т/год – $c_A^{(0)} \in [280, 410]$ моль/м³.

На рисунке 3.3, *б* представлены графики зависимости среднего времени пребывания реакционной смеси $\bar{\tau}$ от концентрации амина $c_A^{(0)}$. Их анализ показывает, что при производительности больше 1000 т/год и концентрации амина не более 100 моль/м³ время пребывания будет расти, так как определяющим условием при этом является неосаждение твердой фазы амина (рис. 3.3, *a*). При концентрациях больше 100 моль/м³ и $Q > 1000$ т/год диаметр реактора определяется только из условий турбулентности реакционного потока и существенно зависит от изменения концентрации амина, что вызывает большее изменение объема реактора, нежели расхода суспензии на входе в ре-

актор. При $Q < 1000$ т/год среднее время пребывания при всех концентрациях падает. Только при очень больших концентрациях (700...800) моль/м³ влияние на время пребывания расхода суспензии и объема реактора становится равнозначным.

На стадии функционирования ХТС диаметр трубы реактора постояен и при необходимости увеличения производительности Q можно наращивать его длину. Этому результата можно добиться и технологическим приемом, повышая концентрацию твердой фазы амина с целью снижения расхода солянокислой суспензии амина в питании реактора. Для увеличения концентрации амина без нарушения условий работоспособности реактора необходимо выбрать такой диаметр трубы (см. рис. 3.3, а), которому будет соответствовать максимально возможный интервал допустимых концентраций амина для выбранной производительности. Такому условию соответствует диаметр трубы, равный 40 мм.

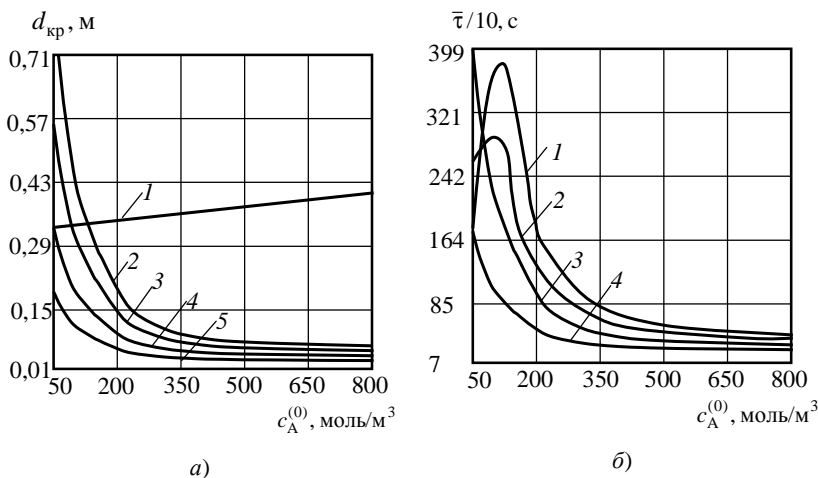


Рис. 3.3. Зависимости критических диаметров трубы реактора $d_{кр}$ (а) и среднего времени $\bar{\tau}$ пребывания реакционной смеси (б) от концентрации амина на входе в реактор:

$$a - 1 - d_{кр}^1 = f(c_A^{(0)}); 2 - 5 - d_{кр}^1 = f(c_A^{(0)}, Q); 2 - Q = 2000 \text{ т/год};$$

$$3 - Q = 1500 \text{ т/год}; 4 - Q = 1000 \text{ т/год}; 5 - Q = 500 \text{ т/год};$$

$$б - 1 - Q = 2000 \text{ т/год}; 2 - Q = 1500 \text{ т/год};$$

$$3 - Q = 1000 \text{ т/год}; 4 - Q = 500 \text{ т/год}$$

Вторым важным достоинством применения реактора с максимальным диаметром (40 мм) является возможность его использования в малотоннажных производствах, так как при больших диаметрах не будет выполняться условие турбулентности реакционной смеси.

На рисунке 3.4 представлен интервал допустимых значений концентраций амина на входе в реактор, по которому определяются минимально и максимально возможные значения концентраций амина при различных производительностях реакторной установки по пигменту. На стадии эксплуатации реактора концентрация амина будет изменяться относительно номинального значения, ориентировочно, в пределах $\pm 2,5\%$. В связи с этим на рис. 3.4 изображена допустимая область значений концентраций амина, ограниченная кривыми $c_{A \max}^{(0)} = f(Q)/0,975$ и $c_{A \max}^{(0)} = f(Q)/1,025$ (допустимая область заштрихована).

Минимально возможная производительность трубчатого реактора по пигменту, при которой выполняются условия неосаждения твердой фазы амина и турбулентности реакционной среды, равна 115 т/год. При меньших производительностях целесообразно использовать реактор с мешалкой периодического действия или реактор смешения типа «царга-тарелка» [75, 76].

Дадим вывод уравнений математической модели непрерывного процесса диазотирования, осуществляемого в трубчатом реакторе. Схема материальных потоков в одной секции трубчатого реактора приведена на рис. 3.5.

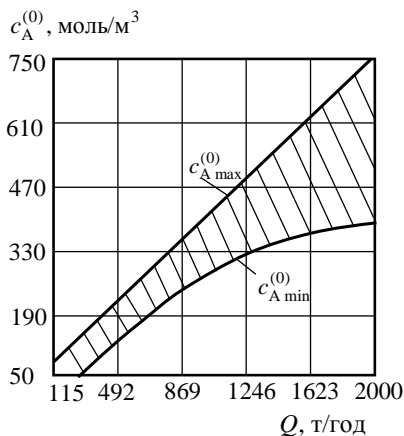


Рис. 3.4. Допустимая область концентрации амина на входе в реактор

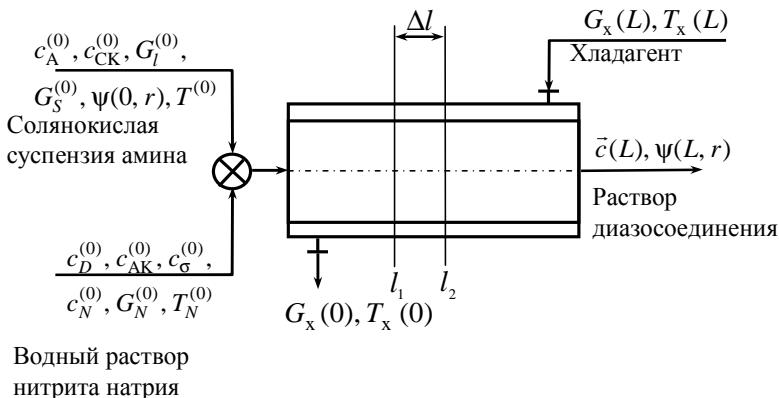


Рис. 3.5. Схема материальных потоков в трубчатом реакторе диазотирования:

$\psi(r)$ – гранулометрический состав; x – хладагент; l – жидкая фаза; S – твердая фаза; σ, χ – нитрозные газы и диазосмолы соответственно

При составлении уравнений математической модели примем следующие допущения: 1) гидродинамические режимы течения реакционной смеси и хладагента близки к режиму идеального вытеснения; 2) реактор является объектом с распределенными только по длине l координатами, скорость потока $\vartheta(l) = \text{const}$; 3) потери тепла в окружающую среду пренебрежимо малы; 4) теплофизические характеристики принимаются постоянными в рабочем диапазоне температур; 5) кристаллы амина будем считать сферическими частицами; 6) реакция диазотирования происходит в растворе.

С учетом принятых обозначений и допущений составим уравнения материального покомпонентного баланса на участке трубы (l_1, l_2) за промежуток времени (t_1, t_2) по растворенному амину:

$$\begin{aligned}
 & G_l \int_{t_1}^{t_2} [c_A(l_2, t) - c_A(l_1, t)] dt + \\
 & + S \int_{t_1}^{t_2} \int_{l_1}^{l_2} \left[W_2(c_A, c_{AK}, T) - \frac{1}{M_A} \int_0^{\infty} \hat{\psi}(l, r) W_1(c_A, T) dr \right] dl dt = \\
 & = S \int_{l_1}^{l_2} [c(l, t_2) - c(l, t_1)] dl.
 \end{aligned}$$

Пользуясь теоремой о среднем, получим равенство

$$\begin{aligned}
 & G_l [c_A(l_2, t) - c_A(l_1, t)] \Big|_{l=l_3} \Delta t + \\
 & + S \left[W_2(c_A, c_{AK}, T) - \frac{1}{M_A} \int_0^\infty \hat{\Psi}(l, r) W_1(c_A, T) dr \right] \Big|_{\substack{l=l_4 \\ t=t_4}}^{l=l_4} \Delta l \Delta t = \\
 & = S [c(l, t_2) - c(l, t_1)] \Big|_{l=l_3} \Delta l,
 \end{aligned}$$

которое при помощи теоремы о конечных приращениях можно преобразовать к виду

$$\begin{aligned}
 & G_l \frac{\partial c_A(l, t)}{\partial l} \Big|_{\substack{l=l_5 \\ t=t_3}} \Delta t \Delta l + \\
 & + S \left[W_2(c_A, c_{AK}, T) - \frac{1}{M_A} \int_0^\infty \hat{\Psi}(l, r) W_1(c_A, T) dr \right] \Big|_{\substack{l=l_4 \\ t=t_4}}^{l=l_4} \Delta l \Delta t = \\
 & = S \frac{\partial c(l, t)}{\partial t} \Big|_{\substack{l=l_3 \\ t=t_5}} \Delta l \Delta t.
 \end{aligned}$$

Переходя к пределу при $l_1, l_2 \rightarrow l$ и $t_1, t_2 \rightarrow t$, получим уравнение

$$\vartheta \frac{\partial c_A}{\partial l} + W_2(c_A, c_{AK}, T) - \frac{1}{M_A} \int_0^\infty \hat{\Psi}(l, r) W_1(c_A, T) dr = \frac{\partial c}{\partial t}; \quad (3.7)$$

$$c_A(l, 0) = c_A^l(l); \quad c_A(0, t) = c_A^{(0)}(t).$$

Аналогичным образом можно получить уравнения динамики трубчатого реактора и для других компонентов реакционной смеси:
по азотистой кислоте (AK)

$$\vartheta \frac{\partial c_{AK}}{\partial l} + W_2(c_A, c_{AK}, T) + W_3(c_{AK}, T) + W_4(c_{AK}, c_D, T) = \frac{\partial c_{AK}}{\partial t}; \quad (3.8)$$

$$c_{AK}(l, 0) = c_{AK}^l(l); \quad c_{AK}(0, t) = c_N G_N^{(0)}(t) / G_l^{(0)}(t);$$

по диазосоединению (D)

$$\vartheta \frac{\partial c_D}{\partial l} - W_2(c_A, c_{AK}, T) + W_4(c_{AK}, c_D, T) + W_5(c_D, T) = \frac{\partial c_D}{\partial t}; \quad (3.9)$$

$$c_D(l, 0) = c_D^0(l); \quad c_D(0, t) = c_D^{(0)}(t);$$

по продуктам разложения (σ , χ)

$$\vartheta \frac{\partial c_\sigma}{\partial l} - W_3(c_{AK}, T) = \frac{\partial c_\sigma}{\partial t}; \quad c_\sigma(l, 0) = c_\sigma^0(l); \quad c_\sigma(0, t) = c_\sigma^{(0)}(t); \quad (3.10)$$

$$\vartheta \frac{\partial c_\chi}{\partial l} - W_4(c_{AK}, c_D, T) - W_5(c_D, T) = \frac{\partial c_\chi}{\partial t}; \quad (3.11)$$

$$c_\chi(l, 0) = c_\chi^0(l); \quad c_\chi(0, t) = c_\chi^{(0)}(t).$$

Составим уравнение динамики для фракции частиц амина, характеризующихся размером от r до $r + dr$ на участке трубы (l_1, l_2) за время (t_1, t_2) :

$$\begin{aligned} & \int_{t_1}^{t_2} [N(l_2, t)\psi(l_2, t, r)dr - N(l_1, t)\psi(l_1, t, r)dr]dt + \\ & + \frac{1}{\vartheta} \int_{t_1}^{t_2} \int_{l_1}^{l_2} N(l, t) [\psi(l, t, r)W_1^{(r)}(l, t, r) - \psi(l, t, r + dr)W_1^{(r)}(l, t, r + dr)]dl dt = \\ & = \frac{1}{\vartheta} \int_{l_1}^{l_2} [N(l, t_2)\psi(l, t_2, r)dr - N(l, t_1)\psi(l, t_1, r)dr]dl, \end{aligned}$$

которое с использованием приведенной выше техники можно преобразовать к уравнению вида

$$\vartheta \frac{\partial \Psi(l, t, r)}{\partial l} - \frac{\partial}{\partial r} [\hat{\Psi}(l, t, r)W_1^{(r)}(l, t, r)] = \frac{\partial \Psi(l, t, r)}{\partial t}; \quad (3.12)$$

$$\hat{\Psi}(0, t, r) = \hat{\Psi}^{(0)}(t, r); \quad \hat{\Psi}(l, 0, r) = \hat{\Psi}^0(l, r).$$

Получим теперь уравнения динамики теплообмена в трубчатом реакторе по реакционной смеси:

$$\begin{aligned} & c_p \rho \int_{t_1}^{t_2} [T(l_2, t) - T(l_1, t)]d\tau + \\ & + \int_{t_1}^{t_2} \int_{l_1}^{l_2} [-qSW_2(l, t) + K_1\pi D[T(l, t) - T_x(l, t)]]dldt = \\ & = c_p \rho S \int_{l_1}^{l_2} [T(l, t_2) - T(l, t_1)]dl; \end{aligned}$$

по хладагенту (x):

$$c_p^x \rho_x G_x \int_{l_1}^{l_2} [T_x(l_2, t) - T_x(l_1, t)] dt - \int_{l_1}^{l_2} \int_{l_1}^{l_2} [K_1 \pi D [T(l, t) - T_x(l, t)]] dl dt = \\ = c_p^x \rho_x S_p \int_{l_1}^{l_2} [T(l, t_2) - T_x(l, t_1)] dl.$$

Проводя рассуждения, аналогичные предыдущим, получим уравнения:

$$c_p \rho G_l \frac{\partial T(l, t)}{\partial l} - q S W_2(l, t) + K_1 \pi D [T(l, t) - T_x(l, t)] = c_p \rho S \frac{\partial T(l, t)}{\partial t}; \quad (3.13)$$

$$T(l, 0) = T^0(l); \quad T(0, t) = T^{(0)}(t);$$

$$c_p^x \rho_x G_x \frac{\partial T_x(l, t)}{\partial l} - K_1 \pi D [T(l, t) - T_x(l, t)] = c_p^x \rho_x S_p \frac{\partial T_x(l, t)}{\partial t}; \quad (3.14)$$

$$T_x(l, 0) = T_x^0(l); \quad T_x(0, t) = T_x^{(L)}(t).$$

Таким образом, уравнения динамики непрерывного процесса диазотирования в трубчатом реакторе представляют собой нелинейные дифференциальные уравнения в частных производных первого порядка, для решения которых можно использовать метод характеристик или конечно-разностные методы.

Уравнения статики легко получить из выведенной системы уравнений динамики приравниванием нулю производной по времени, т.е.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = 0; \quad \frac{\partial T}{\partial t} = 0; \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0.$$

Математическая модель статики процесса диазотирования, осуществляемого в трубчатом реакторе, представляет собой систему нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений. К выходным переменным процесса диазотирования помимо концентраций, температуры и расходов потоков относятся: производительность реакторной установки – $Q(a, d, z, \xi) = c_D^{\text{ВЫХ}} G_l^{\text{ВЫХ}} M_D \cdot 28 \geq 1000$ т пигмента/год;

выход диазосоединения – $K_D(a, d, z, \xi) = \frac{c_D^{\text{ВЫХ}} G_l^{\text{ВЫХ}}}{[c_A^{\text{ВХ}}]_s G_l^{\text{ВХ}}} 100 \geq 98\%$; кон-

центрация азотистой кислоты $7 \text{ моль/м}^3 \leq c_{\text{АК}}^{\text{ВЫХ}}(a, d, z, \xi) \leq 14 \text{ моль/м}^3$

на выходе из реактора; количество диазосмол в диазорастворе –

$$П_{\chi}(a, d, z, \xi) = \frac{c_{\chi}^{\text{ВЫХ}} G_l^{\text{ВЫХ}}}{\left[c_A^{\text{ВХ}} \right]_s G_l^{\text{ВХ}}} 100\% \leq 0,5\% ; \text{ количество нитрозных газов в}$$

$$\text{диазорастворе – } П_{\sigma}(a, d, z, \xi) = \frac{c_{\sigma}^{\text{ВЫХ}} G_l^{\text{ВЫХ}}}{c_N^{\text{ВХ}} G_N^{\text{ВХ}}} 100\% \leq 1,0\% .$$

Наибольшую сложность при решении системы дифференциальных уравнений, описывающих статические режимы непрерывного процесса диазотирования, представляет уравнение, описывающее гранулометрический состав твердой фазы амина в l -м сечении трубчатого реактора:

$$\vartheta \frac{\partial \hat{\psi}(l, r)}{\partial l} = \frac{\partial}{\partial r} \left[\hat{\psi}(l, r) W_1^{(r)}(l, r) \right],$$

$$\hat{\psi}(0, r) = \hat{\psi}^{(0)}(r). \quad (3.15)$$

В случае линейного уравнения кинетики растворения частицы амина

$$\frac{dr}{dt} = -Ar^{-\alpha} \exp(-E_1 / RT) (c_A^* - c_A) / \rho_A. \quad (3.16)$$

Решение уравнения (3.15) может быть получено методом характеристик в аналитическом виде [77], где A, α – кинетические константы; c_A^*, c_A – равновесная и текущая концентрации амина; ρ_A – плотность амина.

Запишем решение уравнения (3.16) в виде

$$r(l) = f(r_0, l) = \left[r_0^{\alpha+1} - (1+\alpha) \frac{\int_0^l A \exp(-E_1 / RT) (c_A^* - c_A)}{\rho_A \vartheta} d\tilde{l} \right]^{\frac{1}{1+\alpha}},$$

откуда можно рассчитать начальный радиус r_0 частицы по формуле

$$r_0 = f_1(r, l) = \left[r^{\alpha+1} + (1+\alpha) \frac{\int_0^l A \exp(-E_1 / RT) (c_A^* - c_A)}{\rho_A \vartheta} d\tilde{l} \right]^{\frac{1}{1+\alpha}}.$$

В этом случае решение уравнения (3.15) с начальным условием может быть записано в следующем виде [77]:

$$\hat{\psi}(r, l) = \hat{\psi}^{(0)}(f_1(r, l)) \exp \left[\int_0^l \frac{\partial W_1^{(r)}}{\partial r} [r(\tilde{l}), f_1(r, \tilde{l})] d\tilde{l} \right]. \quad (3.17)$$

В случае нелинейного уравнения кинетики растворения частицы, например, в виде

$$\frac{dm}{dt} = -\beta^* (c_A^* - c_A) S,$$

где β – эффективный коэффициент массоотдачи; S – поверхность частицы, необходимо использовать численный алгоритм решения уравнения (3.15). Аппроксимируя дифференциальные уравнения в частных производных (3.15) конечной системой дифференциальных уравнений в обычных производных с использованием конечно-разностной схемы первого порядка, получим

$$\frac{d\hat{\psi}_i}{dl} = W_1^{(r)} \left(\frac{r_i + r_{i-1}}{2}, c_A, c_{AK} \right) \left[\frac{\hat{\psi}_i - \hat{\psi}_{i-1}}{\Delta r_i} \right] - \frac{\partial W_1^{(r)}}{\partial r} (r_i, c_A, c_{AK}) \psi_i, \quad (3.18)$$

$\hat{\psi}_1(0) = \hat{\psi}^{(0)}(r_i, l)$, Δr_i – шаг сетки.

Полученная система обыкновенных дифференциальных уравнений (3.18) одновременно с другими уравнениями модели может быть решена каким-либо численным методом. При этом могут возникнуть сложности, поскольку в начальной фазе процесса диазотирования скорость растворения твердой фазы и скорость реакции диазотирования различаются на несколько порядков, т.е. система дифференциальных уравнений математической модели процесса диазотирования является жесткой. В этом случае явные методы Рунге–Кутты исключаются из рассмотрения, и для решения системы дифференциальных уравнений модели статика процесса диазотирования мы применяли два метода: неявный метод трапеций [78] и метод Дормана–Принса 5-го порядка точности с автоматическим выбором шага [79], которые дают вполне сопоставимые результаты и обеспечивают получение решения с заданной точностью.

Математическая модель динамики процесса диазотирования, осуществляемого в турбулентном трубчатом аппарате, включает нелинейные дифференциальные уравнения с частными производными (3.7)–(3.14), для решения которых использовали неявный конечно-разностный метод [80].

Для математического описания процесса диазотирования, осуществляемого в турбулентном трубчатом реакторе комбинированного типа, необходимо к уравнениям (3.7) – (3.14) добавить уравнения, описывающие протекание процесса диазотирования в камере смешения.

В неустановившемся режиме текущий радиус частицы r кроме начального значения r_0 зависит также от возраста частицы τ и текущего времени t . Кинетика растворения частицы описывается квазилинейными дифференциальным уравнением с частными производными первого порядка:

$$\frac{\partial r}{\partial t} + \frac{\partial r}{\partial \tau} = W_1(r, c_{\text{СК}}, c_A, T), \quad (3.19)$$

где W_1 – скорость растворения частицы; $c_{\text{СК}}, c_A$ – концентрации соляной кислоты и амина соответственно; T – температура.

Начальные условия определим следующим образом:

$$t_0 = 0, \tau = \tau_0, r(\tau_0) = r_0(\tau_0). \quad (3.20)$$

Решение уравнений (3.19) при заданных начальных условиях (3.20) имеет вид

$$\frac{r^{(\alpha+1)}(\tau, t)}{\alpha+1} = \frac{r_0^{\alpha+1}(\tau_0)}{\alpha+1} - A \int_0^t \exp(-E_1/RT(\tilde{t}))(c_A^*(c_{\text{СК}}, T) - c_A(\tilde{t})) d\tilde{t},$$

где

$$W_1(r, c_{\text{СК}}, c_A, T) = -A \int_0^t \exp(-E_1/RT(\tilde{t}))(c_A^*(c_{\text{СК}}(\tilde{t}), T(\tilde{t})) - c_A(\tilde{t})) d\tilde{t}.$$

Учитывая, что $\tau - \tau_0 = t - t_0$, получим $\tau_0 = \tau - t + t_0$ и

$$\frac{r^{(\alpha+1)}(\tau, t)}{\alpha+1} = \frac{r_0^{\alpha+1}(\tau - t)}{\alpha+1} - A \int_0^t \exp(-E_1/RT(\tilde{t}))(c_A^*(c_{\text{СК}}(\tilde{t}), T(\tilde{t})) - c_A(\tilde{t})) d\tilde{t}.$$

Плотность распределения массы частиц в каждый момент времени описывается дифференциальными уравнениями, получаемыми из материального баланса для фракции частиц:

$$\frac{\partial \hat{\psi}(r, t)}{\partial t} = \frac{\partial [\hat{\psi} W_1]}{\partial r} + n^{(0)} \hat{\psi}^{(0)}(r, t) - \hat{\psi}(r, t) / \theta(t), \quad (3.21)$$

где $\theta(t)$ – среднее время пребывания частиц в модуле-реакторе.

Решение уравнения (3.21) при тех же начальных условиях (3.20) будет следующим:

$$\hat{\psi}(r, t) = \exp[F(0, t, r, c_{CK}, c_A, T)] \{\Psi_0[\varphi(0, t, r, c_{CK}, c_A, T)]\} + \\ + \int_0^t \hat{G}_s^{(0)}[\varphi(\tilde{t}, t, r, c_{CK}, c_A, T), \tilde{t}] \exp[F(0, \tilde{t}, r, c_{CK}, c_A, T), c_{CK}, T] d\tilde{t}, \quad (3.22)$$

где

$$F(0, t, r, c_{CK}, c_A, T) = \int_0^t \{W_{1r}[\varphi(\tilde{t}, t, r, c_{CK}, c_A, T), c_{CK}, c_A, T] + 1/\theta(\tilde{t})\} d\tilde{t}, \\ W_{1r} = dW_1/dr = \alpha A r^{-(\alpha+1)} \exp(-E_1/RT)(c_A^*(c_{CK}, T) - c_A).$$

Подставляя зависимости (3.22) в уравнения покомпонентного материального и теплового балансов, получим

$$\dot{c}_A = \int_0^{r_{\max}} \hat{\psi}(r, t) W_1(r, c_{CK}, c_A, T) dr / V + c_A^{(0)} G_i^{(0)} / V - W_2(c_A, c_{AK}, T) - c_A G_l; \\ c_A(0) = c_{A0}; \quad (3.23)$$

$$\dot{c}_{AK} = c_{AK}^{(0)} G_l^{(0)} / V + c_N^{(0)} G_N^{(0)} / V - (W_2(c_A, c_{AK}, T) + \\ + W_3(c_{AK}, T) + W_4(c_A, c_D, T) - c_{AK} G_l / V); \\ c_{AK}(0) = c_{AK0}; \quad (3.24)$$

$$\dot{c}_{CK} = c_{CK}^{(0)} G_l^{(0)} / V - c_N^{(0)} G_N^{(0)} / V - W_2(c_A, c_{AK}, T) - c_{CK} G_l / V; \\ c_{CK}(0) = c_{CK0}; \quad (3.25)$$

$$\dot{c}_D = c_D^{(0)} G_l^{(0)} / V + (W_2(c_A, c_{AK}, T) - W_4(c_{AK}, c_D, T) - W_5(c_D, T)) - c_D G_l / V; \\ c_D(0) = c_{D0}; \quad (3.26)$$

$$\dot{c}_\chi = c_\chi^{(0)} G_l^{(0)} / V + W_4(c_{AK}, c_D, T) + W_5(c_D, T) - c_\chi G_l / V; \\ c_\chi(0) = c_{\chi0}; \quad (3.27)$$

$$\dot{T} = G_l^{(0)} T^{(0)} / V + c_v^N G_N^{(0)} T_N^{(0)} / c_v V - G_l T / V + \\ + \frac{W_2(c_A, c_{AK}, T) h_2}{c_v V} + \frac{W_3(c_{AK}, T) h_3}{c_v V} - KF(T - T_x) / c_v V; \quad T(0) = T_0; \quad (3.28)$$

$$\dot{T}_x = G_x^{(0)} T_x^{(0)} / V_p - G_x T_x / V_p + KF(T - T_x) / c_v^x V_p; \\ T_x(0) = T_{x0}. \quad (3.29)$$

Система нелинейных дифференциальных уравнений (3.22) – (3.29) представляет собой математическую модель динамики процесса диазотирования, осуществляемого в камере смешения, которую мы будем использовать в дальнейшем для получения линеаризованных описаний динамики в окрестности номинального статического режима и проверки их адекватности в различных диапазонах изменения возмущающих воздействий.

Линеаризуем уравнения (3.23) – (3.29) в окрестности номинального установившегося режима, обозначаемого *, и получим

$$\dot{x} = Fx + Gu, \quad (3.30)$$

где $x^T = \{\Delta\psi, \Delta\bar{c}, \Delta T, \Delta T_x\}$, $u^T = \{\Delta G_l^{(0)}, \Delta G_N^{(0)}, \Delta G_x^{(0)}\}$.

Векторы с компонентами $\Delta c, \Delta T, \Delta T_x, \Delta G_l^{(0)}, \Delta G_N^{(0)}, \Delta G_x^{(0)}$ обозначают отклонения от стационарных значений, т.е. $\Delta c_i = c_i - c_i^*$, $\Delta T = T - T^*$, $\Delta T_x = T_x - T_x^*$, $\Delta G_l^{(0)} = G_l^{(0)} - G_l^{(0)*}$, $\Delta G_N^{(0)} = G_N^{(0)} - G_N^{(0)*}$, $\Delta G_x = G_x^{(0)} - G_x^{(0)*}$.

Элементы матриц F, G системы дифференциальных уравнений (3.30) имеет следующий вид:

$$f_{11} = \int_0^{r_{\max}} W_1(r, c_{CK}^*, c_A^*, T^*) dr / V; \\ f_{12} = -G_l^{(0)*} / V - G_N^{(0)*} / V + \int_0^{r_{\max}} \hat{\psi}^*(r, t) \frac{\partial W_1}{\partial c_A}(r, c_{CK}^*, c_A^*, T^*) dr / V - k_2(T^*) c_{AK}^*; \\ f_{13} = -k_2(T^*) c_A^*; \\ f_{14} = \int_0^{r_{\max}} \hat{\psi}^* \frac{\partial W_1}{\partial c_{CK}}(r, c_{CK}^*, c_A^*, T^*) dr / V; \quad f_{15} = 0; \quad f_{16} = 0; \\ f_{17} = \int_0^{r_{\max}} \hat{\psi}^* \frac{\partial W_1}{\partial T}(r, c_{CK}^*, c_A^*, T^*) dr / V - \frac{\partial k_2(T^*)}{\partial T} c_A^* c_{AK}^*; \\ f_{18} = 0; \quad f_{21} = 0; \quad f_{22} = k_2(T) c_{AK};$$

$$f_{23} = -G_l^{(0)} / V - G_N^{(0)} / V - k_2(T^*)c_{AK}^* - 4k_3(T^*)c_{AK}^{*3} - k_4(T^*)c_D^*;$$

$$f_{24} = 0; f_{25} = -k_4(T)c_{AK}^*; f_{26} = 0;$$

$$f_{27} = -\frac{\partial k_2(T^*)}{\partial T}c_A^*c_{AK}^* - \frac{\partial k_3(T^*)}{\partial T}c_{AK}^{*4} - \frac{\partial k_4(T^*)}{\partial T}c_{AK}^*c_D^*;$$

$$f_{28} = 0; f_{31} = 0; f_{32} = -k_2(T^*)c_{AK}^*;$$

$$f_{33} = -k_2(T^*)c_{AK}^* - G_l^{(0)*} / V - G_N^{(0)*} / V;$$

$$f_{34} = f_{35} = f_{36} = 0; f_{37} = -\frac{\partial k_2(T^*)}{\partial T}c_A^*c_{AK}^*;$$

$$f_{38} = f_{41} = 0; f_{42} = k_2(T^*)c_{AK}^*; f_{43} = k_2(T^*)c_A^* - k_4(T^*)c_D^*; f_{44} = 0;$$

$$f_{45} = G_l^{(0)*} / V - k_4(T^*)c_{AK}^* - k_5(T^*); f_{46} = 0;$$

$$f_{47} = -\frac{\partial k_2(T^*)}{\partial T}c_A^*c_{AK}^* - \frac{\partial k_4(T^*)}{\partial T}c_{AK}^*c_D^* - \frac{\partial k_5(T^*)}{\partial T}c_D^*;$$

$$f_{48} = f_{51} = f_{52} = 0; f_{53} = -k_4(T^*)c_D^*; f_{54} = 0;$$

$$f_{55} = k_4(T^*)c_{AK}^* + k_5(T^*); f_{56} = -G_l^{(0)*} / V - G_N^{(0)*} / V;$$

$$f_{57} = -\frac{\partial k_4(T^*)}{\partial T}c_{AK}^*c_D^* + \frac{\partial k_5(T^*)}{\partial T}c_D^*; f_{58} = 0;$$

$$f_{61} = 0; f_{62} = k_2(T^*)c_{AK}^*h_2 / c_vV; f_{63} = k_2(T^*)c_A^*h_2 / c_vV;$$

$$f_{64} = f_{65} = f_{66} = 0;$$

$$f_{67} = -G_l^{(0)} / V - G_N^{(0)} / V + \frac{\partial k_2(T^*)}{\partial T}c_A^*c_{AK}^*h_2 / c_vV - KF / c_vV;$$

$$f_{68} = KF / 2c_vV; f_{71} = f_{72} = f_{73} = f_{74} = f_{75} = f_{76} = 0;$$

$$f_{77} = KF / c_v^xV_p; f_{78} = -G_x^{(0)} / V_p - KF / 2c_v^xV_p;$$

$$g_{11} = (c_A^{(0)*} - c_A^*) / V; g_{12} = -c_A^* / V; g_{13} = 0;$$

$$g_{21} = (c_{AK}^{(0)*} - c_{AK}^*) / V; g_{22} = (c_N^{(0)*} - c_{AK}^*) / V; g_{23} = 0;$$

$$\begin{aligned}
g_{31} &= (c_{CK}^{(0)*} - c_{CK}^*)/V; & g_{32} &= -c_{CK}^*/V; & g_{33} &= 0; \\
g_{41} &= (c_D^{(0)*} - c_D^*)/V; & g_{42} &= -c_D^*/V; & g_{43} &= 0; \\
g_{51} &= (c_{\chi}^{(0)*} - c_{\chi}^*)/V; & g_{52} &= -c_{\chi}^*/V; & g_{53} &= 0; \\
g_{61} &= (T^{(0)*} - T^*)/V; & g_{62} &= -c_v^N T_N^{(0)*} / c_v V - T^* / V; \\
g_{63} &= g_{71} = g_{72} = 0; & g_{73} &= (T_x^{(0)*} - T_x^*)/V.
\end{aligned}$$

Линеаризованные уравнения (3.30) будут использоваться далее при выборе структуры системы управления с использованием ранговых критериев управляемости и наблюдаемости ХТС.

3.1.2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И ПРОВЕРКА АДЕКВАТНОСТИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

С целью разработки и исследования процессов тонкого органического синтеза в В НОЦ ТГТУ – ОАО «Корпорация «Росхимзащита» «Новые химические технологии» разработана автоматизированная пилотная установка с широким набором модулей-реакторов и управляемым коммутационным центром D , позволяющими оперативно перенастраивать аппаратно-технологическое оформление на осуществление требуемого технологического процесса. Принципиальная схема пилотной установки diaзотирования производительностью $Q = 1,084 \cdot 10^{-1}$ кг/ч (по сухому пигменту) приведена на рис. 3.6.

Установка включает аппараты 1, 2 для подготовки исходных реагентов (солянокислой суспензии амина и раствора нитрита натрия), устройство 3 активации суспензии амина (дезинтегратор УДА-99/3), насос 4 (перистальтического типа с регулируемой подачей суспензии амина), насосы-дозаторы 5 $_{1,2,3}$ (шприцевого типа), коммутационный центр 6, турбулентные трубчатые реакторы цилиндрического (7а), в вертикальном исполнении (7б) и комбинированного (7в) типов.

Микропроцессорная система управления пилотной установкой включает датчики и приборы для измерения температуры и рН среды в зоне реакции, прибор 8 (термометрический анализатор состава органических продуктов) для измерения концентрации азотистой кислоты в diaзорастворе.

Аппаратурное и приборное оформление пилотной установки изображены на рис. 3.7, 3.8, 3.9.

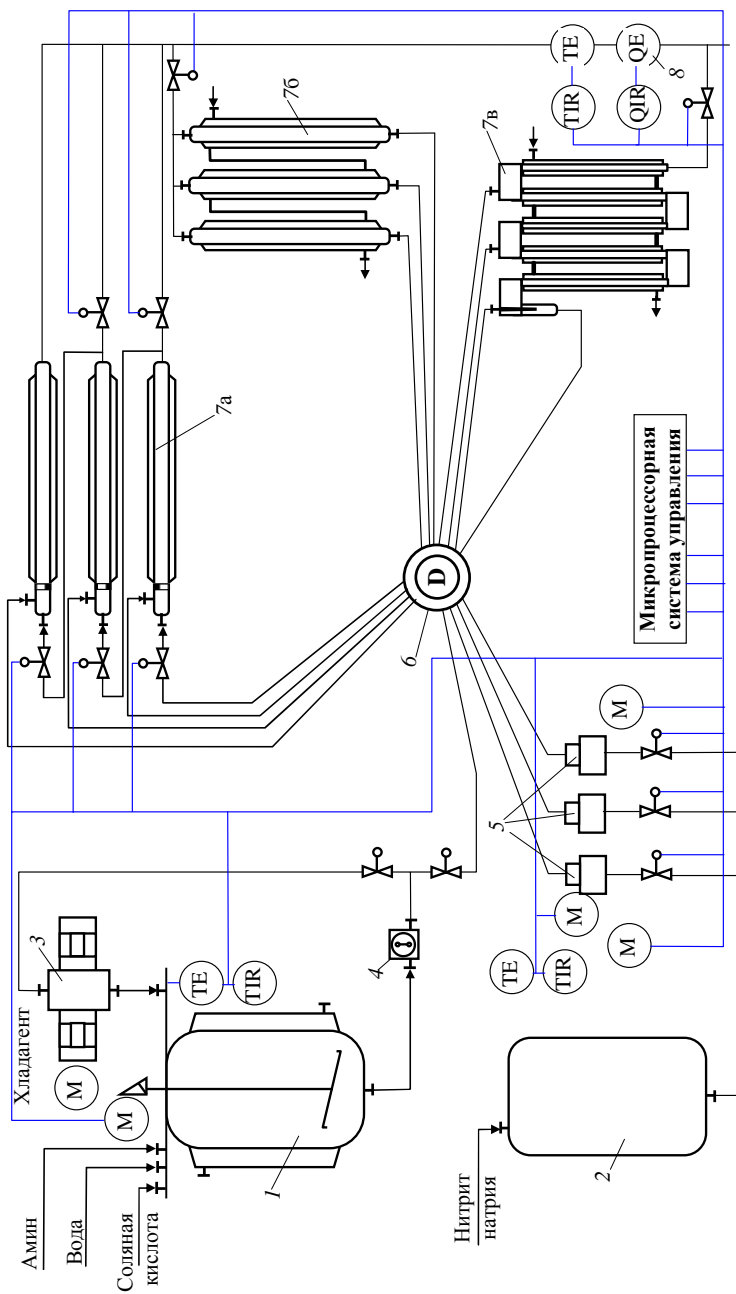


Рис. 3.6. Схема автоматизированной пилотной установки для осуществления непрерывного процесса диазотирования аминов

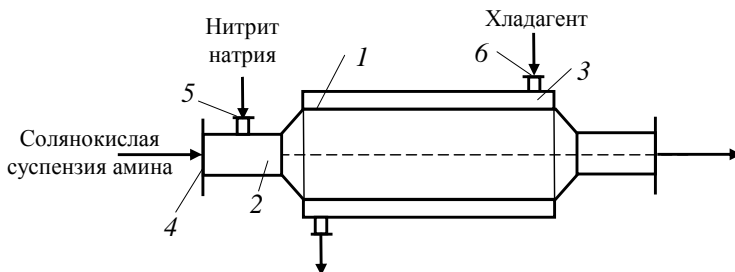


Рис. 3.7. Турбулентный реактор непрерывного действия
(в горизонтальном исполнении)

Трубчатый реактор на рис. 3.7 состоит из цилиндрических труб 1 (диаметром $d_{\text{тр}} = 0,025$ м и длиной $L_{\text{тр}} = 0,5$ м), устройства ввода реагентов 2 , теплообменной рубашки 3 и штуцеров ввода солянокислой суспензии амина 4 , водного раствора нитрита натрия 5 и хладагента 6 . В таких реакторах возможно формировать режим квазиидеального вытеснения в турбулентных потоках, когда в заданном интервале диаметров (d_{max} , d_{min}) формируется плоский фронт концентраций и температур. В этом случае имеет место эффективное смешение реагентов и равномерное распределение концентраций и температуры в зоне реакции по радиусу аппарата.

Трубчатый реактор на рис. 3.8 состоит из вертикальных труб 1 – 4 диаметром $d_{\text{тр}} = 0,025$ м и высотой $h_{\text{тр}} = 0,5$ м, последовательно соединенных переточными трубами ($d_{\text{п.тр}} = 0,005$ м, длиной $l_{\text{п.тр}} = 0,6$ м), а также штуцеров 6 и 7 для подачи солянокислой суспензии амина и распределенной подачи диазотирующего агента. С целью турбулизации потока в трубчатой части на входе каждой вертикальной трубы установлена диффузор-конфузорная секция 5 . По рекомендациям работы [68] соотношение диаметров диффузорной и конфузорной частей составляет $d_L / d = 2$, а угол расширения диффузора $\alpha = 30^\circ$.

Трубчатый реактор комбинированного типа на рис. 3.9 состоит из вертикальных труб (диаметром $d_{\text{тр}} = 0,01$ м и высотой $h_{\text{тр}} = 0,5$ м), попарно соединенных камерами кинетического смешения 3 , 4 (диаметром $d_k = 0,03$ м и длиной $l_k = 0,5$ м), и тонких труб 6 для распределенной подачи и распыления диазотирующего агента в зоне реакции. При этом форсунки 5 закреплены на трубах таким образом, чтобы раствор диазотирующего агента подавался коаксиально навстречу основному потоку реакционной массы. Вход реакционной массы из вертикальной трубы в камеру смешения осуществляется тангенциально для обеспечения турбулизации и смешения потока реакционной массы.

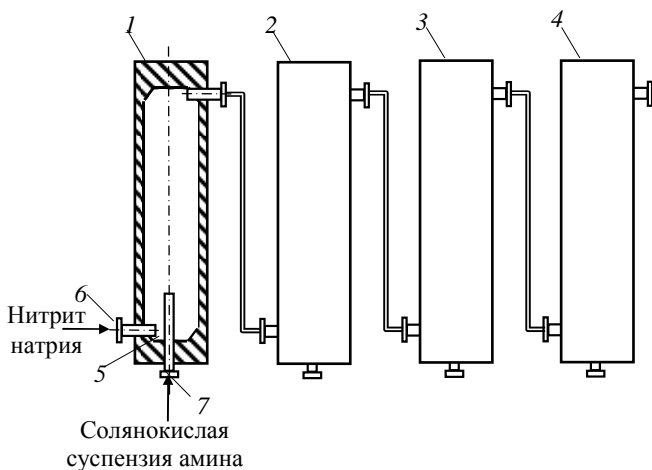


Рис. 3.8. Турбулентный реактор непрерывного действия
(в вертикальном исполнении)

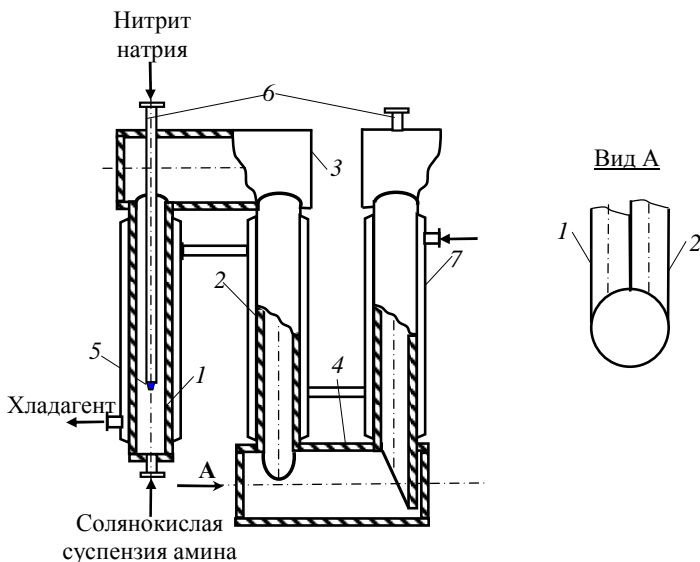


Рис. 3.9. Турбулентный реактор комбинированного типа

Исследование структуры потоков в трубчатых реакторах проводилось в работе [81], где было показано, что структура потоков в трубчатой части реакторов с приемлемой для практики точностью может

быть представлена моделью идеального вытеснения, а в камерах смешения – моделью идеального смешения. Гранулометрические составы суспензии амина и пигмента алого определяли методом электронной микроскопии, описанной в работе [60].

В этих работах показано, что гранулометрический состав суспензии амина с приемлемой для практики точностью описывается логарифмическим законом распределения:

$$\psi(r) = \sqrt{\frac{\sigma}{2\pi}} \exp\left(-\frac{\sigma}{2}(\ln r - \bar{r})^2 - \bar{r} - \frac{1}{2\sigma}\right),$$

где $\bar{r} = 1,4$; $\sigma = 3,38$ – параметры распределения (средний радиус и величина, обратная дисперсии распределения).

При проведении экспериментальных исследований процесса диазотирования ароматического амина – 3-нитро-4-аминотолуола нитритом натрия в среде соляной кислоты в качестве наблюдаемых (регулируемых) переменных состояния процесса были выбраны:

- концентрация азотистой кислоты c_{AK} в диазорастворе на выходе из реактора;
- содержание твердой фазы непрореагировавшего амина $[c_A]_S$ в диазорастворе;
- концентрация целевого продукта – 3-нитро-4-диазотолуола (диазосоединения).

Наличие в диазорастворе азотистой кислоты в пределах $7...14$ моль/м³ свидетельствует о полном протекании реакции диазотирования. Содержание твердой фазы амина в диазорастворе указывает на проскок твердой фазы амина в реакторе, что влечет за собой низкую степень превращения сырья, а это в свою очередь влияет на уровень ресурсосбережения производства. Наконец, концентрация диазосоединения позволяет оценить выход целевого продукта и эффективность функционирования реактора.

В качестве варьируемых факторов эксперимента были выбраны входные переменные, которыми мы можем управлять с помощью специальных исполнительных устройств в ходе эксперимента:

- расход солянокислой суспензии амина $G_I^{(0)}$;
- концентрация амина в суспензии $[c_A]_S^{(0)}$;
- температура реакционной смеси $T^{(0)}$;
- расход нитрита натрия $G_N^{(0)}$.

Этот выбор объясняется тем, что скорость растворения твердой фазы амина и скорость разложения диазосоединения в значительной степени зависят от температуры процесса и концентрации азотистой кислоты в реакционной смеси. В свою очередь расход суспензии амина определяют производительностью реактора.

Методика экспериментов заключалась в следующем. В аппарат 1 пилотной установки (рис. 3.6) загружали водную суспензию амина (3-нитро-4-аминотолуола), затем в раствор добавляли соляную кислоту и перемешивали суспензию в течение 20 минут. Концентрации 3-нитро-4-аминотолуола и соляной кислоты в суспензии определяли методом титрования.

При необходимости концентрации корректировали добавлением недостающего количества реагентов или разбавлением суспензии.

Пуск установки осуществлялся в автоматическом режиме одновременным включением насосов 4 и 5_{1,2,3}, дозирующих суспензию амина и нитрит натрия в реакторы диазотирования (7а, 7б, 7в) через коммутационный центр 6.

Выход на стационарный режим диазотирования осуществляли путем стабилизации азотистой кислоты в зоне реакции. После выхода на стационарный режим отбирали пробы диазораствора для определения содержания в нем диазосоединения и 3-нитро-4-аминотолуола. Методика последних анализов предусматривает применение метода бумажной хроматографии, разработанного в ГНЦ «НИОПИК» (г. Москва).

Измерение переменных состояния процесса диазотирования в статике проводим несколько раз (5 – 7) с целью определения погрешности измерений. Фрагменты результатов экспериментальных исследований процесса диазотирования, осуществляемого в различных типах трубчатых реакторов, и соответствующие им результаты расчетов по математическим моделям статике приведены в табл. 3.2 – 3.4.

Для проверки адекватности математических моделей использовали критерий Бартлета, формулировали нуль-гипотезу о принадлежности дисперсий адекватности и воспроизводимости к одной генеральной совокупности. Полученные в соответствии с данными табл. 3.1 значения критерия Бартлета для переменных $[c_A]_S$ и c_D соответственно равны $B_{[c_A]_S} = 11,8$, $B_{c_D} = 6,51$. Оба этих значения не превосходят табличного значения $\chi_{0,95}^2 = 12,6$ для числа степеней свободы $(n - 1) = 6$ и уровня значимости 0,05. Следовательно, дисперсии адекватности и воспроизводимости можно считать однородными, а модель процесса диазотирования, осуществляемого в трубчатом реакторе цилиндрического типа, – адекватной.

3.2. Экспериментальные и расчетные (по модели статике) значения переменных состояния процесса диазотирования, осуществляемого в трубчатом реакторе (цилиндрического типа) пилотной установки

№ п/п	Факторы эксперимента				Переменные состояния процесса в статике								
	$G_I^{(0)} \cdot 10^6$, м ³ /с	$[c_A]_S^{(0)}$, моль/м ³	$T^{(0)}$, °C	$c_N G_N^{(0)} \cdot 10^4$, моль/с	экспериментальные				расчетные				
					c_{AK} , моль/м ³	$[c_A]_S$, моль/м ³	c_D , моль/м ³	c_{AK} , моль/м ³	$[c_A]_S$, моль/м ³	c_D , моль/м ³			
1	1,8	230,3	18,0	4,1	18,8	17,6	222,5	20,8	15,8	201,4			
2	—	—	—	—	19,2	19,2	196,4	—	—	—			
3	—	—	—	—	20,3	16,8	200,8	—	—	—			
4	1,8	300,4	21,0	5,5	10,8	9,5	295,6	9,4	5,6	270,3			
5	—	—	—	—	11,2	7,8	298,8	—	—	—			
6	—	—	—	—	9,5	8,6	287,7	—	—	—			
7	2,8	310,2	20,0	9,0	15,3	5,8	292,1	16,6	9,5	272,7			
8	—	—	—	—	16,2	7,8	288,6	—	—	—			
9	—	—	—	—	15,8	6,3	394,2	—	—	—			
10	2,8	300,8	30,0	8,5	1,8	1,2	289,3	3,2	1,5	267,6			
11	—	—	—	—	1,4	1,7	278,5	—	—	—			
12	—	—	—	—	0,6	5,2	282,8	—	—	—			
13	1,9	520,4	20,0	9,8	7,0	6,3	455,7	6,4	7,2	442,8			
14	—	—	—	—	6,3	8,7	471,2	—	—	—			
15	—	—	—	—	6,7	7,1	463,3	—	—	—			
16	1,6	280,5	16,0	4,8	16,8	13,2	271,0	17,3	12,8	243,6			
17	—	—	—	—	17,5	19,7	256,0	—	—	—			
18	—	—	—	—	18,2	11,8	262,0	—	—	—			

3.3. Экспериментальные и расчетные (по модели статике) значения переменных состояния процесса диазотирования, осуществляемого в трубчатом реакторе (с вертикальными трубами) пилотной установки

№ п/п	Факторы эксперимента				Переменные состояния процесса в статике					
	$G_t^{(0)} \cdot 10^6,$ м ³ /с	$[c_A]_S^{(0)},$ моль/м ³	$T^{(0)},$ °С	$c_N G_N^{(0)} \cdot 10^4,$ моль/с	экспериментальные			расчетные		
					$c_{AK},$ моль/м ³	$[c_A]_S,$ моль/м ³	$c_D,$ моль/м ³	$c_{AK},$ моль/м ³	$[c_A]_S,$ моль/м ³	$c_D,$ моль/м ³
1	1,8	224,2	18,0	4,2	16,7	17,3	199,7	18,6	16,2	193,4
2	—	—	—	—	15,4	16,8	188,4	—	—	—
3	—	—	—	—	17,3	15,6	205,3	—	—	—
4	1,7	298,4	20,5	5,2	9,8	7,6	276,2	7,8	6,7	261,5
5	—	—	—	—	8,4	8,3	265,8	—	—	—
6	—	—	—	—	7,2	7,2	258,2	—	—	—
7	2,5	320,1	21,0	8,0	6,7	6,3	298,4	5,8	5,2	281,2
8	—	—	—	—	4,9	4,8	288,9	—	—	—
9	—	—	—	—	5,7	5,4	276,6	—	—	—
10	2,7	306,5	30,5	8,8	0,9	2,1	293,1	3,4	1,8	272,2
11	—	—	—	—	1,1	3,3	280,7	—	—	—
12	—	—	—	—	1,6	2,8	279,5	—	—	—
13	2,2	500,8	22,0	10,2	6,6	3,9	495,2	6,2	3,5	489,8
14	—	—	—	—	5,7	2,7	499,7	—	—	—
15	—	—	—	—	7,4	5,1	488,5	—	—	—
16	1,5	283,2	16,7	4,5	14,8	18,2	282,0	16,3	18,8	244,3
17	—	—	—	—	15,5	19,5	279,4	—	—	—
18	—	—	—	—	16,7	17,8	281,1	—	—	—

3.4. Экспериментальные и расчетные (по модели статике) значения переменных состояния процесса диазотирования, осуществляемого в трубчатом реакторе (комбинированного типа) пилотной установки

№ п/п	Факторы эксперимента				Переменные состояния процесса в статике								
	$G_l^{(0)} \cdot 10^6$, м ³ /с	$[c_A]_S^{(0)}$, моль/м ³	$T^{(0)}$, °C	$c_N G_N^{(0)} \cdot 10^4$, моль/с	экспериментальные				расчетные				
					c_{AK} , моль/м ³	$[c_A]_S$, моль/м ³	c_D , моль/м ³	c_{AK} , моль/м ³	$[c_A]_S$, моль/м ³	c_D , моль/м ³			
1	1,72	226,6	20,0	4,0	15,2	9,3	211,3	16,8	10,6	203,5	—	—	—
2	—	—	—	—	16,6	13,3	199,4	—	—	—	—	—	—
3	—	—	—	—	17,8	16,4	213,6	—	—	—	—	—	—
4	1,85	301,2	22,0	5,3	7,1	4,3	285,8	8,2	4,7	268,7	—	—	—
5	—	—	—	—	9,3	5,8	277,4	—	—	—	—	—	—
6	—	—	—	—	10,4	6,6	269,5	—	—	—	—	—	—
7	2,75	315,7	20,8	8,5	6,8	5,5	294,3	6,3	5,1	281,5	—	—	—
8	—	—	—	—	7,9	6,9	290,9	—	—	—	—	—	—
9	—	—	—	—	6,1	4,2	278,1	—	—	—	—	—	—
10	2,6	302,5	29,4	8,3	5,5	2,6	300,4	3,8	2,2	265,4	—	—	—
11	—	—	—	—	4,1	1,9	305,2	—	—	—	—	—	—
12	—	—	—	—	3,7	3,2	298,8	—	—	—	—	—	—
13	2,0	508,6	21,2	10,6	7,4	5,6	497,3	6,5	4,8	478,5	—	—	—
14	—	—	—	—	5,5	3,2	490,6	—	—	—	—	—	—
15	—	—	—	—	8,3	6,4	477,4	—	—	—	—	—	—
16	1,6	288,2	17,2	4,5	15,5	17,8	272,1	15,8	15,3	254,2	—	—	—
17	—	—	—	—	16,8	18,5	268,8	—	—	—	—	—	—
18	—	—	—	—	14,3	14,4	267,7	—	—	—	—	—	—

3.5. Экспериментальные и расчетные (по модели статики) значения переменных состояния процесса диазогирования, осуществляемого в трубчатом реакторе (комбинированного типа) опытно-промышленной установки

№ п/п	Факторы эксперимента				Переменные состояния процесса в статике					
	$G_l^{(0)} \cdot 10^6$, м ³ /с	$[c_{A,LS}]^{(0)}$, моль/м ³	$T^{(0)}$, °C	$c_N G_N^{(0)} \cdot 10^4$, моль/с	экспериментальные			расчетные		
					c_{AK} , моль/м ³	$[c_{A,LS}]$, моль/м ³	c_D , моль/м ³	c_{AK} , моль/м ³	$[c_{A,LS}]$, моль/м ³	c_D , моль/м ³
1	2,2	303,0	16,0	6,7	6,5	11,2	268,0	6,3	10,4	261,0
2	1,9	263,0	10,0	5,1	7,3	12,1	220,0	7,8	11,3	232,0
3	2,6	287,0	17,0	7,5	3,8	11,3	245,0	3,6	12,3	249,0
4	2,8	302,0	14,0	8,4	5,1	17,8	256,0	4,5	17,6	255,0
5	1,6	316,0	15,0	5,1	5,8	7,4	273,0	6,7	7,9	280,0
6	1,3	274,0	15,0	3,7	5,2	7,2	255,0	5,8	7,5	248,0
7	2,3	505,0	8,0	11,6	14,6	20,3	432,0	13,2	19,6	427,0
8	2,5	521,0	6,0	12,9	15,1	21,4	456,0	14,4	23,2	439,0
9	2,1	703,0	11,0	14,8	2,8	33,5	584,0	3,3	15,5	573,0
10	2,0	268,0	13,0	5,3	7,6	8,1	238,0	8,0	7,5	235,0

Аналогичным образом производилась проверка адекватности математических моделей для трубчатых реакторов с вертикальными трубами и комбинированного типа, в результате которой было установлено, что построенные математические модели могут быть использованы для моделирования статических режимов и проектирования процесса диазотирования, осуществляемого в трубчатых реакторах.

Адекватность математической модели процесса диазотирования, осуществляемого в трубчатом реакторе комбинированного типа, была также проверена по опытным данным, полученным на опытно-промышленной установке в Тамбовском ОАО «Пигмент» производительностью 500 т пигмента/год. В таблице 3.5 приведены результаты эксперимента и расчета соответствующих технологических режимов по математической модели статики процесса диазотирования.

Анализ данных, представленных в табл. 3.5, показывает, что среднее квадратичное отклонение расчетных от экспериментальных данных не превышает 10%, что позволяет считать модель статики процесса диазотирования, осуществляемого в трубчатом реакторе комбинированного типа, адекватной процессу диазотирования, осуществляемому в опытно-промышленной реакторной установке.

Заметим, что в ряде экспериментов (1, 2, 5, 6, 10) суспензия амина содержала растворенные алюмокалиевые квасцы, использующиеся в качестве наполнителя при производстве пигмента алого лакокрасочного. Как следует из анализа данных табл. 3.5, присутствие квасцов не оказывает существенного влияния на скорость процесса диазотирования 3-нитро-4-аминотолуола.

В ходе описанных выше экспериментов на опытно-промышленной установке нами изучались переходные режимы процесса диазотирования для реактора комбинированного типа. Наблюдаемыми переменными являлись концентрация азотистой кислоты и pH диазораствора. На рисунке 3.10 приведены кривые изменения концентрации азотистой кислоты в реакторе и pH среды при выводе опытно-промышленной установки на стационарный режим. Нами также в ходе эксперимента снимались кривые разгона по каналам управления: «расход суспензии амина – концентрация азотистой кислоты в диазорастворе» (рис. 3.11), и «концентрация твердой фазы амина $[c_A]_S^{(0)}$ – концентрация диазосоединения c_D », « $[c_A]_S^{(0)} - [c_A]_S^{\text{ВЫХ}}$ », « $[c_A]_S^{(0)} - c_{\text{АК}}^{\text{ВЫХ}}$ » (рис. 3.12).

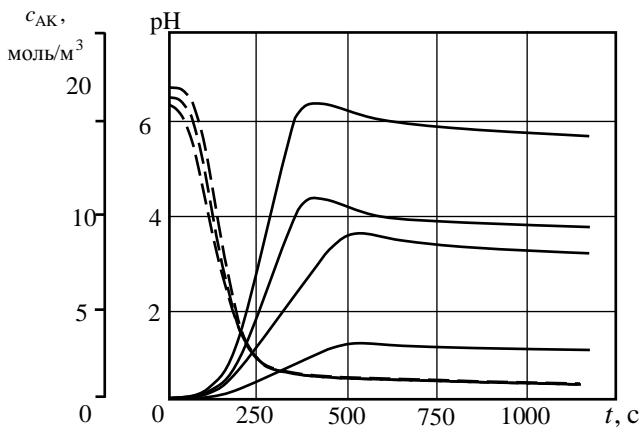


Рис. 3.10. Изменение параметров диазораствора при пуске опытно-промышленного реактора диазотирования:
(— — концентрация азотистой кислоты, - - - — величина pH раствора)

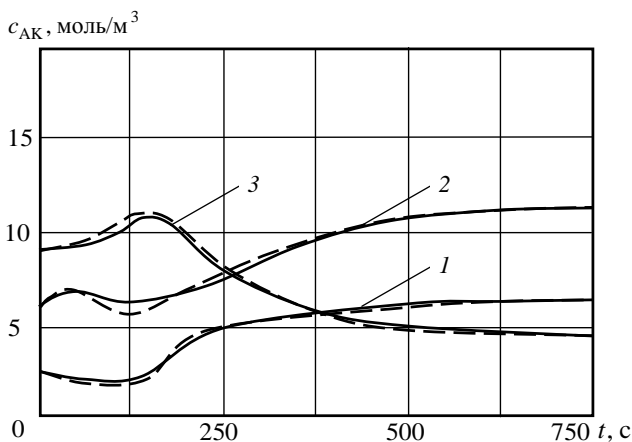


Рис. 3.11. Кривые разгона по каналу: «расход суспензии амина – концентрация азотистой кислоты на выходе реактора»:
1, 2 – уменьшение расхода суспензии на $5 \cdot 10^{-2} \text{ м}^3/\text{с}$; 3 – увеличение расхода на $5 \cdot 10^{-2} \text{ м}^3/\text{с}$ (— — эксперимент, - - - — расчет)

При имитации аналогичных динамических режимов с помощью математической модели динамики максимальное рассогласование по концентрации азотистой кислоты составило 15%, а по величине pH – 9,5%.

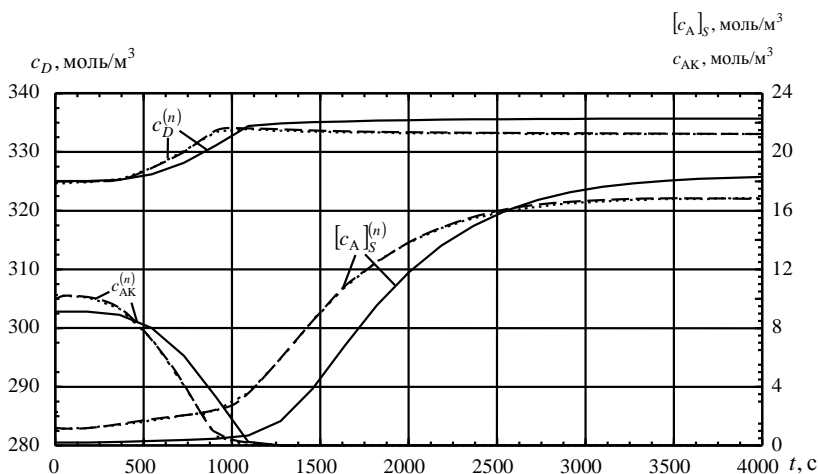


Рис. 3.12. Кривые разгона по каналам управления:

«концентрация твердой фазы амина $[c_A]_S^{(0)}$ –
концентрация диазосоединения c_D », « $[c_A]_S^{(0)} - [c_A]_S^{[вых]}$ », « $[c_A]_S^{(0)} - c_{AK}^{[вых]}$ »

Среднеквадратичная ошибка по указанным переменным составила 7,2% и 5,5% соответственно, что позволяет сделать вывод о возможности применения математической модели динамики для решения практических задач.

3.1.3. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕПРЕРЫВНОГО ПРОЦЕССА ДИАЗОТИРОВАНИЯ

Целью компьютерного моделирования является определение наиболее опасных возмущающих воздействий непрерывного процесса диазотирования и эффективных управляющих воздействий для различных режимов работы реакторной установки: 1) вычисление чувствительности выходных переменных процесса диазотирования по отношению к управляющим и возмущающим воздействиям; 2) исследование областей допустимых режимов функционирования реактора в пространстве управляющих воздействий, на основании которого даются рекомендации по выбору целевых функций оптимизации и интегрированного проектирования.

Компьютерное моделирование статических характеристик непрерывного процесса диазотирования проводили в пилотной установке с различными типами трубчатых реакторов: 4-модульным трубчатым реактором с вертикальными трубами (размер модуля трубы

$d_{\text{тр}} = 0,025$ м, $h_{\text{тр}} = 0,5$ м) и 16-модульным трубчатым реактором комбинированного типа (размеры модуля «труба-камера смешения» $d_{\text{тр}} = 0,01$ м, $h_{\text{тр}} = 0,5$ м, $d_k = 0,03$ м, $l_k = 0,06$ м).

В качестве номинального статического режима задавали:

$$\left[\tilde{c}_A^{(0)} \right]_S = 423 \text{ моль/м}^3; \quad \tilde{T}^{(0)} = 287,4 \text{ К}; \quad \tilde{c}_N^{(0)} = 1430 \text{ моль/м}^3;$$

$$\tilde{c}_{\text{СК}}^{(0)} = 1058 \text{ моль/м}^3; \quad \tilde{G}_I^{(0)} = 6,92 \cdot 10^{-7} \text{ м}^3/\text{с}; \quad \tilde{G}_N^{(0)} = 2,11 \cdot 10^{-7} \text{ м}^3/\text{с};$$

$$\tilde{\Psi}^{(0)}(r^{(0)}) = \sqrt{\frac{\sigma}{2\pi}} \exp\left(-\frac{\sigma_0}{2}(\ln r - \bar{r}_0)^2 - \bar{r}_0 - \frac{1}{2\sigma_0}\right);$$

$$\bar{r}_0 = 1,24, \quad \sigma_0 = 3,38; \quad \tilde{G}_N^{(0)}(1) / \tilde{G}_N^{(0)} = 0,7;$$

$$\tilde{G}_N^{(0)}(2) / \tilde{G}_N^{(0)} = 0,2; \quad \tilde{G}_N^{(0)}(3) / \tilde{G}_N^{(0)} = 0,1.$$

Определение диапазона целесообразных изменений входных независимых переменных математической модели (3.7) – (3.14) (при $\frac{\partial c}{\partial t} = 0$; $\frac{\partial T}{\partial t} = 0$; $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = 0$) проводили на основании расчета статических характеристик для ряда дискретных значений концентрации $\left[c_A^{(0)} \right]_S$ и среднего размера частиц \bar{r}_0 твердой фазы амина в питании реактора. Одновременно рассчитывали чувствительность основных выходных переменных – концентраций $c_{\text{АК}}^{\text{ВЫХ}}$, $\left[c_A \right]_S^{\text{ВЫХ}}$, $\left[c_D \right]^{\text{ВЫХ}}$, $\left[c_\chi \right]^{\text{ВЫХ}}$, $\left[c_\sigma \right]^{\text{ВЫХ}}$ по отношению к независимым входным переменным.

Эффективность функционирования реактора в статических режимах оценивали значениями выхода K диазосоединения, «проскока» Π_η твердой фазы амина, содержания диазосмол Π_χ и нитрозных газов Π_σ в диазорастворе, а также принадлежностью концентрации азотистой кислоты $c_{\text{АК}}$ в реакторе допустимому диапазону 7...14 моль/м³ (0,2...0,5 г/л).

В таблице 3.6 приведены значения функций чувствительности λ_{ij} переменных состояния трубчатого реактора с вертикальными трубами по отношению к входным независимым переменным (управляющим и возмущающим воздействиям, конструктивным параметрам), рассчитанным при номинальном статическом режиме.

3.6. Значения функций чувствительности λ_{ij}

Переменные состояния РСД	$i \backslash j$		c_{AK}	c_D	$[c_A]_S$	c_X^1	c_X^2	c_σ
$[c_A]_S^{(0)}$ $G_I^{(0)}$ $G_N^{(0)}$ $c_N^{(0)}$ $T^{(0)}$ $c_{CK}^{(0)}$ \bar{r}_0 σ_0 τ	1	2	3	4	5	6		
	1	$6,9 \cdot 10^{-1}$	$1,2 \cdot 10^{-2}$	$-1,2 \cdot 10^{-2}$	$2,6 \cdot 10^{-2}$	$-1,7 \cdot 10^{-3}$		
	2	$7,4 \cdot 10^7$	$6,8 \cdot 10^6$	$-1,2 \cdot 10^7$	$1,1 \cdot 10^7$	$-1,2 \cdot 10^7$		
	3	$1,3 \cdot 10^9$	$-2,9 \cdot 10^8$	$-5,7 \cdot 10^7$	$5,6 \cdot 10^7$	$4,7 \cdot 10^7$	$3,8 \cdot 10^7$	
	4	$1,9 \cdot 10^{-1}$	$-9,8 \cdot 10^{-3}$	$-8,6 \cdot 10^{-3}$	$8,6 \cdot 10^{-3}$	$7,7 \cdot 10^{-3}$	$6,5 \cdot 10^{-3}$	
	5	$-2,4 \cdot 10^{-1}$	$-6,6 \cdot 10^{-2}$	$-9,8 \cdot 10^{-2}$	$4,0 \cdot 10^{-2}$	$0,2 \cdot 10^{-2}$	$-8,0$	
	6	$-3,1$	$-1,5 \cdot 10^{-2}$	$-8,8 \cdot 10^{-2}$	$2,3 \cdot 10^{-2}$	$0,2$	$0,2$	
	7	$-8,11$	$-3,57$	$-2,8$	$1,8$	$7,7$	$0,5$	
	8	$-3,9$	$0,55$	$-2,0$	$0,4$	$2,9$	$-0,2$	
9	$-1,0$	$-6,4 \cdot 10^{-4}$	$-4,4 \cdot 10^{-3}$	$1,4 \cdot 10^{-3}$	$8,0 \cdot 10^{-3}$	$-1,4 \cdot 10^{-4}$		

Значения функции чувствительности λ_{ij} рассчитывали по формуле конечной разности

$$\lambda_{ij} = \frac{\left[y_i(x_1, x_2, \dots, x_j + \Delta x_j, \dots, x_M) - y_i(x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_M) \right]}{\Delta x_j},$$

где $x_j, j = \overline{1, m}$ – входные переменные ХТП; $y_i, i = \overline{1, n}$ – выходные переменные ХТП. Величины Δx_j подбираются эмпирическим путем, например, из условия незначительного влияния двукратных изменений Δx_j на величину функции чувствительности.

Анализ данных табл. 3.6 показывает, что наибольшее влияние на выход K_D диазосоединения и другие показатели эффективности функционирования реактора в статике оказывают концентрация амина $c_A^{(0)}$, расходы $G_I^{(0)}$ и $G_N^{(0)}$, температура $T^{(0)}$ в питании реактора, а также параметры гранулометрического состава твердой фазы амиина – \bar{r}_0 и σ_0 . При этом наиболее опасными возмущениями следует считать – $\left[c_A^{(0)} \right]_S, \bar{r}_0$ и σ_0 , а в качестве управляющих воздействий целесообразно выбирать $G_I^{(0)}$ или $G_N^{(0)}, T^{(0)}$ и распределение подачи нитрата натрия по модулям реактора $G_N^{(i)}, i = 1, 2, \dots$.

Более полный анализ возмущающих и управляющих воздействий можно сделать на основании исследования статических характеристик процесса диазотирования. Однако при этом необходимо определить диапазон допустимых управляющих воздействий, при выходе из которого нарушаются технологические ограничения. Предельные значения управляющих переменных и ограничивающие факторы (ОФ) (предельно допустимые значения технологических ограничений) приведены в табл. 3.7.

На рисунках 3.13 – 3.17 изображены статические характеристики процесса диазотирования, осуществляемого в турбулентном трубчатом реакторе с вертикальными трубами, при изменении входных переменных (возмущающих и управляющих воздействий) в заданных пределах (табл. 3.10). Из рисунка 3.13 видно, что при изменении $\left[c_A^{(0)} \right]_S$ от 400 до 425 моль/м³ выход диазосоединения меняется незначительно и лишь при $\left[c_A^{(0)} \right]_S \geq 425$ моль/м³ наблюдается резкое снижение выхода диазосоединения. Снижение выхода можно объяснить недостатком диазотирующего агента в зоне реакции.

3.7. Предельные значения управляющих воздействий

Управляющие воздействия	Возмущающие воздействия					
	$c_A^{(0)}$	J_S	моль/м ³	\bar{r}_0	\bar{r}_0	\bar{r}_0
401,85	423,00	444,15	0,693	1,240	1,946	
1	2	3	4	5	6	7
$G_l^{(0)min} \cdot 10^7, \text{ м}^3/\text{с}/\text{ОФ}^*$	6,5/Q	5,8/Q	5,8/Q	6,5/Q	6,4/Q	
$G_l^{(0)max} \cdot 10^7, \text{ м}^3/\text{с}/\text{ОФ}^*$	12/П _η	11/П _η	10,5/П _η	15/П _η	11/П _η	6,5/П _η
$T^{(0)min}, \text{ К}/\text{ОФ}$	278/П _η	280/П _η	292/П _η	275/П _η	280/П _η	285/П _η
$T^{(0)max}, \text{ К}/\text{ОФ}$	288/П _χ	290/П _χ	293/П _χ	290/П _χ	290/П _χ	290/П _χ
$G_N^{min(1)} / G_N^{(0)}, \%$ / ОФ	30/-	30/-	30/-	30/-	30/-	30/-
$G_N^{max(1)} / G_N^{(0)}, \%$ / ОФ	73/П _σ	73/П _σ	73/П _σ	78/П _σ	73/П _σ	70/П _σ
$\tau^{min}, \text{ с}/\text{ОФ}$	750/П _η	900/П _η	1300/П _η	600/П _η	900/П _η	1300/П _η
$\tau^{max}, \text{ с}/\text{ОФ}$	1800/П _η	1800/П _η	1800/П _η	1800/П _η	1800/П _η	1800/П _η
$G_N^{(0)min} \cdot 10^7, \text{ м}^3/\text{с}/\text{ОФ}^*$	2,11/Q	2,0/Q	2,0/Q	2,0/Q	2,0/Q	-
$G_N^{(0)max} \cdot 10^7, \text{ м}^3/\text{с}/\text{ОФ}^*$	2,35/П _η	3,4/П _η	3,4/П _η	3,4/П _η	4,7/П _η	-

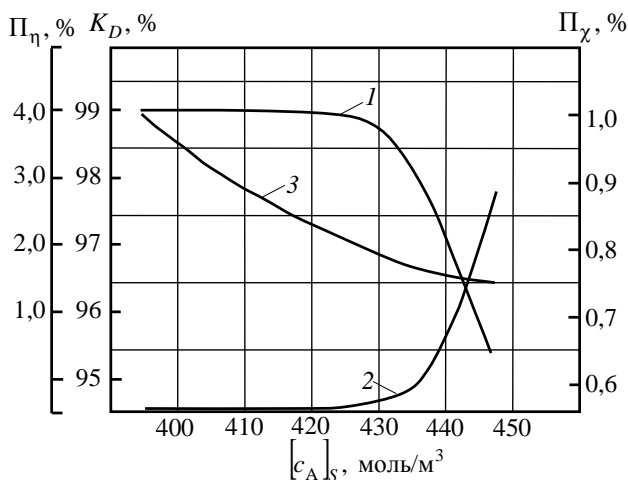


Рис. 3.13. Статические характеристики $y = f([c_A]_S)$:
 1 - $K_D([c_A]_S)$; 2 - $\Pi_\eta([c_A]_S)$; 3 - $\Pi_\chi([c_A]_S)$

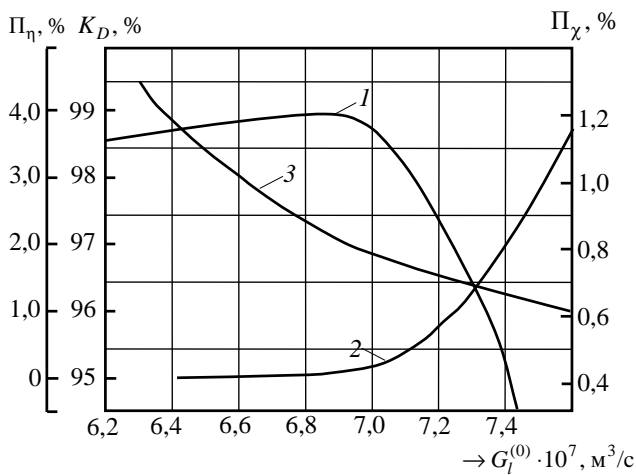


Рис. 3.14. Статические характеристики $y = f(G_i^{(0)})$:
 1 - $K_D(G_i^{(0)})$; 2 - $\Pi_\eta(G_i^{(0)})$; 3 - $\Pi_\chi(G_i^{(0)})$

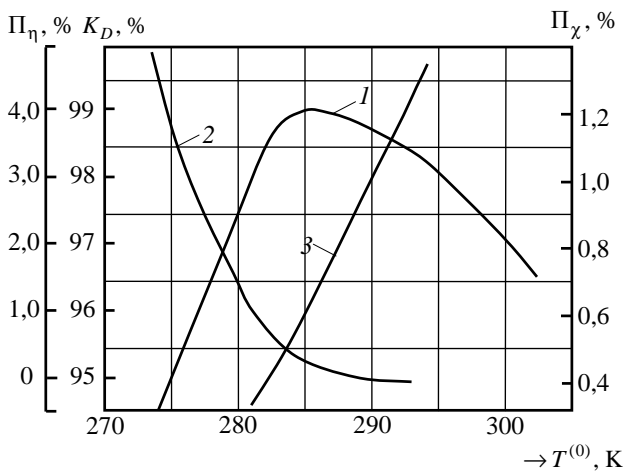


Рис. 3.15. Статические характеристики $y = f(T^{(0)})$, $\bar{r}_0 = 1,24$:
 1 – $K_D(T^{(0)})$; 2 – $\Pi_\eta(T^{(0)})$; 3 – $\Pi_\chi(T^{(0)})$

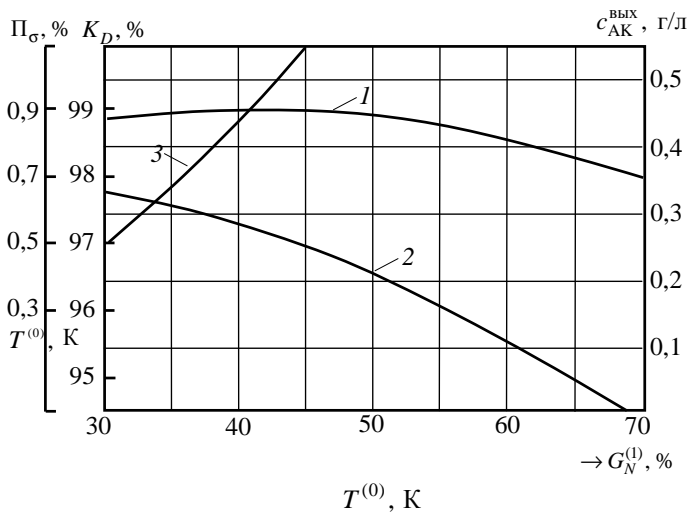


Рис. 3.16. Статические характеристики $y = f(G_N^{(1)})$:
 1 – $K_D(G_N^{(1)})$; 2 – $c_{AK}^{vblx}(G_N^{(1)})$; 3 – $\Pi_\sigma(G_N^{(1)})$

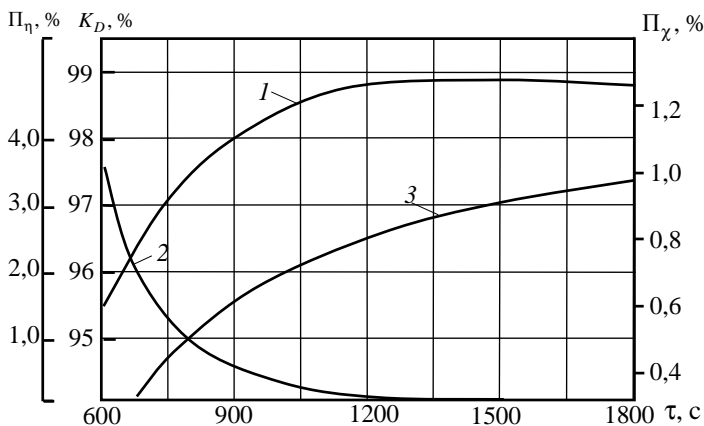


Рис. 3.17. Статические характеристики $y = f(\tau)$:

1 - $K_D(\tau)$; 2 - $\Pi_\eta(\tau)$; 3 - $\Pi_\chi(\tau)$, ($\bar{r}_0 = 1,24$)

Также были исследованы графики изменения выходных переменных процесса диазотирования в зависимости от изменения среднего размера \bar{r}_0 частиц амина в питании реактора. Анализ показал, что колебания \bar{r}_0 в пределах (0,7...1,4) не приводит к нарушению условий технологического регламента. Однако при $\bar{r}_0 > 1,5$ наблюдается резкое снижение выхода диазосоединения за счет увеличения «проскока» амина Π_η и количества диазосмол Π_χ . Отсюда следует, что необходимо стабилизировать размер частиц амина на уровне $\bar{r}_0 \leq 1,5$, например, с использованием устройства измельчения (в пилотной установке используется дезинтегратор УДА 66), и далее при автоматизации процесса диазотирования эту переменную не рассматривать в качестве возмущающего воздействия.

Компьютерный анализ показал, что существуют достаточно узкие пределы изменения допустимых значений $G_l^{(0)}$, при которых выход диазосоединения близок к максимальному значению и выполняются другие условия технологического регламента. Однако при $G_l^{(0)} \geq 7,0 \cdot 10^{-7} \text{ м}^3/\text{с}$ наблюдается резкое снижение выхода диазосоединения. Так, например, при $[c_A^{(0)}]_S \geq 444 \text{ моль}/\text{м}^3$ допустимые значения $G_l^{(0)}$ находятся в пределах $(6,5 \dots 6,6) \cdot 10^{-7} \text{ м}^3/\text{с}$, а при $c_A^{(0)} = 402 \text{ моль}/\text{м}^3$ - $G_l^{(0)} \in [7,15 \dots 7,3] \cdot 10^{-7} \text{ м}^3/\text{с}$. Это означает, что невозможно поддержи-

вать допустимый статический режим диазотирования только стабилизацией расхода солянокислой суспензии амина в питании реактора. При случайном изменении концентрации твердой фазы амина $\left[c_A^{(0)} \right]_S$ выход диазосоединения может изменяться в широких пределах. Так, например, если поддерживать расход $G_I^{(0)} = 6,92 \cdot 10^{-7} \text{ м}^3/\text{с}$, то при $c_A^{(0)} = 444 \text{ моль}/\text{м}^3$ получим выход $K_D = 96,3 \% < 98,5\%$ (по регламенту требуется поддерживать выход на уровне $K_D \geq 98,5\%$).

Резкое снижение выхода при увеличении $G_I^{(0)}$ объясняется, как и в случае изменения концентрации амина $c_A^{(0)}$, недостатком диазотирующего агента в зоне реакции. Поэтому регулирование избыточного содержания азотистой кислоты в зоне реакции путем соответствующего изменения расхода $G_I^{(0)}$ позволит добиться требуемого соотношения количеств амина и нитрита натрия в зоне реакции.

При увеличении расхода суспензии амина $G_I^{(0)}$ в питании реактора наблюдается снижение количества диазосмол Π_χ и нитрозных газов Π_σ в диазорастворе, что объясняется изменением времени пребывания реакционной массы в реакторе.

Важной режимной переменной процесса диазотирования, оказывающей существенное влияние на скорости растворения твердой фазы амина и химического взаимодействия, является температура в зоне реакции диазотирования. Компьютерный анализ графиков изменения выходных переменных процесса диазотирования при варьировании температуры и значений среднего размера \bar{r}_0 частиц амина выявил экстремальный характер статических характеристик и диапазон допустимых изменений температуры 282...287 К. За пределами этого диапазона нарушаются условия по концентрации азотистой кислоты и содержанию диазосмол в диазорастворе. Таким образом, целесообразно регулировать температуру $T^{(0)}$ реакционной массы в питании реактора, добиваясь при этом качественных показателей процесса диазотирования за счет управления потоками солянокислой суспензии амина или нитрита натрия.

Из компьютерного анализа также следует, что при возрастании $G_N^{(1)}$ наблюдается резкое увеличение содержания нитрозных газов Π_σ в диазорастворе и уже при $G_N^{(1)} > 0,75 G_N^{(0)}$ происходит нарушение регламентных требований – $\Pi_\sigma > 1\%$. Следовательно, существует опти-

мальный диапазон подачи нитрита натрия в первый модуль реактора (для нашего случая 60...70%), при котором может быть достигнут близкий к оптимальному значению выход диазосоединения и выполняются другие требования технологического регламента.

Компьютерное исследование позволило выявить, что при увеличении времени пребывания выход диазосоединения увеличивается при диазотировании амина в форме крупных частиц ($\bar{\tau}_0 = 1,946$), однако, при $\tau > 1500$ с происходит нарушение ограничения по количеству диазосмол.

Это означает, что и конструктивные изменения реактора не позволяют добиться качественного проведения реакции диазотирования суспензии амина с крупными размерами частиц порядка $\bar{\tau}_0 \approx 1,5...2$. В диапазоне $\tau \in [1200...1500 \text{ с}]$ условия технологического регламента могут быть выполнены и выход диазосоединения близок к регламентному значению.

Исследование статических характеристик непрерывного процесса диазотирования, осуществляемого в трубчатом реакторе комбинированного типа, показало, что в качественном отношении закономерности процесса диазотирования вполне соответствуют описанным выше закономерностям этого процесса, осуществляемого в турбулентном трубчатом реакторе с вертикальными трубами.

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

1. При отклонениях концентрации твердой фазы амина $\left[c_A^{(0)} \right]_S$ и среднего размера частиц $\bar{\tau}_0$ от номинальных значений выход диазосоединения K_D снижается и нарушаются условия (ограничения) технологического регламента процесса диазотирования. Это обстоятельство позволяет рассматривать эти переменные как неопределенные параметры.

2. При отклонениях среднего размера частиц в питании реактора от номинального значения при $\bar{\tau}_0 > 1,5$ невозможно добиться высокого выхода диазосоединения и выполнения регламентных технологических условий за счет управления $G_I^{(0)}$, $G_N^{(0)}$, $T^{(0)}$, $G_N^{(1)}$. Необходимы технологические приемы стабилизации $\bar{\tau}_0$ на уровне $\bar{\tau}_0 \leq 1,5$.

3. 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.

4. Очевидно, происходит смещение и уменьшение диапазонов допустимых управлений при изменении возмущающих воздействий, что затрудняет проектирование системы управления в классе АСР и делает целесообразным разработку системы статической оптимизации.

3.1.3. ИНТЕГРИРОВАННОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ГИБКОСТИ ТУРБУЛЕНТНЫХ ТРУБЧАТЫХ РЕАКТОРОВ ДИАЗОТИРОВАНИЯ ПРИ СИНТЕЗЕ АЗОПИГМЕНТОВ

Объектом интегрированного проектирования являются опытно-промышленные реакторы диазотирования.

Техническое задание на проектирование включает:

- производительность реактора – $Q=1000$ т/год.
- выход диасоединения – $K_D \geq 98,0\%$;
- «проскок» твердой фазы амина Π_η в реакторе – $\Pi_\eta \leq 1\%$;
- содержание диасомол Π_χ в диазорастворе – $\Pi_\chi \leq 0,5\%$;
- содержание нитрозных газов Π_σ в диазорастворе – $\Pi_\sigma \leq 1\%$;
- переходные процессы в системах стабилизации режимных переменных процесса диазотирования должны удовлетворять требованиям:

при регулировании концентрации кислоты c_{AK} в зоне реакции диазотирования:

- время регулирования – $T_p^{c_{AK}} \leq 45$ мин;
- перерегулирование – $\sigma_{c_{AK}} \leq 0,35$;
- число колебаний N за время регулирования T_p – $N \leq (2-3)$;
- степень затухания ψ переходного процесса – $\psi \approx 75$, что соответствует показателю колебательности $m = 0,221$;
- допустимая статическая ошибка регулирования – $\varepsilon_{c_{AK}} \leq |0,5|$ моль/м³;

при регулировании температуры в первой секции трубчатого реактора диазотирования:

- время регулирования температуры в первой секции трубчатого реактора диазотирования – $T_p^{T^{(1)}} \leq 10...12$ мин; в последующих секциях реактора – $T_p^{T^{(1)}} \leq 15...20$ мин;

- перерегулирование – $\sigma_T \leq 0,2$;
- число колебаний за время регулирования и степень затухания соответствуют вышеприведенным значениям при регулировании концентрации азотистой кислоты;
- статическая ошибка регулирования – $\varepsilon_T \leq |0,5| \text{ К}$.

Выполнение вышеперечисленных требований ТЗ на проектирование реакторных установок необходимо обеспечить в условиях неопределенности концентрации твердой фазы амина $[c_A^{(0)}]_S$, среднего радиуса \bar{r} частиц амина, кинетических коэффициентов (энергий активации при разложении диазосоединения E_{04} , E_{05} , коэффициента теплопередачи K_T от реакционной смеси к хладагенту в реакторе диазотирования).

Номинальные значения и интервалы изменения неопределенных переменных и коэффициентов модели приведены в табл. 3.8.

3.8. Номинальные значения и интервалы изменения неопределенных параметров для процесса диазотирования

№ п/п	Неопределенные параметры	Номинальные значения неопределенных параметров	Интервал изменения неопределенных параметров
1	Концентрация твердой фазы амина $[c_A^{(0)}]_S$, моль/м ³	400,0	[388,0; 412,0]
2	Средний размер частиц амина $\bar{r}^{(0)}$, мкм	1,24	[0,93; 1,55]
3	Кинетические коэффициенты, Дж/моль: E_{04} E_{05}	63 690 87 150	[60 690; 66 690] [83 150; 91 150]
4	Коэффициент теплопередачи K_T , Вт/м ² ·К	187	[168; 205]

ОЗИП реакторной установки diaзотирования. Для решения задачи ОЗИП будем использовать стратегию в соответствии с блок-схемой на рис. 1.4 (п. 1.3): вначале формируются альтернативные варианты турбулентных трубчатых реакторных установок diaзотирования, затем решается задача оптимизации конструктивных и режимных переменных для каждого альтернативного варианта и, наконец, в результате попарного сравнения выбирается оптимальный вариант для реализации в промышленности.

На рисунке 3.18 представлен трубчатый турбулентный аппарат с диффузор-конфузорными устройствами, позволяющими осуществлять химические процессы в высокотурбулентных потоках.

Основными элементами турбулентного комбинированного реактора (рис. 3.18) являются вертикально расположенные трубчатые модули 1, соединительные колена 2, форсунки для распыления нитрита натрия 3, диффузор-конфузорные устройства турбулизации потока 4 и теплообменные рубашки 5. Солянокислая суспензия ароматического амина непрерывно подается в реактор одновременно с водным раствором нитрита натрия, подача которого распределена по длине трубчатой части реактора. Подача раствора нитрита натрия в реактор осуществляется через форсунки непосредственно перед тремя диффузор-конфузорными устройствами турбулизации потока, расположенными на входе в реактор, на 28-м и 60-м метрах реактора. Диаметр $d_{тр}$ вертикальной трубы выбирается однозначно из условий обеспечения заданной производительности, неосаждения твердой фазы и турбулентности режима течения реакционной массы. Чтобы избежать нарушения условий работоспособности реактора, необходимо выбрать такой диаметр трубы, которому будет соответствовать максимально возможный интервал допустимых концентраций амина для выбранной производительности. Такому условию соответствует диаметр трубы $d_{тр}$, равный 40 мм, концентрация твердой фазы амина $[c_A]_s \in [300...400]$ моль/м³ [72].

Отличительной особенностью комбинированного реактора является наличие диффузор-конфузорных устройств турбулизации потока, работоспособность которых определяется условиями обеспечения турбулентности гидродинамического режима течения. Основными параметрами, определяющими эти условия, являются диаметр диффузор-конфузорных камер смешения D , длина диффузор-конфузорной камеры l_k , угол расширения диффузора α_d и сужения конфузора α_k , а также концентрация амина в питании реактора. Конструктивными параметрами реактора являются длина реактора L , состоящего из четырехметровых модулей, внутренний диаметр трубы модуля $d_{тр}$ и объем камеры смешения $V_{кам}$.

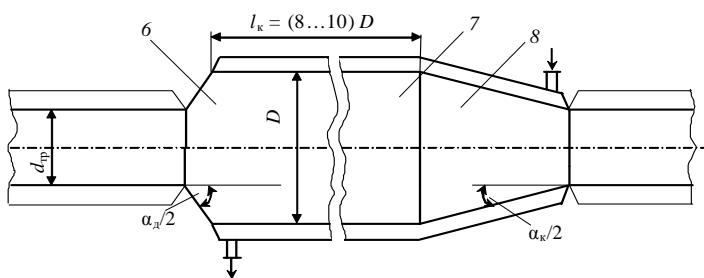
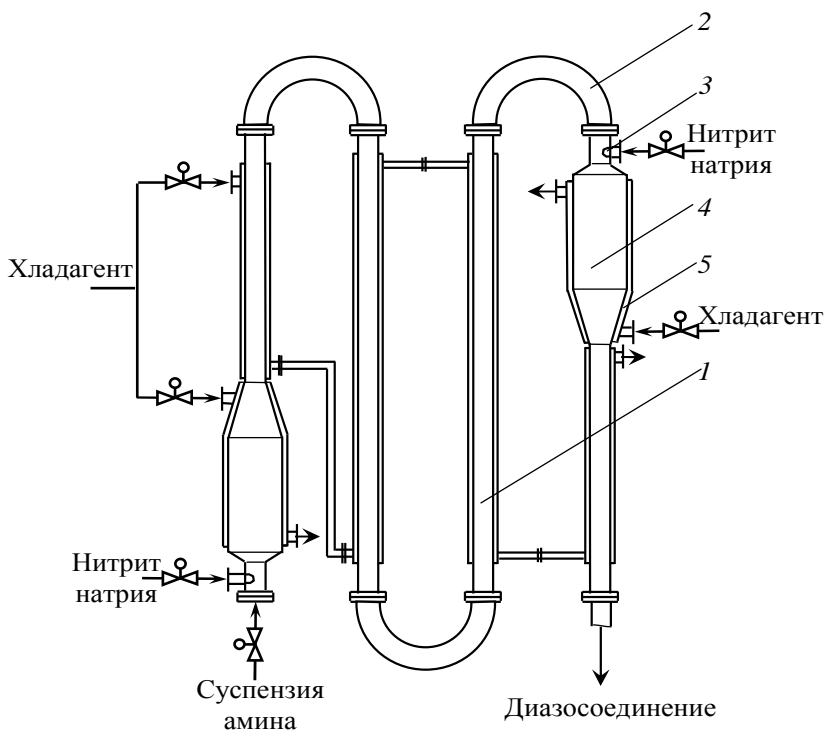


Рис. 3.18. Малогабаритный турбулентный трубчатый реактор с камерами смешения диффузор-конфузорного типа (комбинированный реактор):

- 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_{tr} – диаметр трубчатой части реактора; D – диаметр камеры смешения;
- l_k – длина камеры смешения; α_d – угол расширения диффузора;
- α_k – угол сужения конфузора

В диффузор-конфузорных устройствах с углом расширения $\alpha_d > 40$ происходит полный отрыв потока от стенок диффузора с образованием интенсивных обратных токов и завихрений. Отрыв потока распространяется дальше на участок постоянного сечения за диффузором, поэтому чтобы сгладить турбулизацию потока реакционной среды за диффузором, необходимо наличие участка цилиндрической формы. На этом участке полное выравнивание потока по сечению достигается на расстоянии $l_k = (8...10) D$, где D – диаметр выходного сечения диффузора.

Конфузор служит для окончательного выравнивания потока при переходе из камеры смешения в трубчатую часть реактора. Для выравнивания профиля скорости потока целесообразно принять угол сужения конфузора α_k равным $30...40^\circ$ [82]. Следовательно, для более интенсивного подвода нитрита натрия в реакционную зону можно применять камеры смешения с параметрами: диаметр камеры смешения $D = 0,1$ м, длина камеры $l_k = 1,0$ м, угол расширения диффузора $\alpha_d = 60^\circ$ и сужения конфузора $\alpha_k = 30^\circ$.

Таким образом, отдельная секция реактора состоит из устройства смешения, смонтированного на входе в аппарат; трубчатой части и диффузор-конфузорных устройств турбулизации потока (камер смешения) комбинированного аппарата; изменение условий протекания элементарных процессов химического взаимодействия при наличии в аппарате устройства турбулизации потока (диффузор-конфузоров, камер смешения).

В ОЗИП при фиксированной структуре a секции реактора (число a_1 – вертикальных труб и число a_2 – диффузор-конфузоров (камер смешения) в одной секции), диаметре трубчатой части $d_{тр}$ и высоты $l_{тр}$ вертикальных труб, диаметре камеры смешения $D = 0,1$ м, длине камеры $l_k = 1,0$ м, угле расширения диффузора $\alpha_d = 60^\circ$ и сужения конфузора $\alpha_k = 30^\circ$ в качестве независимых переменных будем рассматривать общую длину трубчатой части, объем $V_{кам}$ камеры смешения (диффузор-конфузора), распределение температуры $T^{(i)}$ и подачи нитрита натрия $\gamma(i)$ по зонам $i = 1, 2, 3$ (длине трубчатой части) реактора.

Как следует из п. 3.1.1, работоспособность турбулентного трубчатого реактора определяется условиями неосаждения агрегатов твердой фазы амина в вертикальных трубах, обеспечения заданной производительности и турбулентного режима течения реакционной смеси в зоне реакции. Основными параметрами, обеспечивающими выполнение этих условий при заданной производительности, являются внутренний диаметр вертикальной трубы и концентрация твердой фазы амина в

питании реактора. При заданной производительности $Q = 1000$ т/год максимально допустимыми значениями диаметра трубы и концентрации твердой фазы амина являются $d_{\text{тр}} = 0,04$ м и $\left[c_A^{(0)} \right]_S = 400$ моль/м³.

В качестве целевой функции (критерия интегрированного проектирования) будем использовать приведенные затраты C на производство 1 т пигмента:

$$C(a, d, z, \theta) = (C_{\text{см}} + C_{\text{Эн}} + E_{\text{Н}} C_{\text{К}}) / Q,$$

где $C_{\text{см}}$ – затраты на сырье и материалы (составляющая критерия по ресурсосбережению); $C_{\text{Эн}}$ – затраты на энергоносители (составляющая критерия по энергосбережению); $C_{\text{К}}$ – стоимость изготовления и транспортирования реактора, строительно-монтажных работ при его установке; $E_{\text{Н}}$ – нормативный коэффициент эффективности капитальных вложений; Q – годовая производительность реакторной установки.

Сформулируем задачу оптимизации конструктивных и режимных переменных турбулентного трубчатого реактора диазотирования комбинированного типа с жесткими ограничениями: при фиксированных значениях – числа вертикальных труб \hat{a}_1 , диаметра $\hat{d}_{\text{тр}}$ и высоты $\hat{l}_{\text{тр}}$ трубы в секции турбулентного реактора требуется определить конструктивные переменные d^* (общую длину L^* трубчатой части (число секций N^* реактора), объем $V_{\text{кам}}$ диффузор-конфузора (камеры смешения)) и режимные z^* переменные (распределение температуры $T^{(i)*}$ и подачи нитрита натрия $G_N^*(i)$ по зонам $i = 1, 2, 3$ (длине трубчатой части)) реактора такие, чтобы приведенные затраты на производство 1 т пигмента достигали минимального значения, т.е.

$$I(\hat{a}, d^*, z^*) = \min_{a, d, z} M_{\xi} \left\{ \begin{array}{l} C(\hat{a}, d, z, \xi) = (C_{\text{см}}(\hat{a}, d, z, \xi) + \\ + C_{\text{Эн}}(\hat{a}, d, z, \xi) + E_{\text{Н}} C_{\text{К}}(\hat{a}, d, z, \xi)) / Q(\hat{a}, d, z, \xi) \end{array} \right\}$$

или

$$I(\hat{a}, d^*, z^*) = \min_{a, d, z} \sum_{i \in I_1} w_i C(\hat{a}, d, z, \xi^i), \quad (3.31)$$

при связях в форме уравнений математической модели $y = \mathfrak{F}(\hat{a}, d, z, \xi)$ статики процесса диазотирования (3.7) – (3.14), (3.22) – (3.29) и ограничениях:

$$\max_{\xi \in \Xi} [g_j(\hat{a}, d, z, \xi) = y_{j\text{зад}} - y_j] \leq 0, \quad j = 1, \dots, 7; \quad (3.32)$$

$$\chi(\hat{a}, d) = \min_{a, d, z} \max_{\xi \in \Xi} \max_{j \in J} g_j(\hat{a}, d, z, \xi) \leq 0, \quad (3.33)$$

где

$$g_1 = 1000,0 - Q(\hat{a}, d, z, \xi); \quad g_2 = 7,0 \text{ моль/м}^3 - c_{\text{АК}}^{\text{ВЫХ}}(\hat{a}, d, z, \xi);$$

$$g_3 = c_{\text{АК}}^{\text{ВЫХ}}(\hat{a}, d, z, \xi) - 14,0 \text{ моль/м}^3; \quad g_4 = 98,0\% - K_D(\hat{a}, d, z, \xi);$$

$$g_5 = \Pi_{\chi}(\hat{a}, d, z, \xi) - 0,5\%; \quad g_6 = \Pi_{\sigma}(\hat{a}, d, z, \xi) - 1,0\%;$$

$$g_7 = \Pi_{\eta}(\hat{a}, d, z, \xi) - 0,5\%;$$

w_i – весовые коэффициенты, $\sum_{i \in I_1} w_i = 1$; I_1 – множество номеров аппроксимационных точек в области Ξ ; $y_j, y_{j\text{зад}}$ – текущее и предельно допустимое значения j -й выходной переменной;

или

$$\text{Вер}_{\xi} \{ [g_j(\hat{a}, d, z, \xi) = y_{j\text{зад}} - y_j] \leq 0 \} \geq \rho_j, \quad j = 1, \dots, 7. \quad (3.34)$$

Для решения задач (3.31) – (3.33) и (3.31), (3.34) применяли алгоритмы 2.2 (см. п. 2.3) и 2.8 (см. п. 2.4). Обозначим совокупность аппроксимационных точек $\xi^i, i \in I_1$ через S_1 , а множество критических точек на v -м шаге – через $S_2^{(v)} = \{\xi^l : j \in I_2^{(l)}\}$.

Результаты решения номинальной задачи оптимизации и ОЗИП с жесткими ограничениями (3.31) – (3.33) и ОЗИП (3.31), (3.34) с мягкими ограничениями представлены в табл. 3.9.

Сравнивая результаты решения задачи номинальной оптимизации и ОЗИП для пяти аппроксимационных точек, мы видим, что для построения гибкой реакторной установки диазотирования необходимо использовать следующие коэффициенты запаса по числу секций:

1) для задачи ОЗИП (3.31) – (3.33) – $[\Delta N] = \frac{N^* - N^{\text{НОМ}}}{N^{\text{НОМ}}} = 0,43$; 2) для

задачи ОЗИП (3.31), (3.34) – $[\Delta N] = \frac{N^* - N^{\text{НОМ}}}{N^{\text{НОМ}}} = 0,25$.

Внутреннюю и внешнюю задачи нелинейного программирования в алгоритмах 2.1 и 2.7 решали методом последовательного квадратичного программирования с использованием программы «ROPUD», разработанной сотрудниками лаборатории математического моделирования НИФХИ им. Л.Я. Карпова, г. Москва под руководством д-ра техн. наук, профессора Г.М. Островского [83, 84].

3.9. Результаты решения задачи оптимизации (3.31) – (3.33)

Наименование переменных задачи	Значения переменных		
	без учета неопределенности (номинальная задача)	с учетом неопределенности (жесткие ограничения)	с учетом неопределенности (мягкие ограничения)
<i>Конструктивные переменные</i>			
Число секций реактора N , шт	7	10	8
Число вертикальных труб a_1 , шт	5		
Число камер смешения a_2 , шт	1		
Диаметр трубы $d_{тр}$, м	0,04		
Высота трубы $h_{тр}$, м	1,8		
Объем диффузор-конфузора $V_{кам}$, м ³	2,7 · 10 ⁻³		
<i>Режимные (управляющие) переменные</i>			
Распределение температуры по зонам реактора $T^{(i)}$, $i = 1, 2, 3, K$	300,2; 297,6; 296,4	286,2; 284,6; 284,0	290,4; 287,8; 283,5
Распределение подачи нитрита натрия по зонам реактора, $\gamma^{(i)}$, $i = 1, 2, 3$	0,55; 0,24; 0,21	0,38; 0,34; 0,28	0,36; 0,33; 0,31
Концентрация твердой фазы амина $[c_A^{(0)}]_S$, моль/м ³	400,0		
Концентрация нитрита натрия $c_N^{(0)}$, моль/м ³	1460,0		
Расход солянокислой суспензии амина, $G_I^{(0)}$, м ³ /с	2,183 · 10 ⁻⁴		
Расход нитрита натрия, $G_N^{(0)}$, м ³ /с	5,98 · 10 ⁻⁵		

Наименование переменных задачи	Значения переменных		
	без учета неопределенности (номинальная задача)	с учетом неопределенности (жесткие ограничения)	с учетом неопределенности (мягкие ограничения)
<i>Составляющие критерия оптимизации</i>			
Стоимость изготовления реактора и строительно-монтажных работ C_K , у.е.	22 660,0	42 148	38 749,1
Затраты на сырье и материалы $C_{см}$, у.е./т	1843,3	1953,8	1925,2
Затраты на энергоносители $C_{Эн}$, у.е./т	31,4	52,6	49,7
Амортизационные отчисления, у.е./т	2,7	5,05	4,6
Приведенные затраты I^* , у.е./т	1877,4	2011,4	1979,5
<i>Значения функций ограничений (3.32), (3.33)</i>			
Производительность реакторной установки Q , т/год	1005,0	1003,0	–
Концентрация азотистой кислоты в диазорастворе c_{AK} , моль/м ³	8,6	9,3	–
Выход диазосоединения по стадии диазотирования K_D , %	98,2	98,28	–
Содержание диазосмол в диазорастворе Π_χ , %	0,5	0,5	–
Содержание нитрозных газов в диазорастворе Π_σ , %	0,88	0,93	–
Проскок амина Π_η , %	0,5	0,48	–
$\chi(\hat{a}, d^*, z^*) = \max_{\xi \in \Xi} \max_{j \in J} g_j(\bullet)$	–	–0,026	–

Наименование переменных задачи	Значения переменных		
	без учета неопределенности (номинальная задача)	с учетом неопределенности (жесткие ограничения)	с учетом неопределенности (мягкие ограничения)
<i>Значения вероятностей выполнения ограничений (3.34)</i>			
$\text{Вер}_\xi \{1000 - Q(\bullet) \leq 0\}$	0,68	1	0,93
$\text{Вер}_\xi \{c_{\text{AK}}(\bullet) \in [7,0 \dots 14,0]\}$	0,72	1	0,93
$\text{Вер}_\xi \{K_D(\bullet) \geq 98,0\%\}$	0,75	1	0,93
$\text{Вер}_\xi \{\Pi_\chi(\bullet) \leq 0,5\%\}$	0,53	1	0,9
$\text{Вер}_\xi \{\Pi_\sigma(\bullet) \leq 1,0\%\}$	0,58	1	0,9
$\text{Вер}_\xi \{\Pi_\eta(\bullet) \leq 0,5\%\}$	0,55	1	0,9

Вероятностные интегралы в (3.34) вычисляли методом Монте-Карло. Число стохастических испытаний выбиралось опытным путем из условия незначительного влияния двукратных изменений числа экспериментов на результаты решения задачи оптимизации. Вычислительные эксперименты показали, что это число можно выбрать равным $M = 100$.

ДЗИП реакторной установки diaзотирования. Сформулируем двухстадийную задачу оптимального проектирования турбулентного трубчатого реактора diaзотирования ароматических аминов со смешанными ограничениями (ДЗИП4). В вектор неопределенных параметров ξ входят параметры (переменные), которые могут быть уточнены (измерены) на стадии эксплуатации ХТС, ограничения с номерами $j \in J_1 = (1, \dots, m_1)$ являются мягкими и должны удовлетворяться с вероятностью ρ_j , а ограничения с номерами $j \in J_2 = (m_1 + 1, \dots, m)$ – жесткими (см. случай 4, п. 2.1). В ДЗИП4 при фиксированных структуре \hat{a} секции реактора (число \hat{a}_1 – вертикальных труб и число \hat{a}_2 – диффузор-конфузоров (камер смешения) в одной секции), диаметре трубчатой части $\hat{d}_{\text{тр}}$ и высоте $\hat{l}_{\text{тр}}$ вертикальных труб, диаметре каме-

ры смешения $\hat{D} = 0,1$ м, угле расширения диффузора $\hat{\alpha}_d = 60^\circ$ и сужения конфузора $\hat{\alpha}_k = 30^\circ$) требуется определить конструктивные переменные d^* (общую длину L^* трубчатой части (число секций N^* реактора), объем $V_{\text{кам}}$ диффузор-конфузора (камеры смешения)), режимные z^* переменные (распределение температуры $T^{(i)*}$ и подачи нитрата натрия $G_N^*(i)$ по зонам $i = 1, 2, 3$ (длине трубчатой части) реактора, структуру $h(b) \in H$ и вектор настроечных параметров $s(h) \in S$ САУ такие, чтобы приведенные затраты на производство 1 т пигмента достигали минимального значения. При этом структура и оптимальные настройки регуляторов обеспечивают заданное качество переходных процессов в АСР.

Формулировка ДЗИП4 может быть представлена в виде (2.121) – (2.124) (см. п. 2.5):

$$I^*(\hat{a}, d^*, z^*) = \min_{d, u, z(\xi)} u, \quad (3.35)$$

при связях в форме уравнений математической модели $y = \mathfrak{F}(\hat{a}, d, z, \xi)$ статики процесса диазотирования (3.7) – (3.14), (3.22) – (3.29) и ограничениях:

$$\text{Вер}_\xi \{g_1 = C(\hat{a}, d, z(\xi), \xi) - u \leq 0\} \geq \rho_1; \quad (3.36)$$

$$\text{Вер}_\xi \{g_j(\hat{a}, d, z(\xi), \xi) \leq 0\} \geq \rho_j, \quad j = 2, 3, 4, 5; \quad (3.37)$$

$$\chi_1(\hat{a}, d) = \max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J_2} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, \quad j = 6, 7, 8, \quad (3.38)$$

где

$$g_2 = 1000,0 - Q(\hat{a}, d, z, \xi); \quad g_3 = 7,0 \text{ моль/м}^3 - c_{\text{АК}}^{\text{ВЫХ}}(\hat{a}, d, z, \xi);$$

$$g_4 = c_{\text{АК}}^{\text{ВЫХ}}(\hat{a}, d, z, \xi) - 14,0 \text{ моль/м}^3; \quad g_5 = 98\% - K_D(\hat{a}, d, z, \xi);$$

$$g_6 = \Pi_\chi(\hat{a}, d, z, \xi) - 0,5\%; \quad g_7 = \Pi_\sigma(\hat{a}, d, z, \xi) - 1,0\%;$$

$$g_8 = \Pi_\eta(\hat{a}, d, z, \xi) - 0,5\% .$$

В ДЗИП4 u – скалярная переменная (аналог конструктивных переменных); $\text{Вер}\{\bullet\}$ – вероятность выполнения ограничения $\{\bullet\}$; g_0, g_j – функции ограничений; $g_0(a, d, z(\xi), \xi) = C(a, d, z(\xi), \xi)$ – приведенные затраты на создание и эксплуатацию реакторной установки

диазотирования; $g_j(a, d, z, \xi) \equiv y_{j \text{ зад}} - y_j \leq 0$, $j = 1, \dots, m$ – функции ограничений; $y_j = \mathfrak{F}(a, d, z, \xi)$, $j = 1, \dots, m$; ρ_0, ρ_j – заданные значения вероятности выполнения ограничений; $\chi_1(d)$ – функция гибкости реакторной установки.

Характерной особенностью двухэтапных задач является возможность подстройки управляющих переменных z в зависимости от параметра ξ на этапе функционирования проектируемой ХТС, т.е. режимные переменные $z = z(\xi)$ являются оптимальными заданиями регуляторам САУ. Система автоматического управления играет важную роль при интегрированном проектировании гибкой реакторной установки диазотирования, служит для выполнения операций пуска и останова, перехода с одного режима работы непрерывно действующей установки на другой, гарантирования устойчивой работы реактора.

Сформулированная выше двухэтапная задача аппаратурно-технологического оформления непрерывного процесса диазотирования в условиях интервальной неопределенности существенно отличается от традиционной задачи НЛП. Во-первых, она позволяет научно обоснованно рассчитывать оптимальные (по критерию $I(\bullet)$) конструктивные и режимные переменные реакторной установки диазотирования при наличии неопределенностей, а также коэффициенты запаса технического ресурса установки, гарантирующие сохранение его работоспособности при любых значениях ξ из области неопределенности Ξ . Во-вторых, задача аппаратурно-технологического оформления в постановке (3.35) – (3.38) дает возможность подстройки режимных (управляющих) переменных на этапе функционирования производства и тем самым обеспечивает более экономичное осуществление физико-химических процессов на различных стадиях производства. Наконец, в постановке задачи (3.35) – (3.38) заложены предпосылки эффективного управления и автоматизации, что позволяет разрабатывать гибкие энерго- и ресурсосберегающие процессы и аппараты, реакторные установки и обеспечивать высокую конкурентоспособность проектируемого производства на мировом рынке.

Для решения задачи (3.35) – (3.38) применяли алгоритм 2.9 (см. п. 2.5). Вводили множества критических точек $S_1^{(v)}$ и $S_2^{(v)}$, где $S_1^{(v)} = \{\xi^i : i \in I_1^{(v)}\}$, $S_2^{(v)} = \{\xi^i : i \in I_2^{(v)}\}$. Во множестве $S_1^{(v)}$ накапливались точки, в которых нарушаются жесткие ограничения, а во множестве $S_2^{(v)}$ – точки, в которых нарушаются мягкие ограничения (3.34). При решении задачи (3.35) – (3.38) в качестве вспомогательной задачи НЛП использовали задачу вида (см. п. 2.5):

$$\min_{a, d(a), b, h, s(h), z^i, \alpha} u, \quad (3.39)$$

$$g_j(a, d(a), z^i, \xi^i) \leq 0, \quad j \in J = J_1 \cup J_2, \quad i \in I, \quad (3.40)$$

где

$$g_1 = C(\hat{a}, d, z(\xi), \xi) - u; \quad g_2 = 1000,0 - Q(\hat{a}, d, z, \xi);$$

$$g_3 = 7,0 \text{ моль/м}^3 - c_{\text{AK}}^{\text{ВЫХ}}(\hat{a}, d, z, \xi);$$

$$g_4 = c_{\text{AK}}^{\text{ВЫХ}}(\hat{a}, d, z, \xi) - 14,0 \text{ моль/м}^3; \quad g_5 = 98\% - K_D(\hat{a}, d, z, \xi);$$

$$g_6 = \Pi_\chi(\hat{a}, d, z, \xi) - 0,5\%; \quad g_7 = \Pi_\sigma(\hat{a}, d, z, \xi) - 1,0\%;$$

$$g_8 = \Pi_\eta(\hat{a}, d, z, \xi) - 0,5\%; \quad I^{(v)} = I_1 \cup I_2.$$

Для решения задачи (3.35) – (3.38) с помощью алгоритма 2.9 потребовалось 18 итераций. Результаты решения ДЗИП4 приведены в табл. 3.10.

Вспомогательную задачу НЛП (3.39)–(3.40) решали методом последовательного квадратичного программирования с использованием программы «ROPUD» [83, 84].

3.10. Результаты решения ДЗИП4 (3.35) – (3.38)

Наименование переменных задачи	Значения переменных	
	без учета неопределенности	с учетом неопределенности (смешанные ограничения)
<i>Конструктивные переменные</i>		
Число секций реактора N^* , шт	7	9
Число вертикальных труб a_1 , шт	5	
Число камер смешения a_2 , шт	1	
Диаметр трубы $d_{\text{тр}}$, м	0,04	
Высота трубы $h_{\text{тр}}$, м	1,8	
Объем диффузор-конфузора $V_{\text{кам}}$, м ³	2,7·10 ⁻³	

Наименование переменных задачи	Значения переменных	
	без учета неопределенности	с учетом неопределенности (смешанные ограничения)

Составляющие критерия оптимизации

Стоимость изготовления реактора и строительно-монтажных работ C_K^* , у.е.	22 660,0	23 372,0
Затраты на сырье и материалы $C_{см}^*$, у.е./т	1808,7	1845,2
Затраты на энергоносители $C_{Эн}^*$, у.е./т	29,4	49,7
Амортизационные отчисления, у.е./т	2,3	3,9
Приведенные затраты $C^* = u^*$, у.е./т	1877,4	1992,2

Значения вероятностей выполнения ограничений (3.36), (3.37)

$\text{Вер}_\xi \{g_1 = C(\hat{a}, d, z(\xi), \xi) - u \leq 0\}$	0,58	0,93
$\text{Вер}_\xi \{g_2 = 1000,0 - Q(\hat{a}, d, z, \xi) \leq 0\}$	0,68	0,93
$\text{Вер}_\xi \left\{ \begin{array}{l} g_3 = 7,0 \text{ моль/м}^3 - c_{\text{АК}}^{\text{ВЫХ}}(\hat{a}, d, z, \xi) \leq 0 \\ \vee g_4 = c_{\text{АК}}^{\text{ВЫХ}}(\hat{a}, d, z, \xi) - 14,0 \text{ моль/м}^3 \leq 0 \end{array} \right\}$	0,72	0,93
$\text{Вер}_\xi \{g_5 = 98\% - K_D(\hat{a}, d, z, \xi) \leq 0\}$	0,95	0,95

Наименование переменных задачи	Значения переменных	
	без учета неопределенности	с учетом неопределенности (смешанные ограничения)
<i>Значения функций ограничений (3.38)</i>		
Содержание диазосмол в диазорастворе $\Pi_\chi, \%$	0,5	0,5
Содержание нитрозных газов в диазорастворе $\Pi_\sigma, \%$	0,88	0,97
Проскок амина $\Pi_\eta, \%$	0,47	0,5
$\max_{\xi \in \Xi} \min_z \max_{j \in J_2} g_j(a, d, z, \xi)$	–	–0,07

Сравнивая результаты решения задачи номинальной оптимизации и ДЗИП4, мы видим, что для построения гибкой реакторной установки диазотирования необходимо использовать коэффициент запаса по числу секций, равный $[\Delta N] = \frac{N^* - N^{\text{ном}}}{N^{\text{ном}}} = 0,28$.

$$[\Delta N] = \frac{N^* - N^{\text{ном}}}{N^{\text{ном}}} = 0,28.$$

Решение задачи интегрированного проектирования реакторной установки диазотирования предусматривает также определение оптимальных заданий регуляторам САУ $z^* \in Z$ (распределение температуры реакционной среды $T^{(i)}$ и подачи нитрита натрия $\gamma^{(i)}$ по зонам $i = 1, 2, 3$ (длине) трубчатой части реактора диазотирования), структуры $h(b) \in H$ и вектора настроечных параметров $s(h) \in S$ САУ. На рисунке 3.19 представлена принципиальная технологическая и функциональная схема автоматизации реакторной установки синтеза азопигментов непрерывного действия, разработанная в соответствии с методологией интегрированного синтеза и с использованием полученных результатов решения задачи ДЗИП4 (рис. 1.4, п. 1.3).

Дадим описание ее работы на примере синтеза азопигментов алого концентрированного, лакокрасочного и желтого светопрочного в турбулентной трубчатой установке непрерывного действия производительностью 1000 т пигмента/год (рис. 3.19).

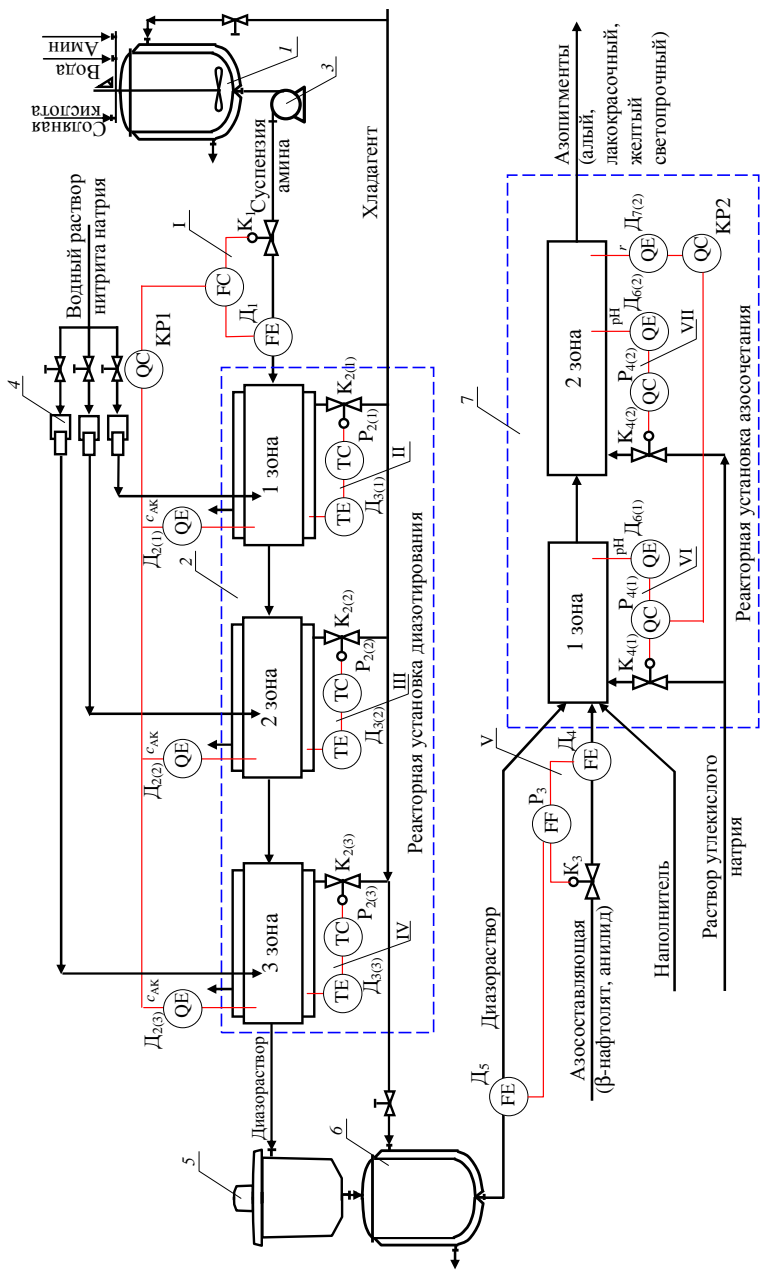


Рис. 3.19. Схема непрерывного технологического процесса синтеза азоимидов

Солянокислую суспензию амина (3-нитро-4-аминотолуола) с заданной концентрацией приготавливают в аппарате 1. Процесс диазотирования 3-нитро-4-аминотолуола нитритом натрия в присутствии 2,5...3-кратного избытка соляной кислоты осуществляют непрерывно в турбулентном трубчатом реакторе диазотирования 2, куда солянокислая суспензия амина подается центробежным насосом 3. Водный раствор нитрита натрия непрерывно и распределенно (по длине трубчатого реактора) подают в реакторную установку 2 с помощью системы дозирующих насосов 4 таким образом, чтобы избыточная концентрация азотистой кислоты (диазотирующего агента) в зоне реакции диазотирования находилась в пределах 0,2...0,5 г/л. Процесс диазотирования осуществляют при турбулентном режиме движения потока реакционной массы при заданном (оптимальном) температурном профиле. Полученный диазораствор непрерывно подается на стадию очистки, которая осуществляется с помощью ультрацентрифуги 5, и далее в емкость 6.

Очищенный раствор диазосоединения самотеком непрерывно поступает в турбулентный трубчатый реактор азосочетания 7. В реактор 7 одновременно подают растворы азосоставляющей (β -нафтолята или анилида ацетоксиусной кислоты в зависимости от марки пигмента) и наполнителя (хлористого бария, гидроокиси алюминия). Подача щелочного агента осуществляется распределенно по длине реактора 7 для формирования оптимального профиля рН-среды сочетания.

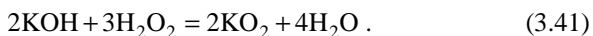
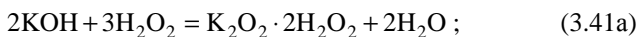
Суспензии азопигментов накапливаются в специальных аппаратах-сборниках для проведения последующих операций термообработки и транспортировки на заключительные стадии физико-механической обработки (фильтрования, сушки и размола).

Автоматическая система регулирования переменных состояния реакторных установок диазотирования и азосочетания включает контуры I – VII, реализующие найденные при решении задачи стохастической оптимизации оптимальные значения режимных (управляющих) переменных. В контуре I поддерживается оптимальное значение расхода солянокислой суспензии амина (датчик (Д1), регулятор (Р1), клапан (К1)) с коррекцией по концентрации азотистой кислоты в третьей зоне реакторной установки диазотирования (Д2_(1,2,3), корректирующий регулятор (КР1)). Оптимальное распределение подачи нитрита натрия в зоны реакторной установки диазотирования обеспечивается системой высокоточных дозирующих насосов. В контурах II – IV поддерживается оптимальный профиль температуры в зонах 1, 2, 3 диазотирования (Д3_(1,2,3), Р2_(1,2,3), К2_(1,2,3)). Соотношение расходов азосоставляющей и диазораствора в питании реакторной установки азосочетания поддерживается в контуре V с помощью Д4, Д5, Р3 и К3. Наконец, оптимальный профиль рН среды азосочетания реализуется в контурах VI и VII (Д6_(1,2), Д7₍₂₎, Р4_(1,2), КР2, К4_(1,2)).

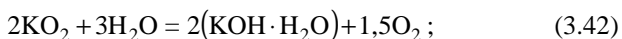
3.2. РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИЙ НЕПРЕРЫВНЫЙ ПРОЦЕСС ПОЛУЧЕНИЯ НАДПЕРОКСИДА КАЛИЯ В АППАРАТЕ РАСПЫЛИТЕЛЬНОГО ТИПА

3.2.1. ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ СОВМЕЩЕННОГО ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ НАДПЕРОКСИДА КАЛИЯ ИЗ РАСТВОРА ПЕРОКСОСОЛЬВАТА ПЕРОКСИДА КАЛИЯ В ТОКЕ СУШИЛЬНОГО АГЕНТА

Способ синтеза надпероксида калия в аппарате распылительного типа основан на том, что пероксид водорода, являясь слабой кислотой, при определенных условиях вступает в обменную реакцию с гидроксидом калия по уравнению (3.41а) с образованием промежуточного аддукта $K_2O_2 \cdot 2H_2O_2$ [85], который при нагревании выше $40^\circ C$ диспропорционирует по уравнению (3.41б), образуя KO_2 . Суммарно процесс образования надпероксида калия из исходных реагентов описывается уравнением (3.41):



Можно предположить, что при диспропорционировании $K_2O_2 \cdot 2H_2O_2$ (дипероксогидрата пероксида калия) в аппарате распылительного типа возможно протекание следующих побочных химических реакций:



влиянием которых (при интенсивном обезвоживании и невысоких концентрациях паров воды и диоксида углерода в сушильном агенте) можно пренебречь.

Скорость протекания реакции (3.41) в аппарате распылительного типа зависит от ряда факторов (температура, концентрация исходных реагентов и продуктов реакции и т.д.). Поэтому определение и последующее обобщение основных кинетических закономерностей водного синтеза надпероксида калия в токе сушильного агента и анализ структуры образуемых гранул являются необходимым этапом при разработке методики расчета аппарата распылительного типа для синтеза надпероксида калия и его конструктивного оформления.

Так, например, практика показывает [86], что выбор и обоснование оптимальных режимов сушки конкретных продуктов должны опираться прежде всего на информацию о механизме протекания внутренних процессов и теплофизических характеристиках объекта сушки. Именно кинетика тепломассообменных процессов в отдельной частице определяет такие важные характеристики конечного продукта, как реакционная способность, насыпная плотность порошка, его слеживаемость и разрушаемость при транспортировке и т.д.

На рисунке 3.20 приведена схема экспериментального стенда для исследования кинетики совмещенного процесса получения надпероксида калия из раствора пероксосольвата пероксида калия в потоке сушильного агента.

Сушильный агент газодувкой 1 через вентиль регулировки расхода 2 подается в психрометр 3 и реометр 4, где снимаются влажность и расход соответственно. Затем для нагрева сушильный агент подается в электрокалорифер 5 и далее выходит из трубопровода 6 в атмосферу через сопло диаметром 17 мм. Термопара 7 закрепляется на специальном кронштейне 8, который связан с прецизионными электронными микровесами 9. Температура и масса капли, подвешиваемой на спай термопары, фиксируются самописцами 10 и 11. Температура сушильного агента определяется по показаниям самописца 10 без навешенной

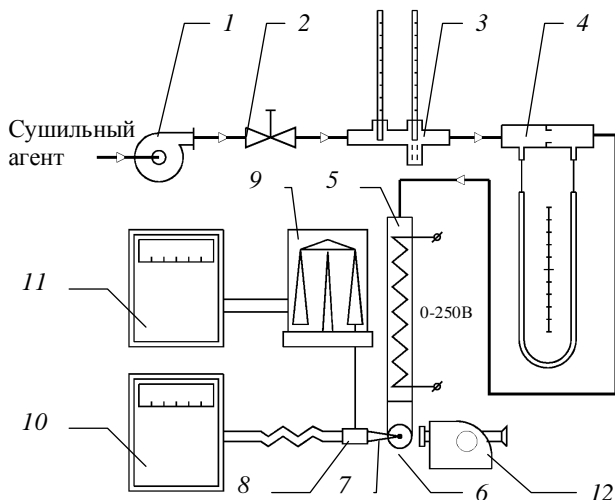


Рис. 3.20. Экспериментальный стенд для исследования кинетики совмещенного физико-химического процесса получения надпероксида калия из раствора пероксосольвата пероксида калия в потоке сушильного агента

на термопару капли после выхода стенда на статический режим. Видеокамера 12 с микронасадкой позволяет вести непрерывную съемку частицы в процессе синтеза.

Чтобы исключить (снизить) радиационный подвод тепла к капле, трубопровод *b* делается с коленом в 90°. Для уменьшения подвода тепла к капле теплопроводностью диаметр проводов термопары берется по возможности наименьшим. В нашем случае диаметр проводов выбирался равным 50 мкм. Все это делается с одной целью – обеспечить подвод тепла преимущественно конвективным способом и максимально приблизить условия проведения эксперимента к реальному процессу обезвоживания капель раствора в промышленном аппарате.

Приготовленный по вышеописанной методике раствор перексольвата пероксида калия подвешивался в виде капли на спай термопары и обдувался сушильным агентом с параметрами, представленными в табл. 3.11.

Снятые экспериментально графические зависимости (рис. 3.21 – 3.23) позволяют выделить пять характерных периодов при синтезе надпероксида калия.

1. Период прогрева капли от начальной температуры t_0 до температуры $t_{\text{рав}}$, соответствующей температуре равновесного испарения раствора при данных значениях температуры и влажности теплоносителя. Длительность этого периода составляет до 15% общего времени синтеза.

2. Период равновесного испарения, в котором происходит интенсивное удаление влаги с поверхности капли при незначительном повышении температуры $t_{\text{рав}} = f(t_{\text{с.г}}, \Phi_{\text{с.г}}, C_{\text{пов}})$. При фиксированных параметрах $t_{\text{с.г}}$ и $\Phi_{\text{с.г}}$ повышение температуры капли связано с непрерывным увеличением концентрации раствора в поверхностном слое $C_{\text{пов}}$ и, как следствие, перераспределением тепловых потоков при

3.11. Условия проведения эксперимента

№ опыта (образца)	Основные параметры опыта					Результаты $t_k(\tau), m_k(\tau), d_k(\tau)$
	Сушильный агент	$t_{\text{сух}}, ^\circ\text{C}$	$t_{\text{мок}}, ^\circ\text{C}$	$G_{\text{с.г}}, \text{л/мин}$	$t_{\text{с.г}}, ^\circ\text{C}$	
1	Атмосферный	27,6	12,4	50	150	рис. 3.21
2	воздух,	21,9	15,5	50	187	рис. 3.22
3	очищенный от CO_2					
		22,6	21,4	50	225	рис. 3.23

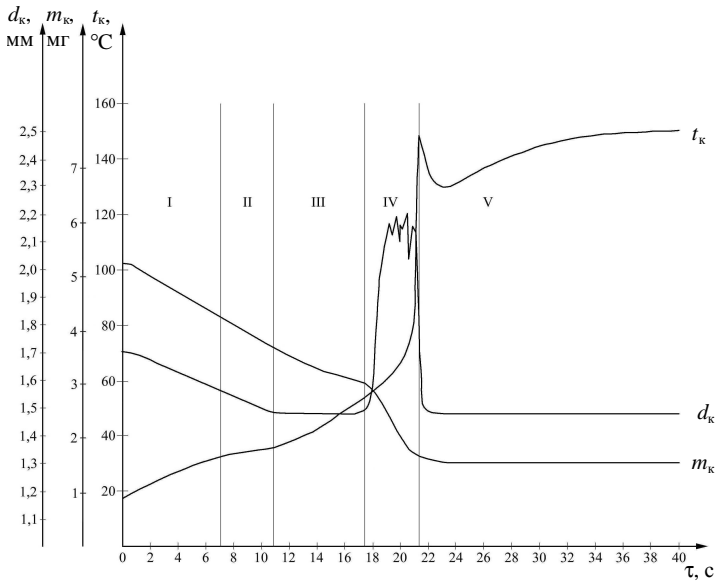


Рис. 3.21. Кинетические кривые совмещенного процесса получения надпероксида калия из раствора перексосольвата пероксида калия (образец № 1)

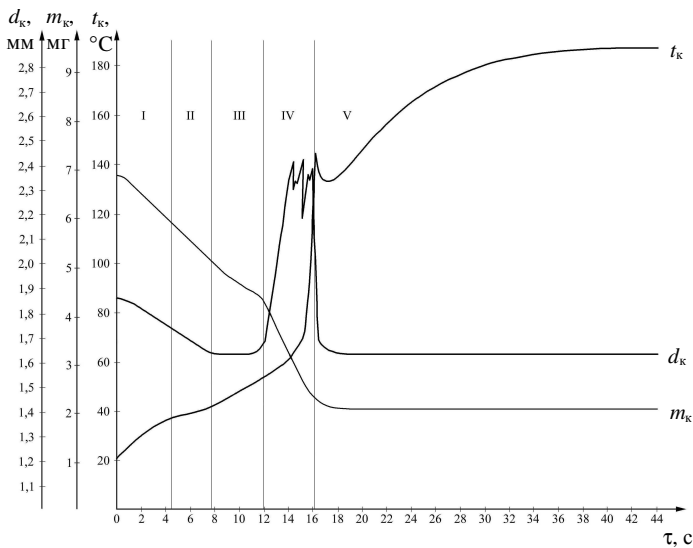


Рис. 3.22. Кинетические кривые совмещенного процесса получения надпероксида калия из раствора перексосольвата пероксида калия (образец № 2)

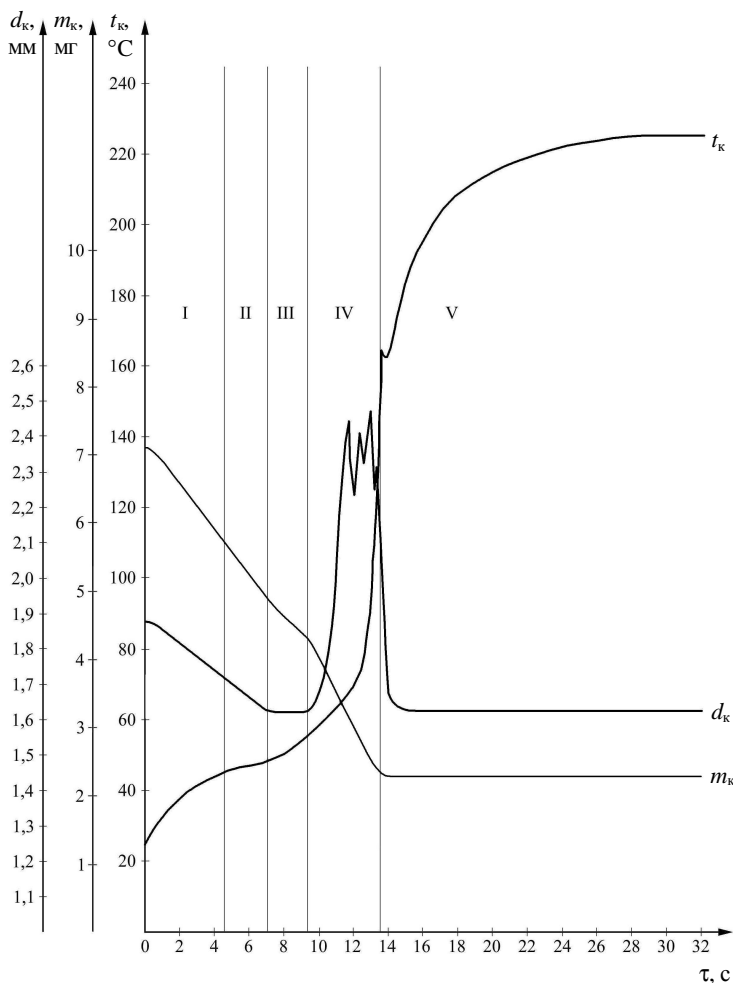


Рис. 3.23. Кинетические кривые совмещенного процесса получения надпероксида калия из раствора перексольвата пероксида калия (образец № 3)

теплообмене капли с газовым теплоносителем. В этом периоде температуру капли в каждый момент времени можно отождествить с температурой мокрого термометра при соответствующих значениях $t_{с.г}$ и $\Phi_{с.г}$. Время завершения этого периода является важной характеристикой кинетики внутренних процессов, поскольку определяет момент

перехода от низкотемпературной стадии процесса к высокотемпературной.

3. Период образования пены начинается при достижении концентрации сухого вещества $C_{\text{пов}} = 40 \dots 43\%$ и происходит при постоянном диаметре капли. Процесс удаления влаги сопровождается незначительным выделением кислорода, являющегося следствием термического разложения раствора перексосолявата пероксида калия. Благодаря выделению кислорода происходит перемешивание вещества в капле. Это дает основание полагать, что температурный и концентрационный градиенты в материале капли незначительны, т.е. допущение о постоянстве температуры $t_k(r, \tau) = t_{\text{пов}}(\tau) = t_k(\tau)$ и концентрации $C_k(r, \tau) = C_{\text{пов}}(\tau) = C_k(\tau)$ по сечению капли не является слишком жестким. На экспериментальных кривых $m_b(\tau)$ данное предположение подтверждается крайне незначительным изменением скорости убыли массы капли на протяжении всего периода. Повышение температуры капли обуславливается увеличением концентрации раствора (температурной депрессией) и экзотермическим характером его разложения.

В этом периоде начинается формирование полый частицы.

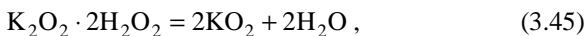
4. Период синтеза KO_2 через образование промежуточного соединения $\text{K}_2\text{O}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}_2$, начало которого фиксируется на приведенных зависимостях при температуре капли $t_k = 53 \dots 57^\circ\text{C}$.

Кристаллизация $\text{K}_2\text{O}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}_2$ (диперексосолявата пероксида калия) из раствора сопровождается разложением избытка перекиси водорода по уравнению реакции

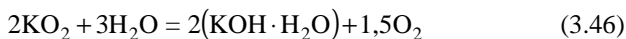


следствием которого является интенсивное выделение кислорода и резкое увеличение диаметра частицы с коэффициентом раздувания $k_{\text{раз}} = d_4/d_3 = 1,43 \dots 1,46$. Отсутствие периода кипения, характерного для большинства растворов при распылительной сушке, позволяет сделать вывод об отсутствии внутренней задачи передачи влаги при кристаллизации раствора.

Далее $\text{K}_2\text{O}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}_2$ диспропорционирует с образованием KO_2 и свободной воды по уравнению реакции



при этом неизбежно протекает побочная реакция разложения целевого продукта



и выделяющийся кислород раздувает каплю, интенсивно перемешивая реакционную массу.

Визуально окончание этого периода определяется по резкому сжатию частицы с коэффициентом сжатия $k_{\text{сж}} = d_4/d_5 = 1,43 \dots 1,46$ и практически мгновенным образованием твердой полый частицы желто-канареечного цвета. Наиболее отчетливо окончание периода прослеживается по наличию экзотермического пика на термограммах.

5. Период падающей скорости сушки, который начинается с момента, когда скорость удаления влаги из частицы ограничивается лишь скоростью перехода влаги, энергетически связанной с материалом, в свободное состояние. В этом периоде интенсивность обезвоживания заметно снижается, что объясняется уменьшением количества оставшейся влаги и ее более сильной связью с материалом. Однако в этом периоде масса капли практически не изменяется, что позволяет его исключить из рассмотрения при расчете высоты аппарата.

В процессе синтеза капля трансформировалась в гранулу с эластичной коркой. Во всех проведенных опытах высушенные частицы были полыми, с тонкими оболочками, близкими к сферическим.

Полученные опытные данные положены в основу математического описания процесса получения надпероксида калия из гидроксида калия и пероксида водорода в аппарате распылительного типа.

3.2.2. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И АППАРАТУРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЕ ОФОРМЛЕНИЕ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ НАДПЕРОКСИДА КАЛИЯ

В реальных распылительных установках при диспергировании образуются капли с различными начальными диаметрами – от $d_{\text{мин}}$ до $d_{\text{макс}}$, причем формирование спектра распыла носит статистический характер.

Наиболее общий подход к описанию функции распределения капель по размерам при распылении пневматическими форсунками рассмотрен в работе [86]. При этом считается, что $d_{\text{мин}} = 0$, а капли остальных размеров возникают вследствие статистических закономерностей и зависят от $d_{\text{макс}}$. Формула для расчета функции плотности распределения в этом случае имеет вид

$$J_n(d) = \frac{dn}{n_0 d(d)} = \frac{\beta_{\Phi}^2 d_{\text{макс}}^2 \exp\left(-\beta_{\Phi} \frac{d_{\text{макс}}}{d}\right)}{d^3 (1 + \beta_{\Phi}) \exp(-\beta_{\Phi})}, \quad (3.47)$$

где $\beta_{\Phi} = 0,350$ для пневматических форсунок.

Для расчета максимального диаметра $d_{\text{макс}}$ при форсуночном распылении будем использовать эмпирическое уравнение:

$$\frac{d_{\text{макс}}}{\delta} = \left(\frac{\sigma_p}{p_{p,г} \delta} \right)^{1/3} \left(1 + \frac{10^6 \mu_p^2}{\rho_p^2 \sigma_p \delta} \right) \left(1 - 0,5 \frac{\rho_{п,г}}{\rho_p} \right), \quad (3.48)$$

где σ_p , μ_p , ρ_p – поверхностное натяжение, динамическая вязкость и плотность диспергируемого раствора соответственно; $p_{p,г}$ – давление распыляющего газа; $\rho_{п,г}$ – плотность парогазовой среды. Толщина пленки δ определяется по известной методике [87].

Будем рассматривать реальный полидисперсный факел распыла (рис. 3.24) как факел, состоящий из N струек со средним начальным диаметром $d_{ab i}$ в каждой i -й струйке. Используя такой подход, можно значительно упростить анализ процессов в полидисперсной системе, не прибегая к грубому осреднению ее параметров.

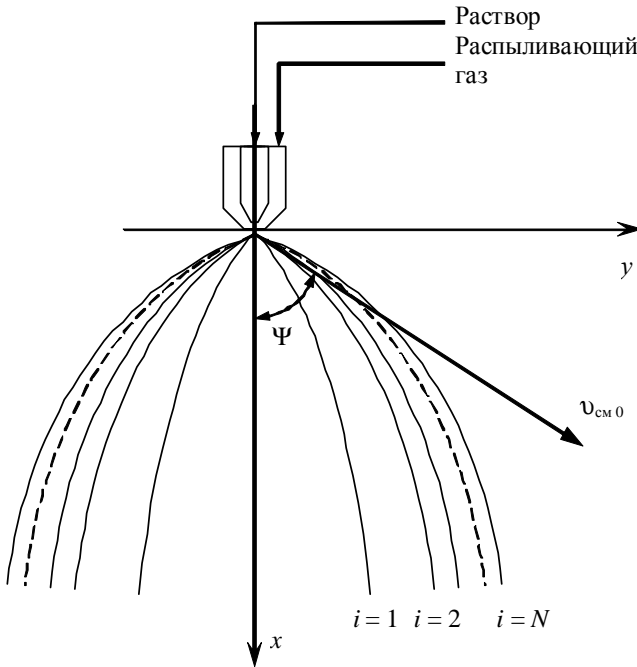


Рис. 3.24. Схема образования полого факела при распылении раствора пневматической форсункой с направляющим дефлектором

В общем случае средний диаметр рассчитывается при известном из опыта распределении частиц по размерам по следующей формуле:

$$d_{ab} = a^{-b} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N d_i^a \Delta n_i}{\sum_{i=1}^N d_i^b \Delta n_i}},$$

где a, b – целые числа, зависящие от способа осреднения; i – номер фракции, на которые разбита совокупность капель; d_i – средний диаметр i -й фракции; Δn_i – число капель i -й фракции; N – общее число фракций.

Тогда в интегральном виде для i -й струйки с начальным диаметром капель от $d_{\min i}$ до $d_{\max i}$, при известном законе распределения $J_n(d)$, средний диаметр капель равен

$$d_{abi} = \left(\frac{\int_{d_{\min i}}^{d_{\max i}} d^a J(d) dd}{\int_{d_{\min i}}^{d_{\max i}} d^b J(d) dd} \right)^{\frac{1}{a-b}}, \quad (3.49)$$

где $i = \overline{1, N}$; $d_{\min i} = \frac{d_{\max} - d_{\min}}{N} (i-1)$; $d_{\max i} = \frac{d_{\max} - d_{\min}}{N} i$.

Расход капель для i -й струйки находим как отношение объемного расхода струйки к объему единичной капли со средним диаметром d_{abi} :

$$n_{abi} = \frac{G_{p0}}{\rho_{p0} d_{abi}^3} \int_{d_{\min i}}^{d_{\max i}} d^3 J(d) dd. \quad (3.50)$$

Вычисление среднего диаметра капель d_{abi} и расхода капель n_{abi} производят в зависимости от того, какое из определяющих свойств системы является существенным в данном случае. При анализе тепло- и массообмена в распылительных аппаратах следует пользоваться средним объемно-поверхностным диаметром, для которого $a = 3, b = 2$.

При расчете расхода газа через выходное сопло форсунки считаем, что течение газа в форсунке адиабатное, так как за короткое время протекания газовых частиц через сопло теплообмен с окружающей средой практически не устанавливается.

Если отношение давления внутри форсунки $p_{p.g}$ к давлению среды $p_{c.g}$, куда происходит истечение, больше критического, т.е.

$$\varepsilon = \frac{p_{c.g}}{p_{p.g}} > \left(\frac{2}{k+1} \right)^{\frac{k}{k-1}}, \quad (3.51)$$

то скорость газа в выходном сечении сопла равна

$$v_{p.g} = \varphi \sqrt{\frac{2k}{k-1} \left(1 - \frac{p_{c.g}}{p_{p.g}} \right)^{\frac{k-1}{k}} p_{p.g} v_{p.g}}, \quad (3.52)$$

где $v_{p.g} = \frac{\tilde{R} T_{p.g}}{M_{p.g} p_{p.g}}$ – удельный объем газа в форсунке, м³/кг; k – показатель адиабаты, равный для воздуха 1,4; φ – скоростной коэффициент, учитывающий трение в форсунке, равный 0,85...0,95; $\tilde{R} = 8,314$ Дж/(кг·К) – универсальная газовая постоянная; $T_{p.g}$ и $M_{p.g}$ – температура и молярная масса газа соответственно.

Расход газа равен

$$G_{p.g} = \varphi f_{p.g} \sqrt{\frac{2k}{k-1} \left[\left(\frac{p_{c.g}}{p_{p.g}} \right) - \left(\frac{p_{c.g}}{p_{p.g}} \right)^{\frac{k-1}{k}} \right] \frac{p_{c.g}}{v_{p.g}}}, \quad (3.53)$$

где $f_{p.g}$ – живое сечение в узком месте сопла, м².

Если отношение давлений меньше или равно критическому, т.е.

$$\varepsilon = \frac{p_{c.g}}{p_{p.g}} \leq \left(\frac{2}{k+1} \right)^{\frac{k}{k-1}}, \quad (3.54)$$

то истечение газа происходит при определенной скорости, называемой критической скоростью:

$$\vartheta_{p.g} = \vartheta_{p.g.kp} = \varphi \sqrt{\frac{2k}{k+1}} p_{p.g} v_{p.g} . \quad (3.55)$$

Секундный расход газа при критических скоростях истечения равен

$$G_{p.g} = \varphi f_{p.g} \sqrt{\frac{2k}{k+1} \left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{2}{k-1}} \frac{p_{p.g}}{v_{p.g}}} . \quad (3.56)$$

Скорость истечения раствора находим из уравнения расхода:

$$\vartheta_p = G_p / f_p , \quad (3.57)$$

где G_p – расход раствора, кг/с; f_p – сечение выходного отверстия для раствора.

По найденным значениям расходов и скоростей взаимодействующих потоков в соответствии с законом сохранения количества движения определяют скорость газожидкостной смеси на выходе из сопла форсунки:

$$\vartheta_{см} = \frac{G_p \vartheta_p + G_{p.g} \vartheta_{p.g}}{G_p + G_{p.g}} . \quad (3.58)$$

На этом расчет основных параметров распыла заканчивается.

Для расчета и конструирования прямоточного распылительного аппарата необходима обобщенная модель процессов переноса количества движения, тепла и массы в дисперсных газожидкостных потоках.

При математическом описании процесса получения надпероксида калия в аппарате распылительного типа будем использовать традиционные уравнения движения, тепло- и влагообмена одиночной капли, уравнения сохранения количества движения, тепла и массы для дисперсной системы в целом, а также эмпирические зависимости, полученные нами при проведении экспериментальных исследований.

Весь факел, ограниченный стенками камеры, разобьем на две зоны. Первая зона начинается от среза сопла и заканчивается, когда скорость сушильного газа по периферии от факела становится равной нулю. Эта зона характеризуется эжекцией сушильного газа в полость факела. Вторая зона характеризуется циркуляцией части парогазовой смеси в полости факела, причем пространство вне факела формально не рассматривается. Ввиду особенностей течения газожидкостного потока в указанных зонах требуется раздельная запись систем дифференциальных уравнений для каждой из них.

Схема процесса получения надпероксида калия в аппарате распылительного типа показана на рис. 3.25.

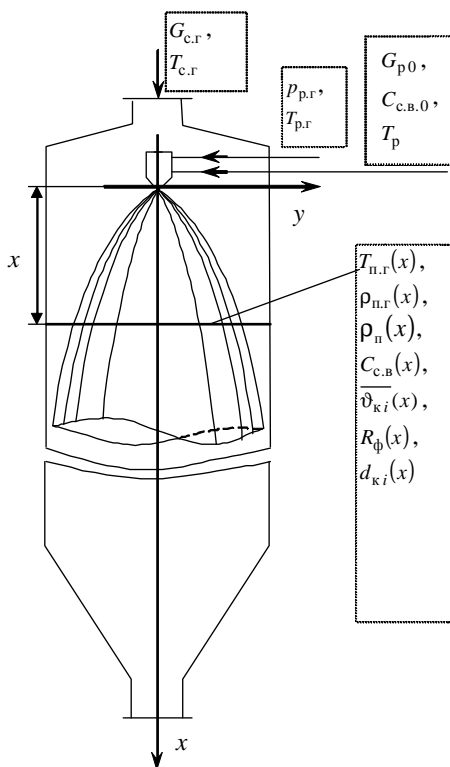


Рис. 3.25. Схема процесса получения надпероксида калия в аппарате распылительного типа

При выводе уравнений математического описания процесса получения надпероксида калия в аппарате распылительного типа приняты следующие основные допущения, правомерность которых обоснована нами в ходе проведенных экспериментальных исследований и в работе [88]:

- 1) полидисперсный поток капель представлен в виде совокупности N струек, каждая из которых характеризуется своим средним объемно-поверхностным (заутеровским) начальным диаметром d_{32i} ;
- 2) капли имеют шарообразную форму;
- 3) процесс протекает во внешнедиффузионной области влаготдачи при постоянной температуре поверхности капли, равной температуре равновесного испарения растворителя;
- 4) пары отводятся от капли равномерно по всей поверхности (отсутствует реактивная сила при испарении растворителя с поверхности капли);

5) движение теплоносителя – сушильного газа принято одномерным (вдоль оси камеры), движение дисперсной фазы – двухмерным (радиальное и осевое) для каждой струйки тока;

6) в качестве распыливаемого и сушильного газов используется сухой воздух;

7) тепловые потери в окружающую среду пренебрежимо малы ввиду наличия тепловой изоляции на поверхности аппарата.

Составим математическое описание процессов по зонам.

Первая зона.

Для наиболее распространенных случаев распылительных процессов, в которых размер частиц находится в диапазоне 20...200 мкм, основное влияние на движение частиц оказывают силы аэродинамического сопротивления и тяжести. С учетом этого, уравнение движения частицы i -й струйки с переменной массой и размером в проекциях на продольную x и радиальную y оси можно записать следующим образом:

$$\frac{d(m_{ki} \vartheta_{kxi})}{d\tau} = -\xi \frac{\pi d_{ki}^2 \rho_{п.г} (\vartheta_{kxi} - \vartheta_{п.г}) |\vartheta_{kxi} - \vartheta_{п.г}|}{4 \cdot 2} + m_{ki} g ,$$

$$\frac{d(m_{ki} \vartheta_{kyi})}{d\tau} = -\xi \frac{\pi d_{ki}^2 \rho_{п.г} \vartheta_{kyi}^2}{4 \cdot 2} ,$$

где $i = \overline{1, N}$ – номер струйки капель; m_{ki} – масса капли, кг; $\rho_{п.г}$, $\vartheta_{п.г}$ – плотность и скорость движения парогазовой смеси в полости факела распыла соответственно; ϑ_{kxi} , ϑ_{kyi} – проекции вектора скорости капли на оси x и y соответственно; τ – время, с; d_{ki} – диаметр капли, м; ξ – коэффициент аэродинамического сопротивления парогазовой смеси движению капли, рассчитывается по уравнению $\xi = \frac{24}{Re} + \frac{4,4}{Re^{1/2}} + 0,32$; Re – число Рейнольдса.

С учетом $d\tau = dx/\vartheta_{kxi}$, и пользуясь правилом дифференцирования произведения функций, запишем уравнения скорости движения капли с условиями однозначности:

$$\frac{d\vartheta_{kxi}}{dx} = \frac{1}{m_{ki}} \left(\frac{1}{\vartheta_{kxi}} \left(m_{ki} g - \frac{\xi \pi d_{ki}^2 \rho_{п.г} (\vartheta_{kxi} - \vartheta_{п.г}) |\vartheta_{kxi} - \vartheta_{п.г}|}{8} \right) - \vartheta_{kxi} \frac{dm_{ki}}{dx} \right); \quad (3.59)$$

$$\vartheta_{kxi}(0) = \vartheta_{cm} \cos \frac{\Psi}{2};$$

$$\frac{d\vartheta_{kyi}}{dx} = \frac{1}{m_{ki}} \left(\frac{-\xi \pi d_{ki}^2 \rho_{п.г} \vartheta_{kyi}^2}{8\vartheta_{kxi}} - \vartheta_{kyi} \frac{dm_{ki}}{dx} \right); \quad (3.60)$$

$$\vartheta_{kyi}(0) = \vartheta_{cm} \sin \frac{\Psi}{2}.$$

В соответствии с математическим описанием гидродинамики факела распыла [89, 90], изменения радиуса и поперечного сечения факела, ограниченного i -й струйкой капель, описываются уравнениями:

$$\frac{dR_i}{dx} = \frac{\vartheta_{kyi} \sqrt{R_i^2 - R_{\phi 0}^2}}{\vartheta_{kxi} R_{\phi 0}}; \quad (3.61)$$

$$R_i(0) = R_{\phi 0};$$

$$\frac{df_i}{dx} = 2\pi R_i \frac{dR_i}{dx}; \quad (3.62)$$

$$f_i(0) = \pi R_{\phi 0}^2.$$

При разбиении факела на большое число струек можно допустить, что радиус факела и площадь его поперечного сечения определяются следующим образом:

$$R_{\phi} = \max_{i=1, N} R_i,$$

$$f_{\phi} = \max_{i=1, N} f_i.$$

Из экспериментов по изучению кинетики совмещенного физико-химического процесса получения KO_2 водным способом отмечена необходимость решения внешней задачи тепловлагообмена, как фактора, определяющего кинетику процесса получения надпероксида калия в целом, т.е. лимитирующего. При этом полагаем, что все тепло, конвективно передаваемое материалу капли, идет на испарение растворителя при температуре равновесного испарения $T_{\text{рав}}$:

$$\frac{dm_{ki}}{dx} = -\eta \frac{\alpha (T_{п.г} - T_{\text{рав}}) \pi d_{ki}^2}{\vartheta_{ki} r}, \quad i = \overline{1, N}, \quad (3.63)$$

$$m_{ki}(0) = \frac{\pi d_{32i}^3}{6} \rho_p,$$

где $\eta = \begin{cases} 1, & C_{c.B} < 1 \\ 0, & C_{c.B} \geq 1 \end{cases}$ – единичная функция, зависящая от концентрации сухого вещества в капле $C_{c.B}$ и характеризующая окончание про-

цесса обезвоживания капли; $d_{ki} = \begin{cases} d_{32i}, & 0,4 < C_{c.B} \leq 0,51 \\ 1,44d_{32i}, & 0,51 < C_{c.B} \leq 0,99 \\ d_{32i}, & 0,99 < C_{c.B} \leq 1,0 \end{cases}$ – диа-

метр капли раствора по результатам экспериментальных данных, м; r – теплота парообразования для воды, Дж/кг.

Коэффициент теплоотдачи определяется с помощью уравнения Дрейка [88]

$$Nu_r = 2 + 0,459 Re^{0,5} Pr_r^{0,33},$$

откуда

$$\alpha = \frac{Nu_r \lambda_{п.г}}{d_{ki}}.$$

Запишем уравнение теплового баланса для парогазовой смеси за время $d\tau$:

$$c_{п.г} d(G_{п.г} T_{п.г}) = c_r T_r dG_r + c_{п.г} T_{рав} dG_{п.г} - \sum_{i=1}^N n_{32i} \alpha (T_{п.г} - T_{рав}) \pi d_{ki}^2 d\tau,$$

из которого после преобразований получим уравнение изменения температуры парогазовой среды вдоль оси камеры:

$$\frac{dT_{п.г}}{dx} = \frac{1}{G_{п.г}} \left[\frac{1}{c_{п.г}} \left(c_r T_r \frac{dG_r}{dx} + c_{п.г} T_{рав} \frac{dG_{п.г}}{dx} - \sum_{i=1}^N \frac{n_{32i} \alpha (T_{п.г} - T_{рав}) \pi d_{ki}^2}{\vartheta_{kxi}} \right) - T_{п.г} \frac{dG_{п.г}}{dx} \right], \quad (3.64)$$

$$T_{п.г}(0) = T_{п.г}.$$

Изменение расхода раствора в i -й струйке составит

$$\frac{dG_{pi}}{dx} = n_{ki} \frac{dm_{ki}}{dx}, \quad i = \overline{1, N}, \quad (3.65)$$

$$G_{pi}(0) = n_{32i} \frac{\pi d_{32i}^3}{6} \rho_p.$$

Причем, очевидно, изменение общего расхода раствора определяется как сумма изменений расхода раствора в струйках:

$$\frac{dG_p}{dx} = \sum_{i=1}^N \frac{dG_{pi}}{dx}, \quad (3.66)$$

$$G_p(0) = G_{p0}.$$

Средняя концентрация сухих веществ в растворе по длине аппарата может быть найдена как отношение расхода раствора на выходе из сопла к текущему расходу: $C_{с.в} = G_{p0} C_{с.в0} / G_p$. Продифференцировав, получим:

$$\frac{dC_{с.в}}{dx} = - \frac{G_{p0} C_{с.в0}}{G_p^2} \frac{dG_p}{dx}, \quad (3.67)$$

$$C_{с.в}(0) = C_{с.в0}.$$

Плотность парогазовой смеси в полости факела при постоянном давлении определяется соотношением

$$\rho_{п.г} = \rho_{п} + \rho_{г}$$

или в дифференциальной форме

$$\frac{d\rho_{п.г}}{dx} = \frac{d\rho_{п}}{dx} + \frac{d\rho_{г}}{dx}, \quad (3.68)$$

$$\rho_{п.г}(0) = \rho_{г0} + \rho_{п0}.$$

Для связи плотности и температуры парогазовой смеси можно воспользоваться уравнением Клапейрона–Менделеева, из которого в случае изобарности процесса теплообмена в полости факела имеем

$$\frac{\rho_{п.г} T_{п.г}}{M_{п.г}} = \text{const}$$

или в дифференциальном виде

$$\left(\frac{d\rho_{п}/dx}{M_{п}} + \frac{d\rho_{г}/dx}{M_{г}} \right) T_{п.г} + \left(\frac{\rho_{п}}{M_{п}} + \frac{\rho_{г}}{M_{г}} \right) \frac{dT_{п.г}}{dx} = 0.$$

После преобразований получим уравнение изменения плотности газа в полости факела:

$$\frac{d\rho_r}{dx} = -M_r \left[\left(\frac{\rho_n}{M_n} + \frac{\rho_r}{M_r} \right) \frac{dT_{n,r}}{T_{n,r} dx} + \frac{d\rho_n}{M_n dx} \right], \quad (3.69)$$

$$\rho_r(0) = \rho_{r0}.$$

Из уравнений расходов компонентов парогазовой смеси (в предположении, что порозность в полости факела близка к 1):

$$G_n = \rho_n f_\phi \vartheta_{n,r},$$

$$G_r = \rho_r f_\phi \vartheta_{n,r}.$$

После дифференцирования по x получим уравнения для плотности пара и расхода газа в полости факела:

$$\frac{d\rho_n}{dx} = \rho_n \left(\frac{dG_n}{G_n dx} - \frac{df_\phi}{f_\phi dx} - \frac{d\vartheta_{n,r}}{\vartheta_{n,r} dx} \right), \quad (3.70)$$

$$\rho_n(0) = \rho_{n0};$$

$$\frac{dG_r}{dx} = G_r \left(\frac{d\rho_r}{\rho_r dx} + \frac{df_\phi}{f_\phi dx} + \frac{d\vartheta_{n,r}}{\vartheta_{n,r} dx} \right), \quad (3.71)$$

$$G_r(0) = \rho_r(0) f_\phi(0) \vartheta_{n,r}(0).$$

Общий расход парогазовой смеси в полости факела

$$G_{n,r} = G_n + G_r$$

или

$$\frac{dG_{n,r}}{dx} = \frac{dG_n}{dx} + \frac{dG_r}{dx}, \quad (3.72)$$

$$G_{n,r}(0) = G_{p,r}.$$

Отметим, что, очевидно,

$$\frac{dG_n}{dx} = -\frac{dG_p}{dx}, \quad (3.73)$$

$$G_n(0) = \rho_n(0) f_\phi(0) \vartheta_{n,r}(0).$$

Из уравнения для изменения импульса сплошной фазы вдоль оси x за время $d\tau$

$$d(G_{п.г} \vartheta_{п.г}) = g \sum_{i=1}^N G_{pi} d\tau - \sum_{i=1}^N d(\vartheta_{кxi} G_{pi}) - d(\vartheta_{с.г} G_{с.г}),$$

заменив $d\tau = dx/\vartheta_{кxi}$, можно получить выражение для изменения скорости парогазовой смеси в полости факела

$$\begin{aligned} \frac{d\vartheta_{п.г}}{dx} = \frac{1}{G_{п.г}} \left(- \sum_{i=1}^N \left(\vartheta_{кxi} \frac{dG_{pi}}{dx} + G_{pi} \frac{d\vartheta_{кxi}}{dx} \right) - \vartheta_{с.г} \frac{dG_{с.г}}{dx} - G_{с.г} \frac{d\vartheta_{с.г}}{dx} + \right. \\ \left. + g \sum_{i=1}^N \frac{G_{pi}}{\vartheta_{кxi}} - \vartheta_{п.г} \frac{dG_{п.г}}{dx} \right), \end{aligned} \quad (3.74)$$

$$\vartheta_{п.г}(0) = \vartheta_{см} \cos \frac{\Psi}{2}.$$

Запишем уравнение расхода для сушильного газа

$$G_{с.г} = \left(\frac{\pi D^2}{4} - f_{\phi} \right) \rho_{с.г} \vartheta_{с.г}$$

и, продифференцировав по x , запишем уравнение изменения скорости сушильного газа в виде

$$\frac{d\vartheta_{с.г}}{dx} = \frac{1}{\pi D^2/4 - f_{\phi}} \left(\frac{dG_{с.г}}{\rho_{с.г} dx} + \vartheta_{с.г} \frac{df_{\phi}}{dx} \right), \quad (3.75)$$

$$\vartheta_{с.г}(0) = \frac{4G_{с.г0}}{\rho_{с.г} \pi D^2};$$

причем

$$\frac{dG_{с.г}}{dx} = - \frac{dG_{г}}{dx}, \quad (3.76)$$

$$G_{с.г}(0) = G_{с.г0}.$$

Вторая зона.

Когда скорость сушильного газа достигает нуля, осуществляется переход ко второй зоне, начало которой обозначается координатой x_{1-2} . Здесь образуется граница между основным и циркулирующим

газовыми потоками, расположенная внутри факела. Так как суммарный вектор скорости газа в зоне циркуляции равен нулю, система уравнений второй зоны относится только к области, расположенной внутри факела. Помимо уравнений для 1 зоны она включает уравнение баланса площадей внутри факела

$$f_{\Phi} = f_0 + f_{\Pi}$$

или в дифференциальном виде относительно площади циркуляционного потока

$$\frac{df_{\Pi}}{dx} = \frac{df_{\Phi}}{dx} - \frac{df_0}{dx}, \quad (3.77)$$

$$f_{\Pi}(x_{1-2}) = 0.$$

Для определения площади основного потока в факеле продифференцируем уравнение

$$G_{\text{п.г}} = \rho_{\text{п.г}} f_0 \vartheta_{\text{п.г}}$$

и запишем в виде

$$\frac{d f_0}{d x} = f_0 \left(\frac{d G_{\text{п.г}}}{G_{\text{п.г}} d x} - \frac{d \rho_{\text{п.г}}}{\rho_{\text{п.г}} d x} - \frac{d \vartheta_{\text{п.г}}}{\vartheta_{\text{п.г}} d x} \right), \quad (3.78)$$

$$f_0(x_{1-2}) = f_{\Phi}(x_{1-2}).$$

При переходе ко 2-й зоне уравнения (3.74), (3.70), (3.71), (3.75) приобретают вид (3.79) – (3.82) соответственно:

$$\frac{d \vartheta_{\text{п.г}}}{d x} = \frac{1}{G_{\text{п.г}}} \left(- \sum_{i=1}^N \left(\vartheta_{\text{кx}i} \frac{d G_{\text{p}i}}{d x} + G_{\text{p}i} \frac{d \vartheta_{\text{кx}i}}{d x} \right) - \rho_{\text{п.г}} f_{\Pi} \vartheta_{\text{п.г}} \frac{d \vartheta_{\text{п.г}}}{d x} + g \sum_{i=1}^N \frac{G_{\text{p}i}}{\vartheta_{\text{кx}i}} - \vartheta_{\text{п.г}} \frac{d G_{\text{п.г}}}{d x} \right); \quad (3.79)$$

$$\frac{d \rho_{\text{п}}}{d x} = \rho_{\text{п}} \left(\frac{d G_{\text{п}}}{G_{\text{п}} d x} - \frac{d f_0}{f_0 d x} - \frac{d \vartheta_{\text{п.г}}}{\vartheta_{\text{п.г}} d x} \right); \quad (3.80)$$

$$\frac{d G_{\Gamma}}{d x} = 0; \quad (3.81)$$

$$\frac{d \vartheta_{\text{с.г}}}{d x} = 0. \quad (3.82)$$

То есть пространство вне факела формально не рассматривается.

Удельная теплоемкость парогазовой смеси в полости факела при постоянном давлении определяется соотношением

$$c_{п.г} = (\rho_{п}c_{п} + \rho_{г}c_{г})/\rho_{п.г} . \quad (3.83)$$

Приближенную оценку значений переменных коэффициентов теплопроводности $\lambda_{п.г}$ и динамической вязкости $\mu_{п.г}$ парогазовой смеси можно получить из литературы [89, 91] соотношения для многокомпонентных газовых смесей. Для вязкости парогазовой смеси – формулу Уилка

$$\mu_{п.г} = \sum_i \mu_i \left(1 + \sum_{j \neq i} K_{ij} \frac{x_j}{x_i} \right)^{-1} ; \quad (3.84)$$

для теплопроводности смеси – уравнение Васильевой

$$\lambda_{п.г} = \sum_i \lambda_i \left(1 + \sum_{j \neq i} N_{ij} \frac{x_j}{x_i} \right)^{-1} , \quad (3.85)$$

где коэффициенты K_{ij} рассчитываются по формуле Уилка:

$$K_{ij} = \frac{\left[1 + (\mu_i/\mu_j)^{0,5} (M_j/M_i)^{0,25} \right]^2}{2\sqrt{2} (1 + M_i/M_j)^{0,5}} ; \quad (3.86)$$

N_{ij} – по формуле Масона и Саксены, причем $N_{ij} = 1,065K_{ij}$, а отношение x_j/x_i мольных долей компонентов может быть выражено через ρ_{ij} и M_{ij} :

$$x_j/x_i = (\rho_j/\rho_i) (M_i/M_j) . \quad (3.87)$$

Значения коэффициентов вязкости μ_i и теплопроводности λ_i отдельных компонентов смеси в зависимости от ее температуры $T_{п.г}$ рассчитываются по уравнению Сатерленда

$$\frac{\mu_i}{\mu_{0i}} = \frac{\lambda_i}{\lambda_{0i}} = \sqrt{T_{п.г}/T_{0i}} \frac{1 + S_i/T_{0i}}{1 + S_i/T_{п.г}} , \quad (3.88)$$

где μ_{0i} и λ_{0i} – значения вязкости и теплопроводности при температуре T_{0i} ; S_i – постоянная Сатерленда, рассчитываемая по уравнению Фогеля:

$$S_i \approx 1,47T_{\text{кип } i} \quad (3.89)$$

Уравнения (3.59) – (3.89) с соответствующими условиями однозначности представляют замкнутую математическую модель процессов переноса количества движения, тепла и массы, решение которой позволяет рассчитать изменение основных параметров двухфазного дисперсного потока по высоте факела распыла, аксиально обдуваемого сушильным газом.

3.2.3. ПРОВЕРКА АДЕКВАТНОСТИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Для проверки адекватности разработанной математической модели процесса получения надпероксида калия из раствора перексольвата пероксида калия в аппарате распылительного типа реальному процессу нами проведено сопоставление результатов математического моделирования с экспериментальными данными. При этом аппарат имел следующие основные конструктивные характеристики.

1. Аппарат:
 - высота рабочей зоны цилиндрической камеры H , м 1,0
 - диаметр цилиндрической камеры D , м 0,24
2. Форсунка:
 - площадь поперечного сечения отверстия для подачи раствора на выходе из форсунки f_p , м² $5,024 \cdot 10^{-7}$
 - площадь поперечного сечения отверстия для подачи распыливаемого газа $f_{p,г}$, м² $7,536 \cdot 10^{-7}$
 - угол при вершине факела распыла ψ , град 12

Натурные эксперименты проводились после вывода пилотной установки на статический режим. Всего было проведено 4 эксперимента при различных входных параметрах. Все контролируемые входные переменные процесса представлены в табл. 3.12.

При этом в качестве параметров адекватности были выбраны: температура парогазовой смеси в полости факела распыла $T_{п,г}$, содержание парогазовой смеси $d_{п,г}$, радиус поперечного сечения факела распыла $R_{ф}$. Измерения всех параметров проводились на оси рас-

3.12. Входные параметры пилотной установки

Наименование параметра	Номер эксперимента			
	1	2	3	4
$G_{p,0}$, кг/с	$1,414 \cdot 10^{-4}$	$7,068 \cdot 10^{-5}$	$1,414 \cdot 10^{-4}$	$2,073 \cdot 10^{-4}$
$G_{c,r,0}$, кг/с	$7,157 \cdot 10^{-3}$	$5,370 \cdot 10^{-3}$	$8,589 \cdot 10^{-3}$	$1,379 \cdot 10^{-2}$
$p_{p,r}$, Па	$6,867 \cdot 10^5$	$1,962 \cdot 10^5$	$3,924 \cdot 10^5$	$2,943 \cdot 10^5$
$C_{c,v}$, кг/кг	0,393	0,393	0,393	0,402
$T_{c,r}$, К	523	423	473	453
$T_{p,r}$, К	283	283	293	293
T_p , К	283	283	293	293

пылительной камеры при различной удаленности от сопла форсунки. Замер температуры $T_{п,r}(x)$ осуществляли игольчатыми термопарами ХК в защитной оболочке из фторопласта с выводом данных на много-точечный потенциометр. Содержание водяного пара в полости факела $d_{п,r}(x)$ определяли с помощью измерителя влажности и температуры ИВГ-1МК. Радиус факела распыла $R_{\phi}(x)$ определяли геометрически.

Расчеты проводились по специально разработанной программе на языке C++, осуществлявшей решение представленной выше математической модели при $N = 20$. Для численного интегрирования системы дифференциальных уравнений использовали метод Рунге–Кутты четвертого порядка с автоматическим выбором шага интегрирования.

Коэффициенты вязкости, плотности и поверхностного натяжения раствора пероксосольвата пероксида калия рассчитывались с использованием зависимостей, полученных в работе [92].

Начальные данные принимались такими же, как и в реальном процессе. В таблице 3.13 приведены сравнительные экспериментальные и расчетные значения параметров адекватности по каждому из проведенных экспериментов.

Из сопоставления экспериментальных и расчетных данных следует: наибольшее рассогласование параметров адекватности не превышает 17%, что позволяет сделать вывод о допустимости использования

3.13. Экспериментальные и расчетные данные параметров адекватности

№ эксперимента	Координата x , м	Параметры адекватности					
		Эксперимент			Расчет		
		$T_{п.г}$, К	$d_{п.г}$, кг/кг	$R_{ф}$, м	$T_{п.г}$, К	$d_{п.г}$, кг/кг	$R_{ф}$, м
1	0,05	425	0,00021	0,006	432	0,00024	0,0052
	0,20	470	0,00128	0,027	483	0,00135	0,0259
	0,40	462	0,00901	0,085	465	0,00886	0,0869
	0,60	450	0,01163	0,089	457	0,01187	0,0881
2	0,05	413	0,00025	0,006	402	0,00023	0,0054
	0,20	420	0,00099	0,037	411	0,00091	0,0336
	0,40	385	0,00905	0,011	391	0,00911	0,0985
	0,60	383	0,00910	0,103	391	0,00911	0,0985
3	0,05	424	0,00033	0,006	431	0,00039	0,0053
	0,20	447	0,00132	0,031	456	0,00124	0,0295
	0,40	430	0,01055	0,090	432	0,01069	0,0982
	0,60	427	0,01064	0,094	432	0,01069	0,0984
4	0,05	414	0,00054	0,007	420	0,00050	0,0053
	0,20	431	0,00095	0,031	445	0,00082	0,0291
	0,40	433	0,00350	0,090	439	0,00324	0,0978
	0,60	420	0,00943	0,110	423	0,00958	0,1179

разработанной математической модели при расчете основных конструктивных и режимных параметров процесса получения надпероксида калия в аппарате распылительного типа с приемлемой для практики точностью.

3.2.4. РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ РАСЧЕТА АППАРАТА РАСПЫЛИТЕЛЬНОГО ТИПА

Разработанная математическая модель процессов, протекающих в аппарате распылительного типа, достаточно универсальна и может быть использована для моделирования режимов работы аппарата, расчета его конструктивных параметров и оптимизации режимных и конструктивных параметров технологического процесса.

Исходными данными для расчета являются: расход раствора на входе в форсунку G_{p0} , температура раствора T_{p0} и его концентрация C_{p0} в момент диспергирования, давление $P_{p,г}$ и температура $T_{p,г}$ распыливаемого газа в форсунке, площадь поперечного сечения выходного отверстия форсунки для раствора f_p и распыливаемого газа $f_{p,г}$, угол раскрытия факела ψ , число струек N , на которые разбивается факел, начальное приближение для диаметра распылительной камеры аппарата D , температура сушильного газа $T_{с,г}$, влагосодержание парогазовой смеси на входе $d_{вх}$ и выходе $d_{вых}$ из аппарата.

Алгоритм

Шаг 1. Рассчитать физико-химические свойства раствора v_p , ρ_p , σ_p по экспериментально найденным зависимостям:

$$v_p = 10^{-6} \left[a_0^{(v_p)} + a_1^{(v_p)} C_{H_2O} + a_2^{(v_p)} C_{H_2O}^2 \right],$$

$$a_0^{(v_p)} = 9413,54 - 61,9307T_p + 0,10213T_p^2,$$

$$a_1^{(v_p)} = -38\,026,39 + 250,9153T_p - 0,41480T_p^2,$$

$$a_2^{(v_p)} = 39\,320,46 - 259,9735T_p + 0,43053T_p^2,$$

$$\rho_p = a_0^{(\rho_p)} + a_1^{(\rho_p)} C_{H_2O} + a_2^{(\rho_p)} C_{H_2O}^2,$$

$$a_0^{(\rho_p)} = 1900,04 - 1,07878T_p,$$

$$a_1^{(\rho_p)} = 48,1161 + 5,44812T_p,$$

$$a_2^{(\rho_p)} = -1561,93 - 4,97642T_p,$$

$$\sigma_p = a_0^{(\sigma_p)} + a_1^{(\sigma_p)} C_{H_2O} + a_2^{(\sigma_p)} C_{H_2O}^2,$$

$$a_0^{(\sigma_p)} = 49,6879 - 0,12943T_p,$$

$$a_1^{(\sigma_p)} = -138,045 + 0,43386T_p,$$

$$a_2^{(\sigma_p)} = 129,015 - 0,40980T_p,$$

где T_p – температура раствора, К; C_{H_2O} – концентрация воды в растворе, кг/кг, а также d_{32i} , n_{32i} , ($i = \overline{1, N}$) и гидравлические параметры $G_{p,i}$, $\vartheta_{см}$ распыла пневматической форсунки по уравнениям (3.47) – (3.58).

Шаг 2. Сформировать НУ для уравнений (3.59) – (3.76).

Шаг 3. Проинтегрировать систему уравнений (3.59) – (3.82) математической модели процесса получения KO_2 в аппаратах распылительного типа с НУ, правый конец отрезка интегрирования определить из условия достижения значения концентрации сухого вещества $C_{с.в} \approx 1$ кг/кг.

Шаг 4. При невыполнении условия

$$k_{D \text{ мин}} D/2 \leq R_{\phi \text{ макс}} \leq k_{D \text{ макс}} D/2$$

произвести коррекцию диаметра распылительной камеры аппарата

$$D = \begin{cases} D + \Delta, R_{\phi \text{ макс}} < k_{D \text{ мин}} D/2 \\ D - \Delta, R_{\phi \text{ макс}} > k_{D \text{ макс}} D/2 \end{cases},$$

где Δ – шаг коррекции, определяемый экспериментально, и перейти к шагу 2. В противном случае рассчитать высоту камеры $H = k_H x (C_{с.в} \approx 1)$ и расчет закончить.

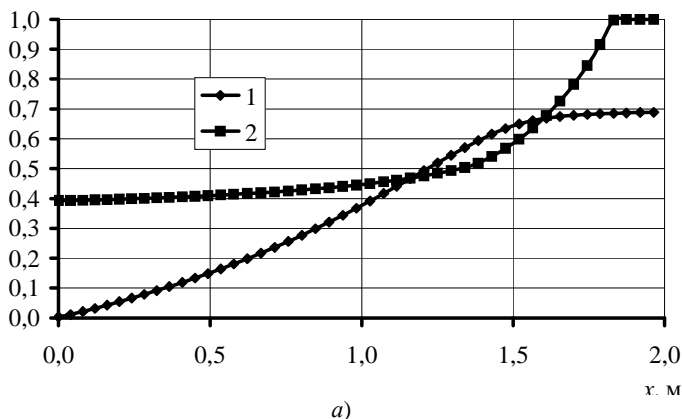
В практике проектирования технологических аппаратов коэффициенты запаса, которые приводятся в алгоритме, обычно не превышают 25%.

Результаты расчета распылительного аппарата по описанному алгоритму для технологической линии производительностью 50 т надпероксида калия в год представлены на рис. 3.26.

Как можно видеть из рис. 3.26, *a*, максимальный радиус факела составил 0,69 м, а образование надпероксида калия заканчивается в поперечном сечении распылительной камеры на расстоянии 1,85 м от среза сопла. Таким образом, с учетом принятых коэффициентов запаса, размеры распылительной камеры составили: $D = 1,5$ м, $H = 2,15$ м.

В результате проведенных расчетов получили другие параметры по высоте аппарата: проекции скорости капли $\vartheta_{кxi}$ и $\vartheta_{кyi}$, $i = \overline{1, N}$ (рис. 3.26, *в*); радиус R_i и площадь f_i факела распыла, ограниченные i -й струйкой капель, а также радиус R_{ϕ} (рис. 3.26, *a*) и площадь f_{ϕ} факела; массу $m_{ки}$ и диаметр $d_{ки}$ капель i -й струйки; расход раствора $G_{p,i}$ в i -й струйке, общий расход раствора G_p ; усредненную концент-

$C_{с.в.}, \text{кг/кг}; R_{\phi}, \text{м}$



$T_{п.г.}, \text{К}$

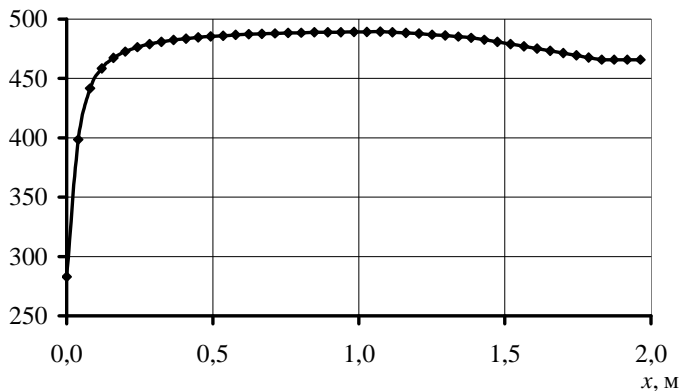


Рис. 3.26. Кинетические кривые промышленного процесса получения надпероксида калия в аппарате распылительного типа мощностью 50 т/год:

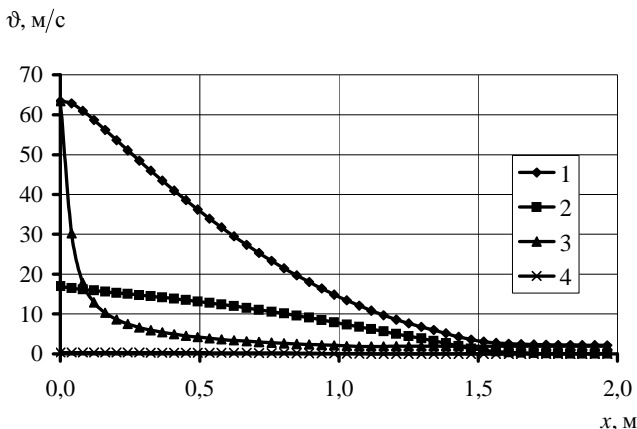
a) - 1 - $C_{с.в.}$; 2 - R_{ϕ} ; б) - $T_{п.г.}$; в) - 1 - $\vartheta_{к.х.N}$; 2 - $\vartheta_{к.у.N}$; 3 - $\vartheta_{п.г.}$; 4 - $\vartheta_{с.г.}$.

Входные конструктивные и режимные параметры процесса:

$$D = 1,5 \text{ м}, \psi = 30^\circ, f_p = 7,065 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2, f_{p,r} = 4,522 \cdot 10^{-6}, N = 20,$$

$$G_{p,0} = 9,343 \cdot 10^{-3} \text{ кг/с}, G_{с.г,0} = 4,756 \cdot 10^{-1} \text{ кг/с}, p_{p,r} = 2,943 \cdot 10^5 \text{ Па},$$

$$T_{с.г} = 498 \text{ К}, T_{p,r} = 283 \text{ К}, T_p = 283 \text{ К}$$



в)

Рис. 3.26. Продолжение

рацию сухих веществ $C_{с.в}$ (рис. 3.26, а); плотности водяного пара $\rho_{п}$, газа (сухого воздуха) $\rho_{г}$ и парогазовой смеси $\rho_{п.г}$ в полости факела; расход $G_{п.г}$, скорость движения $v_{п.г}$ (рис. 3.26, в) и температуру $T_{п.г}$ (рис. 3.26, б) парогазовой смеси.

Результаты компьютерного моделирования позволяют более детально исследовать процессы, протекающие в полидисперсном двухфазном потоке распылительных прямоточных аппаратов.

3.2.5. ПРАКТИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО АППАРАТУРНОМУ ОФОРМЛЕНИЮ ПРОМЫШЛЕННОГО ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ НАДПЕРОКСИДА КАЛИЯ ИЗ ПЕРОКСИДА ВОДОРОДА И ГИДРОКСИДА КАЛИЯ

При разработке процесса получения надпероксида калия из гидроксида калия и пероксида водорода, описанного выше, удалось органично решить задачи, связанные с охраной окружающей среды и рациональным использованием энергетических ресурсов.

В технологической схеме непрерывного производства надпероксида калия из пероксида водорода и гидроксида калия, представленной на рис. 3.27 (условные обозначения, приведены в табл. 3.14 и 3.15), приготовление раствора перексосольвата пероксида калия осуществляется периодическим способом, а синтез надпероксида калия, подготовка сушильного агента, улавливание и выгрузка готового продукта – по непрерывной технологии.

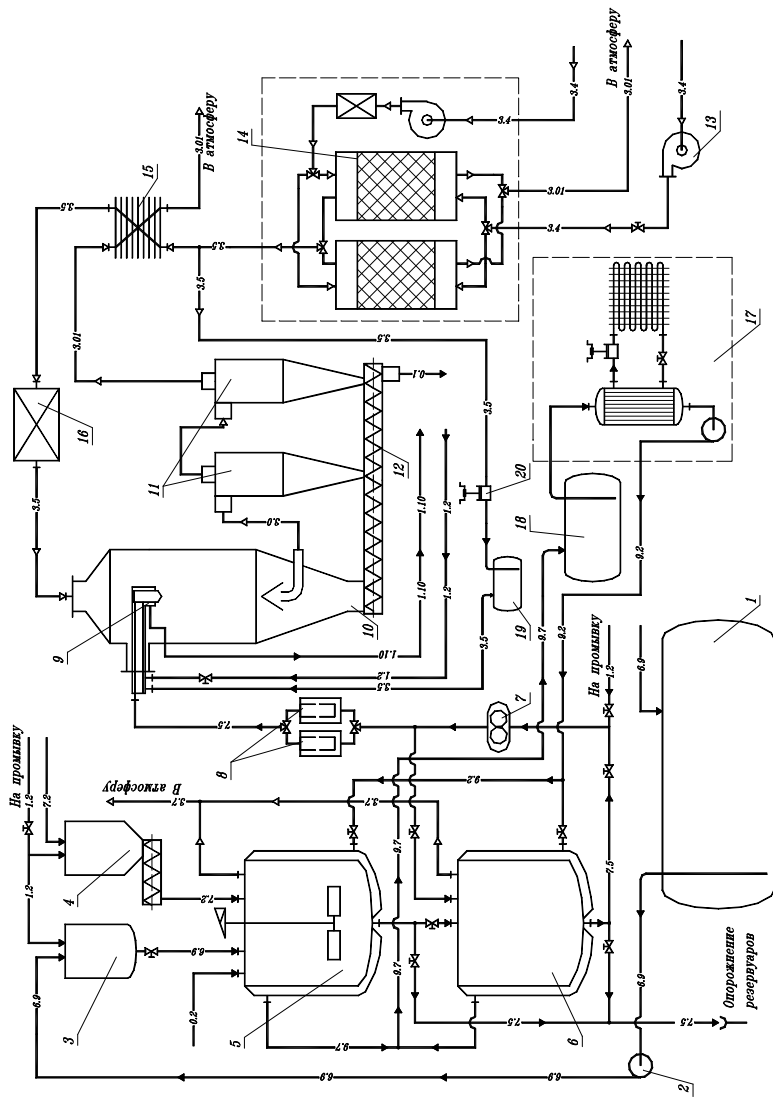


Рис. 3.27. Технологическая схема производства надпероксида калия из пероксида водорода и гидроксида калия

Приготовление раствора пероксогидрата пероксида калия.

Пероксид водорода концентрацией 50%, хранящийся в алюминиевой емкости 1, подается центробежным насосом 2 в мерник 3, откуда дозируется в реактор 5, снабженный охлаждающей рубашкой и турбинной мешалкой. В реакторе последовательно осуществляют растворение частиц семиводного сульфата магния в мольном соотношении $\text{H}_2\text{O}_2/\text{MMgS}_4 = 750$ и охлаждение полученного стабилизированного раствора пероксида водорода до 10 °С. Затем в реактор питателем 4 непрерывно подается чешуирующий гидроксид калия с содержанием основного вещества 85% до тех пор, пока не будет достигнуто мольное соотношение $\text{H}_2\text{O}_2/\text{KOH} = 1,75$ (не допуская нагрева реакционной смеси в реакторе выше 10 °С во избежание разложения пероксидных продуктов). Полученный раствор пероксогидрата пероксида калия хранится в расходной емкости 6.

На протяжении всех технологических операций по хранению и транспортировке раствора его температура не должна превышать 25 °С. Для охлаждения раствора в аппаратах 5, 6 используется холодильная установка 17. Охлаждающий агент – раствор хлорида кальция, хранится в ресивере 18.

Синтез надпероксида калия, подготовка сушильного агента, улавливание и выгрузка готового продукта.

Раствор пероксогидрата пероксида калия насосом 7 через фильтр 8 очистки от механических примесей подается на распыление в охлаждаемую форсунку 9 и взаимодействует с прямотоком сушильного агента в аппарате 10. Газ на распыление подается из ресивера 19. При этом синтез надпероксида калия в распылительном аппарате 10 протекает поэтапно. Вначале осуществляется обезвоживание раствора пероксогидрата пероксида калия, затем его кристаллизация до дипероксогидрата пероксида калия, который диспропорционирует до надпероксида калия.

Атмосферный воздух газодувкой 13 подается в адсорбционную установку 14, где происходит очистка его от паров воды и диоксида углерода. Предварительный нагрев воздуха осуществляется в рекуперативном теплообменнике 15, используя тепло отработанного сушильного агента, затем он догревается в электрокалорифере 16 до температуры 250 °С и подается в распылительный аппарат 10. Температура сушильного агента регулируется посредством изменения напряжения на клеммах калорифера. Готовый продукт улавливается в последовательно включенных батарейных циклонах 11 и выгружается шнековым транспортером 12 в герметичную тару.

3.14. Обозначение машин и аппаратов

Позиция	Наименование	Количество
1	Емкость	1
2	Насос	1
3	Мерник	1
4	Бункер со шнековым питателем	1
5	Реактор с рубашкой и мешалкой	1
6	Емкость с охлаждающей рубашкой	1
7	Насос шестеренный	1
8	Фильтр	2
9	Форсунка пневматическая	1
10	Аппарат распылительный	1
11	Циклон батарейный	1
12	Шнековый транспортер	1
13	Газодувка	1
14	Установка адсорбционная	1
15	Теплообменник	1
16	Калорифер электрический	1
17	Установка холодильная	1
18	Сборник	1
19	Ресивер	1
20	Компрессор	1

Удельные расходы сырья и электроэнергии при производстве надпероксида калия из пероксида водорода и гидроксида калия приведены в табл. 3.16.

3.15. Обозначения сред в трубопроводах

Условное обозначение	Наименование среды в трубопроводе
- 7.2 -	Чешуируванный гидроксид калия с содержанием основного вещества 85...90%
- 1.2 -	Вода технологическая
- 9.2 -	Хладагент – хлорид кальция
- 9.7 -	Отработанный хладагент
- 6.9 -	Пероксид водорода концентрацией 50%
- 0.2 -	Гептагидрат сульфата магния
- 7.5 -	Раствор пероксосольвата пероксида калия
- 0.1 -	Готовый продукт
- 3.4 -	Атмосферный воздух
- 3.5 -	Сухой воздух, освобожденный от диоксида углерода
- 3.6 -	Сушильный агент
- 3.0 -	Пыль продукта
- 3.01 -	Воздух отработанный
- 3.7 -	Кислород
- 1.10 -	Вода отработанная

3.16. Удельные расходы сырья и электроэнергии на производство надпероксида калия

Наименование	Удельный расход
Электроэнергия	9470 кВт·ч/т
Гидроксид калия	1,3029 т/т
Пероксид водорода	2,3492 т/т
Гептагидрат сульфата магния	0,01562 т/т

Себестоимость надпероксида калия, производимого по разработанной непрерывной технологии, составляет 106 р., что на 43% ниже себестоимости супероксида калия, получаемого путем сжигания металлического калия.

3.3. ЭНЕРГОСБЕРЕГАЮЩИЕ УСТАНОВКИ КОРОТКОЦИКЛОВОЙ АДСОРБЦИИ ДЛЯ ОБОГАЩЕНИЯ ВОЗДУХА КИСЛОРОДОМ

3.3.1. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНОГО ПРОЦЕССА ОБОГАЩЕНИЯ ВОЗДУХА КИСЛОРОДОМ В ЭНЕРГОСБЕРЕГАЮЩЕЙ УСТАНОВКЕ КОРОТКОЦИКЛОВОЙ АДСОРБЦИИ

В НОЦ ТГТУ – ОАО «Корпорация «Росхимзащита» «Новые химические технологии» разработана экспериментальная двухадсорберная установка для осуществления процесса обогащения воздуха кислородом и изучения влияния конструктивных параметров и режимных переменных на производительность и концентрацию кислорода на выходе из установки (рис. 3.28, 3.29).

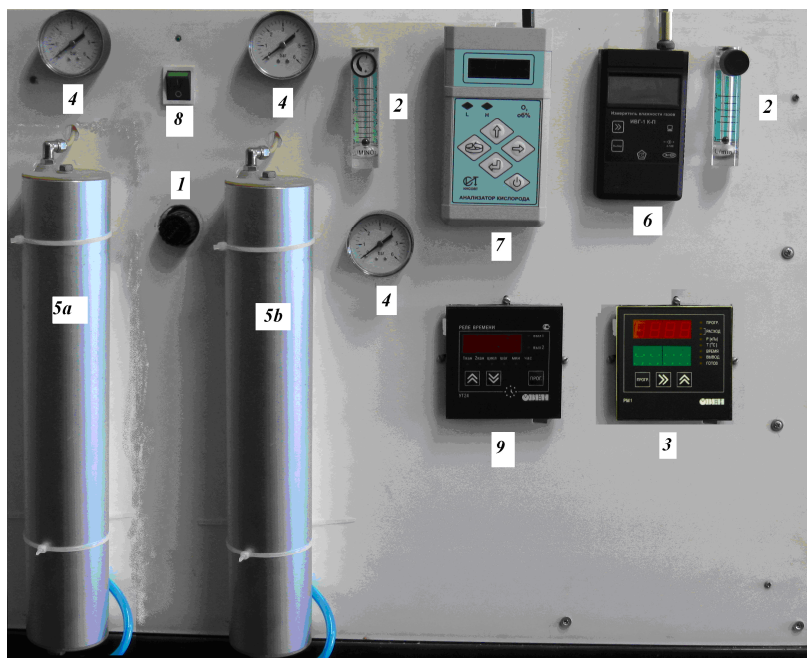


Рис. 3.28. Экспериментальная двухадсорберная установка:

- 1 – регулирующий вентиль; 2 – ротаметр;
3 – измеритель расхода многоканальный; 4 – манометр; 5а, 5б – адсорберы;
6 – измеритель влажности газов; 7 – измеритель концентрации кислорода;
8 – кнопка включения; 9 – реле времени

Установка работает следующим образом: воздух, подаваемый компрессором 10 (рис. 3.32), проходит очистку от частиц пыли, взвешенных в воздухе с помощью фильтра 11, после чего осушается в фильтре-осушителе 12, заполненном гранулированным цеолитом NaX. Поскольку фильтр-осушитель 12 работает не в режиме продувочной регенерации, то с помощью измерителя влажности газов 6 (прибор для измерения микровлажности газов ИВГ-1) осуществляется контроль влажности воздуха, подаваемого на обогащение кислородом с целью определения наступления отработки адсорбционной емкости по воде. Воздушный поток поступает в адсорбер 5а, где осуществляется его обогащение кислородом, после чего выходящий поток направляется в

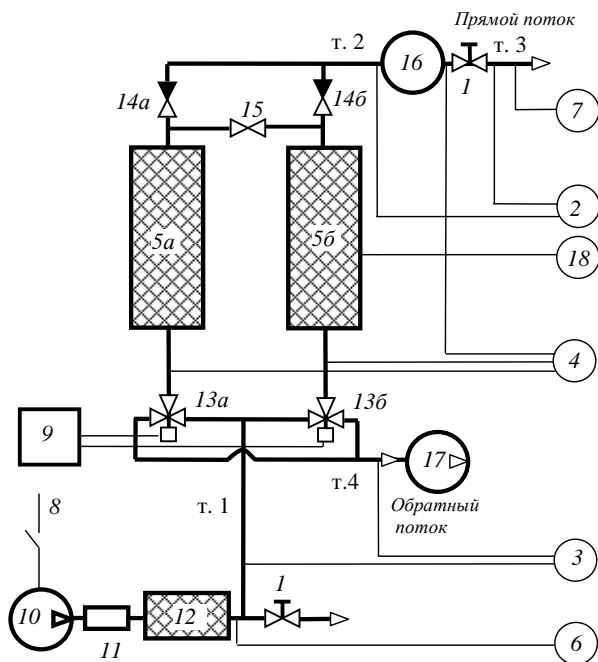


Рис. 3.29. Принципиальная схема экспериментальной двухадсорберной установки:

- 1 – регулирующий вентиль; 2 – ротаметр;
 3 – измеритель расхода многоканальный; 4 – манометр; 5а, 5б – адсорберы;
 6 – измеритель влажности газов; 7 – измеритель концентрации кислорода;
 8 – кнопка включения; 9 – реле времени; 10 – компрессор; 11 – воздушный
 фильтр; 12 – фильтр-осушитель; 13а, 13б – электромагнитные клапаны;
 14а, 14б – обратные клапаны; 15 – дроселирующий вентиль;
 16 – газовый резервуар; 17 – вакуум-насос; 18 – термометр ртутный

ресивер 16. Часть потока дросселируется до пониженного давления и направляется противотоком в адсорбер 5б, где осуществляется регенерация адсорбента. Концентрация кислорода в потоке, направляемом потребителю из ресивера, контролируется с помощью газоанализатора кислорода 7 (газоанализатор кислорода портативный ПГК-06-100-Р1). Величины потоков контролируются с помощью ротаметров 2 и многоканального измерителя расхода 3, влажность – с помощью измерителя влажности газов 6, давление – с помощью манометров 4. Давление входящего потока регулируется вентилем 1, продолжительность цикла задается с помощью микропроцессорного реле времени 9, высота слоя адсорбента фиксируется путем установки крышек адсорбера на заданную глубину.

С помощью газоанализатора кислорода 7 определяется концентрация кислорода на выходе из адсорбера в точке 2 и в продуктивном потоке, отбор которого осуществляется из ресивера 16 в точке 3 с помощью вентиля 1. Концентрация кислорода в точке 2 и в точке 3 совпадают только в том случае, если вентиль 1 открыт максимально и не создает препятствий выходящему из адсорбера потоку. В точке 4 измеряется концентрация кислорода в обратном потоке.

На экспериментальной двухадсорберной установке проведен анализ влияния входных (управляющих) переменных процесса обогащения воздуха кислородом и внутренних параметров установки короткоциклового адсорбции на ее производительность и концентрацию кислорода. Установлено, что производительность установки и концентрация кислорода в наибольшей степени зависят от адсорбционных свойств адсорбента (диаметра гранул d_r , эквивалентного диаметра каналов d_s , предельного адсорбционного объема W_0 , относительного объема вторичных пор ε_2 , пористости ε_3); конструктивных параметров (диаметра адсорбера, высоты слоя адсорбента) и режимных (управляющих) переменных (длительности цикла, коэффициента обратной промывки).

Экспериментальные исследования нестационарного процесса обогащения воздуха кислородом включали изучение зависимостей производительности и концентрации кислорода на выходе из установки короткоциклового адсорбции от величин длительности цикла $\tau_{ц}$, коэффициента обратной промывки θ , высоты блока (слоя) адсорбента H при различных значениях давлений адсорбции $P_{ад}$ и десорбции $P_{дес}$, удельной производительности q . Варьирование режимных (управляющих) переменных и конструктивных параметров осуществляли в следующих пределах: $P \in [0,5...3] \cdot 10^5$ Па; $\tau_{ц} \in [0,2...30]$ с; $\theta \in [1...2,6]$; $\psi_{пр} \in [0,05...0,95]$; $q \in [0,02...4]$; $H \in [0,1...0,4]$ м; $D_{вн} = [0,02; 0,035; 0,05]$ м.

Основными аппаратами экспериментальной установки являются адсорберы 5а и 5б, конструктивное исполнение которых представлено на рис. 3.30.

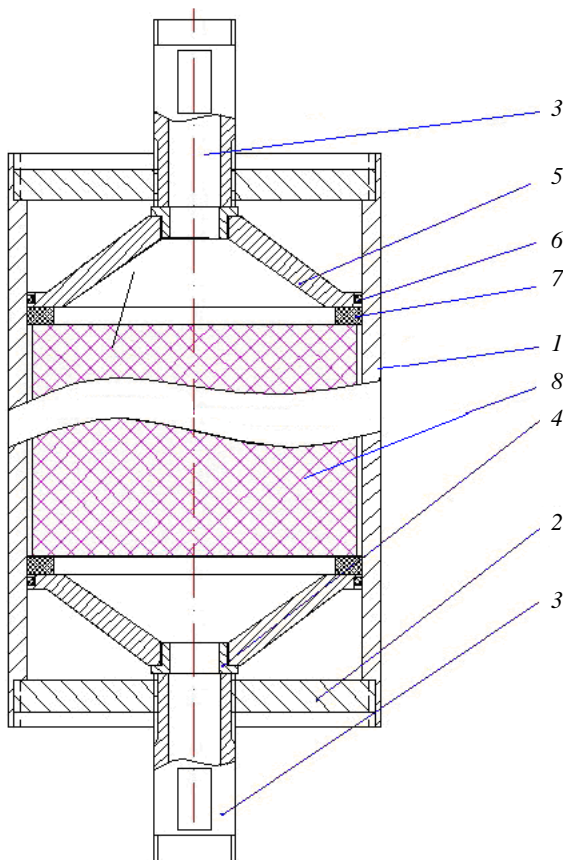


Рис. 3.30. Адсорбер:

- 1 – корпус; 2 – крышка; 3 – штуцер; 4 – антифрикционная втулка;
 5 – коническая вставка; 6 – уплотнение конической вставки;
 7 – уплотнительная прокладка; 8 – блочный адсорбент

Корпус 1 снабжен уплотнительными элементами 7 по обоим торцам, к которым прилегает цеолитовый блок 8. В крышках 2 установлены штуцеры 3 для подвода и отвода обрабатываемой газовой среды с возможностью осевого перемещения. Путем вкручивания или выкручивания штуцеров 3 обеспечивается возможность закрепления блока адсорбента различной высоты H . Штуцеры 3 взаимодействуют с коническими вставками 5, герметично установленными в корпусе 1. В результате обеспечивается простота конструкции при использовании цилиндрических цеолитовых блоков за счет отсутствия герметизации по образующей.

При использовании конических вставок 5 с различным углом наклона конусной части обеспечивается возможность использования блоков адсорбента с различным внешним диаметром в пределах 0,02...0,06 м. Внутренний диаметр корпуса равен 0,06 м. В случае использования блока с диаметром $D_{\text{вн}}$ более 0,05 м нет необходимости в его герметизации по образующей ввиду малого паразитного объема, при меньшем же значении диаметра блока $D_{\text{вн}}$ герметизация по образующей необходима, что обеспечивается установкой дополнительной втулки между корпусом 1 и блочным адсорбентом 8.

Методика исследования адсорбционных свойств изготовленных в опытно-промышленных условиях ОАО «Корпорация «Росхимзащита» цеолитовых блоков заключалась в определении изотерм адсорбции-десорбции азота при 20 °С объемным методом [93] для образцов, прокаленных при 550 °С в течение 8 часов (рис. 3.31).

Обработка полученных данных производилась посредством линеаризации изотерм адсорбции (рис. 3.32) в специальных координатах теории объемного заполнения микропор (ТОЗМ) [94, 95]. Снятые изотермы с приемлемой для практики точностью описывались одночленным уравнением ТОЗМ (уравнение Дубинина–Радушкевича, которое является частным случаем уравнения Астахова–Дубинина при $n = 2$). По линеаризованным изотермам для каждого образца были рассчитаны значения предельного адсорбционного объема W_0 , параметра уравнения ТОЗМ B_T , пористости ϵ_3 , относительного объема вторичных пор ϵ_2 . Полученные результаты представлены в табл. 3.17.

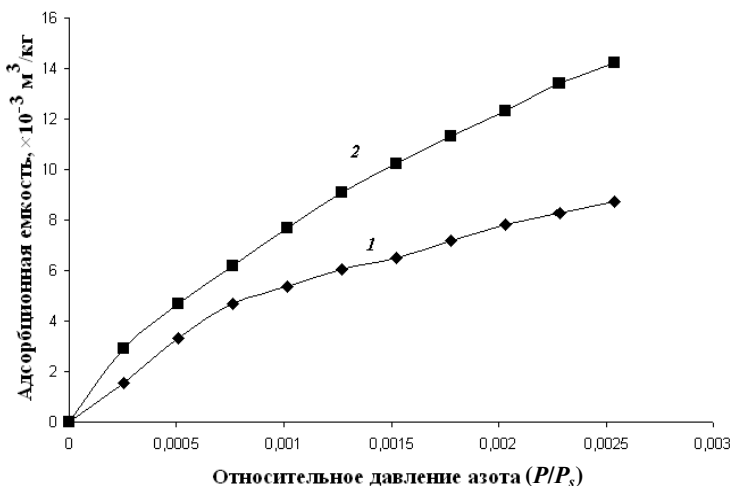


Рис. 3.31. Изотермы адсорбции азота при 20 °С образцами блоков с цеолитом типа X:
1 – Na-форма; 2 – Li-форма

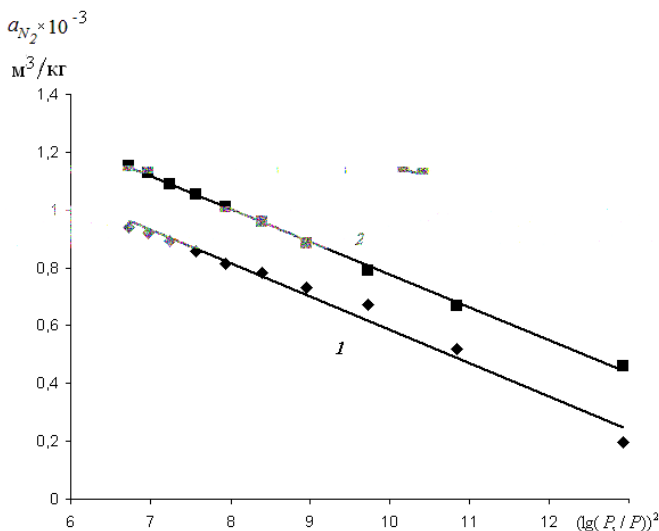


Рис. 3.32. Изотермы адсорбции азота при 20 °С образцами блоков с цеолитом типа X в координатах уравнения Дубинина–Радушкевича: 1 – Na-форма; 2 – Li-форма

3.17. Физико-химические и адсорбционно-структурные свойства блоков на основе синтетических цеолитов типа X

$d_3 \cdot 10^{-3}, \text{ м}$	$\rho_{\text{ист}}^*, \text{ кг/м}^3$	$\rho_{\text{каж}}, \text{ кг/м}^3$	$\varepsilon_3, \text{ м}^3/\text{м}^3$	$W_0 \cdot 10^3, \text{ м}^3/\text{кг}$	$V \cdot 10^6, \text{ град}^{-2}$	$\varepsilon_2, \text{ м}^3/\text{м}^3$
NaX						
0,7	2140	640	0,693	0,084	1,3	0,412
0,5	2140	650	0,712	0,084	1,3	0,406
0,28	2140	640	0,704	0,084	1,3	0,410
0,33	2140	645	0,703	0,084	1,3	0,403
0,26	2140	650	0,703	0,084	1,3	0,421
0,2	2140	650	0,702	0,084	1,3	0,394
LiLSX						
0,7	2120	660	0,710	0,126	1,28	0,412
0,5	2120	670	0,708	0,126	1,28	0,418
0,28	2120	670	0,706	0,126	1,28	0,420
0,33	2120	670	0,703	0,126	1,28	0,403
0,26	2120	660	0,697	0,126	1,28	0,421
0,2	2120	660	0,710	0,126	1,28	0,394

* – данные получены пикнометрическим методом [96], в качестве пикнометрической жидкости использовалась вода.

Энергия, затрачиваемая на преодоление аэродинамического сопротивления слоя адсорбента в адсорбционных установках часто лимитирует скорость потока в адсорбере и значительно удорожает процесс. Особенностью малогабаритных установок (и в частности медицинских концентраторов кислорода) является ограничение потребляемой мощности. Потребляемая мощность, как было показано в главе 1, для двухадсорберной схемы определяется главным образом величиной напора $P_{ад}$, создаваемого на входе в установку (в случае напорной схемы), разрежения $P_{дес}$, создаваемого на выходе из установки (в случае схемы с вакуумной десорбцией) или разницей указанных давлений $P_{ад}$ и $P_{дес}$ (в случае напорной схемы с вакуумной десорбцией). Потери за счет наличия аэродинамического сопротивления блока необходимо компенсировать путем увеличения $P_{ад}$ и уменьшения $P_{дес}$, что приводит к увеличению потребляемой мощности установки.

С целью изучения указанной проблемы была создана экспериментальная установка для измерения перепада давлений в слое адсорбента (рис. 3.33), аналогичная описанной в работе [97]. Адсорбер продувался потоком холодного воздуха, подаваемого через газораспределительную сеть предприятия. При вычислении расхода воздуха делали поправку на плотность и на отклонение температуры воздуха от нормальных условий. Перед каждой серией опытов проверяли герметичность системы. Испытания проводились с использованием гранулированного адсорбента с размером частиц 0,28; 0,5; 0,7 мм и блочного цеолитового адсорбента, для которого был определен эквивалентный диаметр каналов пор.

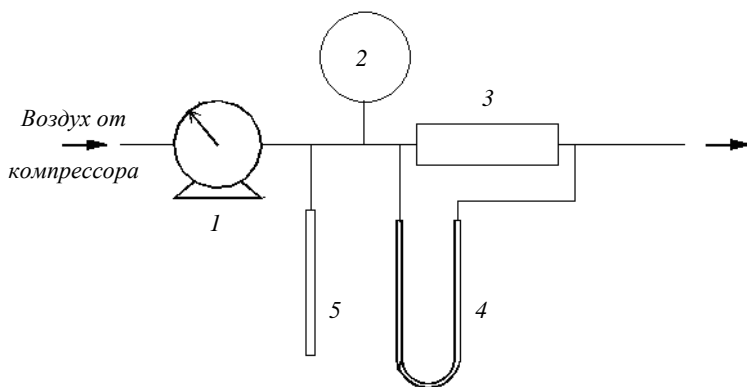


Рис. 3.33. Схема установки для определения перепада давлений в слое:

1 – газосчетчик; 2 – манометр; 3 – адсорбер;

4 – дифференциальный манометр; 5 – термометр

Для адсорбента в виде сплошного пористого монолитного блока диаметр эквивалентного шара определялся по следующей формуле:

$$d_3 = \frac{6}{\sigma_\phi} [98], \text{ где } \sigma_\phi - \text{ величина удельной поверхности фильтрования,}$$

определенная экспериментально. Величина σ_ϕ оценивает только те поры, которые образуют единую систему и потому участвуют в процессе фильтрации, в отличие от полной удельной поверхности σ , которая определяется специальными методами (как правило, по уравнению Брунауэра–Эммета и Теллера БЭТ [93]) и характеризует всю совокупность пор. Существуют различные методы определения удельной поверхности, среди которых можно выделить три, наиболее полно оценивающих пустотное пространство блока: 1) основанный на изучении низкотемпературной адсорбции азота или аргона; 2) фильтрации; 3) ртутной порометрии.

Метод низкотемпературной адсорбции азота или аргона позволяет получить лишь оценку суммарной полной удельной поверхности образца σ . Полученные этим методом значения трудно связать с основными фильтрационно-емкостными и структурными свойствами блока.

Метод ртутной порометрии основан на изучении процесса вдавливания ртути в образец путем ступенчатого увеличения внешнего давления. При этом радиус порового канала определяется достигнутым капиллярным давлением. Этот метод позволяет получить оценку не только полной удельной поверхности σ , но и удельной поверхности фильтрации σ_ϕ , которая определяется порами, принимающими участие в движении газового потока. При обработке порометрических данных для определения диапазона радиусов пор суммирование проводят последовательно от более крупных пор к мелким, получая таким образом различные характеристики порового пространства [93]. Обязательным условием фильтрации по системе поровых каналов является их связанность. Чем больше длина проводящих элементов, тем меньше может быть их концентрация для выполнения этого условия. Методика учета связанности поровых каналов при обработке порометрических кривых позволяет рассчитать доленое участие пор в процессе фильтрации [99, 100]. Это наиболее точный метод, однако для практических расчетов он не слишком удобен, поскольку требует проведения исследований на высокоточном оборудовании, таком как ртутный поромер.

Метод фильтрации, основанный на использовании формулы Козени–Кармана, применяется для определения удельной поверхности фильтрующих пор σ_ϕ [101]. Формула Козени–Кармана справедлива для идеальных пористых сред и связывает вторичную пористость (объем транспортных пор) ε_2 , проницаемость K_f и удельную поверхность

фильтрации $\sigma_{\phi} = \sqrt{\frac{\varepsilon_2^2}{2K_f}}$, $K_f = \frac{Q\eta P_{bar} H}{\Delta P(\Delta P/2 + P_{bar})F}$, где Q – расход

газа на выходе из образца, приведенный к н.у., м³/с; P_{bar} – барометрическое давление, 10⁵ Па; F – площадь поперечного сечения образца, м².

Известно, что максимальные значения удельной поверхности наблюдаются в мезо- и микропорах. Зависимость полной удельной поверхности σ и удельной поверхности фильтрации σ_{ϕ} от содержания микропор прямо пропорциональны, т.е. с повышением содержания микропор увеличивается и удельная поверхность. Основной вклад в величину полной удельной поверхности вносят микропоры, которые практически не оказывают влияния на процессы фильтрации в пористой среде в отличие от более крупных пор, но существенно снижают величину среднего радиуса всей совокупности пор. Непосредственное влияние фильтрующих пор начинает сказываться на величине полной удельной поверхности σ только в высокопористых материалах с низким содержанием мелких пор. При этом наблюдаемое систематическое отклонение рассчитанных значений по формуле Козени–Кармана от результатов обработки порометрических данных отражает более сложный характер реальной пористой среды по сравнению с идеальной, теоретически представленной пучком параллельных капилляров.

Источником давления служил компрессор сжатого воздуха. Газ очищали от паров воды и загрязняющей пыли с помощью фильтра. Измерителем давления служил технический манометр и мановакуумметр двухтрубный с водяным заполнением с длиной шкалы 800 мм. В качестве измерителя расхода газа использовался газосчетчик ГСБ-400.

Исходные данные, результаты расчета коэффициента проницаемости, удельной поверхности фильтрации и эквивалентного диаметра частиц монолитного цеолитового адсорбента представлены в табл. 3.18.

Таким образом, расчетный эквивалентный диаметр блочного цеолитового адсорбента d_p составил: 0,33; 0,26; 0,21 мм.

3.18. Эквивалентный диаметр каналов пор блочного адсорбента

№	$Q \cdot 10^{-5}, \text{ м}^3/\text{с}$	$H, \text{ м}$	$\eta \cdot 10^{-7}, \text{ Па}\cdot\text{с}$	$F \cdot 10^{-4}, \text{ м}^2$	$\Delta P \cdot 10^5, \text{ Па}$	$K_f \cdot 10^{-12}$	$\varepsilon_2, \text{ м}^3/\text{м}^3$	$\sigma_{\phi}, \text{ м}^2/\text{м}^3$	$d_p, \text{ м}$
1	33,4	0,2	181,2	7,1	0,07	239,5	0,403	18400	0,33
2	33,4	0,2	181,2	7,1	0,1	162,4	0,421	23300	0,26
3	33,4	0,2	181,2	7,1	0,19	83,4	0,394	30510	0,20

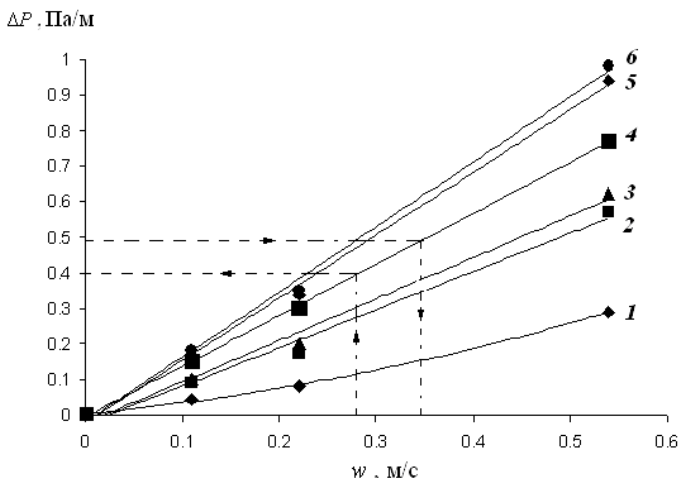


Рис. 3.34. Расходно-напорные характеристики цеолитовых адсорбентов:
 1 – 0,7 мм; 3 – 0,5 мм; 6 – 0,28 мм, гранулированного;
 2 – 0,33 мм; 4 – 0,26 мм; 5 – 0,20 мм, монолитного

Расходно-напорные характеристики для гранулированного и блочного цеолитового адсорбентов представлены на рис. 3.34. Анализ рисунка 3.34 позволяет сделать вывод, что блочный адсорбент при эквивалентном диаметре частиц менее 0,5 мм обладает меньшим аэродинамическим сопротивлением, чем шихта, состоящая из гранулированного адсорбента при той же высоте слоя [102].

С использованием полученных зависимостей на рис. 3.34 имеется возможность для расчета диаметра адсорбера D . Например, допустимая величина перепада давлений в слое адсорбента высотой 0,2 м с $d_3 = 0,26$ мм принята равной $0,1 \cdot 10^5$ Па. В соответствии с графиком 4 на рис. 3.34 это соответствует линии 4 и перепаду давлений $0,5 \cdot 10^5$ Па·м, соответственно, допустимая скорость потока составляет 0,34 м/с. Для заданного расхода $Q = 0,34 \cdot 10^{-3}$ м³/с, высоты слоя адсорбента $H = 0,2$ м, внутреннего диаметра адсорбера $D = 0,035$ м из уравнения расхода $Q = wF$, получим, что $w = 0,29$ м/с, что ниже допустимой скорости. Перепад давлений в слое составит $0,08 \cdot 10^5$ Па.

При технологическом расчете установки короткоциклового адсорбции необходимо определение величины перепада давлений в слое адсорбента расчетным методом. В расчетной практике для этого пользуются одним из наиболее распространенных уравнений – обобщенной

$$\text{зависимостью Эргуна [97]: } \Delta P = 150 \frac{(1 - \varepsilon_2)^2 \eta w_0}{\varepsilon_2^3 d_4} H + 1,75 \frac{1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_2^3} \frac{\rho g w_0^2}{d_4},$$

где g – ускорение свободного падения, м/с²; $d_ч$ – диаметр частицы в слое гранулированного адсорбента. Часто используется уравнение, описывающее движение газов через пористые слои [103]: $\Delta P = 150 \frac{(1 - \varepsilon_2)^2 \eta w_0}{\varepsilon_2^3 d_ч} H$.

В работе [94] приводится ряд уравнений для расчета величины гидравлического сопротивления слоя адсорбента. Одно из них – уравнение Минского, которое записывается в следующей форме:

$$\Delta P = 2H \frac{(1 - \varepsilon_2)^3}{gd_3} \left[\frac{1900\mu w}{d_3(1 - \varepsilon_2)} + 52(w\rho)^2 \right].$$

Здесь свободный объем адсорбента входит в качестве переменной величины, т.е. она справедлива при любой «рыхлости» упаковки, в частности, и в условиях установок с движущимся слоем. Здесь же приведена формула Фуртига–Вебера на основе практических зависимостей, полученных немецкими инженерами для слоя цеолитов:

$$\Delta P = 1090 \frac{w^{1,36} \rho^{0,36} \eta^{0,64}}{2gd_3^{1,64}} H.$$

Результаты расчета перепада давлений по приведенным выше формулам, а также опытные данные, полученные на экспериментальной установке, приведены на рис. 3.34. Нелинейный характер представленных зависимостей при скоростях выше 0,3 м/с позволяет утверждать, что перепад давлений в слое адсорбента при скоростях, не превышающих 1 м/с, пропорционален скорости газового потока во второй степени. Анализ опытных данных показал, что адекватное описание зависимости перепада давлений в слое адсорбента (гранулированного и блочного) обеспечивается при использовании зависимости Эргуна. При этом для гранулированного адсорбента вместо коэффициента 1,75 в формуле Эргуна рекомендуется использовать коэффициент 2,15, а для блочного адсорбента – коэффициент 1,54.

При осуществлении процесса обогащения воздуха кислородом необходимо учитывать наличие в воздухе аргона, воды, диоксида углерода. Аргон адсорбируется и диффундирует в цеолитах так же, как кислород. Это определяет такое же соотношение между кислородом и аргоном в обогащенном потоке, которое имеет место в исходном воздухе: кислород – 20,95 об. %, аргон – 0,93 об. %. В соответствии с этими данными в адсорбционном процессе обогащения воздуха кислородом на цеолитах невозможно получить поток, содержащий более 95,8% кислорода (остальное – аргон).

Вода как кристаллообразующий компонент цеолита всегда предпочтительно адсорбируется на этом адсорбенте, и дегидратированный цеолит, находящийся в контакте с парами воды в течение достаточно долгого времени, утрачивает свою способность поглощать другие ве-

щества. Однако в процессе обогащения воздуха кислородом влияние воды сравнительно невелико благодаря наличию в указанном процессе стадий противоточного сброса давления и обратной промывки слоя адсорбента. Поглотительная способность цеолитов по отношению к воде столь велика, что вся вода, поступающая в слой, поглощается в сравнительно тонком лобовом слое адсорбента, протяженность которого составляет до 0,1 м. Даже слой цеолита, составленный из равных частей дегидратированного и увлажненного адсорбента, способен осуществлять разделение воздуха и постепенно приобретает эффективность полностью дегидратированного адсорбента. Способность к самодегидратации утрачивается, если доля увлажненного цеолита в первоначальной загрузке превышает 50%.

Исследования адсорбционно-десорбционных процессов на лабораторном стенде установки короткоциклового адсорбции не включали изучение динамики сорбции атмосферной влаги, поскольку поступающий воздух проходит предварительную осушку в фильтре-осушителе. Проблема адсорбции паров воды цеолитами в различных процессах, осуществляемых на основе технологии короткоциклового адсорбции, подробно освещена в работах [104 – 107]. Полученные нами опытные данные вполне согласуются с результатами, представленными в работе [108]. В широком диапазоне температур, давлений и влажности воздуха расчетное значение высоты слоя адсорбента H , адсорбирующего азот, необходимо увеличить на 20%, чтобы гарантировать полную адсорбцию влаги слоем цеолита при температурах окружающей среды выше 0 °С.

Анализ процесса обогащения воздуха кислородом и исследование основных закономерностей протекания циклических процессов адсорбции–десорбции проводилось на напорной схеме короткоциклового адсорбции при отключенном вакуум-насосе и следующих величинах давлений – $P_{ад} = 3 \cdot 10^5$ Па, $P_{дес} = 1 \cdot 10^5$ Па; и на напорной схеме с вакуумной десорбцией при величинах давлений – $P_{ад} = 1,5 \cdot 10^5$ Па, $P_{дес} = 0,5 \cdot 10^5$ Па. В качестве адсорбентов использовались гранулированные цеолиты NaX и LiLSX (с диаметром гранул 0,7; 0,5; 0,28 мм) и блочные цеолитовые адсорбенты с эквивалентным диаметром каналов 0,33; 0,26; 0,20 мм.

Все характеристики концентратора кислорода можно разделить на два типа: абсолютные и относительные [106]. К абсолютным характеристикам относятся средняя концентрация кислорода на выходе из установки c_{O_2} , производительность $Q_{зад}$ на выходе из установки и производительность $Q_{исх}$ по исходной смеси.

На рисунке 3.35 представлена зависимость концентрации кислорода c_{O_2} на выходе из установки от величины отбора $Q_{зад}$ (основная характеристика концентратора кислорода).

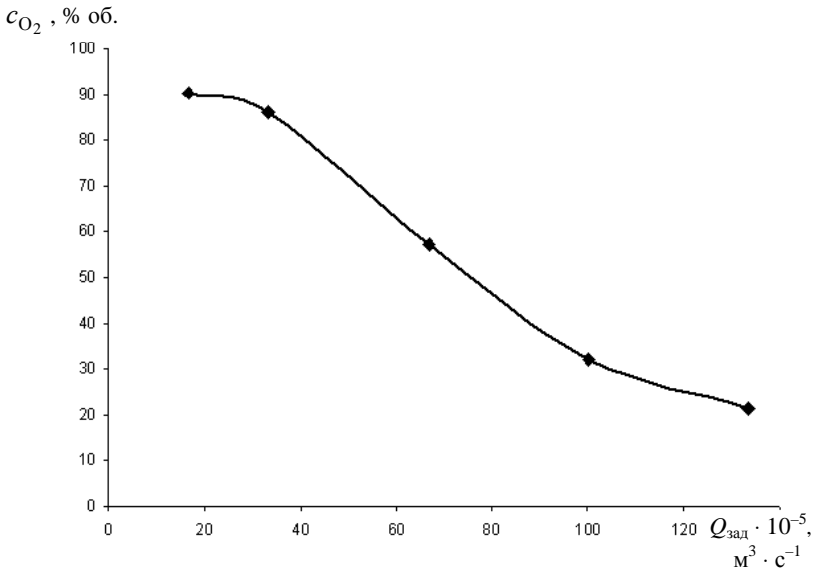


Рис. 3.35. Зависимость концентрации кислорода от производительности установки короткоцикловой адсорбции

Из анализа рисунка 3.35 видно, что концентрация кислорода на выходе из установки снижается до достижения минимального значения, равного концентрации кислорода в окружающем воздухе. Это происходит из-за того, что при величине расхода выше определенного уровня (в данном случае при $Q_{зад}$ выше $112 \cdot 10^{-3} \text{ м}^3/\text{с}$) не выполняется условие по обеспечению необходимой величины обратной промывки (анализ влияния величины коэффициента обратной промывки на концентрацию кислорода будет рассмотрен ниже), в результате чего концентрация c_{O_2} быстро падает и установка начинает работать в режиме фильтрации без концентрирования кислорода. Зависимость на рис. 3.35 не полностью описывает работу концентратора кислорода, как правило, она используется в совокупности с другими удельными характеристиками.

Удельная производительность установки короткоцикловой адсорбции по смеси, обогащенной кислородом, и степень извлечения продукционного газа и кислорода находятся по формулам

$$q_{\text{прод}} = \frac{Q_{\text{зад}}}{kV_{\text{ад}}}, \quad \Psi_{\text{пр}} = \frac{Q_{\text{зад}}}{Q_{\text{исх}}}, \quad \Psi_{O_2} = \frac{Q_{O_2} c_{\text{зад}}}{Q_{\text{исх}} c_{\text{исх}}},$$

где k – количество адсорберов в установке.

Степень извлечения обратно пропорциональна энергозатратам на получение единицы объема воздуха, обогащенного кислородом. При выводе формулы для расчета коэффициента полезного действия концентратора кислорода будем руководствоваться следующими соображениями. Известно, что для осуществления процесса короткоциклового адсорбции необходимо, чтобы расход потока, направляемого на промывку $Q_{об}$ при давлении десорбции $P_{дес}$, был как минимум равен величине потока на стадии адсорбции $Q_{исх}$. Это означает, что минимальный коэффициент обратной промывки θ равен 1. Очевидно, что при минимальном θ достигается максимальная степень извлечения $\psi_{пр}$. В таком случае, когда расход в т. 2 $Q_{пр}$ равен расходу в т. 3 на выходе из установки $Q_{зад}$, максимальная степень извлечения может быть найдена по следующей формуле: $\psi_0 = \left(1 - \theta \frac{P_{дес}}{P_{ад}}\right) = \left(1 - \frac{P_{дес}}{P_{ад}}\right)$. Следует

отметить, что величины θ и $\psi_{пр}$ характеризуют величину обратного потока. Действительно, уменьшение величины $\psi_{пр}$ при постоянном потоке $Q_{исх}$ приводит к увеличению обратного потока $Q_{об}$. Разница заключается только в том, что величина θ регулируется дросселирующим вентилем 15, а $\psi_{пр}$ – с помощью регулирующего вентиля 1, стоящего после ресивера 16 (рис. 3.29).

Теоретически достижимая максимальная концентрация кислорода на выходе из установки короткоциклового адсорбции не может превышать 95,5% или 0,955 в объемных долях. Тогда коэффициент полезного действия КПД установки может быть рассчитан по следующей формуле:

$$\text{КПД} = \frac{\psi_{пр} c_{O_2}^{в\text{ых}}}{\psi_{пр \max} c_{O_2}^{в\text{ых max}}} = \frac{\psi_{пр} c_{O_2}^{в\text{ых}}}{\psi_{пр \max} 0,955} = 1,05 \frac{\psi_{пр} c_{O_2}^{в\text{ых}}}{\psi_{пр \max}}$$

На рисунке 3.36 приведены расчетные кривые зависимостей степени извлечения воздуха, обогащенного кислородом $\psi_{пр}$, и КПД от концентрации кислорода на выходе из установки.

Из рисунка 3.36 видно, что оба показателя стремятся к нулю при приближении концентрации кислорода к ее предельному значению $c_{O_2}^{\max}$. Кроме того, чем выше удельная производительность $q_{пр}$, тем ниже расположены кривые 1 и 2 по отношению к оси абсцисс.

Уменьшение концентрации кислорода на выходе из установки при увеличении удельной производительности $q_{пр}$ объясняется большей скоростью заполнения азотом адсорбционной емкости адсорбента.

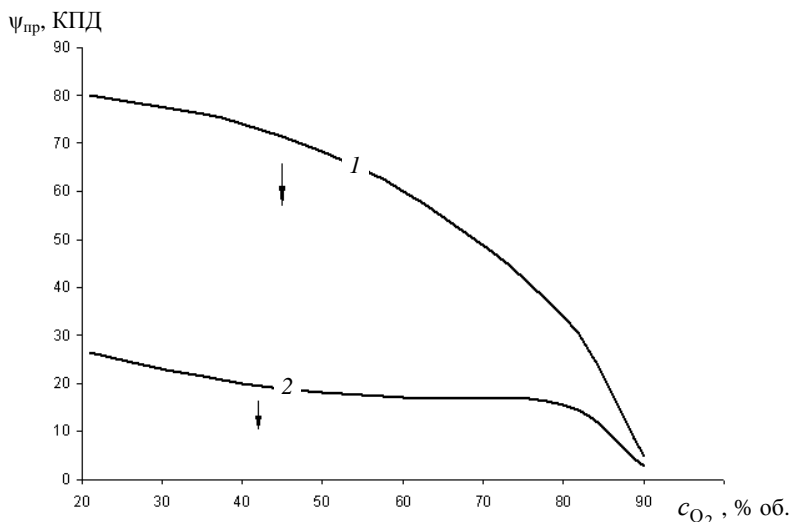


Рис. 3.36. Зависимости степени извлечения потока, обогащенного кислородом (1), и КПД концентратора (2) от концентрации кислорода на выходе из установки

Увеличение концентрации кислорода на выходе из установки при уменьшении степени извлечения $\psi_{\text{пр}}$ объясняется обеспечением более глубокой десорбции азота из слоя адсорбента обратным потоком и заполнением адсорбера избыточным кислородом, полученным на стадии адсорбции.

Результаты исследования зависимости концентрации кислорода на выходе из установки от величины времени цикла представлены на рис. 3.37, 3.38: $H = 0,2$ м; $V_{\text{ад}} = 0,25 \cdot 10^{-3}$ м³; $Q_{\text{исх}} = 0,167 \cdot 10^{-3}$ м³ · с⁻¹; $\psi_{\text{пр}} = 0,25$.

Из анализа рисунков 3.37 – 3.40 видно, что величина длительности цикла адсорбции–десорбции оказывает значительное влияние на концентрацию кислорода на выходе из установки. Увеличение концентрации кислорода при сокращении длительности цикла объясняется уменьшением доли «проскока» потока без адсорбции азота. Однако минимальное время цикла ограничено, так как при длительности цикла менее 2 с поток не покидает слой адсорбента, что приводит к резкому падению концентрации кислорода на выходе из установки. Сравнение аналогичных участков на рис. 3.37 и 3.39 показывает, что адсорбент на основе цеолита LiLSX позволяет получать более высокую концентрацию кислорода по сравнению с цеолитом NaX. При этом процесс с вакуумной десорбцией позволяет получать более высокую концентрацию кислорода даже при большей длительности цикла, что также делает предпочтительным использование блоков на основе цеолита LiLSX.

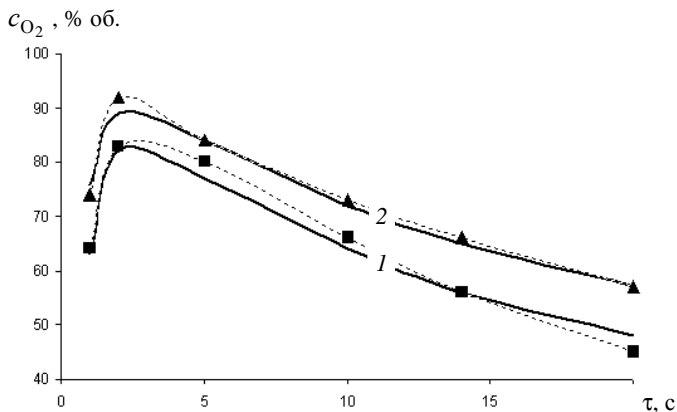


Рис. 3.37. Зависимости концентрации кислорода на выходе из установки, реализующей напорную схему от длительности цикла:

1 – гранулированный адсорбент NaX с размером частиц 0,28 мм;
 2 – блочный адсорбент NaX с размером пор 0,20 мм;
 сплошная кривая – расчет по модели,
 штриховая – по экспериментальным данным

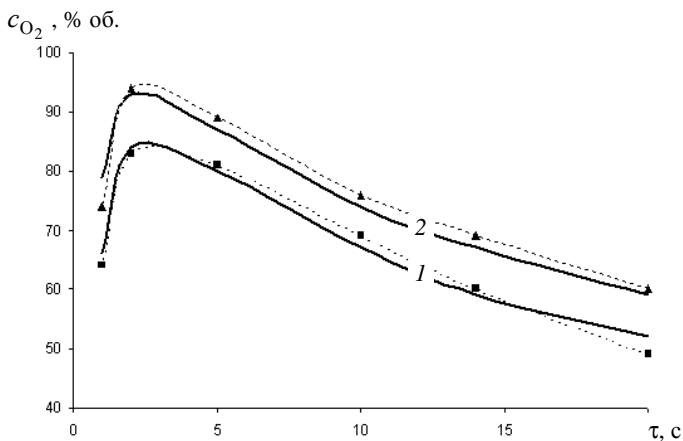


Рис. 3.38. Зависимости концентрации кислорода на выходе из установки, реализующей напорную схему с вакуумной десорбцией от длительности цикла:

1 – гранулированный адсорбент NaX с размером частиц 0,28 мм;
 2 – блочный адсорбент NaX с размером пор 0,20 мм;
 сплошная кривая – расчет по модели,
 штриховая – по экспериментальным данным

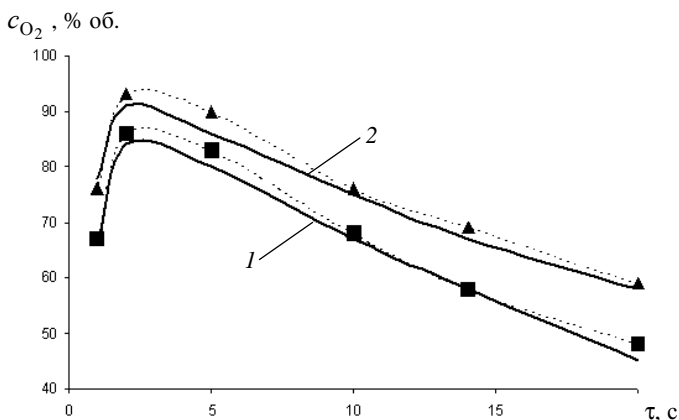


Рис. 3.39. Зависимости концентрации кислорода на выходе из установки, реализующей напорную схему от длительности цикла:
 1 – гранулированный адсорбент LiLSX с размером частиц 0,28 мм;
 2 – блочный адсорбент LiLSX с размером пор 0,20 мм;
 сплошная кривая – расчет по модели,
 штриховая – по экспериментальным данным

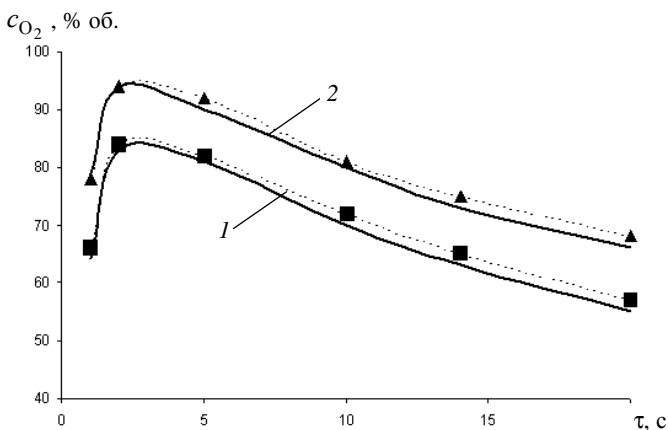


Рис. 3.40. Зависимости концентрации кислорода на выходе из установки, реализующей напорную схему с вакуумной десорбцией от длительности цикла:
 1 – гранулированный адсорбент LiLSX с размером частиц 0,28 мм;
 2 – блочный адсорбент LiLSXX с размером пор 0,20 мм;
 сплошная кривая – расчет по модели,
 штриховая – по экспериментальным данным

Для получения потока воздуха с повышенной концентрацией кислорода $c_{O_2}^{в\ddot{y}x}$ необходимо сокращать длительность цикла и использовать вместо гранулированного адсорбента блочный цеолитовый адсорбент с меньшим эквивалентным диаметром каналов пор. Использование цеолитовых блоков в установке короткоциклового адсорбции наряду с обеспечением механической прочности способствует развитию более высоких скоростей процессов массопереноса и адсорбции и уменьшению коэффициента диффузии молекул газовой фазы в адсорбенте. Необходимо отметить, что уменьшение длительности цикла является наиболее эффективным способом повышения концентрации кислорода. Нижний предел, до которого длительность цикла может быть сокращена, определяется совокупностью факторов: высотой слоя адсорбента H , размером его частиц d_r (или эквивалентным диаметром каналов пор d_s) и величиной перепада давлений в слое ΔP .

Принцип осуществления процесса короткоциклового адсорбции заключается в том, что тепло, запасенное в слое на стадии адсорбции, используется затем при десорбции. Реализацию этого принципа обеспечивает противоточная продувка слоя некоторой частью очищенного потока. Доля потока, которую необходимо направить на регенерацию, задается материальным балансом адсорбата в установке: $\theta = Q_{об} / Q_{исх}$, где θ – коэффициент обратной промывки; $Q_{об}$ – величина обратного потока при давлении $P_{дес}$, m^3 , $Q_{пр}$ – величина прямого потока при давлении $P_{ад}$, m^3 . При осушке значение коэффициента θ выбирали равным 1,1...1,2 [104]. При обогащении воздуха кислородом значение коэффициента θ превышало 1,1...1,2, что позволяло обеспечить не только регенерацию адсорбента и удаление адсорбированного азота, но и удаление влаги, адсорбированной лобовым слоем.

Обогащенный поток разделялся на два потока: прямой – $Q_{пр}$, направляемый в ресивер $I3$ и промывной – $Q_{об}$, направляемый на регенерацию адсорбента в соседнем адсорбере (рис. 3.29). Величина потока,

направляемого на промывку, при давлении $P_{ад}$ равна $Q_{об} = Q_{исх} \theta \frac{P_{дес}}{P_{ад}}$.

Результаты исследования зависимости концентрации кислорода на выходе из установки от коэффициента обратной промывки θ представлены на рис. 3.41, 3.42: $Q_{исх} = 0,167 \cdot 10^{-3} m^3 \cdot c^{-1}$; $\tau_{ц} = 5$ с.

При замене адсорбента NaX на LiLSX концентрация кислорода возрастает в среднем на 3...4%.

При увеличении величины обратной промывки θ концентрация кислорода на выходе из установки увеличивается, одновременно снижается объемная производительность. При этом наблюдается достижение максимально возможной концентрации кислорода при значениях коэффициента обратной промывки в пределах $\theta \in [2,1 \dots 2,6]$.

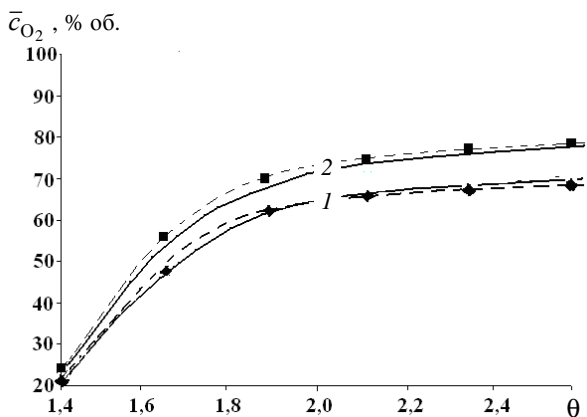


Рис. 3.41. Зависимости концентрации кислорода на выходе из установки, реализующей напорную схему от коэффициента обратной промывки:
 1 – гранулированный адсорбент с размером частиц 0,28 мм;
 2 – блочный адсорбент с размером пор 0,20 мм;
 сплошная кривая – расчет по модели,
 штриховая – по экспериментальным данным

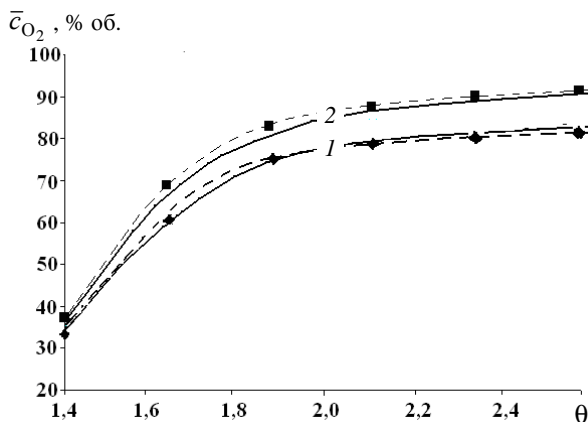


Рис. 3.42. Зависимости концентрации кислорода на выходе из установки, реализующей напорную схему с вакуумной десорбцией от коэффициента обратной промывки:
 1 – гранулированный адсорбент с размером частиц 0,28 мм;
 2 – блочный адсорбент с размером пор 0,20 мм;
 сплошная кривая – расчет по модели,
 штриховая – по экспериментальным данным

Результаты исследования зависимости концентрации кислорода на выходе из установки от высоты слоя адсорбента представлены на рис. 3.43, 3.44: $Q_{исх} = 0,167 \cdot 10^{-3} \text{ м}^3 \cdot \text{с}^{-1}$; $\tau_{ц} = 5 \text{ с}$; $\psi_{пр} = 0,25$. Максимально возможная высота слоя адсорбента была установлена исходя из величины перепада давлений в слое ΔP , которое достигает максимального значения, равного $0,37 \cdot 10^5 \text{ Па} \cdot \text{м}^{-1}$ при $d_r = 0,28 \text{ мм}$.

Известно, что с увеличением высоты слоя концентрация кислорода на выходе возрастает практически линейно до достижения максимального значения [93].

Из анализа рисунков 3.43, 3.44 видно, что зависимость концентрации кислорода от высоты слоя адсорбента H близка к линейной, начиная с 0,15 м для схемы с вакуумной десорбцией. При высоте слоя менее 0,15 м концентрация кислорода быстро падает. Это объясняется следующим соображением. Уменьшение высоты слоя приводит к падению максимально достижимой концентрации, а уменьшение высоты адсорбера к его диаметру [106] может привести к ухудшению аэродинамической обстановки, образованию застойных зон по границе адсорбера, что приводит к режиму течения газа, отличному от модели идеального вытеснения, и проскоку части потока без адсорбции азота.

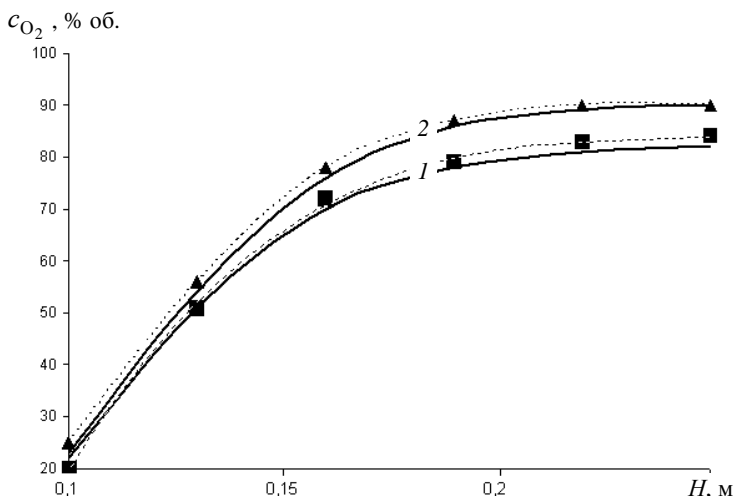


Рис. 3.43. Зависимости концентрации кислорода на выходе из установки, реализующей напорную схему от высоты слоя адсорбента:

1 – гранулированный адсорбент с размером частиц 0,28 мм;

2 – блочный адсорбент с размером пор 0,20 мм;

сплошная кривая – расчет по модели,

штриховая – по экспериментальным данным

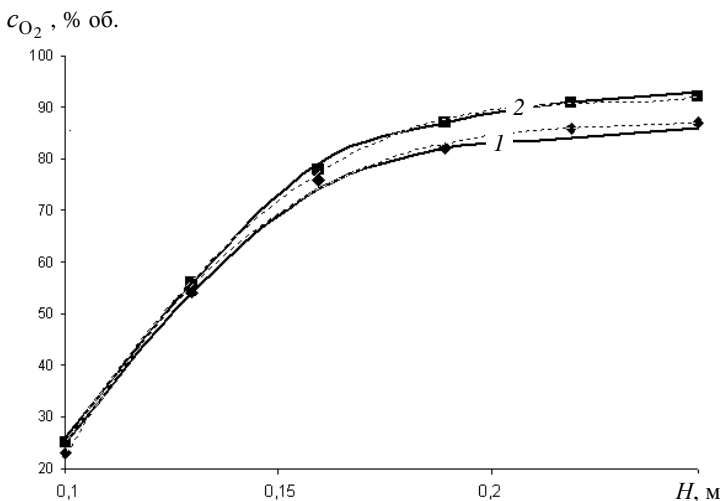


Рис. 3.44. Зависимости концентрации кислорода на выходе из установки, реализующей напорную схему с вакуумной десорбцией от высоты слоя адсорбента:

- 1 – гранулированный адсорбент с размером частиц 0,28 мм;
- 2 – блочный адсорбент с размером пор 0,20 мм;
- сплошная кривая – расчет по модели,
- штриховая – по экспериментальным данным

Поэтому на практике при уменьшении высоты блока адсорбента с целью сокращения размеров адсорберов и снижения их массы необходимо уменьшать и диаметр блока.

В результате проведенных экспериментальных исследований нестационарного процесса обогащения воздуха кислородом в установке короткоциклового адсорбции были определены конструктивные и режимные переменные (диаметр адсорбера, высота слоя адсорбента, длительность цикла, коэффициент обратной промывки), оказывающие наибольшее влияние на производительность и концентрацию кислорода на выходе из установки.

3.3.2. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССА ОБОГАЩЕНИЯ ВОЗДУХА КИСЛОРОДОМ

Интенсивное развитие техники и технологии короткоциклового адсорбции (КЦА) позволило вплотную подойти к созданию высокоэффективных и одновременно достаточно простых и дешевых установок по обогащению воздуха кислородом, что особенно важно при их

использовании в медицинских целях [109 – 112]. Установки КЦА также могут успешно применяться и для очистки газовой смеси от вредных примесей [113, 114].

Принцип работы установки КЦА заключается в циклическом чередовании осуществления процессов адсорбции азота из непрерывного потока газовой смеси и десорбции азота из адсорбента в параллельно работающих адсорберах. При этом формируется непрерывный поток обогащенного кислородом воздуха на выходе из установки КЦА (рис. 3.45). Циклограмма работы установки приведена на рис. 3.46.

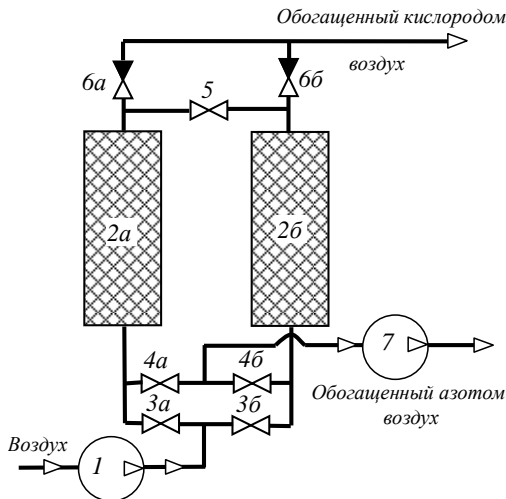


Рис. 3.45. Схема установки КЦА:

1 – компрессор; 2а, 2б – адсорберы; 3а, 3б, 4а, 4б – управляемые клапаны; 5 – дросселирующий вентиль; 6а, 6б – обратные клапаны; 7 – вакуум-насос

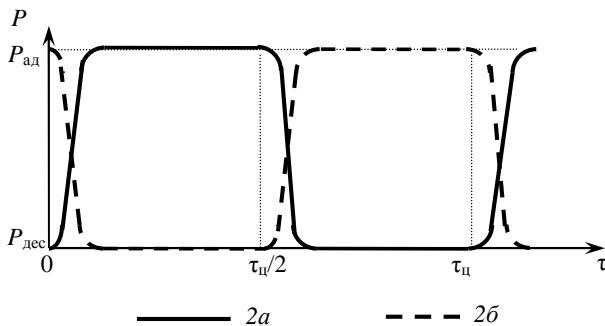


Рис. 3.46. Циклограмма работы установки КЦА

На входе в установку поток газовой смеси сжимается компрессором 1 до давления $P_{ад}$ и подается в адсорбер $2a$, заполненный сплошным пористым цеолитовым адсорбентом. Адсорбция азота осуществляется адсорбентом при давлении $P_{ад}$ на отрезке времени от 0 до $t_{ц}/2$ (рис. 3.46), и при этом обеспечивается обогащение газовой смеси кислородом (прямой поток на выходе из установки). Процесс адсорбции протекает с выделением тепла, которое накапливается в адсорбенте и расходуется при его последующей регенерации.

Часть обогащенной газовой смеси с помощью вентиля 5 дросселируют до пониженного давления $P = P_{дес}$ (рис. 3.46), создаваемого вакуум-насосом 7 , и направляют противотоком в адсорбер $2б$ для десорбции азота из адсорбента на отрезке времени от $t_{ц}/2$ до $t_{ц}$. В результате в адсорбере $2б$ производится регенерация адсорбента.

При закрытии клапанов $3a$ и $4б$ и открытии клапанов $3б$ и $4a$ в адсорбере $2a$ осуществляется десорбция азота, а в адсорбере $2б$ – адсорбция азота. При обратном срабатывании клапанов цикл повторяется.

Наши исследования показали, что при аппаратно-технологическом оформлении процесса обогащения воздуха кислородом наиболее перспективно использование цеолитового адсорбента в виде сплошного пористого монолитного блока, имеющего транспортные поры с эквивалентным диаметром $d_p \leq 0,5 \cdot 10^{-3}$ м (предельный адсорбционный объем – $0,195 \text{ см}^3 \cdot \text{кг}^{-1}$, удельная поверхность транспортных пор – $124 \text{ 300 м}^2 \cdot \text{м}^{-3}$). При длительной эксплуатации монолитного блока цеолитового адсорбента отсутствует истирание в циклических процессах адсорбции–десорбции (предел прочности блока $\sim 54 \cdot 10^5$ Па) [115].

При адсорбции азота цеолитовым адсорбентом протекают следующие массо- и теплообменные процессы: а) диффузия азота в газовой фазе; б) распространение тепла в газовом потоке и адсорбенте; в) внешний массообмен азотом и теплообмен между газовой и твердой фазами; г) адсорбция азота в микропорах сплошного цеолитового адсорбента с выделением тепла и десорбция азота из микропор с поглощением тепла.

Наиболее широко при исследовании и моделировании массо- и теплообменных процессов, сопровождающих адсорбцию газов микропористыми адсорбентами, применяется теория объемного заполнения микропор (ТОЗМ), разработанная академиком М.М. Дубининым [116] и развитая в работах других известных ученых [93, 117 – 120]. Согласно этой теории микропоры адсорбента представляются областями пространства, соизмеримыми по размерам с адсорбируемыми молекулами. Во всем пространстве микропор адсорбента действует адсорбционное

поле, а адсорбция в микропорах определяется объемным заполнением адсорбционного пространства. В этом случае основным геометрическим параметром, характеризующим микропористый адсорбент, является объем микропор, в связи с чем вводится понятие предельного адсорбционного объема микропор.

Лимитирующим процессом обогащения воздуха кислородом при адсорбции азота микропористым цеолитовым адсорбентом является процесс внешней массоотдачи, определяемый коэффициентом β и величиной равновесной концентрации азота $a_i^*(c, T_g)$ в твердой фазе.

С учетом этого при выводе уравнений массо- и теплообмена при адсорбции азота сплошным пористым цеолитовым адсорбентом принимали следующие допущения: 1) в качестве адсорбента используется сплошной пористый цеолитовый блок с относительным объемом транспортных пор $\epsilon = 0,394$; объем транспортных пор $V_{тр}$ для газовой фазы в элементарном слое вычисляется как: $V_{тр} = S_{тр} \Delta x$, где $S_{тр}$ – площадь транспортных пор в адсорбенте в сечении x ; 2) высоту адсорбента H в адсорбере разбиваем на N элементарных слоев, в каждом из которых концентрация a_i адсорбированного азота и температура T_{ai} зависят от времени, т.е. $a_i = a_i(t)$, $T_{ai} = T_{ai}(t)$, $i = \overline{1, N}$; 3) адсорбцией кислорода из газовой смеси пренебрегаем; 4) коэффициент продольной диффузии азота D_g в газовой фазе зависит от температуры T_g потока газовой смеси.

Составим уравнения математической модели процесса обогащения воздуха кислородом, включающего адсорбцию (десорбцию) азота из газовой смеси сплошным пористым цеолитовым адсорбентом, массо- и теплообменные процессы в газовой и твердой фазах (рис. 3.47).

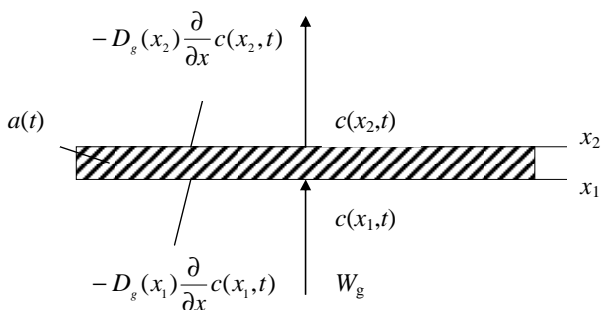


Рис. 3.47. К выводу уравнения диффузии азота в газовой фазе

1. Диффузия азота в газовой смеси по высоте адсорбента. Составим уравнение баланса массы в элементарном слое по высоте адсорбента (x_1, x_2) за некоторый промежуток времени (t_1, t_2) [121]:

$$\begin{aligned}
 & W_g \int_{t_1}^{t_2} [c(x_1, t) - c(x_2, t)] dt + \\
 & + S_{tr} \int_{t_1}^{t_2} \left[\left(-D_g(x_1) \frac{\partial}{\partial x} c(x_1, t) \right) - \left(-D_g(x_2) \frac{\partial}{\partial x} c(x_2, t) \right) \right] dt - \\
 & - V_{ai} [a_i(t_2) - a_i(t_1)] = S_{tr} \int_{x_1}^{x_2} [c(x, t_2) - c(x, t_1)] dx.
 \end{aligned}$$

Предположим, что функция $c(x, t)$ имеет непрерывные производные $\frac{\partial c}{\partial t}$ и $\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$. Пользуясь теоремой о среднем, получаем равенство

$$\begin{aligned}
 & -W_g \frac{[c(x_2, t) - c(x_1, t)]}{\Delta x} \Big|_{t_3 \in (t_1, t_2)} \Delta t \Delta x + \\
 & + S_{tr} \frac{\left[D_g(x_2) \frac{\partial}{\partial x} c(x_2, t) - D_g(x_1) \frac{\partial}{\partial x} c(x_1, t) \right]}{\Delta x} \Big|_{t_4 \in (t_1, t_2)} \times \\
 & \times \Delta t \Delta x - \frac{V_{ai}}{\Delta x} \frac{[a_i(t_2) - a_i(t_1)]}{\Delta t} \Big|_{x_3 \in (x_1, x_2)} \Delta t \Delta x = S_{tr} \frac{[c(x, t_2) - c(x, t_1)]}{\Delta t} \Big|_{x_3 \in (x_1, x_2)} \Delta x \Delta t,
 \end{aligned}$$

где $\Delta x = (x_2 - x_1)$, x_3 , x_4 , и t_3 , t_4 – промежуточные точки интервалов (x_1, x_2) и (t_1, t_2) .

Далее при помощи теоремы о конечных приращениях последнее уравнение можно преобразовать к виду

$$\begin{aligned}
 & -w S_{tr} \frac{\partial c(x, t)}{\partial x} \Big|_{\substack{t_3 \in (t_1, t_2) \\ x_4 \in (x_1, x_2)}} \Delta t \Delta x + S_{tr} \frac{\partial}{\partial x} \left(D_g(x) \frac{\partial}{\partial x} c(x, t) \right) \Big|_{\substack{t_4 \in (t_1, t_2) \\ x_5 \in (x_1, x_2)}} \Delta t \Delta x - \\
 & - \frac{V_{ai}}{\Delta x} \frac{\partial a(t)}{\partial t} \Big|_{t_5 \in (t_1, t_2)} \Delta t \Delta x = S_{tr} \frac{\partial c(x, t)}{\partial t} \Big|_{\substack{x_3 \in (x_1, x_2) \\ t_6 \in (t_1, t_2)}} \Delta x \Delta t.
 \end{aligned}$$

После сокращения на $\Delta t \Delta x$ получим

$$-w \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} \Big|_{\substack{t_3 \in (t_1, t_2) \\ x_4 \in (x_1, x_2)}} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_g(x) \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} \right) \Big|_{\substack{t_4 \in (t_1, t_2) \\ x_5 \in (x_1, x_2)}} - \\ - \frac{V_{ai}}{S_{tr} \Delta x} \frac{\partial a(t)}{\partial t} \Big|_{t_5 \in (t_1, t_2)} = \frac{\partial c(x,t)}{\partial t} \Big|_{\substack{x_3 \in (x_1, x_2) \\ t_6 \in (t_1, t_2)}}.$$

Все эти рассуждения относятся к произвольным промежуткам времени (x_1, x_2) и (t_1, t_2) . Переходя к пределу при $x_1, x_2 \rightarrow x$ и $t_1, t_2 \rightarrow t$, получим дифференциальное уравнение диффузии азота в газозвдушной смеси на отрезке времени $(n-1)t_{\text{ц}} < t < (n-1/2)t_{\text{ц}}$, $n = 1, 2, \dots$

$$-w \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_g(x) \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} \right) - \frac{V_{ai}}{S_{tr} \Delta x} \frac{\partial a_i(t)}{\partial t} = \frac{\partial c(x,t)}{\partial t}$$

или, вводя обозначение $\varepsilon_i = \frac{V_{ai}}{V_{ai} + V_{tri}}$, мы получим

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} + \frac{1-\varepsilon_i}{\varepsilon_i} \frac{\partial a_i(t)}{\partial t} = -w \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_g(x) \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} \right), \quad (3.90)$$

где номер i слоя адсорбента соответствует координате x_i , например, в решении уравнения (3.90) с соответствующими граничными условиями с помощью конечно-разностного метода номер слоя i соответствует интервалу (x_i, x_{i+1}) по пространственной координате x . Внутри этого интервала (слоя адсорбента i) концентрация азота принимается постоянной, т.е. $a_i = \text{const}$.

Аналогичное уравнение описывает процесс диффузии при десорбции азота на отрезке времени $(n-1/2)t_{\text{ц}} < t \leq nt_{\text{ц}}$, $n = 1, 2, \dots$

Используя описанную в п. 1 методику вывода уравнения диффузии, получим уравнения математической модели остальных процессов.

2. Изменение концентрации азота в адсорбенте:

– в интегральной форме в i -м слое адсорбента за промежуток времени (t_1, t_2)

$$V_{ai} [a_i(t_2) - a_i(t_1)] = S_{ai} \beta \int_{t_1}^{t_2} \left[a_i^* \left(\bar{c}_i, \bar{T}_{gi} \right) - \bar{c}_i(t) \right] dt, \quad i = 1, \dots, N;$$

– в дифференциальной форме на отрезке времени $(n-1)t_{\text{ц}} < t < (n-1/2)t_{\text{ц}}$, $n = 1, 2, \dots$

$$V_{ai} \left(\frac{\partial a_i(t)}{\partial t} \right) = \beta S_{ai} (a_i^* (\bar{c}(t), \bar{T}_g(t)) - c_i(t)), \quad i = 1, \dots, N, \quad (3.91)$$

где $\bar{c}_i(t) = (c(x_i, t) + c(x_{i+1}, t)) / 2$, $\bar{T}_g(t) = (T_g(x_i, t) + T_g(x_{i+1}, t)) / 2$.

3. Распространение тепла в газозвушной смеси по высоте адсорбента:

– в интегральной форме на отрезке (x_1, x_2) за промежутки времени (t_1, t_2)

$$\begin{aligned} & c_p^g \rho_g W_g \int_{t_1}^{t_2} [T_g(x_1, t) - T_g(x_2, t)] dt + \\ & + S_{tr} \int_{t_1}^{t_2} \left[\left(-\lambda(x_1) \frac{\partial T_g(x_1, t)}{\partial x} \right) - \left(-\lambda(x_2) \frac{\partial T_g(x_2, t)}{\partial x} \right) \right] dt + \\ & + \alpha S_{ai} \int_{t_1}^{t_2} (T_{ai}(t) - \bar{T}_{gi}(t)) dt + c_p^g \rho_g S_{tr} \int_{x_1}^{x_2} [T_g(x, t_2) - T_g(x, t_1)] dx = 0; \end{aligned}$$

– в дифференциальной форме на отрезке времени $(n-1)t_{\text{ц}} < t < (n-1/2)t_{\text{ц}}$, $n = 1, 2, \dots$

$$\begin{aligned} -c_p^g \rho_g w \frac{\partial T_g(x, t)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda(x) \frac{\partial T_g(x, t)}{\partial x} \right) + \left(\frac{1 - \varepsilon_i}{\varepsilon_i} \right) \alpha \sigma [T_{ai}(t) - \bar{T}_{gi}(t)] + \\ + c_p^g \rho_g \frac{\partial T_g(x, t)}{\partial t} = 0, \quad 0 < x < H, \end{aligned} \quad (3.92)$$

где σ – удельная поверхность транспортных пор адсорбента, $\text{м}^2/\text{м}^3$.

Аналогичное уравнение описывает процесс распространения тепла в газозвушной смеси при десорбции азота на отрезке времени $(n-1/2)t_{\text{ц}} < t \leq nt_{\text{ц}}$, $n = 1, 2, \dots$

4. Изменение температуры в адсорбенте: в интегральной форме в i -м слое адсорбента за промежутки времени (t_1, t_2)

$$\begin{aligned} -\alpha S_{ai} \int_{t_1}^{t_2} [T_{ai}(t) - \bar{T}_{gi}(t)] dt + h_{ad} [a_i(t_2) - a_i(t_1)] V_{ai} = \\ = c_p^a \rho_a V_{ai} [T_{ai}(t_2) - T_{ai}(t_1)]; \end{aligned}$$

– в дифференциальной форме на отрезке времени $(n-1)t_{ц} < t < (n-1/2)t_{ц}$, $n = 1, 2, \dots$

$$c_p^a \rho_a \frac{\partial T_{ai}(t)}{\partial t} + \left(\frac{1-\varepsilon_i}{\varepsilon_i} \right) \alpha \left(T_{ai}(t) - \bar{T}_g(t) \right) - h_{ад} \frac{\partial a_i(t)}{\partial t} = 0. \quad (3.93)$$

Аналогичное уравнение описывает процесс распространения тепла в адсорбенте при десорбции азота на отрезке времени $(n-1/2)t_{ц} < t \leq nt_{ц}$, $n = 1, 2, \dots$. При этом в уравнении вместо $h_{ад}$ используется $h_{дес}$.

5. Изменение скорости газовой смеси по высоте адсорбента:

– в интегральной форме на отрезке (x_1, x_2) за промежуток времени (t_1, t_2)

$$-S_{tr} \int_{t_1}^{t_2} [w(x_2, t) - w(x_1, t)] dt - V_{ai} [a_i(t_2) - a_i(t_1)] M_{N_2} / \rho_{N_2} = 0;$$

– в дифференциальной форме на отрезке времени $(n-1)t_{ц} < t < (n-1/2)t_{ц}$, $n = 1, 2, \dots$

$$-\frac{\partial w}{\partial x} - \frac{M_{N_2}}{\rho_{N_2}} \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \right) \frac{\partial a_i(t)}{\partial t} = 0. \quad (3.94)$$

Аналогичное уравнение описывает процесс изменения скорости газовой смеси при десорбции азота на отрезке времени $(n-1/2)t_{ц} < t \leq nt_{ц}$, $n = 1, 2, \dots$

Начальные условия для уравнений (1) – (5) имеют вид:

– при $t = 0$

$$a_i(0) = 0, \quad c(x, 0) = c_0, \quad T_{ai}(0) = T_{a0}, \quad T_g(x, 0) = T_{g0}, \quad 0 \leq x \leq H; \quad (3.95)$$

– при $t = nt_{ц}$, $n = 1, 2, \dots$:

$$a_i(t) = a_i^{дес}(t_{ц}), \quad c(x, t) = c^{дес}(x, t_{ц}), \quad T_{ai}(t) = T_{ai}^{дес}(t_{ц}), \quad (3.96)$$

$$T_g(x, t) = T_g^{дес}(x, t_{ц}), \quad w(x, t) = w^{дес}(x, t_{ц}), \quad 0 \leq x \leq H;$$

– для десорбционного процесса при $(n-1/2)t_{ц}$, $n=1, 2, \dots$:

$$a_i^{\text{дес}}(t) = a_i(t_{ц}/2), \quad c^{\text{дес}}(x, t) = c(x, t_{ц}/2), \quad T_a^{\text{дес}}(x, t) = T_a(x, t_{ц}/2), \\ T_g^{\text{дес}}(x, t) = T_g(x, t_{ц}/2), \quad w^{\text{дес}}(x, t) = w(x, t_{ц}/2), \quad 0 \leq x \leq H. \quad (3.97)$$

Граничные условия для адсорбционного процесса при $(n-1)t_{ц} \leq t \leq (n-1/2)t_{ц}$, $n=1, 2, \dots$ и десорбционного процесса при $(n-1/2)t_{ц} < t \leq nt_{ц}$, $n=1, 2, \dots$ принимались следующими:

– для адсорбционного процесса при $x=0$

$$c^{\text{ад}}(0, t) = c_{\text{вх}}, \quad T_g^{\text{ад}}(0, t) = T_g^{\text{вх}}, \quad w^{\text{ад}}(0, t) = w_{\text{вх}}; \quad (3.98)$$

– при $x=H$

$$\frac{\partial c(H, t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial T_g(H, t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial w(H, t)}{\partial x} = 0; \quad (3.99)$$

– для десорбционного процесса при $x=0$

$$\frac{\partial c(H, t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial T_g(H, t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial w(H, t)}{\partial x} = 0; \quad (3.100)$$

– при $x=H$

$$c^{\text{дес}}(H, t) = c(H, t_{\text{ад}}), \quad T_g^{\text{дес}}(H, t) = T_g(H, t_{\text{ад}}), \quad w(H, t) = w(H, t_{\text{ад}}). \quad (3.101)$$

Коэффициент диффузии азота в газовой фазе D_g рассчитывался по методу Фуллера, Шлеттера и Гиддингса [122] (см. табл. 3.19), дифференциальные мольные теплоты адсорбции $h_{\text{ад}}$ и $h_{\text{дес}}$ определялись на основе термического уравнения теории объемного заполнения микропор [116], равновесная величина адсорбции a_i^* определялась по уравнению Дубинина–Радушкевича [93, 116]. Давление насыщения P^* , коэффициент теплоотдачи α , коэффициент массоотдачи β – согласно рекомендациям работ [103, 123], соответственно (см. табл. 1). Объемный расход потока, подаваемого в установку, определялся по формуле

$$W_{\text{вх}} = W_{\text{зад}} \left/ \left(1 - \theta \frac{P_{\text{дес}}}{P_{\text{ад}}} \right) \right., \quad (3.102)$$

где θ – коэффициент обратной промывки, характеризующий долю потока воздуха, обогащенного кислородом, направляемую на десорбцию азота [124].

Формулы для расчета коэффициентов уравнений математической модели представлены в табл. 3.19.

3.19. Формулы для расчета коэффициентов модели

$$1. P^* = \exp\left(A - \frac{F}{(T_g - C)}\right) / 760 \quad (3.103)$$

$$v_i = \frac{M_i}{\rho_{кр i} \exp(\varphi(T_{кр i} - T_g))}, \quad i = N_2, O_2 \quad (3.104)$$

$$2. a_i^* = \frac{W_0}{22,4\bar{c}_i v_{N_2}} \exp\left(-\frac{BT_a^2}{(22,4\bar{c}_i \Psi)^2} \left(\log\left(\frac{P^*}{22,4\bar{c}_i P}\right)\right)^2\right) \quad (3.105)$$

$$3. h_{ал} = \gamma_{N_2} + E_0 \left[\left(\ln\left(\frac{a_i^*}{a_i}\right)\right)^{\frac{1}{n}} + \left(\frac{\varphi T_a}{n}\right) \left(\ln\left(\frac{a_i^*}{a_i}\right)\right)^{\frac{1}{n}-1} \right] \quad (3.106)$$

$$h_{дес} = \gamma_{N_2} + E_0 \left[1 + \left(\ln\left(\frac{a_i^*}{a_i}\right)\right)^{\frac{1}{n}} + \left(\frac{\varphi T_a}{n}\right) \left(\ln\left(\frac{a_i^*}{a_i}\right)\right)^{\frac{1}{n}-1} \right] \quad (3.107)$$

$$4. D_g = \frac{10^{-7} T_g^{1,75} [(M_{N_2} + M_{O_2}) / (M_{N_2} M_{O_2})]^{1/2}}{P \left[(v_{N_2})^{\frac{1}{3}} + (v_{O_2})^{\frac{1}{3}} \right]^2} \quad (3.108)$$

$$5. \beta = 0,355 \frac{w}{\varepsilon \rho_a} \left(\frac{w \rho_g d_3}{\mu}\right)^{0,359} \left(\frac{\mu}{\rho_g D_g}\right)^{-0,667} \quad (3.109)$$

$$\alpha = \frac{0,24 \text{Re}_3^{0,83} \lambda}{d_3} \quad (3.110)$$

$$7. \rho(c) = \frac{(1 - 22,4c) \cdot 32}{22,4} P \quad (3.111)$$

$$8. \Delta P = 150 \frac{(1 - \varepsilon)^2 \eta w_0}{\varepsilon^3 d_3} x + 1,54 \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon^3} \frac{\rho g w_0^2}{d_3}; \quad w_0 = w / S \quad (3.112)$$

В представленных формулах: $A, C, F, \psi, \gamma, \phi$ – константы для азота; B, n – константы для цеолита; $\rho_{кр}$ – критическая плотность; $T_{кр}$ – критическая температура [122].

3.3.2. АЛГОРИТМ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МОДЕЛИ ОБОГАЩЕНИЯ ВОЗДУХА КИСЛОРОДОМ

Система дифференциальных уравнений (3.90) – (3.94) является нелинейной, поскольку коэффициенты a_i^* , $h_{ад}(a_i)$, $h_{дес}(a_i)$ зависят от текущих значений концентрации азота в газовой фазе c и температуры адсорбента T_a соответственно. Для ее решения нами разработан итерационный алгоритм с использованием метода конечных элементов в программной среде Matlab [125]. Схема алгоритма представлена на рис. 3.48.

В первом блоке задаются конструктивные размеры установки и режимные переменные ее функционирования, кинетические и физико-химические константы, входящие в коэффициенты уравнений математической модели (3.90) – (3.94), а также настроечные параметры алгоритма численного решения дифференциальных уравнений массо- и теплопереноса.

Во втором блоке начинается расчет процесса обогащения воздуха кислородом – адсорбции (управляющим переменным bb и ab присваиваются значения «А» («А» означает расчет процесса адсорбции, «Д» – расчет процесса десорбции) и «И» («И» означает итерационный цикл, «НИ» – отсутствие итерационного цикла), т.е. $bb:=A$, $ab:=I$), задаются начальные приближения для уравнений (3.90) – (3.94).

В блоке 3 осуществляется переприсваивание переменных состояния процесса обогащения воздуха в зависимости от номера итерации v .

В блоке 4 последовательно выполняются расчеты коэффициентов математической модели (3.90) – (3.94) (табл. 3.19).

В блоке 5 методом конечных элементов вычисляются значения $c^{(v)}(x_i, t_j)$; $a_i^{(v)}(t_j)$; $T_g^{(v)}(x_i, t_j)$; $T_{ai}^{(v)}(t_j)$, $w^{(v)}(x_i, t_j)$, $i = \overline{0, n}$ на следующей итерации.

В блоке 6 осуществляется проверка выполнения условий сходимости итерационного цикла:

$$\left| \frac{g_{ij}^{(v+1)} - g_{ij}^{(v)}}{g_{ij}^{(v)}} \right| \leq \delta, \quad g_{ij} = (c_{ij}, a_j, T_{gij}, T_{aj}, w_{ij}),$$

$$\left| \frac{c_{ij}^{(v+1)} - c_{ij}^{(v)}}{c_{ij}^{(v)}} \right| \leq \delta; \quad \left| \frac{a_j^{(v+1)} - a_j^{(v)}}{a_j^{(v)}} \right| \leq \delta; \quad \left| \frac{T_{gij}^{(v+1)} - T_{gij}^{(v)}}{T_{gij}^{(v)}} \right| \leq \delta;$$

$$\left| \frac{T_{aj}^{(v+1)} - T_{aj}^{(v)}}{T_{aj}^{(v)}} \right| \leq \delta; \quad \left| \frac{w_{ij}^{(v+1)} - w_{ij}^{(v)}}{w_{ij}^{(v)}} \right| \leq \delta.$$

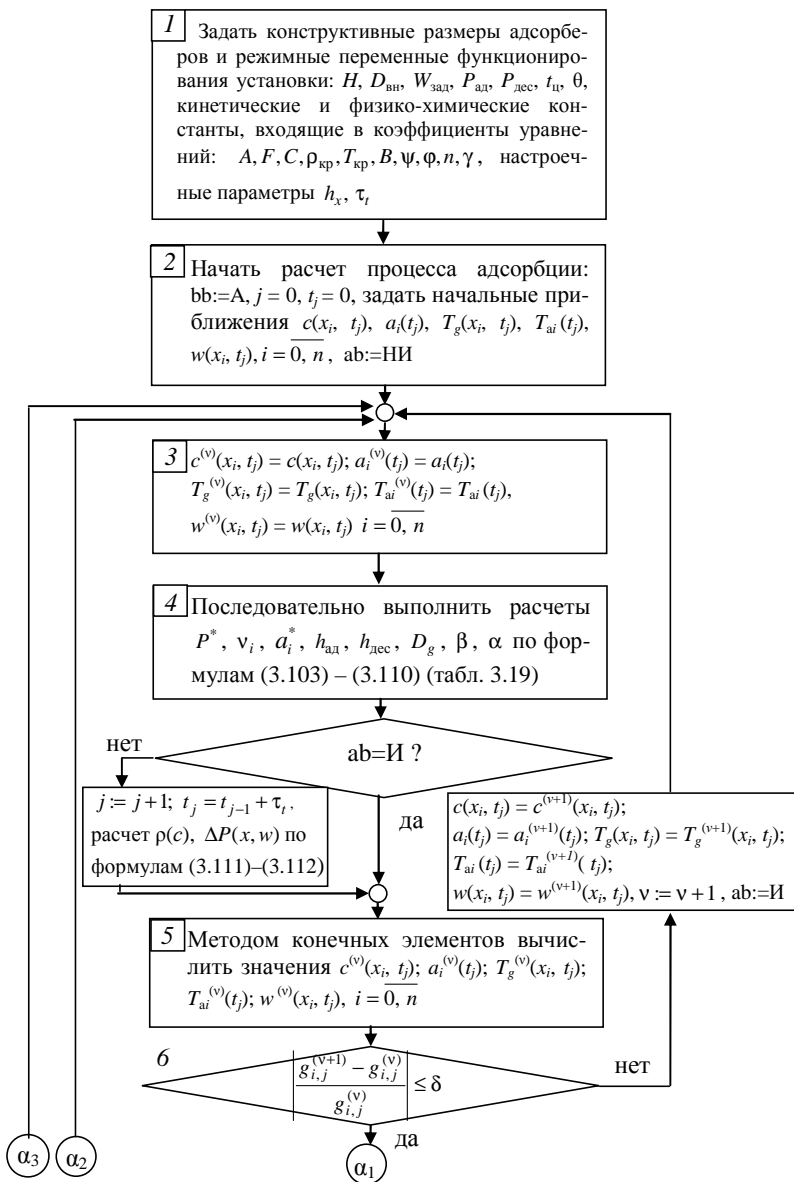


Рис. 3.48. Схема итерационного алгоритма решения дифференциальных уравнений (3.90) – (3.94):

И – итерационный цикл; НИ – отсутствие итерационного цикла; А – рассчитывается процесс адсорбции; Д – рассчитывается процесс десорбции

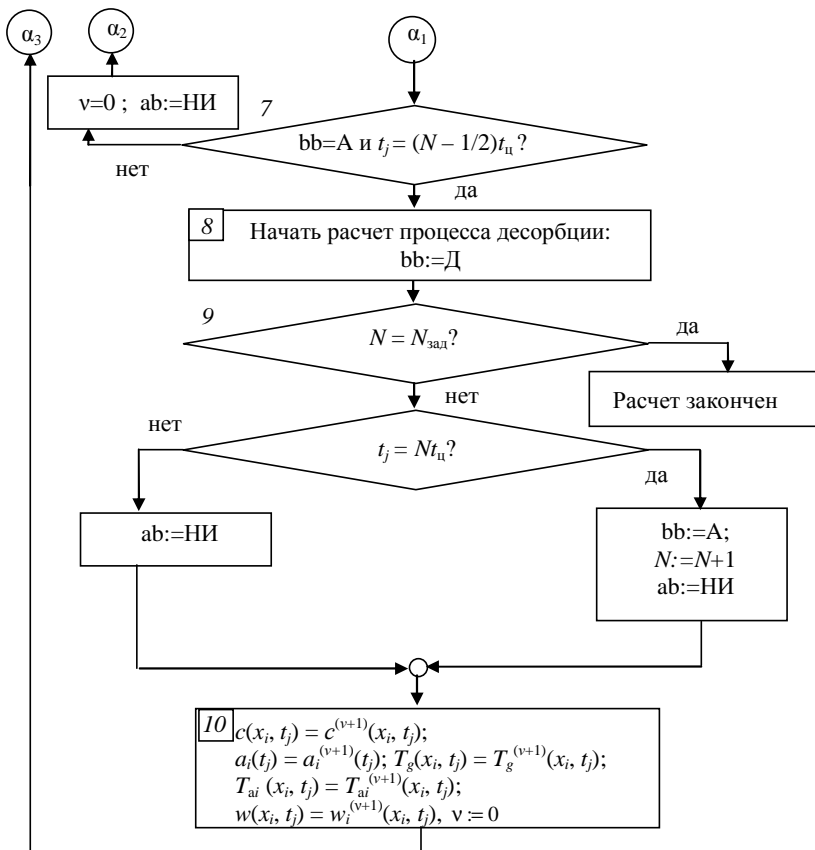


Рис. 3.48. Продолжение

В блоке 7 осуществляется проверка выполнения условия окончания расчета процесса адсорбции: $t_j = (N - 1/2) t_{ц}$?. Если это условие выполняется, то осуществляется переход к расчету процесса десорбции (блок 8, $bb:=Д$).

При достижении заданного числа циклов $N = N_{зад}$ (блок 9) расчет закончен.

В блоке 10 осуществляется переприсваивание переменных состояния процесса обогащения воздуха в зависимости от номера итерации v .

При моделировании процесса обогащения воздуха кислородом были приняты следующие характеристики адсорбента LiLSX [112] (табл. 3.20).

3.20. Характеристики адсорбента LiLSX

Характеристика	Значение	Характеристика	Значение
E_0 , Дж·моль ⁻¹	16 800	W_0 , См ³ ·кг ⁻¹	0,195
ε	0,394	c_p^a , Дж·(кг·град) ⁻¹	700
B , град ⁻²	$1,28 \cdot 10^{-6}$	ρ_a , кг·м ⁻³	660
Ψ	1	d_3 , м	$2 \cdot 10^{-4}$

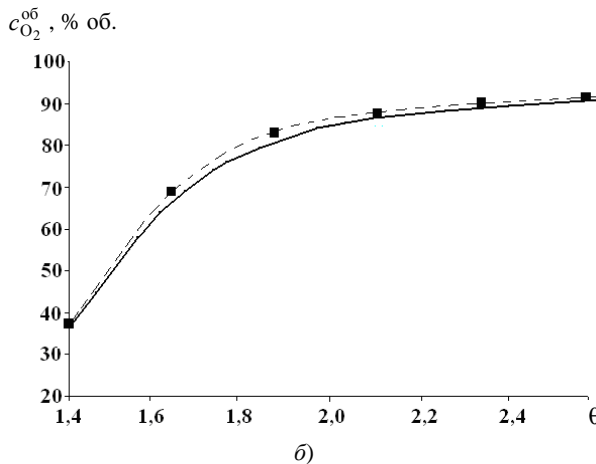
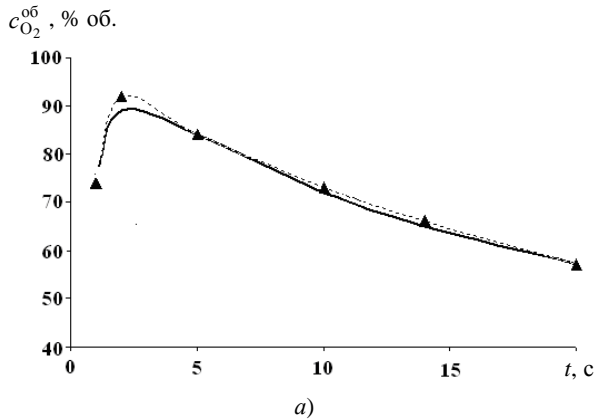


Рис. 3.49. Расчетные и экспериментальные зависимости концентрации кислорода от длительности цикла (а), коэффициента обратной промывки (θ), высоты слоя адсорбента (б):

$LiLSX$, $H = 0,25$ м; $V_{раб} = 0,25 \cdot 10^{-3}$ м³; $W_{вх} = 0,167 \cdot 10^{-3}$ м³/с;
 $\theta = 2,5$; $d_3 = 0,20$ мм; $t_{и} = 5$ с

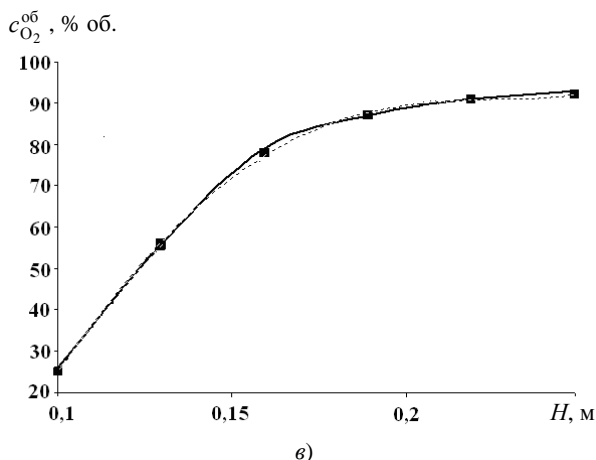


Рис. 3.49. Продолжение

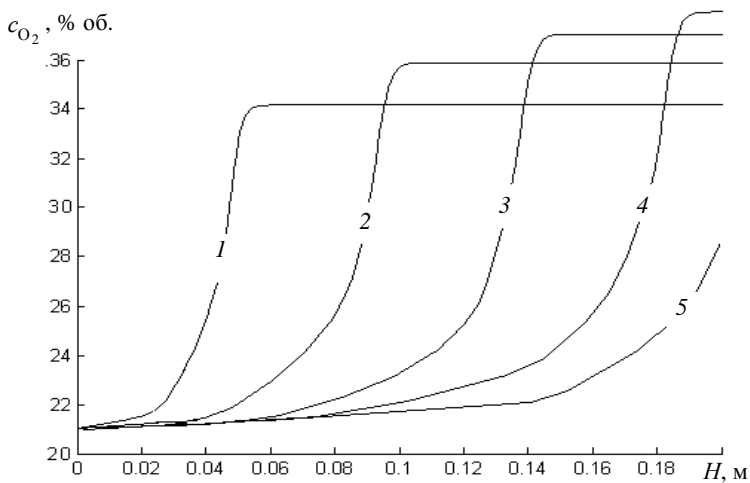
Адекватность модели проверялась сравнением расчетных по модели (сплошные линии) и экспериментальных значений (штрихпунктирные линии) концентрации кислорода на выходе из установки короткоцикловой адсорбции (рис. 3.49, а, б, в).

Максимальное рассогласование расчетных по модели и экспериментальных значений концентрации кислорода на выходе из установки в течение цикла работы не превышает 12%.

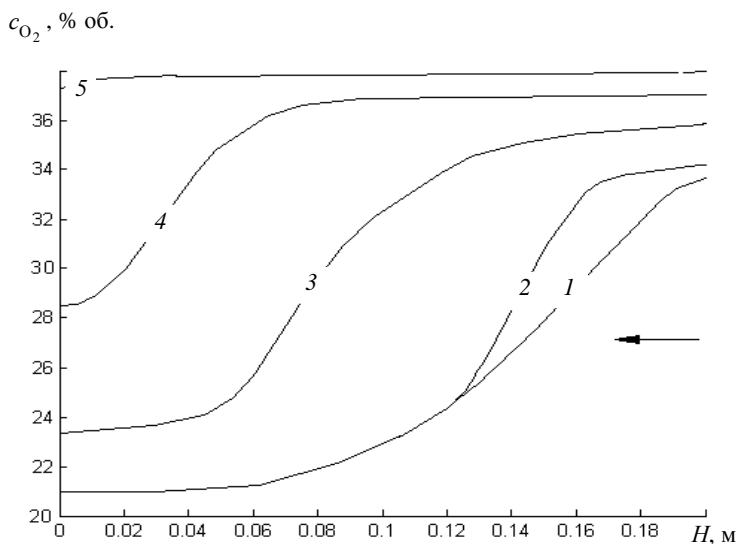
На рисунке 3.50 приведены профили концентрации кислорода в газовой фазе по высоте адсорбента при адсорбции (а) и десорбции (б) в зависимости от времени, а на рис. 3.51 – зависимости концентрации кислорода в газовой фазе и аэродинамического сопротивления адсорбента от величины отношения высоты слоя адсорбента к диаметру адсорбера.

Из анализа графиков на рис. 3.51 следует, что максимальная концентрация кислорода достигается при величинах $H/D_{вн}$ в диапазоне значений 4...6, а при $H/D_{вн} > 8$ сопротивление слоя монотонно возрастает, что приводит к снижению $P_{ад}$ и, следовательно, к уменьшению концентрации кислорода на выходе из установки.

Методом вычислительного эксперимента также установлено, что в цикле работы установки концентрация кислорода на выходе повышается до максимального значения $c_{O_2}^{об} = 91,1\%$ при минимальном числе циклов адсорбции–десорбции $n_{ц} = 18$.



a)



б)

Рис. 3.50. Изменение концентрации кислорода в газовой фазе в 1 цикле:

a – при адсорбции; *б* – при десорбции;

1 – $t = 0,2$; *2* – $t = 0,4$; *3* – $t = 0,6$; *4* – $t = 0,8$; *5* – $t = 1,0$

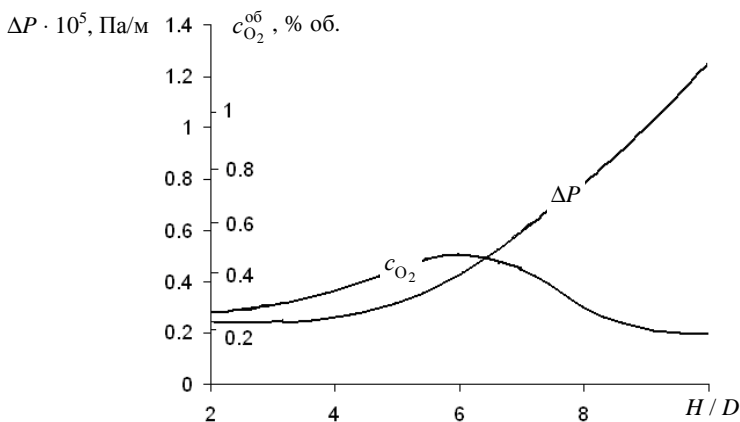


Рис. 3.51. Концентрация кислорода и аэродинамическое сопротивление слоя в зависимости от отношения высоты к диаметру адсорбера:

$$V_{\text{раб}} = 0,25 \cdot 10^{-3} \text{ м}^3; d_3 = 0,2 \text{ мм}$$

На базе математической модели тепло- и массообменных процессов при обогащении воздуха кислородом разработана методика и программа ЭВМ технологического расчета установки короткоциклового адсорбции, с использованием которой были определены конструктивные (высота слоя адсорбента, диаметр адсорбера) и режимные (управляющие) переменные (длительность цикла, коэффициент обратной промывки) установки при обеспечении заданных значений производительности $W_{\text{зад}} = 0,05 \cdot 10^{-3} \text{ м}^3/\text{с}$ и концентрации кислорода $[c_{\text{O}_2}^{\text{об}}]_{\text{зад}} \geq 90\%$.

3.3.3. ИНТЕГРИРОВАННОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ УСТАНОВКИ КОРОТКОЦИКЛОВОЙ АДСОРБЦИИ ОБОГАЩЕНИЯ ВОЗДУХА КИСЛОРОДОМ

Задача оптимального (по критерию приведенных затрат) проектирования установки короткоциклового адсорбции обогащения воздуха кислородом формулируется следующим образом: для заданных типов аппаратного оформления $a \in A$ адсорбционной установки и $b \in B$ адсорбента, значений производительности $Q_{\text{зад}}$ и концентрации кислорода $c_{\text{O}_2}^{\text{вых}}$ на выходе из установки требуется определить конструктивные параметры (высоту слоя H адсорбента, диаметр $D_{\text{вн}}$ адсорбера) и режимные переменные (значения давлений $P_{\text{ад}}$, $P_{\text{дес}}$, длительность цикла $\tau_{\text{ц}}$, коэффициент обратной промывки θ), при которых достигается

ся минимум приведенных затрат $C(a, d, P_{ад}, P_{дес}, \tau_{ц}, \theta, c_{O_2}^{BX}, W_0, \beta)$ на создание установки. Неопределенными параметрами в этой задаче являются концентрация кислорода $c_{O_2}^{BX}$ в воздухе, подаваемом компрессором на обогащение в адсорбер (может изменяться в пределах от 18 до 23% об.), предельный адсорбционный объем цеолитового адсорбента W_0 (0,160...0,230 см³/г), значение коэффициента массоотдачи β (1,2...1,8 · 10⁻⁵ 1/с). Сформулируем ДЗИП4 в математической постановке (2.120) – (2.123):

$$I^* = \min_{H, D_{вн}, u, P_{ад}, P_{дес}, \tau_{ц}, \theta} u \quad (3.113)$$

при связях в форме уравнений математической модели нестационарного процесса обогащения воздуха кислородом (3.90) – (3.111) [126] и ограничениях:

– на значение целевой функции проектирования

$$\text{Вер}_{\{c_{O_2}^{BX}, W_0, \beta\}} \{g_0(\bullet) = C(H, D_{вн}, P_{ад}, P_{дес}, \tau_{ц}, \theta, c_{O_2}^{BX}, W_0, \beta) - u \leq 0\} \geq \rho_0; \quad (3.114)$$

– на производительность установки

$$\text{Вер}_{\{c_{O_2}^{BX}, W_0, \beta\}} \{g_1(\bullet) = Q - Q_{зад}(H, D_{вн}, P_{ад}, P_{дес}, \tau_{ц}, \theta, c_{O_2}^{BX}, W_0, \beta) \leq 0\} \geq \rho_1; \quad (3.115)$$

– на функцию гибкости

$$\chi_1(H, D_{вн}) = \max_{c_{O_2}^{BX}, W_0, \beta} \min_{P_{ад}, P_{дес}, \tau_{ц}, \theta} \max_{j=2,3} g_j(H, D_{вн}, P_{ад}, P_{дес}, \tau_{ц}, \theta, c_{O_2}^{BX}, W_0, \beta) \leq 0; \quad (3.116)$$

– и габариты установки

$$k_p \leq \hat{k}_p, \quad H \leq \hat{H}, \quad D_{вн} \leq \hat{D}. \quad (3.117)$$

В задаче (3.113) – (3.117) u – скалярная переменная (аналог конструктивных переменных); $\text{Вер}\{\bullet\}$ – вероятность выполнения ограничения $\{\bullet\}$; g_0, g_j – функции ограничений; $g_0(\bullet) = C(H, D_{вн}, P_{ад}, P_{дес}, \tau_{ц}, \theta, c_{O_2}^{BX}, W_0, \beta)$ – критерий интегрированного проектирования; $g_j(H, D_{вн}, P_{ад}, P_{дес}, \tau_{ц}, \theta, c_{O_2}^{BX}, W_0, \beta) \equiv y_{jзад} - y_j \leq 0, \quad j = 1, \dots, m$ – функции ограничений;

$$y_j = \mathfrak{Z}(H, D_{\text{вн}}, P_{\text{ад}}, P_{\text{дес}}, \tau_{\text{ц}}, \theta, c_{\text{O}_2}^{\text{вх}}, W_0, \beta), j = 1, \dots, m,$$

$\mathfrak{Z}(H, D_{\text{вн}}, P_{\text{ад}}, P_{\text{дес}}, \tau_{\text{ц}}, \theta, c_{\text{O}_2}^{\text{вх}}, W_0, \beta)$ – оператор математической модели (3.90) – (3.112); $g_2(\bullet) = [c_{\text{O}_2}^{\text{вх}}]_{\text{зад}} - c_{\text{O}_2}^{\text{вх}}(H, D_{\text{вн}}, P_{\text{ад}}, P_{\text{дес}}, \tau_{\text{ц}}, \theta, c_{\text{O}_2}^{\text{вх}}, W_0, \beta)$; $g_3(\bullet) = M(H, D_{\text{вн}}, P_{\text{ад}}, P_{\text{дес}}, \tau_{\text{ц}}, \theta, c_{\text{O}_2}^{\text{вх}}, W_0, \beta) - \hat{M}$; ρ_0, ρ_j – заданные значения вероятности выполнения ограничений; $\chi_1(H, D_{\text{вн}})$ – функция гибкости адсорбционной установки; $\hat{M}, \hat{k}_p, \hat{H}, \hat{D}_{\text{вн}}$ – предельно допустимые значения массы, коэффициента давления и габаритов адсорберов установки.

В качестве примера оптимального проектирования энергосберегающей установки короткоцикловой адсорбции рассмотрим разработку портативного медицинского концентратора кислорода, техническое задание на проектирование которого включает достижение следующих характеристик: производительность концентратора – $Q_{\text{зад}} = 0,05 \cdot 10^{-3} \text{ м}^3 \cdot \text{с}^{-1}$; концентрацию кислорода на выходе из аппарата – $[c_{\text{O}_2}^{\text{вх}}]_{\text{зад}} \geq 90\%$; $\rho_0, \rho_1 = 0,9$; предельно допустимые значения массы адсорберов $\hat{M} = 0,6 \text{ кг}$; отношения давлений адсорбции $P_{\text{ад}}$ и десорбции $P_{\text{дес}}$ – $\hat{k}_p = 3$; высоту слоя адсорбента $\hat{H} = 0,4 \text{ м}$ и диаметр адсорбера $\hat{D}_{\text{вн}} = 0,1 \text{ м}$ соответственно.

Альтернативные варианты аппаратурно-технологического оформления включали адсорбер колонного типа, двухадсорберную схему без выравнивания давлений между адсорберами, двухадсорберную схему с выравниванием давлений, четырехадсорберную схему с выравниванием давлений и пятиадсорберную схему с двумя операциями выравнивания давлений. Для каждого варианта анализировались различные схемы организации процесса обогащения воздуха кислородом (напорная, с вакуумной десорбцией, вакуум-напорная) и типы адсорбентов (гранулированный и блочный – *NaX, LiLSX*).

В ходе оптимального проектирования была выбрана двухадсорберная адсорбционная установка с вакуумной десорбцией и определены оптимальные значения конструктивных параметров $H^* = 0,22 \text{ м}$; $D_{\text{вн}}^* = 0,035 \text{ м}$, режимных переменных $P_{\text{ад}}^* = 1,5 \cdot 10^5 \text{ Па}$; $P_{\text{дес}}^* = 0,5 \cdot 10^5 \text{ Па}$; $\theta^* = 2,5$; $\tau_{\text{ц}}^* = 1,6 \text{ с}$; $Q_{\text{исх}}^* = 2,93 \cdot 10^{-4} \text{ м}^3/\text{с}$ и технико-экономических показателей портативного медицинского концентратора кислорода: $\text{ПЗ}^* = 45 \text{ 250 р.}$; $M^* = 0,5 \text{ кг}$; $N^* = 76 \text{ Вт}$.

Наши практические рекомендации при проектировании медицинских концентраторов кислорода с диапазоном производительности до $0,08 \cdot 10^{-3} \text{ м}^3/\text{с}$ включают использование адсорберов с размерами $4 \leq H/D_{\text{вн}} \leq 6$ при реализации напорной схемы с вакуумной десорбцией ($k_p = P_{\text{ад}}/P_{\text{дес}} \leq 3$) и блочных цеолитовых адсорбентов *LiLSX* с $d_3 \leq 0,5 \cdot 10^{-3} \text{ м}$. При этом достигается улучшение энергосберегающих показателей медицинских концентраторов кислорода по сравнению с мировыми аналогами в среднем на 20%.

ОБОЗНАЧЕНИЯ

- a_i – концентрация в адсорбенте, кмоль/кг;
- a^* – равновесная величина адсорбции, кмоль/кг;
- A – константа для азота;
- B – параметр уравнения ТОЗМ, 1/град²;
- C_p – теплоемкость, Дж/(кг·К);
- C – константа для азота;
- c – концентрация в газовой фазе, кмоль/м³;
- $c_{\text{O}_2}^{\text{об}}$ – концентрация кислорода в газовой фазе на выходе из установки, м³/м³, % об.;
- $D_{\text{вн}}$ – внутренний диаметр адсорбера, м;
- D_g – коэффициент диффузии в газовой фазе, м²/с;
- d_3 – эквивалентный диаметр транспортных пор адсорбента, м;
- E_0 – характеристическая энергия адсорбции, Дж/моль;
- F – константа для азота;
- h – тепловой эффект, Дж/моль;
- h_x – величина шага сетки конечных элементов по координате, м;
- H – высота слоя адсорбента, м;
- m – масса, кг;
- M – молекулярная масса, кг/кмоль;
- N – число элементарных слоев;
- $N_{\text{потр}}$ – потребляемая мощность, Вт;
- n_r – показатель степени в уравнении ТОЗМ;
- $n_{\text{ц}}$ – число циклов адсорбции–десорбции;
- P – давление, Па;
- P^* – давление насыщения, Па;
- R – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·°К);
- S – площадь, м²;
- S_a – площадь поверхности транспортных пор адсорбента, м²;
- t – время, с

T – температура, °К;
 V – объем, м³;
 $V_{\text{раб}}$ – рабочий объем адсорбера, м³;
 W – объемный расход, м³/с;
 W_0 – предельный адсорбционный объем, см³/кг;
 w – скорость газового потока, м/с;
 α – коэффициент теплоотдачи, Вт/(м²·К);
 β – коэффициент внешней массоотдачи, м/с;
 γ – теплота конденсации (парообразования), Дж/кг;
 δ – заданная точность расчета;
 ε – относительный объем транспортных пор (коэффициент пористости);
 θ – коэффициент обратной промывки;
 η – кинематическая вязкость воздуха, м²/с;
 λ – коэффициент теплопроводности, Вт/(м·°К);
 μ – динамическая вязкость воздуха, Па·с;
 ν – молярный объем, моль/м³;
 ρ – плотность, кг/м³;
 σ – удельная поверхность транспортных пор адсорбента, м²/м³;
 τ_i – величина шага по времени, с;
 φ – термический коэффициент предельной адсорбции;
 ψ – коэффициент аффинности

ИНДЕКСЫ

a – адсорбента (в адсорбенте);
 $ад$ – адсорбции;
 $вх$ – входная (входной);
 $дес$ – десорбции;
 $зад$ – заданный;
 $кр$ – критическая;
 $об$ – обратного;
 $пр$ – продуктового;
 $тр$ – транспортных пор;
 $ц$ – цикла;
 g – газовой фазы (в газовой фазе);
 N_2 – азота;
 O_2 – кислорода;
 v – номер итерации.

3.4. ЭНЕРГОСБЕРЕГАЮЩИЙ ПРОЦЕСС ПРЕССОВАНИЯ ТВЕРДОСПЛАВНЫХ МАТЕРИАЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗА

Самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС) тугоплавких неорганических соединений – технологический процесс получения материалов, основанный на химическом взаимодействии исходных реагентов в твердой фазе в форме горения. Горение здесь является экзотермической реакцией взаимодействия порошкообразных реагентов между собой или порошкообразных реагентов с жидкими или газообразными реагентами с образованием твердых химических соединений. Чаще всего это тугоплавкие неорганические соединения (карбиды, нитриды, бориды и т.п.), не разлагающиеся при горении, и материалы на их основе [127, 133].

Несмотря на свою древнейшую историю и богатейшую практику, на базе процессов горения только сейчас начинает создаваться новейшая технология СВС-синтеза неорганических материалов. Эта технология представляет собой альтернативу традиционной технологии, основанной на использовании внешних источников тепла (печной и плазмохимической синтезы, спекание и горячее прессование, литье и наплавка и др.). Перечислим отличительные черты СВС-технологии:

- использование более дешевой химической энергии вместо электрической;
- простота оборудования благодаря отсутствию внешних источников тепла;
- большая скорость процессов, связанная со значительным саморазогревом во фронте горения;
- послонный характер выделения тепла и, как следствие этого, возможность работы с большими количествами вещества.

Общая схема технологии СВС-синтеза включает в себя такие основные технологические стадии, как приготовление шихты из порошкообразных реагентов, проведение собственно процесса высокотемпературного синтеза (сжигание шихты) и переработку продуктов горения. В настоящее время разработано около 100 технологических вариантов осуществления СВС-синтеза, в практическом отношении важное значение имеет технология СВС-компактирования.

В технологии СВС-компактирования горячий пористый продукт горения подвергается уплотнению до беспористого состояния. При этом может быть организовано формообразование. Наибольшее развитие СВС-компактирование получило для изготовления изделий из твердых сплавов: режущих пластин, фильер, штампов, валков, электродов для наплавки и электроискрового легирования, мишеней для

магнетронного и катодного распыления и т.д. Особенно перспективна технология СВС-компактирования для заполнения рынка изделий из новых безвольфрамовых твердых сплавов [128].

Объектом моделирования и исследования в технологии СВС-прессования является теплообменный процесс синтеза и уплотнения горячих продуктов СВС в пресс-форме с целью получения тугоплавких неорганических твердосплавных материалов. Цилиндрическая пресс-форма для СВС-компактирования (рис. 3.52) состоит из подвижной части (пуансона) и неподвижной части (матрицы), полости которых являются негативным (обратным) отпечатком внешней поверхности заготовки изделия.

Для осуществления технологии СВС-прессования используются следующие операции. Из порошков металлов и неметаллов готовится многокомпонентная реакционная шихта в виде брикета. Брикет помещается в реакционную пресс-форму. Пропусканием электрического тока через воспламенитель инициируется горение шихтового брикета. По окончании горения через определенное время задержки прессования t_3 (1...5 с), необходимое для отвода примесных газов, начинается приложение давления прессования P и выдержка прессуемого образца под этим давлением. Спрессованное изделие извлекается из пресс-формы и охлаждается. Весь процесс СВС-компактирования, включая сборку и разборку пресс-формы, протекает за 2...3 мин.

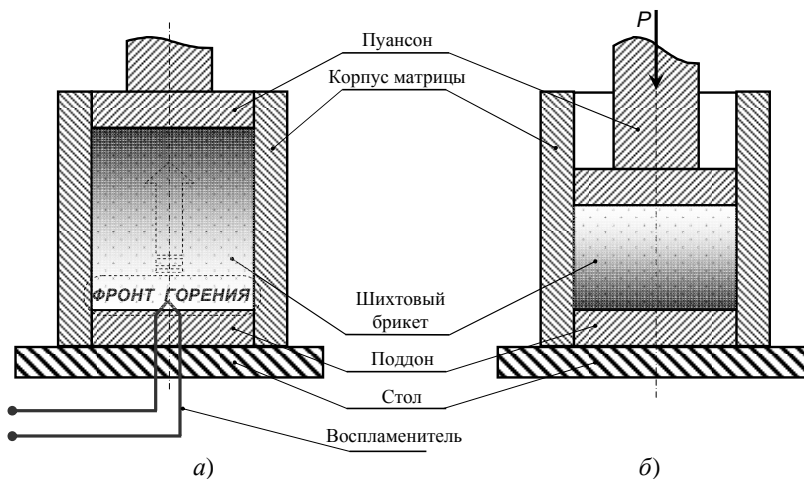


Рис. 3.52. Схема процесса СВС-компактирования в пресс-форме:
 а – горение (синтез)–задержка; б – прессование–выдержка

3.21. Класс твердосплавных материалов СТИМ

№ п/п	Марка сплава	Основной состав, %	Температура горения шихты T_r , К	Скорость горения шихты U_r , мм/с	Область применения
1	Состав на основе $MoSi_2$	$90MoSi_2 + 10Al_2O_3$	3073 ± 25	20 ± 5	Высокотемпературные нагреватели
2	СТИМ-1Б/3	$76TiC + 19TiB_2 + 5Cu$	2800 ± 25	60 ± 5	Режущий инструмент
3	СТИМ-2	$80TiC + 20Ni$	2500 ± 25	20 ± 5	Броне-пластины
4	СТИМ-2А	$50TiC + 50(Ni-Mo-Cu)$	2200 ± 25	10 ± 5	Штампы, фильеры
5	СТИМ-3Б	$90(TiC-Cr_3C_2) + 10Ni$	2600 ± 25	14 ± 5	Режущий инструмент

Твердые сплавы, синтезируемые при СВС-компактировании, получили название СТИМ – синтетические твердые инструментальные материалы. Их основу составляют карбиды, бориды, нитриды, карбонитриды и другие соединения тугоплавких металлов (Ti, Zr, Nb, Ta и других). Здесь излагается методика расчета и оптимизация толщины стенки пресс-формы для СВС-компактирования определенного класса твердосплавных материалов (табл. 3.21).

3.4.1. РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУР И НАПРЯЖЕНИЙ В ПРЕСС-ФОРМЕ ДЛЯ СВС-КОМПАКТИРОВАНИЯ

Расчет пресс-формы для компактирования изделий цилиндрической формы из указанных в табл. 3.21 твердосплавных СТИМ предусматривает определение конструктивных размеров пресс-формы: внутреннего диаметра D , толщины стенки δ и высоты H . Главной задачей здесь является определение толщины стенки, так как диаметр пресс-формы принимается равным диаметру требуемого СТИМ-изделия, а высота определяется по формуле $H = H_0 + 2\delta$, где H_0 – на-

чальная высота шихтового брикета прессуемого материала. Толщина стенки выбирается исходя из выполнения условия прочности по нормальным напряжениям в стенке, возникающим от действия высоких температурных и механических нагрузок.

Для расчета температур в стенке пресс-формы для СВС-компактирования в [129, 134] разработана математическая модель, позволяющая рассчитать температуру как функцию двух пространственных координат r , z и времени t : $T = f(r, z, t)$. Модель включает нелинейные уравнения теплопроводности и движения фронта горения шихты в пресс-форме с краевыми условиями; входными переменными модели являются время задержки прессования t_3 и давление на плунжере прессы P . Вычислительный эксперимент показал, что наиболее высокие температуры ($T = 500$ °С) развиваются в средней части пресс-формы и на внутренней поверхности стенки.

Образование твердых сплавов в пресс-формах протекает за короткий промежуток времени ($t = 0,5 \dots 15$ с) при высоких температуре и давлении ($T = 2000 \dots 3000$ °С, $P = 100$ МПа). При этом процесс теплопроводности является нестационарным, наблюдается высокий градиент температуры по радиусу и высоте пресс-формы. В цилиндрической стенке возникают термоупругие напряжения, наличие которых обусловлено кратковременностью процесса СВС-компактирования и неравномерной тепловой нагрузкой в стенке пресс-формы.

В настоящее время существует большое количество методов прочностного расчета цилиндрических обечаек (корпусов, пресс-форм и т.п.), нагруженных внутренними силовыми и температурными напряжениями [130 – 132]. В основном эти методы сводятся к расчету прочности на основе допущения о постоянстве температурного профиля в стенке рассчитываемого объекта, когда тепловой поток через стенку можно считать установившимся. Однако для современных производств химической и металлургической промышленности характерны процессы, протекающие в режиме неустановившегося теплового потока при высоких, а иногда и сверхвысоких температурах. Применение традиционных методов прочностного расчета корпусов оборудования для промышленных целей приводит в этих случаях к неоправданному увеличению веса пресс-формы и соответственно расходу материала. Такой «стационарный изотермический» расчет можно использовать лишь при разработке лабораторных установок с малой толщиной стенок. Наличие высоких силовых и температурных нагрузок, накладывающихся в разные временные интервалы, требуют более подробного изучения процесса при разработке оборудования. В случае

промышленного оборудования для получения крупногабаритных заготовок проведение экспериментального исследования либо невозможно, либо трудоемко и сопряжено с большими материальными затратами. Решение данной проблемы заключается в моделировании процессов СВС-прессования [135]. Предлагается новый подход к тепловому расчету пресс-оснастки для СВС-прессования, учитывающий специфику процессов, протекающих внутри пресс-формы, а именно, их существенную нестационарность, неизотермичность, а также качественно различный уровень термической градиентности по толщине стенки пресс-формы.

В работе [136] была разработана методика теплового и прочностного расчета пресс-формы для технологии СВС-компактирования, учитывающая большой перепад температуры в стенке пресс-формы и нестационарность процесса СВС-синтеза.

На рисунке 3.53 представлена схема установки СВС-компактирования. Химически реагирующее вещество заполняет область II. Вещество находится в пресс-форме, состоящей из пуансона 1, корпуса 2 и поддона 3. В совокупности эти элементы конструкции образуют область I. На протяжении всего процесса между образцом и пресс-формой (граница G_1) имеет место плотный контакт, что соответствует граничным условиям 4-го рода (равенство температур и тепловых потоков).

Теплообмен на границах G_2 , G_3 осуществляется за счет естественной конвекции воздуха. Коэффициенты теплоотдачи, соответствующие этим границам, могут быть найдены из решения задачи об остывании ограниченного вертикального цилиндра. В случае односторон-

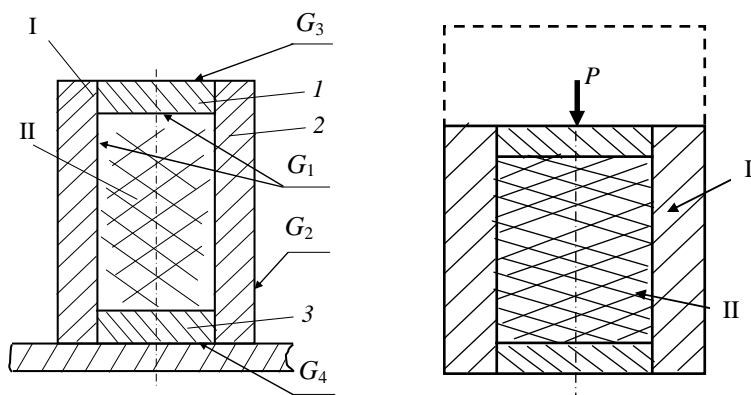


Рис. 3.53. Схема СВС-прессования:

1 – пуансон; 2 – корпус; 3 – поддон

него прессования теплообмен на границе G_4 происходит за счет кондуктивного теплопереноса из материала пресс-формы в металлический стол. Поскольку, как показывает опыт, нижняя поверхность стола, на котором стоит пресс-форма, нагревается незначительно, то ее температуру можно принять равной температуре окружающей среды T_0 и считать не изменяющейся в ходе протекания процесса. Температура же верхней части стола изменяется во времени и равна температуре наружной границы пресс-формы (G_4). В этом случае возможно использование коэффициента теплоотдачи, который рассчитывается следующим образом: $\alpha_4 = \frac{\lambda_s}{\delta_s}$, где λ_s и δ_s – коэффициент теплопроводности и

толщина стола соответственно. На стадии горения–задержки приняты следующие допущения: 1) зависимость коэффициентов теплопроводности и теплоемкости от температуры подчиняется линейному закону [137]: $\lambda = \lambda_0(1 + \alpha T)$, $c = c_0(1 + \beta T)$; 2) фронт горения плоский, температура во фронте постоянная $T_f = \text{const}$, движение фронта равномерное со скоростью $U_f = \text{const}$. Скорость горения U_c и температура горения T_c для СВС-материалов довольно надежно определяются из эксперимента в условиях технологической установки; 3) учитывая осесимметричность рассматриваемой области, можно считать, что температура является функцией двух координат – радиуса r , высоты z и времени t : $T = T(r, z, t)$.

При изложенных выше предпосылках исследуемый процесс на стадии горения–задержки может быть описан с помощью системы дифференциальных уравнений теплопроводности:

$$\frac{\partial T_1}{\partial t} = a_1 \nabla^2 T_1 = a_1 \left(\frac{\partial T_1}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T_1}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_1}{\partial z^2} \right), \quad (3.118)$$

$$\frac{\partial T_2}{\partial t} = a_2 \nabla^2 T_2. \quad (3.119)$$

Здесь индекс 1 соответствует пресс-форме, 2 – образцу, а a_i – коэффициенты температуропроводности образца ($i = 2$) и пресс-формы ($i = 1$) соответственно.

Граничные условия имеют следующий вид.

На границе G_1 (рис. 3.53):

$$T_1 = T_2, \quad -\lambda_1(T_d) \frac{\partial T_1}{\partial n} = -\lambda_2(T_d) \frac{\partial T_2}{\partial n}. \quad (3.120)$$

На границах пресс-форма–воздух G_2, G_3 :

$$-\lambda_1(T_d) \frac{\partial T_1}{\partial n} = \alpha_{2,3}(T_1 - T_0), \quad (3.121)$$

где $\alpha_{2,3}$ – коэффициенты теплоотдачи от пресс-формы на границах G_2, G_3 соответственно; T_d – предельно допустимая температура для материала стенки пресс-формы. Коэффициент теплоотдачи от вертикально-го цилиндра в воздух $\alpha_2 = 1,215 \cdot (\Delta T / L)^{0,25}$, где ΔT – температурный напор по толщине стенки; L – высота цилиндра.

Для конвективного теплообмена от горизонтальных горячих пластин (верхнее и нижнее основания пресс-формы) имеем следующие зависимости: а) для горячих пластин, обращенных вверх (верхнее основание пресс-формы): $\alpha_3 = 1,130 \cdot (\Delta T / D)^{0,25}$; б) для горячих пластин, обращенных вниз (нижнее основание пресс-формы): $\alpha_4 = 0,503 \cdot (\Delta T / D)^{0,25}$, где D – диаметр основания пресс-формы (наружный диаметр пресс-формы).

В нашем случае объектом рассмотрения является одностороннее прессование, поэтому на линии раздела «пресс-форма–стол» граничное условие имеет вид

$$-\lambda_1(T_d) \frac{\partial T_1}{\partial n} = \alpha'_4(T_1 - T_0). \quad (3.122)$$

Начальные условия имеют следующий вид:

$$t = 0, T_1 = T_0, T_2 = \begin{cases} T_0, z \leq \delta + H_0 \\ T_r, \delta < z \leq \delta + \varepsilon \end{cases}, \quad (3.123)$$

где ε – малая величина, которая выбирается из условия возможности начать численный счет; T_0 – температура окружающей среды; T_r – температура фронта горения; δ – толщина пресс-формы.

Движение фронта горения описывается линейным уравнением

$$z_* = \delta + U_r t, \quad (3.124)$$

где U_r – скорость движения фронта горения; z_* – координата фронта горения.

На фронте горения выполняется условие:

$$T(r, z_*, z_* / U_c) = T_c. \quad (3.125)$$

Дифференциальные уравнения, начальные и граничные условия приводились к безразмерному виду. Поставленная задача решалась конечно-разностным методом с использованием четырехточечной разностной схемы [121].

Проверка адекватности модели проводилась на основе сопоставления экспериментальных данных и результатов расчетов по математической модели [138 – 140]. Сравнение результатов тепловой модели и экспериментальных данных проводилось по температуре в образце (состав на основе дисилицида молибдена) (рис. 3.54).

Из анализа рис. 3.54 следует, что в течение всего процесса обе кривые имеют не только одинаковый качественный вид, но и хорошо согласуются количественно. В начале процесса имеет место плавный прогрев стенки: на экспериментальной кривой этот участок продолжается до 30 с, на теоретической – до 35 с. Затем на обеих кривых в течение 35...40 с температура внешней стенки практически не изменяется. При увеличении времени выдержки далее должно следовать охлаждение корпуса пресс-формы. Рассогласование расчетных и экспериментальных данных не превышает 5%.

Далее в ходе проведения вычислительного эксперимента были получены графические зависимости, отражающие температурное состояние системы в материале и по толщине стенки с учетом реальных условий процесса и времени. На рисунке 3.55, а, б показаны температурные распределения по образцу и толщине стенки пресс-формы в момент времени сразу после прохождения волны горения по материалу

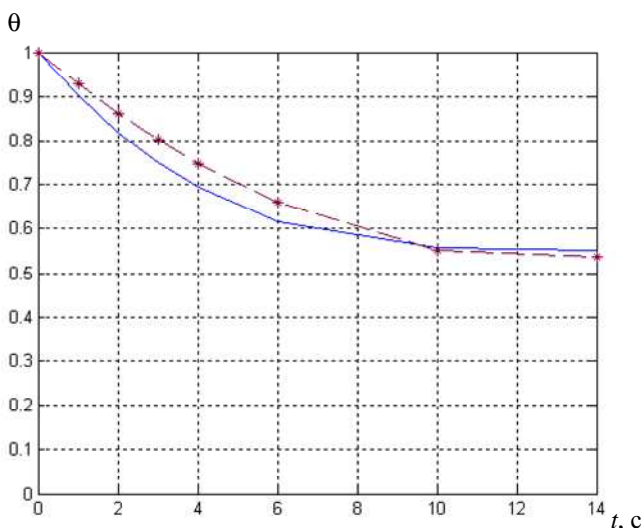


Рис. 3.54. Зависимость безразмерной температуры $\theta = T / T_r$ в образце от времени:

($D = 6,5 \cdot 10^{-2}$ м, $H_0 = 5 \cdot 10^{-2}$ м; $t_d = 2$ с; $U_r = 2 \cdot 10$ м/с), сплошная линия – расчет по математической модели, пунктирная линия – эксперимент

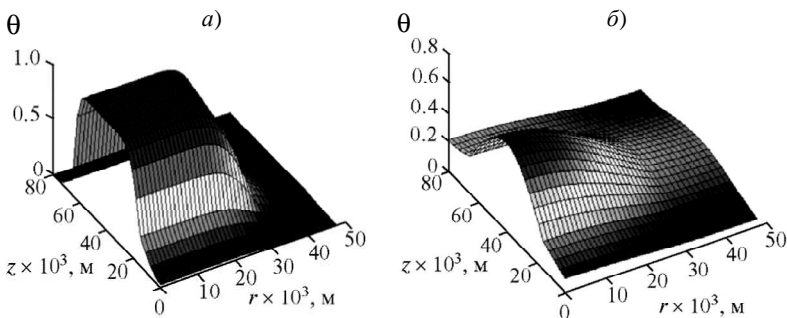


Рис. 3.55. Распределение безразмерной температуры $\theta = T/T_r$ в образце и стенке пресс-формы по высоте z и по радиусу r ($\delta = 1 \cdot 10^{-2}$ м, $T_c = 2000$ °С):
а – в конце горения ($t = 2,5$ с); *б* – в момент остывания ($t = 20$ с)

и после 20 с. Из графиков видно изменение температуры всей системы образец-пресс-форма во времени. В начальный момент времени ($t = 2,5$ с) стенка прогревается на небольшую глубину и температура с внешней стороны пресс-формы равна температуре окружающей среды. На рисунке 3.55, *б* изображено распределение температур в момент остывания системы. Видно, что максимальные температуры сосредоточены внутри образца. Наличие более пологой поверхности говорит о распределении тепла по системе и прогреве стенки пресс-формы.

На рисунке 3.56 показано распределение температуры в стенке пресс-формы по радиусу и высоте для разных скоростей горения. Очевидно, что наиболее высокие температуры развиваются на внутренней стороне стенки со стороны горячей заготовки относительно радиуса пресс-формы и в центральной части стенки по высоте. Сравнивая два разных скоростных режима горения образца ($U_r = 5 \cdot 10^{-3}$ м/с и $U_r = 5 \cdot 10^{-2}$ м/с), легко заметить, что для медленно горящих составов характерно более сильное прогревание стенки пресс-формы к концу синтеза, чем в случае быстрого горения. Наиболее холодные части пресс-формы расположены на внешней стороне со стороны окружающей среды и массивного стола.

Нестационарность процесса СВС-синтеза подтверждается зависимостями температуры от толщины стенки для различных моментов времени (рис. 3.57). При увеличении времени задержки нелинейность профиля температур уменьшается, а градиент температур в стенке падает, при этом происходит прогревание пресс-формы и отвод тепла в

окружающую среду. Отметим, что максимальный перепад температур в стенке для стадии горения материала относится только к начальному периоду времени.

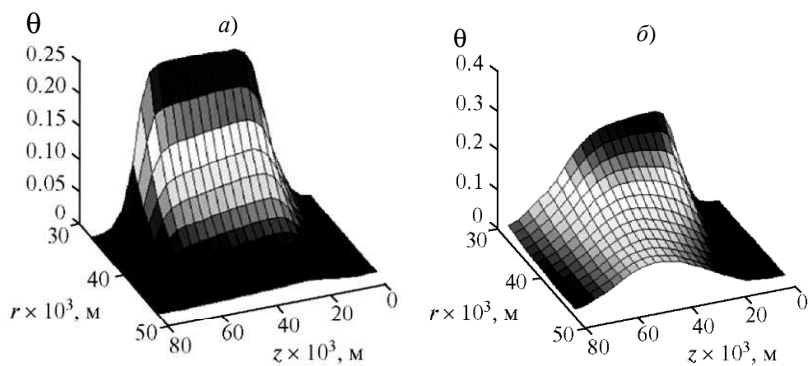


Рис. 3.56. Распределение безразмерной температуры θ в стенке пресс-формы по высоте z и по радиусу r ($\delta = 1,5 \cdot 10^{-2}$ м) в конце горения для различных скоростей горения:
a – $U_c = 5 \cdot 10^{-2}$ м/с; *б* – $U_c = 5 \cdot 10^{-3}$ м/с

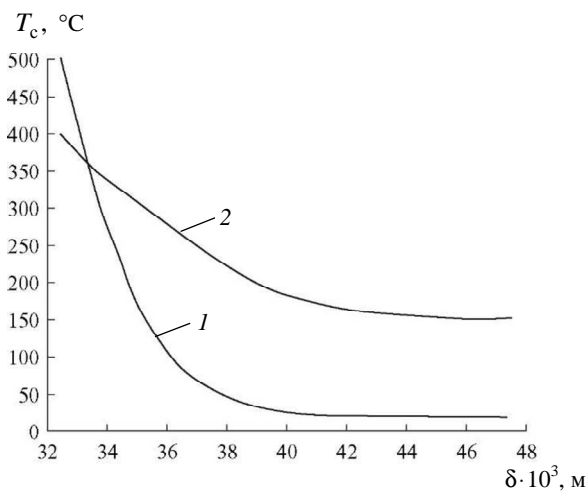


Рис. 3.57. Распределение температуры T_c в стенке пресс-формы для различных моментов времени:
1 – $t = 3$ с; *2* – $t = 10$ с

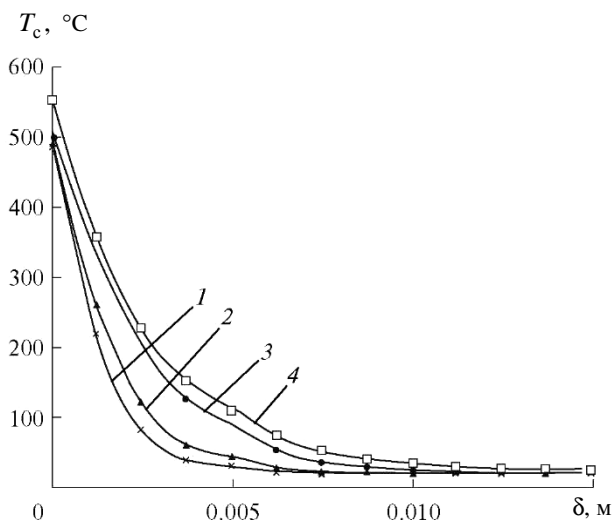


Рис. 3.58. Распределение температуры T_c по толщине стенки пресс-формы $\delta = 1,5 \cdot 10^{-2}$ м в момент приложения давления

для различных скоростей горения:

1 — $U_r = 3 \cdot 10^{-2}$ м/с; 2 — $U_r = 2 \cdot 10^{-2}$ м/с; 3 — $U_r = 1 \cdot 10^{-2}$ м/с; 4 — $U_r = 5 \cdot 10^{-3}$ м/с

Более детально оценить влияние скорости горения на распределение температур по стенке можно по оценить из анализа графиков на рис. 3.58. С увеличением скорости горения U_r основной перепад в стенке сдвигается к внутренней стороне, что связано с малым временем протекания реакции. При малых скоростях синтеза (рис. 3.58, кривые 3, 4) время сгорания образца при заданных размерах увеличивается, и движущийся фронт горения успевает сильнее прогреть стенку пресс-формы, чем при быстрой реакции (рис. 3.58, кривые 1, 2).

3.4.2. МЕТОДИКА ПРОЧНОСТНОГО РАСЧЕТА ПРИ УЧЕТЕ НЕСТАЦИОНАРНОСТИ ТЕПЛООВОГО ПОТОКА

Широкое распространение получила методика расчета пресс-оснастки в случае, когда тепловой поток через стенку принимается установившимся и температуры на стенках можно считать постоянными в ходе процесса [141] (рис. 3.59). Рассмотрим пример расчета по этой методике.

В качестве рабочего материала пресс-формы принимали сталь 40X. Расчетная температура для определения допускаемых напряжений выбирается равной максимально допустимой температуре

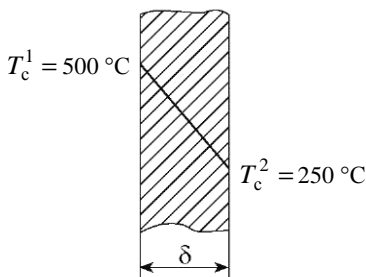


Рис. 3.59. Профиль температур по толщине стенки при установившемся тепловом потоке

температуре $T = T_d = 500 \text{ }^\circ\text{C}$. Температура на внешней стенке считается равной половине расчетной температуры $T_c^2 / 2 = 250 \text{ }^\circ\text{C}$. Перепад температур по толщине стенки: $\Delta T = T_c^1 - T_c^2 = 500 - 250 = 250 \text{ }^\circ\text{C}$.

Для указанных условий толщина стенки, полученная на основе традиционного подхода, равна $\delta = 56 \text{ мм}$.

При расчете на прочность пресс-форм, нагруженных внутренним давлением, тепловой поток через стенку принимали постоянным, а перепад температур в стенке принимается равным максимальному значению в ходе проведения процесса. Выше был произведен такой расчет. Однако для оборудования, подвергающегося краткосрочным температурным нагрузкам, нецелесообразно применять данный подход в силу нестационарности процесса, например для СВС-прессования.

В основу предлагаемой методики расчета пресс-оснастки для СВС-прессования заложены теоретические представления о тепловых режимах процесса прессования [139, 140]. Эта методика учитывает такие принципиальные моменты как нестационарность процесса и неравномерность градиента температурного профиля в стенке пресс-формы.

Весь расчет толщины стенки можно разделить на несколько этапов.

На первом этапе для характеристики тепловых условий работы пресс-формы выделяются три температурных диапазона для данного материала:

$T < T_{\text{low}}$ – низкотемпературный интервал, в котором в материале пресс-формы не происходит никаких изменений;

$T_{\text{low}} < T < T_d$ – допустимый температурный диапазон, в котором если и происходят изменения в материале пресс-формы, то они являются обратимыми и не приводят к потере механических свойств;

$T > T_d$ – высокотемпературный интервал, при работе в котором материал пресс-формы теряет заданные механические свойства.

$T_d = 500 \text{ }^\circ\text{C}$ (сталь 40X). Предел прочности и предел текучести при расчетной температуре $\sigma_B(T_p) = \sigma_B(500 \text{ }^\circ\text{C}) = 342 \text{ МПа}$, $\sigma_T(T_p) = \sigma_T(500 \text{ }^\circ\text{C}) = 284 \text{ МПа}$. Коэффициенты запаса прочности и текучести соответственно $n_B = 2,6$, $n_T = 1,5$. Коэффициент линейного расширения материала $\alpha = 14,7 \cdot 10^{-6} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$. Модуль упругости $E = 1,53 \cdot 10^{11} \text{ МПа}$. Температура на внутренней стенке принимается равной максимально допустимой (или расчетной) температуре

Для стали 40X согласно [141] имеем $T_{\text{low}} = 200 \text{ }^\circ\text{C}$, $T_{\text{д}} = 500 \text{ }^\circ\text{C}$.

На втором этапе рассчитывали зависимость максимальной температуры на внутренней стенке пресс-формы от толщины стенки (рис. 3.60). На кривой этой зависимости (для стали 40X) можно выделить критическое значение толщины стенки δ_{T} , ниже которого максимальная температура на внутренней стенке относится к высокотемпературному интервалу $T > T_{\text{д}}$ ($T_{\text{д}} = 500 \text{ }^\circ\text{C}$), а выше которого максимальная температура на внутренней стенке входит в допустимый температурный диапазон $T < T_{\text{д}}$, в котором если и происходят изменения в материале пресс-формы, то они являются обратимыми и не приводят к потере механических свойств.

Из полученного графика видно, что для стенки в 12 мм и выше температура на внутренней стороне не превышает предельного значения, т.е. допустимой температуры материала (в качестве материала выбрана сталь 40X). При толщине меньше 12 мм максимальная температура выходит за предел допустимых значений для материала. Таким образом, при выбранных параметрах процесса и размерах заготовки границей двух участков является значение $\delta_{\text{T}} = 12 \text{ мм}$.

Эту величину δ_{T} можно считать оптимальной в тепловом отношении, так как выбор стенки с большей толщиной почти не сказывается на изменении температуры в пресс-форме, выбор меньшей толщины приводит к существенному повышению температуры в ней.

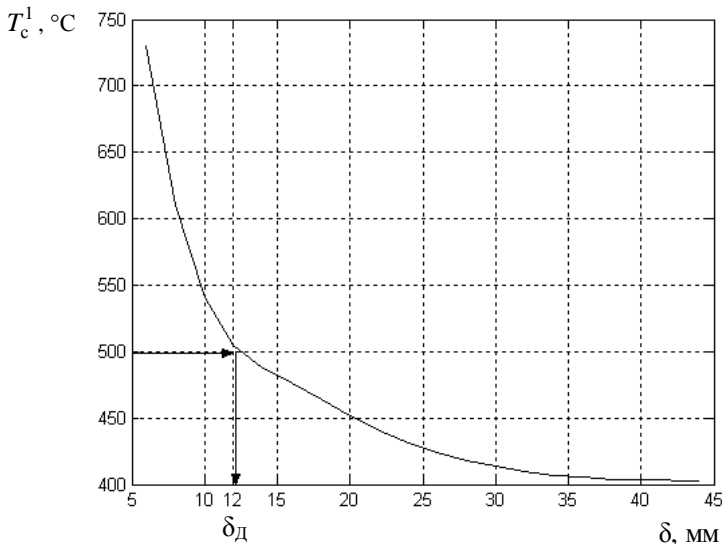


Рис. 3.60. Зависимость максимальной температуры на внутренней стенке пресс-формы от толщины различных стенок

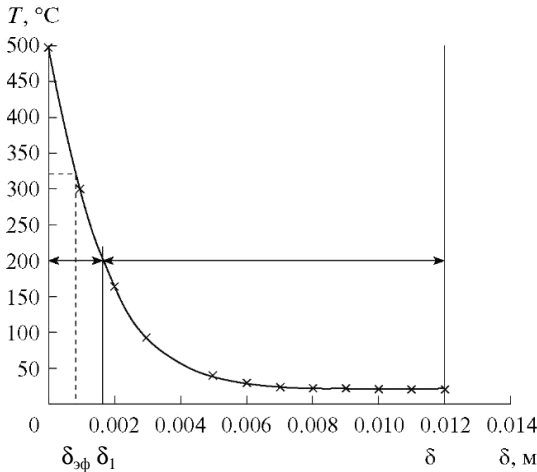


Рис. 3.61. Распределение температуры T по толщине δ стенки пресс-формы в момент времени $t = t_c$ ($\delta = \delta_d = 1,2 \cdot 10^{-2}$ м, $U_r = 2 \cdot 10^{-2}$ м/с)

На этом второй этап заканчивали, однако пресс-форма с найденной толщиной стенки δ_d в процессе работы обязана была выдерживать определенные напряжения, поэтому проводили проверочный расчет на предмет удовлетворения значения δ_d условиям прочности.

На третьем этапе для рассчитанной δ_d определяли распределение температуры внутри стенки в зависимости от радиальной координаты – толщины стенки (рис. 3.61) и выделяли указанные выше температурные интервалы. Заметим, что основное тепловое усилие сосредоточено лишь в узком пограничном слое непосредственно у внутренней стенки пресс-формы $[0, \delta_1]$. Остальная же часть стенки корпуса пресс-формы работает при довольно умеренных тепловых нагрузках $[\delta_1, \delta]$.

Для расчета температурного перепада, равномерно распределенного по толщине стенки и участвующего при определении напряжений, можно использовать традиционный подход к оценке перепада температур по толщине стенки, т.е. считать его как разность между температурами на внутренней (T_c^1) и внешней стенках (T_2^s) пресс-формы:

$$\Delta T_{\max} = T_c^1 - T_c^2. \quad (3.126)$$

Причем температура на внешней стенке T_c^2 считается равной половине расчетной температуры: $T_c^2 = \frac{T_c^1}{2}$. При этом значение ΔT_{\max}

будет означать температурный перепад не столько на всей стенке, сколько по толщине слоя, приходящегося на некоторую малую величину стенки. Такой выбор является завышенным.

Если же принять перепад, соответствующий основной малонагруженной в тепловом отношении части стенки $[\delta_1, \delta]$

$$\Delta T_{\max} = T_c^{\delta_1} - T_c^2,$$

и отнести этот температурный перепад ко всей толщине, то получим явно заниженное значение.

Поэтому для характеристики теплового нагружения всей стенки пресс-формы в выражении (3.126) вместо температуры на внутренней стенке пресс-формы будем использовать так называемую эффективную температуру $T_{\text{эф}}$:

$$T_{\text{эф}} = \frac{1}{\delta_1} \int_0^{\delta_1} T dr,$$

которая является характеристикой температурного профиля и размеров пограничного слоя, $T_c^1 < T_{\text{эф}} < T_c^1$, а перепад температур в стенке определяется согласно выражению:

$$\Delta T = T_{\text{эф}} - T_c^2.$$

Такая замена физически оправдана, поскольку максимальная градиентность температур возникает в узком пограничном слое ($\delta_{\text{эф}}$) в небольшой момент времени после прохождения фронта горения, и далее уменьшается в связи с остыванием образца. При таком подходе пренебрегают толщиной пограничного слоя, наиболее нагруженного в тепловом отношении, по сравнению с общей рассчитанной толщиной.

Таким образом, температурный перепад в данном случае не является независимым параметром задачи, а связан с толщиной стенки пресс-формы. В этом принципиальное отличие предлагаемой методики от рассмотренной выше стандартной методики.

Сама процедура прочностного расчета, который представляет собой следующий этап по расчету толщины стенки пресс-формы, формально сохраняется, однако, как видно, смысл и характер величин, заложенных в эквивалентные напряжения $\sigma_{\text{экв}}$, совсем иной. Необходимо учесть, что при выборе ряда исходных данных на основе данных тепловой модели СВС-компактирования расчетная температура для определения допустимых напряжений принимается равной эффективной температуре.

Окончательно выбирается исполнительная толщина стенки при условии, что эквивалентные напряжения не превышают допустимых значений (допускаемое напряжение также определяется для эффективной температуры $T_{эф}$).

Применим предложенный подход к расчету предельной в тепловом отношении толщины стенки $\delta_T = 12$ мм (рис. 3.60). Перепад температур в стенке определяется согласно выражению

$$\Delta T = T_{эф} - T_{low}.$$

Эффективная температура в стенке пресс-формы равна

$$T_{эф} = \frac{1}{\delta_1} \int_0^{\delta_1} T dr = 350 \text{ } ^\circ\text{C}.$$

Предел прочности и предел текучести при расчетной температуре составляет $\sigma_B(T_{эф}) = \sigma_B(350 \text{ } ^\circ\text{C}) = 750$ МПа, $\sigma_T(T_{эф}) = \sigma_T(350 \text{ } ^\circ\text{C}) = 650$ МПа,

$$\sigma_{\min} = \min \left\{ \frac{\sigma_B}{n_B} \right\} = \min \left\{ \frac{750/2,6}{650/1,5} \right\} = \min \left\{ \frac{288}{433} \right\} = 228 \text{ МПа}.$$

Таким образом, допускаемые напряжения $\sigma = 288 \cdot 0,9 = 259$ МПа.

Перепад температур по толщине стенки равен $\Delta T = 350 - 200 = 150 \text{ } ^\circ\text{C}$.

Коэффициент толстостенности $\beta = 1,37$. Эквивалентные напряжения по четвертой теории прочности равны

$$\sigma_{э\text{кв}} = \frac{1}{\beta^3 - 1} \sqrt{3P^2 + 3Pk\Delta T + k^2\Delta T^2},$$

где $k = \frac{\alpha E}{1 - \mu} \left(\frac{\beta^2}{2 \ln \beta} - 1 \right)$.

Подставив значения заданных величин, получим $\sigma_{э\text{кв}} = 619$ МПа.

Условие прочности $\sigma_{э\text{кв}} \leq \sigma$ ($619 \leq 259$) не выполняется, поэтому увеличиваем толщину стенки. Рассмотрим профиль температур для стенки $\delta = 15$ мм (рис. 3.62).

Эффективная температура $T_{эф} = 327 \text{ } ^\circ\text{C}$. Предел прочности и предел текучести при расчетной температуре $\sigma_B(T_{эф}) = \sigma_B(327 \text{ } ^\circ\text{C}) = 800$ МПа, $\sigma_T(T_{эф}) = \sigma_T(350 \text{ } ^\circ\text{C}) = 660$ МПа,

$$\sigma_{\min} = \min \left\{ \frac{\sigma_B}{n_B} \right\} = \min \left\{ \frac{800/2,6}{660/1,5} \right\} = \min \left\{ \frac{307}{440} \right\} = 228 \text{ МПа}.$$

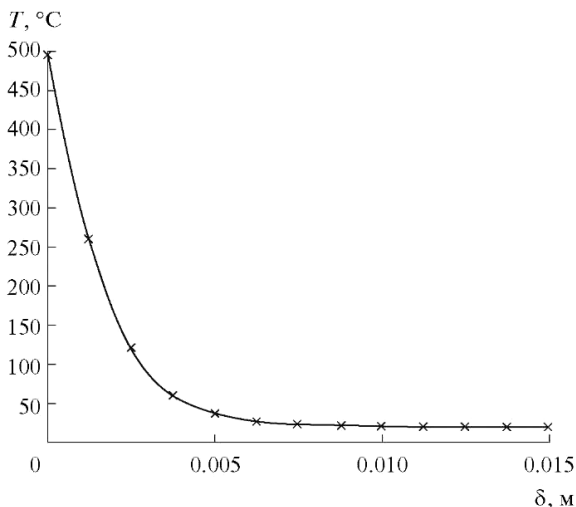


Рис. 3.62. Распределение температуры T по толщине δ стенки пресс-формы в момент времени $t = t_c$ ($\delta = \delta_d = 1,5 \cdot 10^{-2}$ м, $U_r = 2 \cdot 10^{-2}$ м/с)

Допускаемые напряжения $\sigma = 307 \cdot 0,9 = 276$ МПа. Перепад температур по толщине стенки $\Delta T = 327 - 200 = 127$ °С. С учетом вышеизложенного определяем параметры пресс-формы: $\beta = 1,46$; $k = 7,54$, эквивалентные напряжения $\sigma_{\text{эКВ}} = 252$ МПа.

Условие прочности $\sigma_{\text{эКВ}} \leq \sigma$ ($252 \leq 276$) выполняется, поэтому окончательно принимаем толщину стенки, равную 15 мм (табл. 3.22).

3.22. Результаты расчета пресс-формы по неизотермической методике

Величина	I итерация: $\delta = 12$ мм	II итерация: $\delta = 15$ мм
$T_{\text{эф}}$, °С	350	327
T_2 , °С	200	200
$\Delta T = T_{\text{эф}} - T_2$	150	127
$\sigma_T (T_{\text{эф}})$, МПа	650	660
$\sigma_B (T_{\text{эф}})$, МПа	750	800
σ , МПа	259	276
$\sigma_{\text{эКВ}}$, МПа	619	252
$\sigma_{\text{эКВ}} \leq \sigma$	Не выполняется	Выполняется
M , кг	–	11

3.4.3. ОПТИМИЗАЦИЯ КОНСТРУКТИВНЫХ РАЗМЕРОВ ПРЕСС-ФОРМЫ ДЛЯ СВС-КОМПАКТИРОВАНИЯ

В рассмотренном выше подходе к расчету толщины стенки пресс-формы работоспособность пресс-формы оценивалась по величине эквивалентных напряжений, зависящих от температурного перепада ΔT , давления P и коэффициента толстостенности β . К недостаткам данной методики можно отнести следующее:

- 1) эквивалентные напряжения рассчитаны для постоянного градиента температур по высоте и стенке пресс-формы, тогда как $\partial T/\partial z \neq \text{const}$ и $\partial T/\partial r \neq \text{const}$;
- 2) нет возможности установить участки растяжения и участки сжатия по сечению пресс-формы;
- 3) не учитывается влияние касательных напряжений и не оценивается прочность конструкции на сдвиг.

Поэтому для всестороннего анализа прочности, рассчитанной по предложенной методике пресс-формы, был проведен анализ напряженно-деформированного состояния, заключающийся в определении величины и характера действия (растяжение–сжатие) термоупругих напряжений в стенке пресс-формы.

Рассматривая динамику процесса СВС-компактирования, наиболее опасным моментом времени можно считать $t = t_3$, когда начинается прессование горячих продуктов синтеза. Для данного момента характерны наибольший перепад ΔT и градиент температуры $\partial T/\partial r$ в стенке в ходе процесса прессования. Термоупругие напряжения, величина которых прямо пропорциональна ΔT и $\partial T/\partial r$, достигают наибольших значений в момент времени $t = t_3$. Для данного момента времени необходимо проводить расчет напряженно-деформированного состояния пресс-формы, осуществлять проверку выполнения условий прочности по максимальным нормальным напряжениям и с учетом выполнения этих условий подбирать толщину стенки пресс-формы.

В работе [142] получено решение уравнений модели напряженно-деформированного состояния цилиндрического упругого тела в условиях двумерного поля температур $T = T(r, z)$.

С использованием полученного решения были определены компоненты нормальных ($\sigma_r, \sigma_\theta, \sigma_z$) и касательных τ_{rz} напряжений (рис. 3.63) при граничных условиях (боковые поверхности пресс-формы свободны от нагрузок и не закреплены): $\sigma_r(r = a) = Pk$, $\sigma_r(r = b) = 0$, $w(z = 0) = 0$, $\tau_{rz}(r = b) = 0$.

$$\begin{aligned} \sigma_r = & k_1 \left[-1/r^2 f_1(r) + (r^2 - a^2) / ((b^2 - a^2)r^2) f_2(r) \right] + \\ & + k_2 \left[-f_3(r) + (r^2 - a^2)b^2 / ((b^2 - a^2)r^2) f_4(r) \right] + \\ & + k_3 \left[-1/r^2 f_5(r) + (r^2 - a^2) / ((b^2 - a^2)r^2) f_6(r) \right] + P^*; \end{aligned}$$

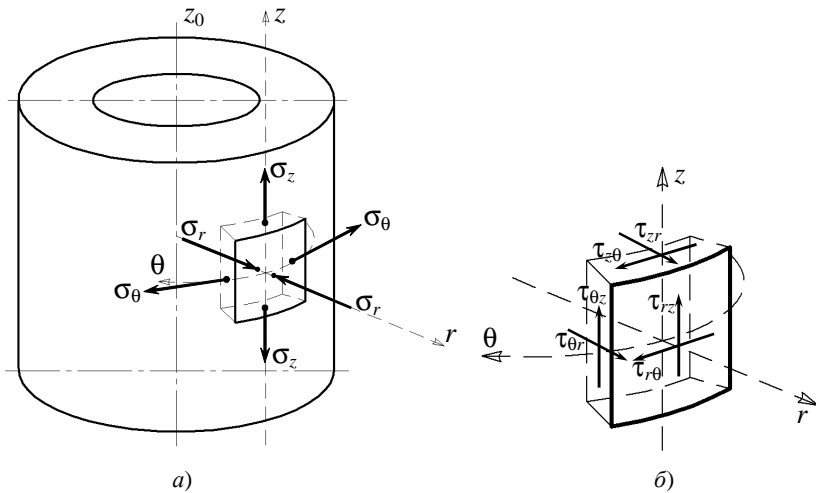


Рис. 3.63. Напряженное состояние элемента цилиндрической стенки пресс-формы:

- a* – компоненты нормальных напряжений σ ;
 σ_r – радиальная; σ_θ – тангенциальная; σ_z – осевая;
б – компоненты касательных напряжений τ

$$\begin{aligned} \sigma_\theta = & k_1 \left[-1/r^2 f_1(r) + (r^2 + a^2) / ((b^2 - a^2)r^2) f_2(r) - T \right] + \\ & + k_2 \left[-f_3(r) + (r^2 + a^2)b^2 / ((b^2 - a^2)r^2) f_4(r) \right] + \\ & + k_3 \left[1/r^2 f_5(r) + (r^2 - a^2) / ((b^2 - a^2)r^2) f_6(r) \right] + P^*; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_z = & k_1 \left[2\nu / (b^2 - a^2) f_2(r) - T \right] + k_2 2\nu b^2 / (b^2 - a^2) f_4(r) + \\ & + k_3 2\nu / (b^2 - a^2) f_6(r) + k_4 f_3(r) + 2\nu a^2 / (b^2 - a^2) Pk; \end{aligned}$$

$$\tau_{rz} = -\alpha E / (1 - 2\nu) \frac{1}{r} \int_r^b \frac{\partial T}{\partial z} r dr,$$

где r, z – радиальная и вертикальная координаты; a, b – внутренний и внешний радиусы пресс-формы; $0,5 \leq k \leq 1$ – коэффициент передачи давления на стенку пресс-формы; w – перемещение в вертикальном направлении; α – коэффициент линейного теплового расширения; E – модуль Юнга; ν – коэффициент Пуассона,

$$k_1 = \alpha E / (1 - \nu), \quad k_2 = \alpha E / (2(1 - \nu)),$$

$$k_3 = \alpha E / (2(1-\nu)(1-2\nu)), \quad k_4 = \alpha E (2-\nu) / ((1-\nu)(1-2\nu));$$

$$P^* = (r^2 - b^2) a^2 / ((b^2 - a^2) r^2) P k;$$

$$f_1(r) = \int_a^r T r \, dr, \quad f_2(r) = \int_a^b T r \, dr, \quad f_3(r) = \int_a^r 1/r f^*(r) \, dr,$$

$$f_4(r) = \int_a^b 1/r f^*(r) \, dr, \quad f_5(r) = \int_a^r r f^*(r) \, dr,$$

$$f_6(r) = \int_a^b r f^*(r) \, dr, \quad f^*(r) = \int_a^r \partial^2 T / \partial z^2 \, r \, dr.$$

Расчет напряжений осуществлялся для момента времени $t = t_3$. Как видно из рис. 3.64, наибольшие значения нормальных напряжений σ сосредоточены в средней части пресс-формы по высоте и внутренней поверхности по радиусу, т.е. в зонах наибольших значений перепада и, соответственно, градиента температуры. Наибольшие значения касательных напряжений (рис. 3.65) возникают в торцах цилиндрической пресс-формы, тогда как в средней части $\tau_{rz} = 0$.

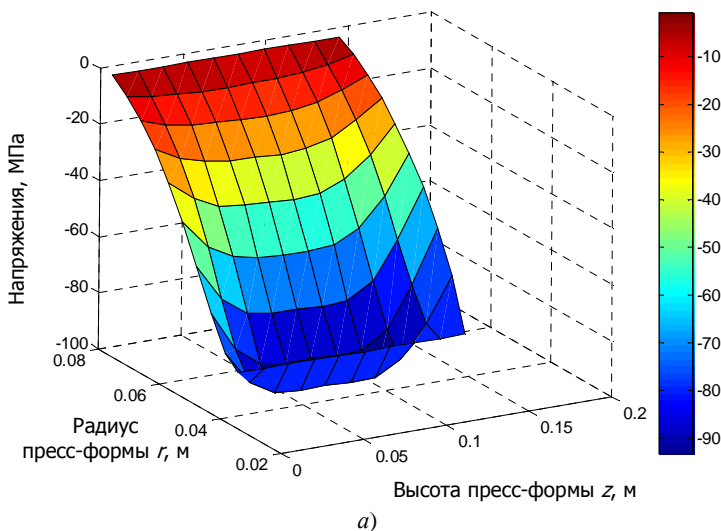
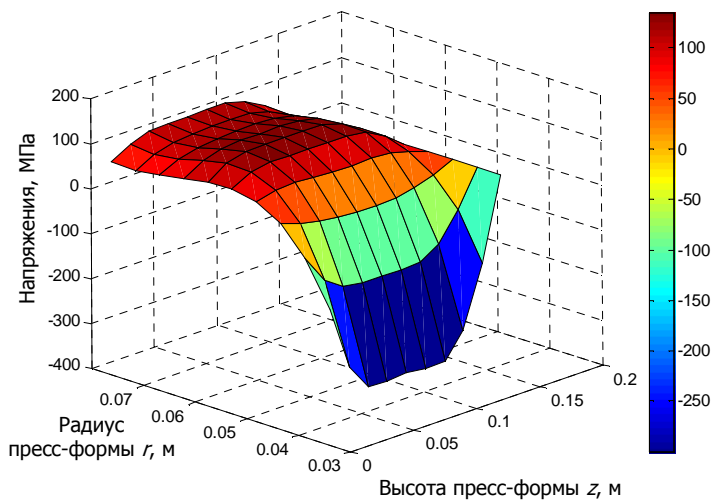


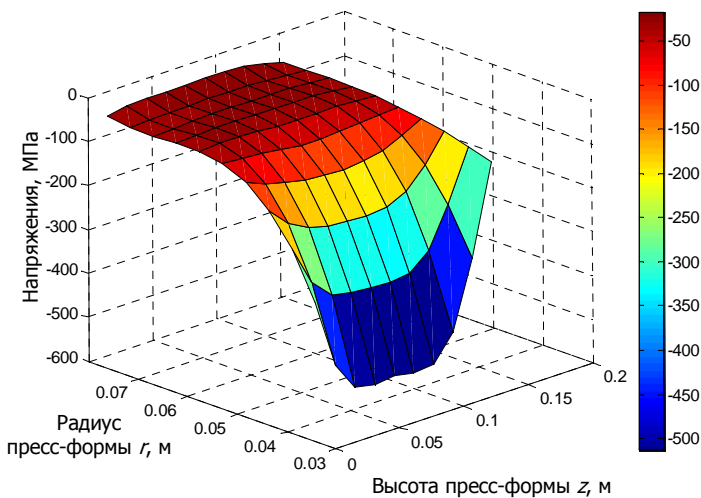
Рис. 3.64. Распределение нормальных напряжений по высоте z и радиусу r пресс-формы:

a – радиальная компонента σ_r ;

\bar{b} – тангенциальная компонента σ_θ ; \bar{v} – осевая компонента σ_z



б)



в)

Рис. 3.64. Продолжение

В ходе анализа напряженно-деформированного состояния стенки пресс-формы толщиной $\delta = 42$ мм было установлено [136], что возникающие нормальные и касательные напряжения превышают допустимые значения для выбранного конструкционного материала (сталь 40Х) в 2 – 4 раза (табл. 3.23).

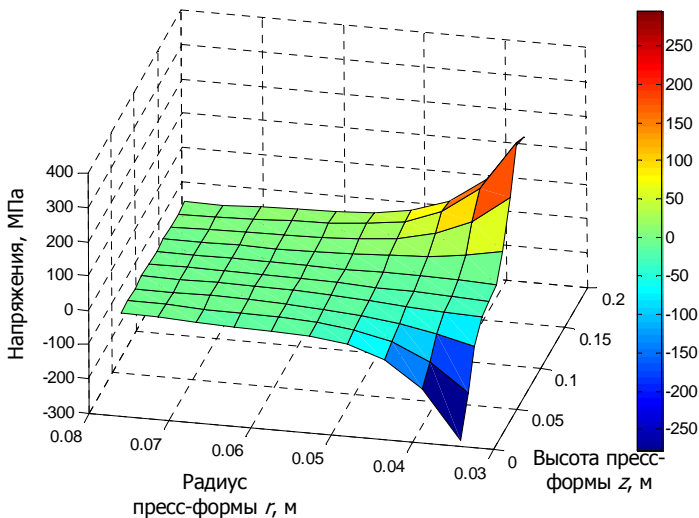


Рис. 3.65. Распределение касательных напряжений τ_{rz} по высоте z и радиусу r пресс-формы

3.23. Напряжения в стенке пресс-формы толщиной $\delta = 42$ мм и допустимые значения

Напряжения в стенке	Наибольшие значения напряжений, МПа		Допустимые значения напряжений, МПа	
	Растяжение	Сжатие	Растяжение	Сжатие
σ_r	0	295	490	490
σ_θ	82	1904		
σ_z	0	1980		
τ_{rz}	1361		240	

Для обеспечения выполнения условий прочности по нормальным и касательным напряжениям в стенке пресс-формы $\delta = 42$ мм, целесообразно проводить процесс СВС-прессования с применением теплоизолирующего материала. Таким материалом может служить оболочка из асбестовой ткани толщиной 1,5 мм, в которую помещают исходный шихтовый брикет. Благодаря устранению непосредственного контакта между стенкой пресс-формы и горячим продуктом СВС-прессования значение перепада температур по стенке ΔT снижается в 4–5 раз, вследствие чего существенно снижаются значения термоупругих напряжений в стенке (рис. 3.66, 3.67).

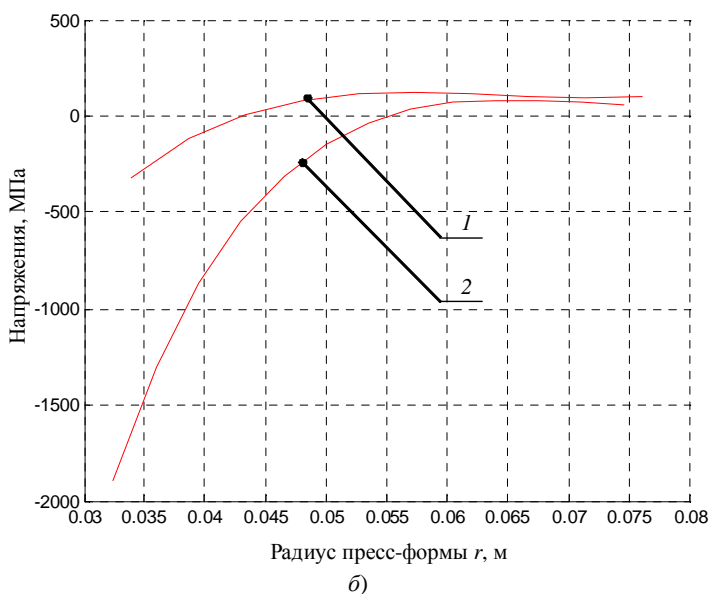
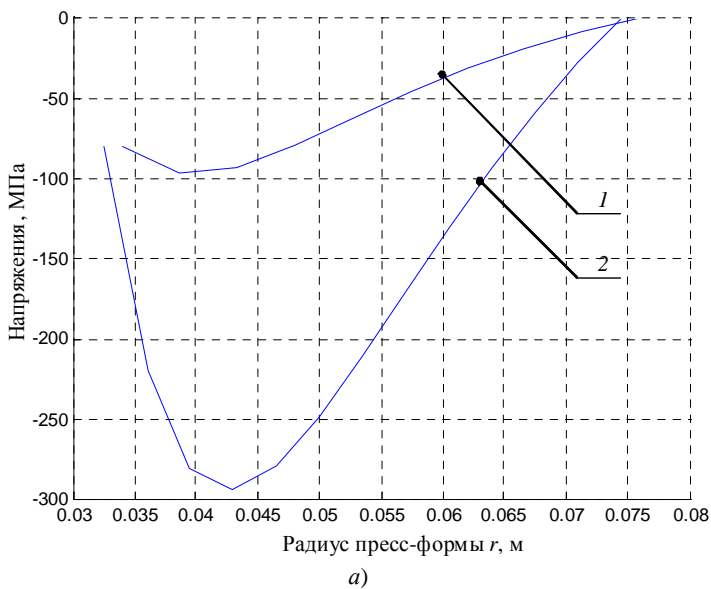
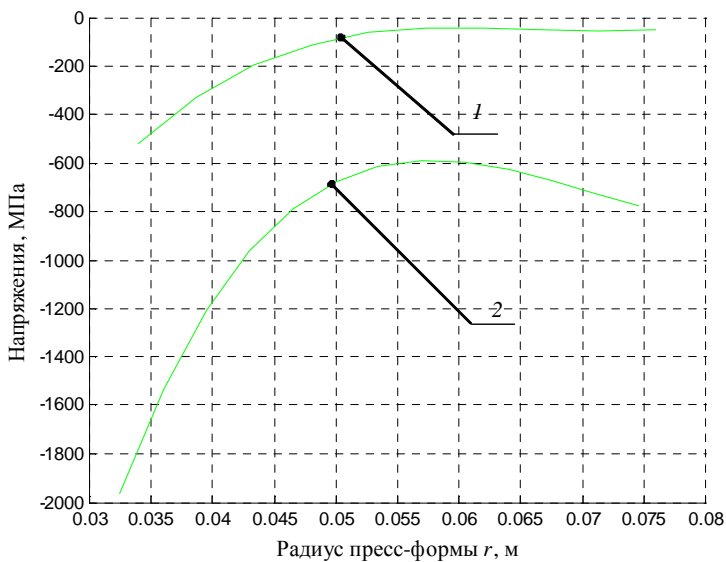


Рис. 3.66. Максимальные значения нормальных напряжений при наличии (кривая 1) и отсутствии (кривая 2) теплоизолирующей оболочки:
a – радиальная компонента σ_r ; *б* – тангенциальная компонента σ_θ ;
в – осевая компонента σ_z



в)

Рис. 3.66. Продолжение

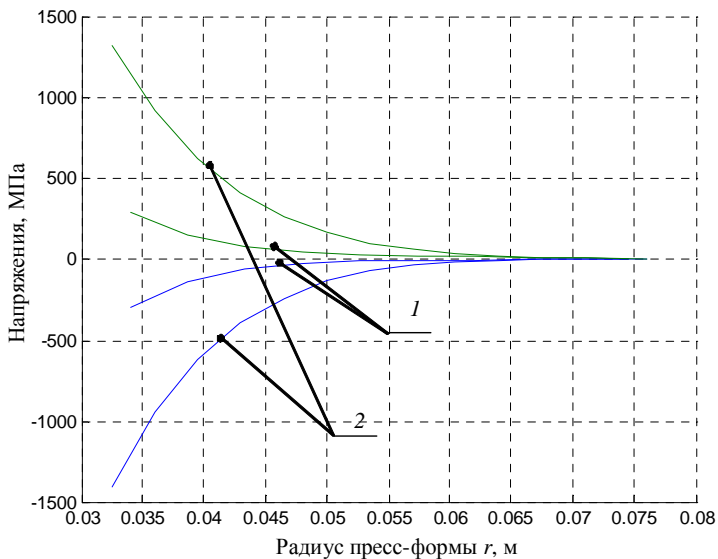


Рис. 3.67. Максимальные значения касательных напряжений τ_{rz} при наличии (кривая 1) и отсутствии (кривая 2) теплоизолирующей оболочки

3.24. Напряжения в стенке пресс-формы $\delta = 42$ мм при использовании теплоизолирующей оболочки

Напряжения в стенке	Наибольшие значения напряжений, МПа		Допускаемые значения напряжений, МПа	
	Растяжение	Сжатие	Растяжение	Сжатие
σ_r	0	95	490	490
σ_θ	105	350		
σ_z	0	483		
τ_{rz}	238		240	

В таблице 3.24 приведены результаты расчета напряжений при использовании теплоизолирующей оболочки. Таким образом, благодаря использованию теплоизолирующей оболочки обеспечено выполнение условий прочности по нормальным напряжениям и на сдвиг.

При расчете пресс-формы для СВС-компактирования твердых сплавов СТИМ различных марок существует неопределенность информации относительно U_r и T_r (табл. 3.21). Это объясняется различными факторами, зависящими от свойств подготовленной исходной шихты (насыпная плотность, влагосодержание и т.п.). Поэтому для решения задачи прочностного расчета пресс-формы была использована постановка задачи оптимизации в условиях неопределенности, где в качестве неопределенных параметров ξ выступают U_r и T_r , т.е. $\xi = \{U_r, T_r\}$.

Сформулируем ОЗИП1 пресс-формы для СВС-компактирования в форме (2.50) – (2.52): требуется определить минимальную толщину δ^* стенки пресс-формы, время задержки t_3^* и давление P^* на плунжере пресса, т.е.

$$\min_{\delta, t_3, P} M_\xi \{ \delta(t_3, P, \xi) \approx \sum_{i \in I_1} \gamma_i \delta(t_3, P, \xi^i) \},$$

где γ_i – весовые коэффициенты, $\sum_{i \in I_1} \gamma_i = 1$; I_1 – множество индексов аппроксимационных точек в области Ξ .

При связях в форме уравнений математической модели теплопроводности [129], уравнениях модели напряженно-деформированного состояния [142] и ограничениях:

- по температуре на внутренней стенке пресс-формы

$$\max_{\xi \in \Xi} \min_{t_3} T_1^c(\delta, t_3, P, \xi) - [T_1^c]_{\text{доп}} \leq 0; \quad (3.127)$$

- по толщине пограничного слоя стенки пресс-формы

$$g_2(\delta, t_3, P, \xi) = \max_{\xi \in \Xi} \min_{t_3, P} \delta_1(\delta, t_3, P, \xi) - [\delta_1]_{\text{зад}} \leq 0; \quad (3.128)$$

- по эквивалентному напряжению в стенке

$$g_3(\delta, t_3, P, \xi) = \max_{\xi \in \Xi} \min_{t_3, P} \sigma_{\text{экр}}(\delta, t_3, P, \xi) - [\sigma]_{\text{доп}} \leq 0; \quad (3.129)$$

- по нормальным напряжениям в стенке

$$g_4(\delta, t_3, P, \xi) = \max_{\xi \in \Xi} \min_{t_3, P} \sigma_{r, \theta, z}(\delta, t_3, P, \xi) - [\sigma_{r, \theta, z}]_{\text{доп}} \leq 0; \quad (3.130)$$

- по касательным напряжениям в стенке

$$g_5(\delta, t_3, P, \xi) = \max_{\xi \in \Xi} \min_{t_3, P} \tau_{r, z}(\delta, t_3, P, \xi) - [\tau_{r, z}]_{\text{доп}} \leq 0. \quad (3.131)$$

Обозначим совокупность аппроксимационных точек $\xi^i, i \in I_1$ через S_1 , а множество критических точек на ν -м шаге – через $S_2^{(\nu)} = \{\xi^j : j \in I_2^{(l)}\}$. Тогда алгоритм 2.1 (см. п. 2.3) решения задачи (3.127) – (3.131) можно записать в следующем виде.

Алгоритм

Шаг 1. Полагаем число итераций $\nu = 1$ и выбираем совокупность аппроксимационных точек S_1 , начальную совокупность критических точек $S_2^{(0)}$ и начальные приближения $a^{(0)}, d^{(0)}, z^{(0)}$.

Шаг 2. Решаем вспомогательную задачу

$$\min_{\delta, t_3, P} M_{\xi} \{ \delta(t_3, P, \xi) \approx \sum_{i \in I_1} \gamma_i \delta(t_3, P, \xi^i) \},$$

$$\max_{\xi \in \Xi} \min_{t_3} T_1^c(\delta, t_3, P, \xi^l) - [T_1^c]_{\text{доп}} \leq 0,$$

$$g_2(\delta, t_3, P, \xi) = \max_{\xi \in \Xi} \min_{t_3, P} \delta_1(\delta, t_3, P, \xi^l) - [\delta_1]_{\text{зад}} \leq 0,$$

$$g_3(\delta, t_3, P, \xi) = \max_{\xi \in \Xi} \min_{t_3, P} \sigma_{\text{экр}}(\delta, t_3, P, \xi^l) - [\sigma]_{\text{доп}} \leq 0,$$

$$g_4(\delta, t_3, P, \xi) = \max_{\xi \in \Xi} \min_{t_3, P} \sigma_{r, \theta, z}(\delta, t_3, P, \xi^l) - [\sigma_{r, \theta, z}]_{\text{доп}} \leq 0,$$

$$g_5(\delta, t_3, P, \xi) = \max_{\xi \in \Xi} \min_{t_3, P} \tau_{r, z}(\delta, t_3, P, \xi^l) - [\tau_{r, z}]_{\text{доп}} \leq 0, \quad \xi^l \in S_2^{(v)}; \quad l \in I_2^{(v)},$$

и определяем $\delta^{(v)}, t_3^{(v)}, P^{(v)}$.

Шаг 3. Решаем m -задач

$$\max_{\xi \in \Xi} g_j(\delta, t_3, P, \xi), \quad j = \overline{1, 5},$$

и определяем 5 точек $\xi^{l*}, l = \overline{1, 5}$. Предполагаем на первом этапе, что функции g_j выпуклы. В этом случае решение задачи находится в одной из вершин параллелепипеда Ξ . В начальное множество критических точек $S_2^{(0)}$ включается некоторое количество угловых точек куба Ξ , а на шаге 3 рассчитываются значения функций $g_j(\delta, t_3, P, \xi), j = \overline{1, 5}$ во всех угловых точках куба Ξ , не принадлежащих множествам $S_2^{(v)}$ и S_1 . Среди этих точек выбираются 5 точек, в которых функции $g_j(\delta, t_3, P, \xi), j = \overline{1, 5}$ принимают наибольшие значения.

Шаг 4. Образуем множество новых критических точек на v -й итерации

$$R^{(v)} = \left\{ \xi^{l*} : g_j(\delta, t_3, P, \xi^{l*}) > 0 \right\}.$$

Если это множество пустое, то решение задачи получено. В противном случае перейдем к шагу 5.

Шаг 5. Формируем новое множество критических точек $S_2^{(v+1)} = S_2^{(v)} \cup R^{(v)}$ и, полагая $v := v+1$, переходим к шагу 2.

В результате решения задачи оптимизации на примере получения твердого сплава на основе MoSi_2 определены оптимальные значения толщины стенки пресс-формы – $\delta^* = 45$ мм, времени задержки $t_3^* = 6,5$ с, давления прессования $P^* = 90$ МПа. Сравнительный анализ показывает, что для обеспечения прочности конструкции толщина стенки пресс-формы должна быть увеличена на 3 мм, время задержки должно быть увеличено на 2 с, давление прессования снижено на 10 МПа по сравнению с результатами расчета пресс-формы без учета влияния термоупругих напряжений.

3.5. РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИЙ ПЕРИОДИЧЕСКИЙ ПРОЦЕСС СИНТЕЗА СУЛЬФЕНАМИДА М

Стадии синтеза химикатов-добавок для полимерных материалов являются наиболее ответственными процессами, во многом определяющими качество получаемой продукции. В настоящее время процессы синтеза химикатов осуществляются неоптимальным образом, в результате чего количество получаемых продуктов колеблется в широких пределах, допускается перерасход энергетических и сырьевых ресурсов, низка производительность установок.

Для повышения эффективности производства химикатов-добавок необходимо решение следующих задач:

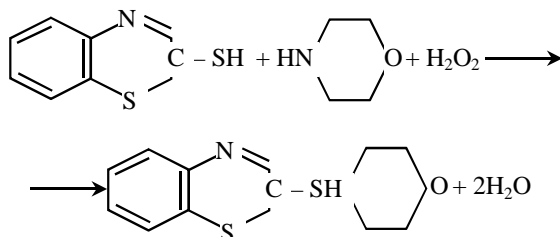
- исследование механизма и кинетики синтеза химикатов-добавок для полимерных материалов;
- построение математической модели динамики процесса синтеза в реакторе периодического действия;
- оптимизация процесса синтеза и разработка гибкого автоматизированного реакторного узла (периодического действия) синтеза химикатов-добавок для полимерных материалов.

Рассмотрим решение перечисленных выше задач применительно к созданию гибкого автоматизированного узла синтеза одного из наиболее эффективных и часто применяемых ускорителей вулканизации натурального и синтетического каучука – сульфенамида М.

3.5.1. ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА СИНТЕЗА И ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ СУЛЬФЕНАМИДА М

Существующее производство сульфенамида М, основанное на гипохлоритном способе окисления, дает много солевых отходов, надежные способы утилизации которых отсутствуют. В настоящее время разрабатывается технология, использующая в качестве окислителя пероксид водорода. Данная технология лишена указанных недостатков.

Сульфенамид М получается в результате реакции окислительной конденсации 2-меркаптобензтиазолила (2-МБТ) и морфолина пероксидом водорода



Изучение кинетики проводили в термостатированном стеклянном реакторе. Исходный 2-МБТ с температурой плавления 180° получали многократной кристаллизацией из бензола. Морфолин и пероксид водорода использовали марки х.ч. с содержанием основного вещества 99,5 и 30...35%, соответственно. Реакцию окислительной конденсации проводили при эквимольном соотношении 2-МБТ и пероксида водорода в избытке морфолина при температурах: $T_1 = 21^\circ$, $T_2 = 37^\circ$, $T_3 = 30^\circ$. Начальные концентрации 2-МБТ и пероксида водорода были равны 0,05 моль/л.

Текущие концентрации 2-МБТ и сульфенамида М определяли следующим образом. Через определенные промежутки времени отбирали точный объем (25 мл) реакционной массы, которую приливали к 150 мл дистиллированной воды для выделения образовавшегося сульфенамида М из морфолина. Выделившийся сульфенамид М отфильтровывали (при этом 2-МБТ полностью переходил в фильтрат), промывали дистиллированной водой до $\text{pH} = 7$, сушили до постоянной массы и анализировали на содержание основного вещества. Содержание основного вещества в сульфенамиде М определяли методом титрования морфолина, выделяющегося при реакции сульфенамида М с 2-МБТ в кислой среде. Концентрацию 2-МБТ в фильтрате определяли титрованием ртути нитратом в присутствии дифенилкарбазона. Среднеквадратичная ошибка при определении концентрации составляла 3,5...5%.

На рисунке 3.68 приведены экспериментальные кинетические кривые для 2-МБТ и сульфенамида М, полученные при T_1 , T_2 , T_3 соответственно.

Поиск кинетического уравнения (и схемы процесса) проводили по соответствию экспериментальным данным наиболее вероятных химических реакций. Нами составлены не все возможные схемы процесса; кроме того, до настоящего времени не разработаны надежные методики определения текущих концентраций большинства промежуточных и побочных продуктов реакции окислительной конденсации 2-МБТ с морфолином, что не позволяет установить точный механизм и найти универсальное уравнение скорости для описания кинетики изучаемой сложной реакции для широкого интервала изменения соотношений реагентов. Однако такой подход позволяет выявить наиболее вероятную схему процесса и кинетические уравнения, отражающие основные маршруты сложной реакции, которые вполне можно использовать для определения оптимальных условий ее проведения.

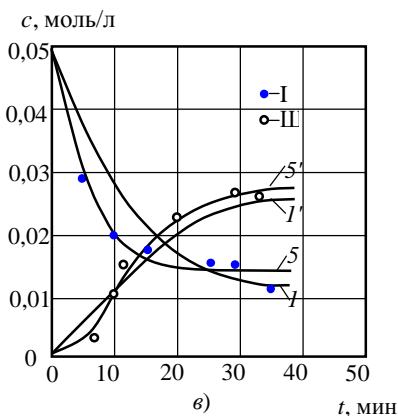
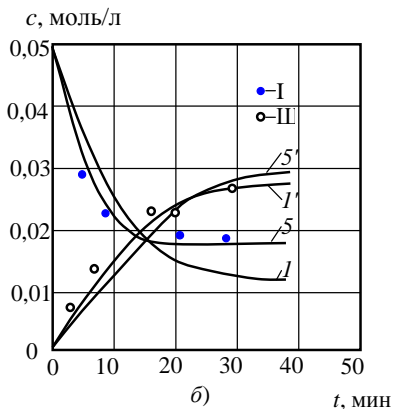
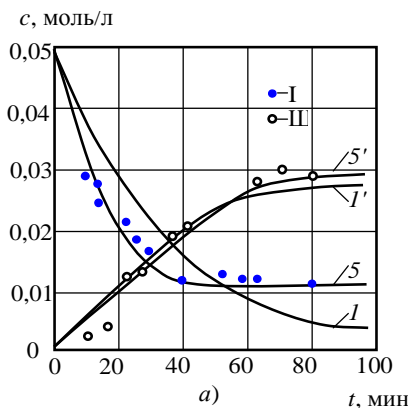
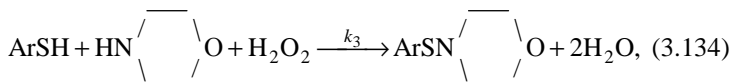
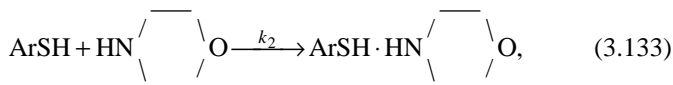
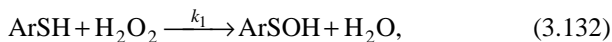
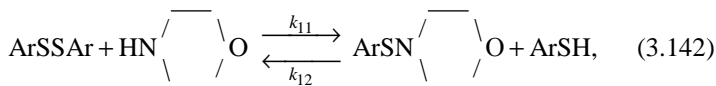
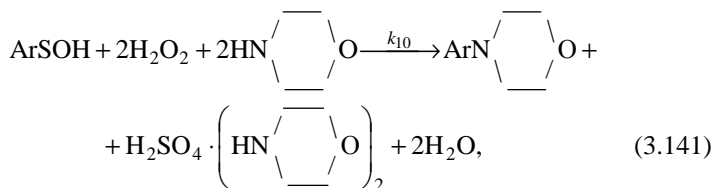
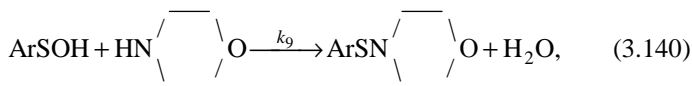
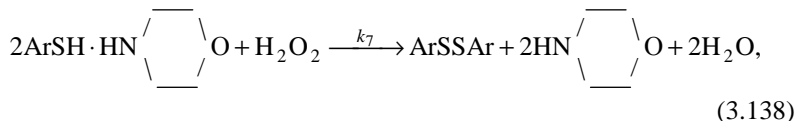
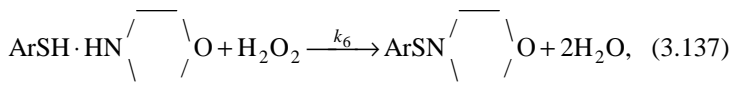
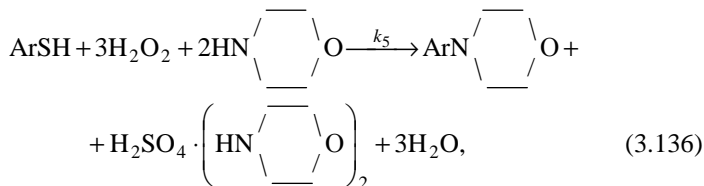
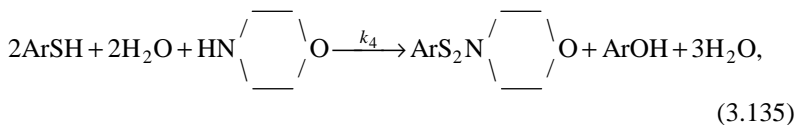


Рис. 3.68. Зависимость концентрации 2-МБГ (кривые *I, 5*) и сульфенамида М (кривые *I', 5'*) при температуре 21 °С (*a*), 37 °С (*б*) и 30 °С (*в*): значения: I, II – экспериментальные; *I, I', 5, 5'* – расчетные по механизмам *I* и *5* соответственно

Обзор литературных данных [143 – 145] и дополнительные экспериментальные исследования состава реакционных масс позволили установить перечень наиболее вероятных химических реакций, протекающих при синтезе сульфенамида М:





где (3.132) – (3.143) последовательно-параллельные реакции, отражающие возможные пути образования сульфенамида М и побочных

продуктов, изображаются графом (рис. 3.69); К – 2-МБТ (2-мерапто-бензтиазол, ArSH); P – пероксид водорода (H_2O_2); SK – сульфеновая кислота (ArSOH); В – вода (H_2O); М – морфолин ($\text{HN} \begin{array}{c} \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \quad \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{O} \end{array}$); KC – морфолиновая соль 2-МБТ ($\text{ArSH} \cdot \text{HN} \begin{array}{c} \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \quad \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{O} \end{array}$); SM – сульфенамид М ($\text{ArSN} \begin{array}{c} \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \quad \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{O} \end{array}$); TS – оксадиэтиленбензтиазолил-2 тиосульфенамид ($\text{ArS}_2\text{N} \begin{array}{c} \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \quad \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{O} \end{array}$); OB – оксибензтиазол (ArOH); MO – морфолидобензтиазол ($\text{ArN} \begin{array}{c} \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \quad \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{O} \end{array}$); SR – сернокислый морфолин ($\text{H}_2\text{SO}_4 \cdot \left(\text{HN} \begin{array}{c} \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \quad \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{O} \end{array} \right)_2$); A – ди-(2-бензтиазолил) (ArSSA).

Было предложено несколько альтернативных механизмов протекания реакций окислительной конденсации, которые могли бы в какой то мере соответствовать истинному механизму [146]. Соответствующие им кинетические уравнения в дифференциальной форме представлены в табл. 3.25.

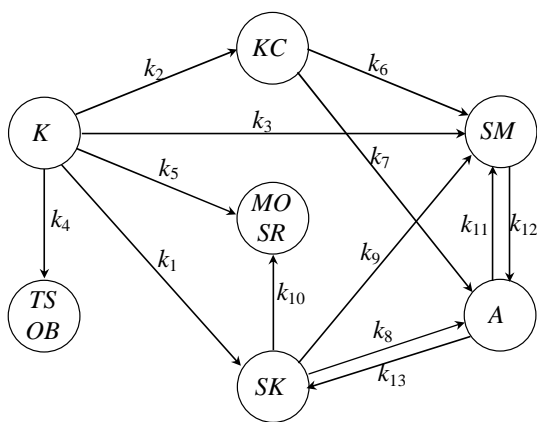


Рис. 3.69. Схема синтеза сульфенамида М

3.25. Математические модели альтернативных механизмов окисления 2-МБТ и морфолина пероксидом водорода

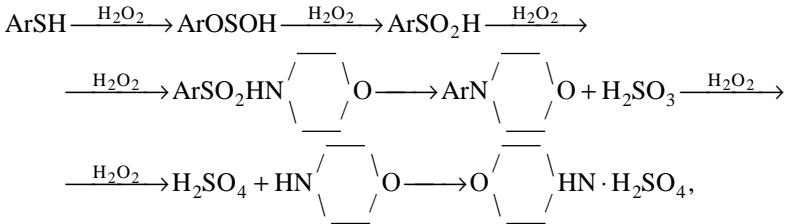
Скорость химических реакций	Механизм							
	1	2	3	4	5	6	7	8
$\frac{dc_K}{dt} = -k_1c_Kc_P$	-	-	+	+	+	-	-	-
$-k_2c_Kc_M$	+	+	-	-	+	-	+	+
$-k_3c_Kc_Mc_P$	-	-	-	-	-	+	-	-
$-2k_4c_K^2c_P^2c_M$	+	+	+	+	+		+	+
$-k_5c_Kc_P^3c_M^2$	+	+	-	-	-	+	-	+
$-k_8c_Kc_{SK}$	-	-	-	+	-	-	-	-
$+k_{11}c_{ACM}$	+	+	+	+	+	+	+	+
$-k_{12}c_Kc_{SM}$	+	+	+	+	+	+	+	+
$+k_{13}c_{ACP}$	-	-	-	-	-	-	+	-
$\frac{dc_M}{dt} = -k_2c_Kc_M$	+	+	-	-	+	-	+	+
$-k_3c_Kc_Mc_P$	-	-	-	-	-	+	-	-
$-k_4c_K^2c_Mc_P^2$	+	+	+	+	+	+	+	+
$-2k_5c_Kc_M^2c_P^3$	+	+	-	-	+	+	-	+
$-2k_7c_K^2c_Pc_M$	-	-	-	-	+	-	+	+
$-k_9c_{SK}c_M$	-	-	+	-	+	-	-	-
$-2k_{10}c_{SK}c_M^2c_P^2$	-	-	+	+	+	-	+	-
$-k_{11}c_{ACM}$	+	+	+	+	+	+	+	+
$+k_{12}c_{SM}c_K$	+	+	+	+	+	+	+	+
$\frac{dc_P}{dt} = -k_1c_Kc_P$	-	-	+	+	+	-	-	-
$-k_3c_Kc_Mc_P$	-	-	-	-	-	+	-	-
$-2k_4c_K^2c_Mc_P^2$	+	+	+	+	+	+	+	+
$-3k_5c_Kc_M^2c_P^3$	+	+	-	-	-	+	-	+
$-k_6c_Pc_{KC}$	+	-	-	-	-	-	-	+
$-k_7c_Pc_{KC}^2$	-	+	-	-	+	-	+	+
$-2k_{10}c_{SK}c_M^2c_P^2$	-	-	+	+	+	-	+	-
$-k_{13}c_{ACP}$	-	-	-	-	-	-	+	-

Скорость химических реакций	Механизм							
	1	2	3	4	5	6	7	8
$\frac{dc_{SM}}{dt} = +k_3c_Kc_Mc_P$ $+k_6c_Pc_{KC}$ $+k_9c_Mc_{SK}$ $+k_{11}c_Kc_A$ $-k_{12}c_{SM}c_K$	-	-	-	-	-	+	-	-
$\frac{dc_A}{dt} = +k_7c_K^2c_P$ $+k_8c_Kc_{SK}$ $-k_{11}c_Mc_A$ $+k_{12}c_Kc_{SM}$ $-k_{13}c_Pc_A$	-	+	-	-	+	-	+	+
$\frac{dc_{SR}}{dt} = \frac{dc_{MO}}{dt} =$ $+k_5c_Kc_M^2c_P^3$ $+k_{10}c_M^2c_P^2c_{SK}$	+	+	-	-	-	+	-	+
$\frac{dc_{SK}}{dt} = -k_9c_Mc_{SK}$ $+k_1c_Kc_P$ $-k_8c_Kc_{SK}$ $-k_{10}c_M^2c_P^2c_{SK}$ $+2k_{13}c_Pc_A$	-	-	+	-	+	-	-	-

Скорость химических реакций	Механизм							
	1	2	3	4	5	6	7	8
$\frac{dc_{TS}}{dt} = \frac{dc_{OB}}{dt} = \frac{dc_{KC}}{dt}$								
$+k_4c_K^2c_Mc_P^2$	+	+	+	+	+	+	+	+
$+k_2c_Kc_M$	+	+	-	-	+	-	+	+
$-k_6c_Pc_{KC}$	+	-	-	-	-	-	-	+
$-2k_7c_Pc_{KC}^2$	-	+	-	-	+	-	+	+

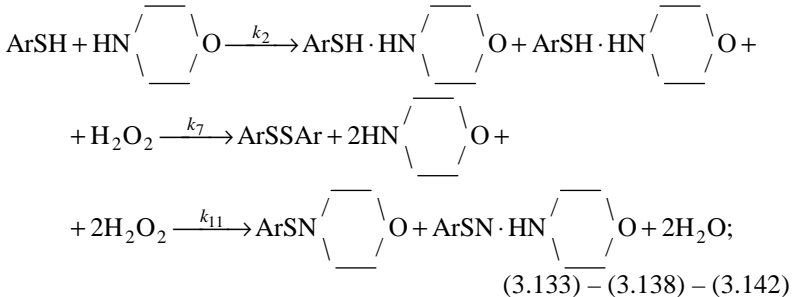
Примечание. Знаки +(-) означают наличие (отсутствие) данной составляющей скорости химической реакции в соответствующем механизме.

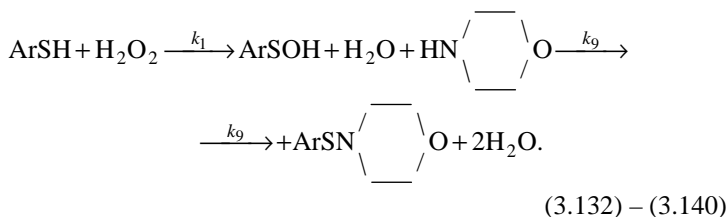
Следует заметить, что стехиометрические уравнения (3.135), (3.136), (3.141) не обязательно отражают механизм взаимодействия реагентов на молекулярном уровне. Так, например, уравнение (3.136) представляет собой последовательность элементарных стадий:



которые не представляется возможным учесть из-за резкого увеличения сложности определения кинетических констант.

Анализ механизма образования сульфенамида М позволил установить, что его синтез протекает в несколько стадий, причем по разным маршрутам: (3.133) – (3.138) – (3.142) и (3.132) – (3.140).





Как видно маршрут (3.133) – (3.138) – (3.142) получения целевого продукта проходит через образование морфолиновой соли 2-МБТ, которая затем окисляется до ди-(2-бензтиазолил)-дисульфида, дающего в свою очередь при взаимодействии с морфолином сульфенамид М. Следовательно, технологический процесс необходимо проводить в полярных средах, например в среде амина, поскольку избыток амина смещает равновесие в сторону образования морфолиновой соли 2-МБТ. Кроме того, избыток амина способствует более полному протеканию реакции ди-(2-бензтиазолил)-дисульфида с морфолином, лимитирующей процесс образования сульфенамида М.

Основным источником образования побочных продуктов является свободный 2-МБТ (маршруты (3.135), (3.132) – (3.140)), причем скорость их образования, как установлено, зависит от концентрации пероксида водорода в реакционной массе. В связи с этим возникает необходимость оптимального дозирования окислителя в реактор, при котором исключается возможность образования избытка пероксида водорода в реакторе.

Задача определения наиболее вероятного механизма синтеза сульфенамида М решалась в два этапа: вначале для каждого механизма находились кинетические параметры k_i , а затем выбирался наиболее вероятный механизм по принципу максимального правдоподобия [147]. Константы скоростей химических реакций каждого из рассматриваемых механизмов определялись при решении следующей экстремальной задачи – для заданного механизма определить константы скоростей реакций (из табл. 3.26), дающие наилучшее совпадение экспериментальных и расчетных данных в среднеквадратичном смысле:

$$I(\vec{k}) = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N \gamma_i \left[x_i^{\ominus}(t_j) - x_i(\vec{k}, t_j) \right]^2 + \alpha \int_0^{t_N} \sum_{i=1}^M \left(\frac{dx_i}{dt} \right)^2 dt \Rightarrow \min_k, \tag{3.144}$$

где M – число переменных; N – число экспериментальных точек; $x_i^{\ominus}(t_j)$, $x_i(\vec{k}, t_j)$ – экспериментальные и расчетные значения концент-

3.26. Кинетические константы реакции окисления 2-меркаптобензтиаола и морфолина пероксидом водорода

Кинетическое уравнение	Порядок реакции, n	Предэкспоненциальный множитель, $(\text{м}^3)^{n-1}/(\text{моль}^{n-1} \text{ с})$	Энергия активации, кДж/моль
$W_1 = k_1 c_K c_P$	2	$5,0 \cdot 10^8$	67,0
$W_2 = k_2 c_K c_M$	2	$3,7 \cdot 10^{30}$	272,0
$W_4 = k_4 c_K^2 c_P^2 c_M$	5	$5,9 \cdot 10^{10}$	121,0
$W_7 = k_7 c_K^2 c_P$	3	$1,6 \cdot 10^{17}$	151,0
$W_9 = k_9 c_{SK} c_M$	2	$1,1 \cdot 10^9$	75,0
$W_{10} = k_{10} c_{SK} c_M^2 c_P^2$	5	$1,1 \cdot 10^8$	105,0
$W_{11} = k_{11} c_A c_M$	2	$1,8 \cdot 10^2$	32,0
$W_{12} = k_{12} c_{SM} c_K$	2	$6,9 \cdot 10^{12}$	71,0

раций реагирующих веществ; $\vec{k} = (k_1, k_2, \dots, k_L)$ – вектор обобщенных значений констант скоростей при заданной температуре; L_S – число констант химических реакций для S -го механизма; γ_i – весовые множители, $0 \leq \gamma_i \leq 1$; α – параметр регуляризации.

Здесь требование минимума добавочного члена $\alpha \int_0^{t_N} \sum_{i=1}^M \left(\frac{dx_i}{dt} \right)^2 dt$

ослабляет влияние погрешности изменения концентраций реагирующих веществ. Параметр α находится из условия согласования точности определения кинетических констант с погрешностью экспериментального определения концентраций [148]:

$$\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N \gamma_i [x_i^{\ominus}(t_j) - x_i(\bar{k}, t_j)]^2 = N \sum_{i=1}^M \hat{\sigma}_i^2, \quad (3.145)$$

где $\hat{\sigma}_i^2$ – оценка дисперсии случайной ошибки определения концентрации реагирующих веществ.

В результате решения регуляризованной задачи (3.144) на ЭВМ были рассчитаны кинетические параметры для всех рассматриваемых механизмов реакций синтеза сульфенамида М. Энергии активации и предэкспоненциальные множители для каждой химической реакции альтернативных механизмов определены на основании гипотезы об аррениусовском характере температурной зависимости кинетических констант.

На основании расчетов были выявлены по принципу максимального правдоподобия два механизма реакции синтеза сульфенамида М (первый и пятый), расчеты по математическим моделям которых дают удовлетворительное согласие экспериментальных и расчетных значений концентраций 2-МБТ и сульфенамида М при $T_1 = 21^\circ$, $T_2 = 37^\circ$ (рис. 3.68 а, б). Адекватность моделей первого и пятого механизма проверялась по экспериментальным данным, полученным при $T = 30^\circ$ (рис. 3.68, в). Проведенные расчеты, а также дополнительные экспериментальные исследования показали, что предпочтение как наиболее вероятному механизму следует отдать пятому механизму, наилучшим образом отвечающему опытным данным (рис. 3.68, в). Кинетические параметры наиболее вероятного механизма реакции окислительной конденсации 2-МБТ и морфолина пероксидом водорода представлены в табл. 3.26.

Процесс получения сульфенамида М осуществляется в реакторе периодического действия при постепенном приливе пероксида водорода, смеси 2-МБТ и морфолина.

При построении математической модели синтеза сульфенамида М в аппарате с мешалкой примем следующие допущения: а) аппарат представляет собой реактор идеального смешения; б) потери тепла от реактора в окружающую среду пренебрежимо малы; в) теплофизические параметры веществ в рассматриваемом диапазоне температур постоянны.

С учетом принятых допущений математическую модель синтеза сульфенамида М можно записать в виде:

$$\dot{q}_K = (-W_1 - W_2 - 2W_4 + W_{11} - W_{12})V, \quad q_K(0) = q_K^{(0)}; \quad (3.146)$$

$$\dot{q}_M = (-W_2 - W_4 - 2W_5 + 2W_7 - W_9 - 2W_{10} - W_{11} + W_{12})V, \quad q_M(0) = q_M^{(0)}; \quad (3.147)$$

$$\dot{q}_P = (-W_1 - 2W_4 - W_7 - 2W_{10})V + g_P c_P^{\text{BX}}, \quad q_P(0) = q_P^{(0)}; \quad (3.148)$$

$$\dot{q}_{SM} = (W_9 + W_{11} - W_{12})V, \quad q_{SM}(0) = q_{SM}^{(0)}; \quad (3.149)$$

$$\dot{q}_A = (+W_7 - W_{11} + W_{12})V, \quad q_A(0) = q_A^{(0)}; \quad (3.150)$$

$$\dot{q}_{SR} = \dot{q}_{MO} = W_{10}V, \quad q_{SR}(0) = q_{SR}^{(0)}; \quad (3.151)$$

$$\dot{q}_{SK} = (-W_9 + W_1 - W_{10})V, \quad q_{SK}(0) = q_{SK}^{(0)}; \quad (3.152)$$

$$\dot{q}_{TS} = \dot{q}_{OB} = W_4V, \quad q_{TS}(0) = q_{TS}^{(0)}; \quad (3.153)$$

$$\dot{q}_{KC} = (+W_2 - 2W_7)V, \quad q_{KC}(0) = q_{KC}^{(0)}; \quad (3.154)$$

$$\dot{V} = g_P, \quad V(0) = V^{(0)}; \quad (3.155)$$

$$c_V^R \dot{T} = c_V^P g_P T_P + W_4 h V + K_T F(T_x - T), \quad T(0) = T^{(0)}; \quad (3.156)$$

$$c_V^x V_R \dot{T}_x = c_V^x g_x (T_x^{\text{BX}} - T_x) + K_T F(T - T_x), \quad T_x(0) = T_x^{(0)}, \quad (3.157)$$

где $q_i = c_i V$; $\dot{q}_i = dq_i / dt$; c_i – мольная концентрация i -го компонента; V – объем реакционной массы; c_P^{BX} , g_P – концентрация и расход пероксида водорода на входе в реактор; c_V^R , c_V^x , c_V^P – объемные теплоемкости реакционной массы, хладагента, пероксида водорода соответственно; V_R – объем теплообменной рубашки.

Разработанная математическая модель (3.146) – (3.157) может быть использована для моделирования и оптимизации периодического процесса получения сульфенамида М.

3.4.2. СИНТЕЗ ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ ПОЛУНЕПРЕРЫВНЫМ ПРОЦЕССОМ СИНТЕЗА СУЛЬФЕНАМИДА М

Сформулируем задачу оптимального управления процессом синтеза сульфенамида М в реакторе периодического действия. В качестве управлений примем расходы пероксида водорода $g_P(t)$ и хладагента $g_X(t)$. Требуется найти такие $g_P^*(t)$ и $g_X^*(t)$, при которых выход сульфенамида М – максимален, а затраты на управление – минимальны, т.е.

$$I[g_P(t), g_X(t)] = [q_K^{(0)} - q_{SM}(t_K)]^2 + q_{TS}^2(t_K) + q_{SR}^2(t_K) + 1/2 \int_0^{t_K} \left[\left(\frac{g_P(t)}{\alpha_P} \right)^2 + \left(\frac{g_X(t)}{\alpha_X} \right)^2 \right] dt \longrightarrow \min_{g_P, g_X} \quad (3.158)$$

при связях (3.146) – (3.157) и ограничениях

$$\underline{g_P} \leq g_P \leq \overline{g_P}, \quad \underline{g_X} \leq g_X \leq \overline{g_X}. \quad (3.159)$$

Заметим, что выполнение ограничений обеспечивается соответствующим выбором коэффициентов α_P, α_X .

Для удобства дальнейших выкладок запишем уравнение математической модели (3.146) – (3.157) в форме

$$\dot{x}_i + f_i(x, t) = \varphi_i^{(1)} g_P + \varphi_i^{(2)} g_X, \quad i = 1, 12,$$

где $\varphi_3^{(1)} = c_P^{BX}$, $\varphi_9^{(1)} = 1$, $\varphi_{10}^{(1)} = c_P^V T_P / c_R^V T$, $\varphi_{11}^{(2)} = (T_x^{BX} - T_x) / V_R$, остальные $\varphi_i^{(j)}$ тождественно равны нулю.

Оптимальные расходы g_P^* , g_X^* в момент времени t определяются как

$$g_P^*(t) = -\alpha_P^2 \left[\varphi_3^{(1)} \partial L / \partial q_P + \varphi_9^{(1)} \partial L / \partial V + \varphi_{10}^{(1)} \partial L / \partial T \right];$$

$$g_X^*(t) = -\alpha_X^2 \varphi_{11}^{(2)} \partial L / \partial T_x, \quad (3.160)$$

где $L(x, t)$ – положительно определенная функция вида

$$L(x, t) = L[x(t_K)] = [q_K^{(0)} - q_{SM}(t_K)]^2 + q_{TS}^2(t_K) + q_{SR}^2(t_K). \quad (3.161)$$

Опишем алгоритм вычисления $g_p^*(t)$, $g_x^*(t)$ на отрезке $[t_0, t_K]$ по формулам (3.160). Покроем отрезок $[t_0, t_K]$ равномерной сеткой с начальным шагом τ , причем величина шага уменьшается пропорционально интервалу оптимизации $t_0 \dots t_K$. Решение задачи синтеза оптимального управления будем искать в классе кусочно-постоянных функций, т.е. $g_p(t) = \text{const}$, $g_x(t) = \text{const}$ при $t \in [t_{j-1}, t_j]$, $j = 1, 2, \dots, m$. Предположим, что априори нам известны значения $g_p^*(t)$, $g_x^*(t)$ на начальном отрезке $[t_0, t_0 + \tau]$. Вычислим теперь оптимальные значения $g_p^*(t)$, $g_x^*(t)$ на отрезке $[t_1, t_1 + \tau]$. Для этого определим по модели (3.146) – (3.157) значения переменных состояния $x(t)$ объекта управления, которые в момент времени t_1 задают начальные условия для модели свободного движения

$$\dot{x}_i + f_i(x, t) = 0, \quad i = \overline{1, 12}; \quad (3.162)$$

и проинтегрируем систему (3.162) в ускоренном времени на отрезке $[t_1/\chi, t_K/\chi]$, где $\chi \gg 1$. Далее вычислим значение $L[x(t_K)]$. Для расчета частных производных $\partial L/\partial x_i$ будем применять формулу правой разности с одновременным проектированием градиента на векторы эффективности $\varphi_i^{(j)}$ управлений.

Тогда получим расчетные формулы для оптимальных управлений $g_p^*(t)$, $g_x^*(t)$ на отрезке $[t_1, t_2]$:

$$\begin{aligned} g_p^*(t) &\approx -\alpha_p^2 \left\{ L[x(t) + \varepsilon \varphi^{(1)}] - L[x(t)] \right\} / \varepsilon \left\| \varphi^{(1)} \right\|; \\ g_x^*(t) &\approx -\alpha_x^2 \left\{ L[x(t) + \varepsilon \varphi^{(2)}] - L[x(t)] \right\} / \varepsilon \left\| \varphi^{(2)} \right\|, \end{aligned} \quad (3.163)$$

где ε – достаточно малое число; $\left\| \varphi^{(j)} \right\|$ – евклидова норма вектора $\varphi^{(j)}$.

Вычисленные по формулам (3.163) значения $g_p^*(t)$, $g_x^*(t)$ подставляются в математическую модель (3.146) – (3.157), с помощью которой рассчитываются начальные значения переменных состояния объекта управления для нового цикла в момент времени $[t_2 = t_1 + \tau]$ и т.д. Таким образом последовательно вычисляются оптимальные значения расходов $g_p^*(t)$, $g_x^*(t)$ для каждого отрезка $[t_{j-1}, t_j]$, $j = 2, \dots, m$.

Оптимальные и существующие режимы изменения расходов пероксида водорода и хладагента приведены на рис. 3.70, а соответствующие им траектории фазовых координат – на рис. 3.71. В действующих производствах химикатов прилив окислителя в реактор осуществляют с постоянной скоростью, а в реакторе поддерживают постоянную температуру.

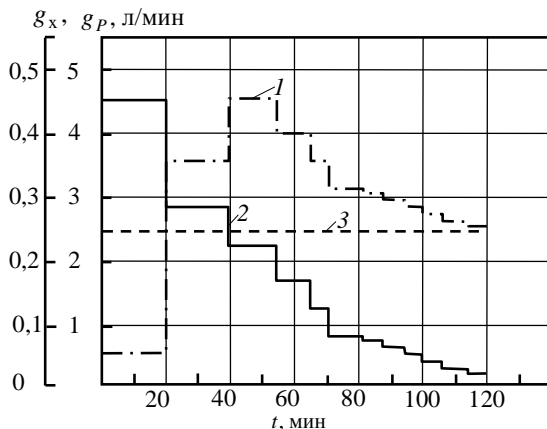


Рис. 3.70. Оптимальный 1 – g_x^* , 2 – g_p^* и существующий 3 – g_p режимы синтеза сульфенамида М

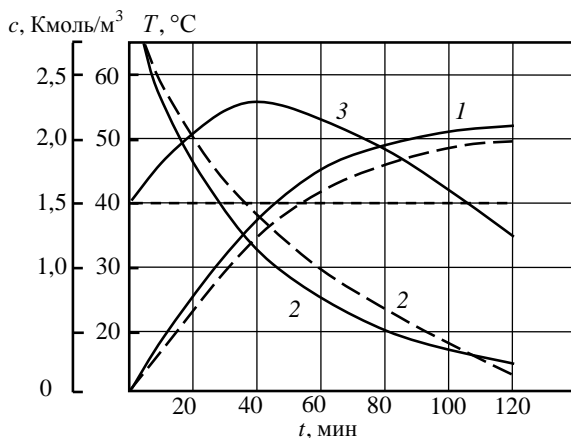


Рис. 3.71. Графики изменения переменных состояния объекта управления при оптимальном (сплошная линия) и существующем (пунктирная) режимах:

1 – концентрация сульфенамида М; 2 – концентрация 2-МБТ;
3 – температура в реакторе

Из графиков видно, что интенсивное образование сульфенамида М приходится на первую фазу процесса синтеза. Объясняется это тем, что в начальный период в реакторе имеется достаточное количество морфолиновой соли каптакса, а также ди-(2-бензтиазолил)-дисульфида, являющихся основными источниками образования сульфенамида М. Во второй фазе наблюдается возрастание сульфеновой кислоты, которая является источником образования не только целевого продукта, но и в большей степени побочных продуктов.

В задаче синтеза оптимального управления периодическим процессом получения сульфенамида М принимали $\tau_0 = 20$ мин, $\alpha_p = 1,1$, $\alpha_x = 0,9$. Сравнительный анализ рассчитанных оптимальных режимов синтеза сульфенамида М и существующих в настоящее время производств химикатов показывает, что при реализации оптимальных режимов выход сульфенамида М увеличивается в среднем на 3%, количество окислителя уменьшается на 5...7% и количество примесей в целевом продукте снижается примерно на 3%.

Обсудим теперь реализацию оптимального управления в АСУ процессом синтеза сульфенамида М. Этот процесс относится к объектам с неполной степенью наблюдаемости. Автоматический контроль возможен лишь при изменении температуры в реакторе, температуры и расходов окислителя и хладагента. Следовательно, концентрации реагирующих веществ в любой момент времени можно определить только с использованием прогнозирующей модели (3.146) – (3.157).

Функциональная схема АСУ реакторным блоком синтеза сульфенамида М приведена на рис. 3.72. Оценивание состояния технологического процесса осуществляется следующим образом. В некоторый момент времени t производится опрос датчиков температуры T в реакторе, температур T_p , T_x и расходов g_p , g_x окислителя и хладагента соответственно. Затем в блоке 1 по уравнениям кинетики рассчитываются текущие значения концентраций реагирующих веществ. В блоке 2 осуществляется расчет экстраполированных значений переменных состояния на момент времени $t + \tau$ по формуле

$$x_i(t + \tau) = x_i(t) + \int_t^{t+\tau} f_i(x, S) dS,$$

где τ – время, затрачиваемое на расчет новых значений управлений. Экстраполированные оценки переменных состояния передаются в блок 3, где рассчитываются управляющие воздействия на новый цикл. Оптимальные управления $u_1^* = g_p^*$, $u_2^* = g_x^*$ выдаются в качестве задания цифровому регулятору 4, который в соответствии с ПИ-законом регулирования устанавливает требуемые значения расхода окислителя и хладагента.

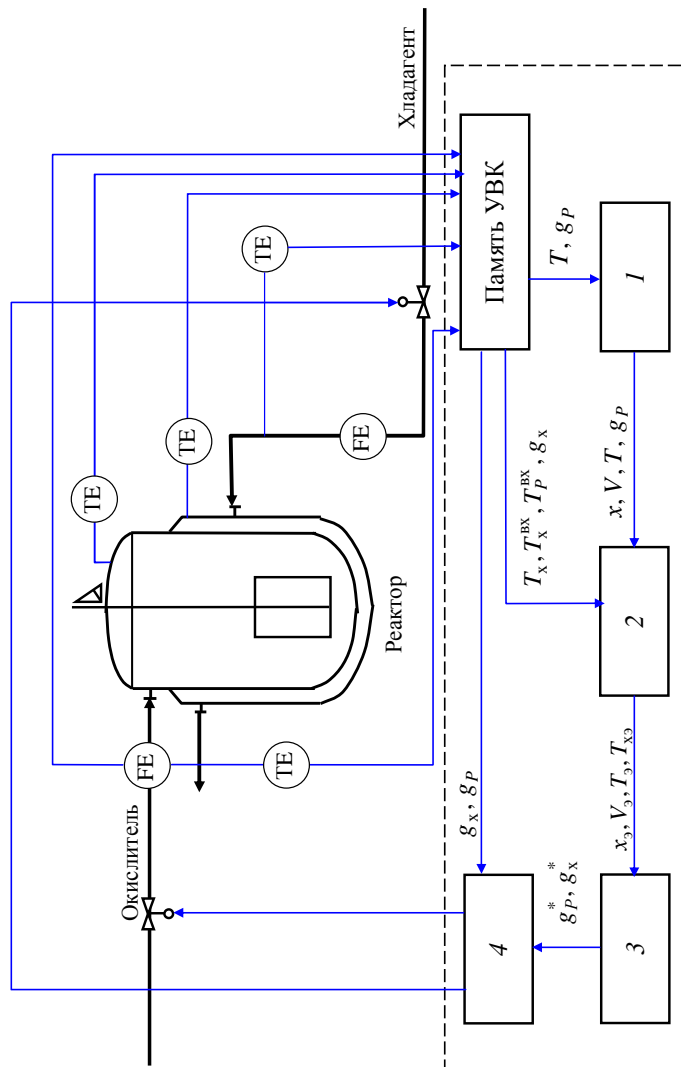


Рис. 3.72. Функциональная схема АСУ:

1 – блок расчета текущих координат вектора состояния; 2 – блок экстраполяции координат вектора состояния на момент $t + \tau$;

3 – блок расчета оптимальных управлений $u_1^* = g_p, u_2^* = g_x$; 4 – цифровой регулятор

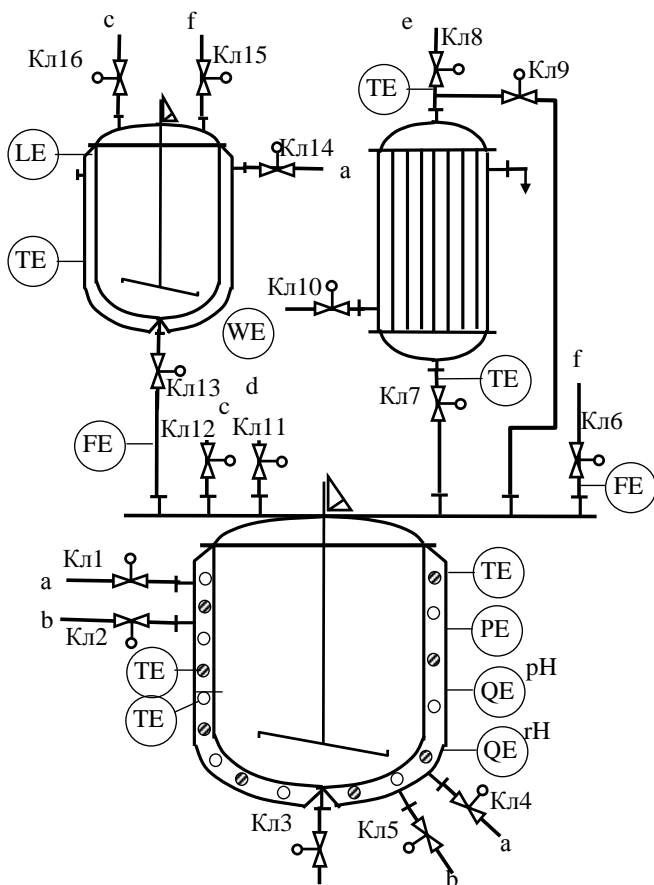


Рис. 3.73. Принципиальная схема модуля синтеза химикатов-добавок для полимерных материалов

Анализ производств химикатов-добавок показал, что технологические процессы синтеза преимущественно осуществляются в реакторах периодического действия. Технологический цикл аппарата периодического действия включает следующие типовые операции: загрузку сырья из расходной емкости в мерник по уровню или весу; выгрузку сырья из мерника в реактор; загрузку сырья из расходной емкости в реактор по счетчику; перемешивание реакционной массы в течение заданного промежутка времени; отгонку из реакционной массы воды или иного продукта; прилив реагента в реактор по программе; разогрев

или охлаждение реакционной массы (сырья) до заданной температуры в реакторе (мернике); создание вакуума (давления) в реакторе; термообработку реакционной массы по заданной программе; выгрузку реакционной массы из реактора другой аппарат.

Во время выполнения вышеперечисленных операций автоматически контролируются следующие технологические переменные: температура, давление (вакуум), pH среды, окислительно-восстановительный потенциал реакционной массы, температура сырья, уровень или вес сырья в мернике. На рисунке 3.73 изображена принципиальная схема гибкого автоматизированного узла синтеза химикатов-добавок для полимерных материалов. Узел включает: 1 – реактор с мешалкой и рубашкой для двух видов теплоносителей (горячего и холодного); 2 – мерник с мешалкой и теплообменной рубашкой; 3 – теплообменник; Кл1 – Кл16 – клапаны на линиях горячего (а) и холодного (b) теплоносителей, азотного дыхания (с), азота (d), вакуума (e), подачи сырья (f).

Конструкция реактора предусматривает специальные вводы для установки датчиков. Мешалка реактора снабжена датчиком скорости вращения.

Теплообменник 3 при таком подключении может работать как обычный, например, в случае отгонки воды или другого продукта из реакционной массы, и как обратный холодильник, когда нужно возвращать в реактор легколетучие компоненты.

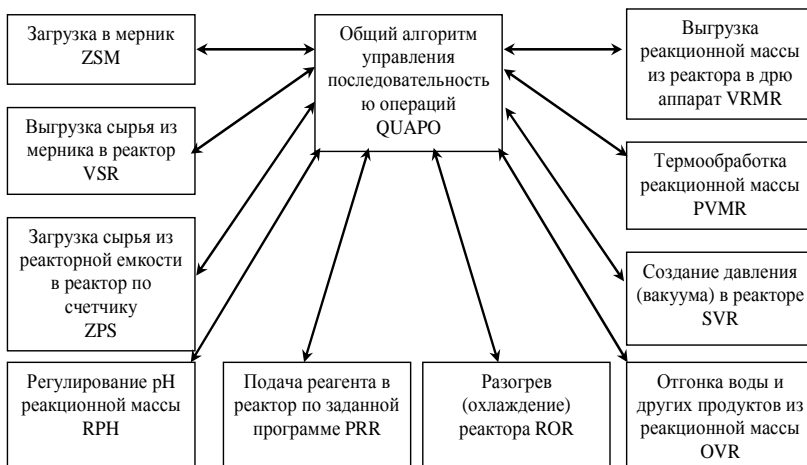


Рис. 3.74. Структура организации алгоритмов управления в АСУ реакторным блоком синтеза химикатов

Предлагаемая конструкция технологического узла синтеза химикатов в совокупности с разработанной АСУ обеспечивают необходимую гибкость производства химикатов и возможность его модернизации в необходимых случаях.

В состав специального программного обеспечения АСУ узлом синтеза химикатов включены алгоритмы управления (рис. 3.74): последовательностью операций (ОАУРО); загрузкой сырья из расходной емкости в мерник (ZSM); выгрузкой сырья из мерника в реактор (VSR); загрузкой сырья из расходной емкости в реактор по счетчику (ZPS); (RPH); приливом реагента в реактор (PRR); разогревом (охлаждением) реакционной массы до заданной температуры (ROR); созданием давления (вакуума) в реакторе (SVR); термообработкой (PVMR); отгонкой воды или иного продукта (OVR); выгрузкой реакционной массы из реактора в другой аппарат (VRMR).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Бесспорно, что уже на ранних этапах использования компьютеров для решения задач проектирования и управления исследователи поняли важность учета неточности математических моделей для построения работоспособных (гибких) технических систем, и первые публикации по этой проблеме появились за рубежом в 60-е – 70-е годы прошлого столетия.

Существенное развитие теория гибкости получила в 1980-е годы в работах профессора Гроссмана и его учеников в Университете Carnegie Mellon (г. Питсбург, США). Они сформулировали три фундаментальных понятия теории гибкости – тест гибкости, индекс гибкости и двухэтапную задачу оптимизации с учетом гибкости. В последующие годы за рубежом и в России в работах профессора Г.М. Островского и его учеников в ГНЦ НИФХИ им. Л.Я. Карпова, Тамбовском государственном техническом университете и Казанском национальном исследовательском технологическом университете изучались следующие вопросы: обобщение функции гибкости и развитие методов ее оценки, обобщение формулировок двухэтапной задачи оптимизации и развитие методов ее решения, многокритериальная оптимизация технических систем, совместное проектирование гибких ХТС и САУ, гибкость и надежность технических систем и др.

В монографии с позиций современных методов системного анализа, математического и физического моделирования получены новые научные результаты для теории интегрированного проектирования энерго- и ресурсосберегающих гибких промышленных химико-технологических процессов, аппаратов и систем, формирующих предпосылки эффективного управления и автоматизации.

Авторами разработана методология (система принципов, способов организации и построения теоретической и практической деятельности при интегрированном проектировании) и формализована стратегия интегрированного проектирования промышленных энерго- и ресурсосберегающих гибких ХТП, оборудования и систем автоматического управления в условиях интервальной неопределенности физико-химических, технологических и экономических исходных данных, реализована многоэтапная итерационная процедура решения задач интегрированного проектирования гибких автоматизированных ХТС, предусматривающая: выбор типа, расчет конструктивных параметров и режимных переменных аппаратно-технологического оформления ХТС; выбор класса, структуры и расчет настроечных параметров САУ; определение допустимой области изменения параметров сырья, техно-

логических переменных и коэффициентов математической модели ХТС, в пределах которой обеспечивается оптимальное (в смысле безопасности, энерго- и ресурсосбережения и качества выпускаемой продукции) функционирование ХТС.

Значительное развитие в монографии получили методы и алгоритмы решения одно- и двухстадийных задач стохастической оптимизации с «мягкими» (вероятностными) и смешанными ограничениями, возникающими при аппаратурно-технологическом оформлении промышленных энерго- и ресурсосберегающих гибких автоматизированных ХТС в условиях неопределенности. Всесторонне рассмотрена проблема динамической гибкости ХТС, намечены подходы к формулированию одно- и двухстадийных задач оптимизации в условиях неопределенности для совместного проектирования ХТС и САУ. Авторами на основе новых принципов и методов синтеза энерго- и ресурсосберегающего управления гибкими ХТС разработан универсальный алгоритм оптимального управления нелинейными периодическими химическими процессами.

Однако, несмотря на известные достижения в теории интегрированного проектирования гибких автоматизированных ХТС, остается немало проблем, связанных с экономичным вычислением математического ожидания (многомерного интеграла) в двухстадийных задачах, разработкой новых быстродействующих методов и алгоритмов решения двухстадийных задач при совместном проектировании гибких ХТС и САУ, задач планирования в условиях неопределенности, обеспечения устойчивости, надежности и робастности ХТС и др. Эти вопросы требуют скорейшего разрешения, и мы призываем молодых ученых, аспирантов и студентов включиться в исследовательский процесс и внести свой вклад в разработку теоретических основ интегрированного проектирования энерго- и ресурсосберегающих гибких автоматизированных ХТС.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. – М.: Химия, 1985. – 448 с.
2. Девятов Б.Н. Теория переходных процессов в технологических аппаратах с точки зрения задач управления. – Новосибирск: Акад. наук СССР. Сибирское отделение. – 323 с.
3. Biegler L.T., Grossmann I.E., Westerberg A.W. Systematic methods of chemical process design. Upper Saddle River, New Jersey: Prentice Hall, 1997. – 796 p.
4. Grossmann I.E., Morari M. Operability, resilience and flexibility – process design objectives for changing world. Proceedings of Second International Conference Foundations of Computer aided process design. Snowmass Village, Colorado, 1983.
5. Mohiden M.J., Perkins J.D., Pistikopoulos E.N. Optimal design of dynamic systems under uncertainty. AIChE Journal, 1996; 42: P. 2252.
6. Островский Г.М., Волин Ю.М. Оптимальное проектирование гибких химико-технологических процессов. Доклады Академии наук. 1993. – Т. 331. – С. 326 – 328.
7. Островский Г.М., Волин Ю.М. Оптимизация химико-технологических процессов в условиях частичной неопределенности исходной информации // Автоматика и телемеханика. 1995. – № 12. – С. 92 – 106.
8. Островский Г.М., Волин Ю.М. Новые проблемы теории гибкости химико-технологических процессов. Доклады Академии наук. 2000. – Т. 370. – С. 773 – 776.
9. Бодров В.И., Дворецкий С.И. Стратегия синтеза гибких автоматизированных химико-технологических систем // Технические основы химической технологии. – 1991. – Т. 25, № 5. – С. 716 – 730.
10. Бодров В.И., Дворецкий С.И., Дворецкий Д.С. Оптимальное проектирование энерго- и ресурсосберегающих процессов и аппаратов химической технологии // Технические основы химической технологии. – 1997. – Т. 31, № 5. – С. 542 – 548.
11. Советский энциклопедический словарь. – М.: Большая российская энциклопедия, 2002. – 543 с.
12. Новиков А.М., Новиков Д.А. Методология. – М.: СИНТЕГ, 2007. – 668 с.
13. Джонс Д. Методы проектирования. – М.: Мир, 1986. – 326 с.

14. Дворецкий С.И., Муромцев Ю.Л., Погонин В.А., Схиртладзе А.Г. Моделирование систем. – М.: Издательский центр «Академия», 2009. – 320 с.
15. Волкова В.Н., Денисов А.А. Основы теории систем и системного анализа. – 2-е изд. – СПб.: СПб.ГТУ, 1999. – 512 с.
16. Сидельников Ю.В. Системный анализ технологии экспертного прогнозирования. – М.: Изд-во МАИ-ПРИНТ, 2007. – 348 с.
17. Майданов А.С. Искусство открытия: Методология и логика научного творчества. – М., 1993.
18. Красовский А.А., Буков В.Н., Шендрик В.С. Универсальные алгоритмы оптимального управления непрерывными процессами. – М.: Наука, 1977. – 272 с.
19. Комплексная программа научно-технологического развития и технологической модернизации экономики РФ до 2015 года. – М., 2007.
20. Новиков Д.А. Теория управления организационными системами. – М.: МПСИ, 2005. – 584 с.
21. Кендалл И., Роллинз К. Современные методы управления портфелями проектов и офис управления проектами. – М.: ПМСОФТ, 2004. – 576 с.
22. Бурков В.Н., Заложнев А.Ю., Новиков Д.А. Теория графов в управлении организационными системами. – М.: Синтег, 2001. – 124 с.
23. Вагнер Г. Основы исследования операций. – М.: Мир, 1972. – 336 с.
24. Математические основы управления проектами / Под ред. В.Н. Буркова. – М.: Высшая школа, 2005. – 424 с.
25. Воропаев В.И. Управление проектами в России. – М.: Аланс, 1995. – 225 с.
26. Свод знаний по управлению проектами (РМВОК) / Пер. с англ. – М.: ПМСОФТ, 2000. – 111 с.
27. Управление проектами: Справочное пособие / Под ред. И.И. Мазура, В.Д. Шапиро. – М.: Высшая школа, 2001. – 875 с.
28. Бурков В.Н., Новиков Д.А. Как управлять проектами. – М.: Синтег, 1997. – 188 с.
29. Матвеев А.А., Новиков Д.А., Цветков А.В. Модели и методы управления портфелями проектов. – М.: ПМСОФТ, 2005. – 206 с.

30. Гламаздин Е.С., Новиков Д.А., Цветков А.В. Механизмы управления корпоративными программами: информационные системы и математические модели. – М.: Спутник, 2003. – 161 с.
31. Островский Г.М., Волин Ю.М. Технические системы в условиях неопределенности: анализ гибкости и оптимизации. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. – 319 с.
32. Halemane K.R., Grossmann I.E. Optimal Process Design under Uncertainty / *AIChE Journal*, 1983. – V. 29. – P. 425 – 433.
33. Swaney R.E., Grossmann I.E. An index for operational flexibility in chemical process design / *AIChE Journal*, 1985. – V. 31. – P. 621 – 644.
34. Shapiro A., De-Mello T.H. A simulation-based approach to two-step stochastic programming with recourse. *MATH. program* 1998; 81; P. 301 – 305.
35. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. – 636 с.
36. Horst R., Tuy H. *Global Optimization: Deterministic Approaches*. Berlin: Springer-Verlag, 1993.
37. Falk J.E., Soland R.M. An algorithm for separable nonconvex programming problems. *Manag. Sci.* 1969; 15: P. 550 – 569.
38. Ostrovsky G.M., Shevchenko A.L. On synthesis of optimal chemical-technological systems // *Chem. Eng. Science*. 1979; 34: P. 1243 – 1249.
39. Ostrovsky G.M., Achenie L.E.K., Karalapakkam A., Volin Yu.M. Flexibility analysis of chemical processes: selected global optimization sub-problems. *Optimization and Engineering*. 2002; 3: P. 31 – 52.
40. Maine P.Q., Polac E., Traham R. An outer approximation algorithm for computer-aided design problem. *J. Optim. Theory Appl.* 28; 3: P. 1979.
41. Hettich R., Kortanek K.O. Semi-infinite programming: Theory, methods and applications. *SIAM Review* 1993; 53: P. 380 – 429.
42. Reemstead R., Gornor S. Numerical methods for semi-infinite programming: A survey, 195-275. In *Semi-infinite Programming*, R. Reemtsen and J.-J. Ruckman (Ed's), Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1998.
43. Raspanty C.G., Bandoni J.A., Biegler L.T. New strategy for flexibility analysis and design under uncertainty. *Comp. Chem. Eng.* 2000; 24: P. 2193 – 2209.

44. Ostrovsky G.M., Achenie L.E.K., Wang Y., Volin Yu.M. A unique approach for solving sub-problems in flexibility analysis. Chem. Eng. Comm. 2002; 189: P. 125 – 149.

45. Bernardo F.P., Saraiva P.M. Robust optimization framework for process parameter and tolerance design. AIChE Journal 1998; 44: P. 2007 – 2117.

46. Diwaker U.M., Kalagnanam J.R. An efficient sampling technique for optimization under uncertainty. AIChE Journal 1997; 43: P. 440 – 447.

47. Ostrovsky G.M., Achenie L.E.K., Datskov I., Volin Yu.M. Optimization of chemical processes under uncertainty: the case of insufficient process data at the operation stage. AIChE Journal 2003; 49: P. 1216 – 1240.

48. Дворецкий С.И., Дворецкий Д.С., Мищенко С.В., Островский Г.М. Новые подходы к интегрированному синтезу гибких автоматизированных химико-технологических систем // Технические основы химической технологии. – 2010. – Т. 44, № 1. – С. 69 – 77.

49. Дворецкий С.И., Дворецкий Д.С., Островский Г.М. Об одном алгоритме двухэтапной задачи оптимизации // Математические методы в технике и технологиях (ММТТ-24): Сб. тр. XXIV Междунар. науч. конф. в 10 т. – Саратов: Саратов. гос. техн. ун-т, 2011. – С. 85 – 87.

50. Справочник по теории автоматического управления / Под ред. А.А. Красовского. – М.: Наука, 1987. – 711 с.

51. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1967. – 575 с.

52. Kokossis A.C., Floudas C.A. Stability in optimal design: Synthesis of complex reactor networks. AIChE Journal 1994; 40: P. 849 – 861.

53. Mohiden M.J., Perkins J.D., Pistikopoulos E.N. Optimal design of dynamic systems under uncertainty. AIChE Journal, 1996; 42: P. 2252.

54. Luyben M.L., Floudas C.A. Analysing the interaction of design and control-1. A multiobjective framework and application to binary distillation synthesis. Comp. Chem. Eng. 1994; 18: P. 933.

55. Walsh S., Perkins J. Operability and control in process synthesis and design. In process synthesis, J.L. Anderson, ed. New York: Academic Press, 1996.

56. Мамонтов И.Н. Разработка алгоритмов оптимального проектирования автоматизированных химико-технологических установок: Дис. ... канд. техн. наук. – Тамбов: Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 1999. – 198 с.

57. Солопахо А.В. Гарантированное оптимальное управление объектом, описанным системой дифференциальных уравнений со случайным параметром // Вестник Тамбовского государственного технического университета. – 1995. – Т. 1, № 3–4. – С. 239 – 246.

58. Черноусько Ф.Л., Колмановский В.Б. Вычислительные и приближенные методы оптимального управления // Математический анализ. – М., 1977. – Т. 14. – С. 101 – 166. (Итоги науки и техники / ВИНТИ).

59. Берлин А.А., Минскер К.С., Дюмаев К.М. Новые унифицированные энерго- и ресурсосберегающие высокопроизводительные технологии повышенной экологической чистоты на основе турбулентных реакторов. М.: НИИТЭХИМ, 1996. – 188 с.

60. Баранов Б.А. Исследование колористических и физико-технологических свойств некоторых азопигментов в зависимости от их дисперсного состава: Дис. ... канд. техн. наук. – М., 1975. – 111 с.

61. Кудрявцев А.М. Разработка и оптимизация непрерывного технологического процесса получения азопигментов: Дис. ... канд. техн. наук. – Тамбов, 1987. – 256 с.

62. Майстренко А.В. Оптимальное проектирование аппаратурно-го оформления гибкой автоматизированной установки производства азопигментов: Дис. ... канд. техн. наук. – Тамбов, 1993. – 236 с.

63. Брюске Я.Э. Исследование процессов растворения и диазотирования 3-нитро-4-аминотолуола (азоамин красный А) в концентрированных кислотах и разложения 3-нитро-4-диазотолуола в широком диапазоне: отчет о НИР. № гр. 72059965, инв. № 42910. – Тамбов: НИОПИК, 1976.

64. Дворецкий С.И., Майстренко А.В., Дворецкий Д.С., Утробин Н.П. Разработка непрерывной энерго- и ресурсосберегающей технологии получения азопигментов // Вестник Тамбовского государственного технического университета. – 1997. – Т. 2, № 1. – С. 76 – 82.

65. Кудрявцев А.М., Дворецкий С.И., Баранов Б.А., Брюске Э.Я., В.В. Стаханова. Разработка непрерывного технологического процесса получения пигмента алого // ЖПХ. – 1988. – № 11. – С. 2525 – 2531;.

66. Бодров В.И., Дворецкий С.И., Кудрявцев А.М. Математическое моделирование процесса получения азокрасителей // Известия вузов. Химия и химическая технология. – 1985. – Т. 28, № 1. – С. 81 – 86.

67. Гордеев Л.С., Дворецкий С.И., Кудрявцев А.М. Математическое моделирование и исследование непрерывной технологии синтеза азопигментов // Химическая промышленность. – 1990. – № 10. – С. 44 – 48.

68. Тахавутдинов Р.Г., Дьяконов Г.С., Дебердеев Р.Я., Минскер К.С. Турбулентное смешение в малотоннажных трубчатых аппаратах химической технологии // Химическая промышленность. – 2000. – № 5. – С. 41 – 49.

69. Берлин А.А., Дюмаев К.М., Минскер К.С. и др. Трубчатые турбулентные реакторы – основа энерго- и ресурсосберегающих технологий // Химическая промышленность. – 1995. – № 9. – С. 550 – 559.

70. Минскер К.С., Захаров В.П., Тахавутдинов Р.Г. и др. Увеличение коэффициента турбулентной диффузии в зоне реакции как способ улучшения технико-экономических показателей в производстве полимеров // Журнал прикладной химии. – 2001. – Т. 74, вып. 1. – С. 87 – 91.

71. Берлин А.А., Минскер К.С., Дюмаев К.М. Новые унифицированные энерго- и ресурсосберегающие высокопроизводительные технологии повышенной экологической чистоты на основе турбулентных реакторов. – М.: НИИТЭХИМ, 1996. – 188 с.

72. Дворецкий С.И., Карнишев В.В., Дворецкий Д.С. Разработка энерго- и ресурсосберегающих технологических установок непрерывного действия // Химическое и нефтегазовое оборудование. – 1998. – № 4. – С. 4 – 7.

73. Бодров В.И., Дворецкий С.И. и др. Разработка прогрессивных технологий и оборудования перенастраиваемых автоматизированных анилинокрасочных производств // Химическая промышленность. – 1997. – № 1. – С. 64 – 73.

74. Дворецкий С.И., Майстренко А.В. Новые подходы к созданию ресурсо- и энергосберегающих производств // Научно-технические химические технологии: Тез. докл. V Междунар. конф. – Ярославль, 1998. – С. 59 – 61.

75. Дворецкий С.И., Калинин В.Ф., Майстренко А.В., Дворецкий Д.С. Разработка и исследование прогрессивной технологии и ресурсосберегающей техники в производстве азокрасителей // Научно-технические химические технологии: Тез. докл. VI Междунар. конф. – М., 1999. – С. 47 – 49.

76. Баранов Б.А., Бодров В.И., Дворецкий С.И., Калинин В.Ф. Проектирование аппарата для непрерывного диазотирования труднорастворимых аминов // Химическая промышленность. – 1982. – № 10. – С. 612 – 616.

77. Фарлоу С. Уравнения с частными производными. – М.: Мир, 1985. – 384 с.

78. Холл Д., Уатт Д. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. – М.: Мир, 1970. – 312 с.

79. Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. – М.: Мир, 1987. – 572 с.

80. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1972. – 736 с.

81. Иванова О.Г. Математическое моделирование и оптимальное проектирование трубчатых реакторов на примере многоассортиментного производства синтетических красителей: Дис. ... канд. техн. наук. – Тамбов, 1996. – 210 с.

82. Идельчик И.Е. Аэрогидродинамика технологических аппаратов. (Подвод, отвод и распределение потока по сечению аппаратов). – М.: Машиностроение, 1983. – 351 с.

83. Волин, Ю.М., Островский Г.М. ROPUD – программа многоуровневой универсальной оптимизации // Технические основы химической технологии. – 1998. – Т. 32, № 6. – С. 648 – 652.

84. Волин Ю.М., Островский Г.М., Масчева Л.А. Особенности программы ROPUD-2 для решения задач оптимизации химико-технологических систем // Математические методы в технике и технологиях: Сб. тр. XVIII Междунар. науч. конф. – Казань, 2005. – Т. 2. – С. 8 – 11.

85. Казарновский И.А. О механизме самопроизвольного распада перекиси водорода в водных растворах // ДАН. – 1975. – Т. 221, № 2. – С. 353 – 356.

86. Долинский А.А., Иваницкий Г.К. Оптимизация процессов распылительной сушки. – Киев: Наук. думка. – 1984. – 240 с.

87. Треш М.Г. Распыливание жидкости // Вопросы ракетной техники. – 1955. – № 4. – С. 74 – 79.

88. Пажи Д.Г., Галустов В.С. Основы техники распыливания жидкостей. – М.: Химия. 1984. – 254 с.

89. Звездин Ю.Г., Симаков Н.Н., Пластинин А.П., Басаргин Б.Н. Гидродинамика и теплообмен при распыливании жидкости в потоке высокотемпературного газа // Технические основы химической технологии. – 1985. – Т. 19, № 3. – С. 354 – 359.

90. Галустов В.С., Анискин С.В., Феддер И.Э., Чуфаровский А.И. Тепло- и массообмен в прямоточных распылительных аппаратах // Технические основы химической технологии. – 1987. – Т. 21, № 3. – С. 298 – 303.

91. Бретшнайдер С. Свойства газов и жидкостей. – М.-Л.: Химия, 1966. – 535 с.

92. Жданов Д.В. Кинетика и аппаратурное оформление ресурсосберегающего технологического процесса получения надпероксида галлия: Дис. ... канд. техн. наук. – Тамбов, 2003.

93. Кельцев Н.В. Основы адсорбционной техники. – М.: Химия, 1984. – 592 с.

94. Беккер Б.И., Торочешников И.С., Шумяцкий Ю.И. Динамика короткоциклового проточной адсорбции // Технические основы химической технологии. – 1973. – Т. 7, № 3. – С. 359 – 364.

95. Белов С.В. Пористые проницаемые материалы: Справ. изд. / Под ред. С.В. Белова. – М.: Металлургия, 1987. – 335 с.

96. Акулинин Е.И., Дворецкий Д.С., Симаненков С.И., Ермаков А.А. Современные тенденции по уменьшению энергозатрат кислороддобывающих установок короткоциклового безнагревной адсорбции // Вестник Тамбовского государственного технического университета. – Тамбов. – 2008. – Т. 14, № 3. – С. 597 – 601.

97. Аэров М.Э., Тодес О.М. Гидравлические и тепловые основы работы аппаратов со стационарным и кипящим зернистым слоем. – Л.: Изд-во «Химия», 1968. – 512 с.

98. Пат. 6709486 США, МКИЗ В01D 53/047. Pressure swing adsorption process with controlled internal depressurization flow / K.L. Sang, J.D. Bukowski. – № 743381; заяв. 27.02.03; опубл. 03.12.04, Бюл. № 7. – 11 с.

99. Шершуков И.В. Учет связанности проводящих каналов при обосновании фильтрационных свойств трещиноватых и пористых сред // Эффективные методы прогноза нефтегазоносности природных резервуаров: Тр. ВНИГНИ. – М., 1988. – С. 65 – 76.

100. Purceil W.R. Capillary pressures – their measurement using mercury and the calculation of permeability therefrom // Trans. AIME. – 1949. – Vol. 186 – P. 39 – 48.

101. ГОСТ 26450.2–85. Породы горные. Метод определения коэффициента абсолютной газопроницаемости при стационарной и нестационарной фильтрации.

102. Акулинин Е.И., Дворецкий Д.С., Ермаков А.А., Симаненков С.И. Исследование аэродинамических характеристик гранулированных адсорбентов LiLSX и NaX для портативной дыхательной установки короткоциклового безнагревной адсорбции // Фундаментальная наука – ресурс сохранения здоровья здоровых людей: Сб. материалов Всерос. науч. Конгресса. – Тамбов, 2008. – С. 21 – 23.

103. Касаткин А.Г. Основные процессы и аппараты химической технологии. – 9-е изд., испр. – М.: Химия, 1973. – 752 с.
104. Шумяцкий Ю.И., Афанасьев Ю.И. Адсорбция: процесс с неограниченными возможностями. – М.: Высшая школа, 1998. – 78 с.
105. Громова К.И. Установки безнагревной адсорбции // Химическая промышленность за рубежом. – 1967. – № 7(67). – С. 60 – 75.
106. Акулов А.К. Моделирование разделения бинарных газовых смесей методом адсорбции с колеблющимся давлением: Дис. ... д-ра техн. наук. – СПб., 1996. – 304 с.
107. Ruthven D.M., Farooq S., Knaebel K.S. Pressure swing adsorption. – University of New Brunswick Fredericton, NB, Canada. – VCH Publishers, Inc, 1994. – 352 p.
108. Рид Р., Праустниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. – Л.: Химия, 1982. – 592 с.
109. Шумяцкий Ю.И. Промышленные адсорбционные процессы. – М.: Изд-во Колосс, 2009. – 184 с.
110. Лицкевич Л.В., Лаптева И.М. Оценка эффективности кратковременной кислородтерапии у пациентов с дыхательной недостаточностью вследствие хронической обструктивной болезни легких на стационарном этапе медицинской реабилитации // Медицинская панорама. – 2004. – № 10 (<http://www.plaintest.com/pulmonology/oxygen>).
111. Douglas M. New in zeolites // Ind. Eng. Chem. Res. – 2000. – Vol. 39(7). – P. 2127 – 2131.
112. Salil U., Yang R. Limits for air separation by adsorption with LiX zeolite // Ind. Eng. Chem. Res. – 1997. – P. 5358 – 5365.
113. Edward J. Bennett. Pressure swing adsorption (PSA) regenerative chemical filtration and environmental control systems for the colpro of armoured fighting vehicles // 2002 NBC Defense Collective Protection Conference (<http://nsrdec.natick.army.mil/jocotas/index.htm>).
114. Underground Self-Rescuer Technology, Past, Present, and Future, J. Jolson, presented at the 3rd SCSR Workshop on July 25, 2006 at the MSHA Training Academy (s3.amazonaws.com/seak_members/production/.../seak-reprocess,26472,1).
115. Акулинин Е.И., Дворецкий С.И., Ермаков А.А., Симаненков С.И. Перспективы развития адсорбентов для установок короткоциклового адсорбции // Стратегия развития научно-производственного комплекса РФ в области разработки и производства систем жизнеобеспечения и защиты человека в условиях химической и биологической опасности: Тр. Всерос. науч. конф. – Тамбов, 2009. – С. 119 – 121.

116. Дубинин М.М. Адсорбция и пористость: Учебное пособие. – М.: Изд-во ВАХЗ, 1972. – 124 с.
117. Рудобашта С.П. Массоперенос в системах с твердой фазой. – М.: Химия, 1980. – 470 с.
118. Устинов Е.А. Динамика адсорбции паров воды в процессе безнагревного адсорбционного разделения воздуха // Журнал прикладной химии. – 1987. – Т. 60, № 1. – С. 74 – 78.
119. Грег С., Синг К. Адсорбция, удельная поверхность, пористость: Пер. с англ. – 2-е изд. – М., 1984. – 306 с.
120. Ruthven D.M., Farooq S., Knaebel K.S. Pressure swing adsorption. – University of New Brunswick Fredericton, NB, Canada. – VCH Publishers, Inc, 1994. – 352 p.
121. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. – 5-е изд. – М.: Наука, 1977. – 799 с.
122. Рид Р., Праустниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. – Л.: Химия, 1982. – 592 с.
123. Кулинченко В.Р. Справочник по теплообменным расчетам. – Киев: Техника, 1990. – 165 с.
124. Шумяцкий Ю.И. Промышленные адсорбционные процессы. – М.: Изд-во Колосс, 2009. – 184 с.
125. Дьяконов В.В., Круглов В.А. Математические пакеты расширения Матлаб: Специальный справочник. – СПб.: Изд-во Питер, 2001. – 480 с.
126. Акулинин Е.И., Дворецкий Д.С., Дворецкий С.И., Ермаков А.А. Математическое моделирование процесса обогащения кислородом воздуха в установке короткоциклового адсорбции // Вестник Тамбовского государственного технического университета. – 2009. – Т. 15, № 2. – С. 341 – 355.
127. Амосов А.П., Боровинская И.П., Мержанов А.Г. Порошковая технология самораспространяющегося высокотемпературного синтеза материалов: Учеб. пособие / Под науч. ред. В.Н. Анциферова. – М.: Машиностроение-1, 2007. – 471 с.
128. Мержанов А.Г., Столин А.М. Силовое компактирование и высокотемпературная реодинамика // Инженерно-физический журнал. – 1992. – Т. 63, № 5. – С. 515–516.
129. Стельмах Л.С., Жилиева Н.Н., Столин А.М. Математическое моделирование тепловых режимов силового СВС-компактирования // Инженерно-физический журнал. – 1992. – Т. 63, № 5. – С. 623 – 629.

130. Лацинский А.А., Толчинский А.Р. Основы конструирования и расчета химической аппаратуры: Справочник. – 3-е изд., стереотип. – М.: ИД «Альянс», – 2008. – 752 с.

131. Михалев М.Ф., Третьяков Н.П., Мильченко А.И. и др. Расчет и конструирование машин и аппаратов химических производств: Примеры и задачи: Учебное пособие для студентов вузов / Под общ. ред. М.Ф. Михалева. – Л.: Машиностроение, Ленингр. отд., 1984. – 301 с.

132. Тимонин А.С. Основы конструирования и расчета химико-технологического и природоохранного оборудования: Справочник в 3-х т.: Учеб. пособие. – Калуга: Изд-во Н. Бочкаревой, 2002. – 968 с.

133. Merzhanov A.G., Borovinskaya I.P. Historical retrospective of SHS: An autoreview // J. SHS. – 2008. – V. 99, № 4. – P. 242.

134. Столин А.М., Стельмах Л.С. Математические модели СВС-технологий // Самораспространяющийся высокотемпературный синтез: теория и практика: Сб. тр. – Черноголовка, 2001. – С. 122.

135. Stolin A.M., Stelmakh L.S. Mathematical Modeling of SHS compaction / Extrusion: An Autoreview // J. SHS. – 2008. – V. 13, № 1. – P. 53.

136. Стельмах Л.С., Столин А.М., Дворецкий Д.С. Неизотермический метод расчета пресс-оснастки установки компактирования горячих продуктов самораспространяющегося высокотемпературного синтеза // Теоретические основы химической технологии. – 2010. – Т. 44, № 1. – С. 1 – 9.

137. Исаченко В.П., Осипова В.А., Сукомел А.С. Теплопередача. – М.: Энергоатомиздат, 1981. – 416 с.

138. Жилиева Н.Н., Стельмах Л.С. Тепловые режимы СВС-прессования // Тепло- и массообмен в химически реагирующих системах: Тез. докл. Междунар. школы-семинара. – Минск: Изд-во ИТМО им. А.В. Лыкова АН БССР, 1989. – Ч. 2. – С. 44.

139. Стельмах Л.С., Столин А.М., Мержанов А.Г. Математическое моделирование СВС-экструзии. Ч. 1. Тепловые модели // Инженерно-физический журнал. – 1993. – Т. 64, № 3. – С. 83.

140. Стельмах Л.С., Жилиева Н.Н., Столин А.М. Математическое моделирование тепловых режимов силового СВС-компактирования // Инженерно-физический журнал. – 1992. – Т. 63, № 5. – С. 623.

141. Чиркин В.С. Теплофизические свойства материалов. – М.: Физматгиз, 1959. – 356 с.

142. Столин А.М., Стельмах Л.С., Жилиева Н.Н. Аналитическая модель напряженно-деформированного состояния осесимметричного

упругого тела в условиях двумерного поля температур // Инженерно-физический журнал. – 1989. – Т. 56, № 4. – С. 650 – 657.

143. Амирова Э.Д. Синтез и исследование аммопроизводных 2-меркаптоимидазолина: Автореф. дис. ... канд. хим. наук. – Ташкент, 1979. – 20 с.

144. Игнатов В.А., Лазовенко А.Н., Бородкин В.Ф. Исследование окисления 2-меркаптобензтиазола кислородом в водных растворах аминов // Известия вузов. Химия и химическая технология. – 1980. – Т. 23, вып. 1. – С. 39–40.

145. Лазовенко А.Н., Игнатов В.А., Желобкова И.В. Исследования реакции дисульфидов с аминами // Журнал общей химии. – Т. 1, № 3. – С. 679 – 681.

146. Безденежных А.А. Инженерные методы составления уравнений скоростей реакций и расчета кинетических констант. – Л.: Химия, 1973. – 256 с.

147. Применение вычислительной математики в химической и физической кинетике / Под ред. Л.С. Полака. – М.: Наука, 1969. – 273 с.

148. Балакирев В.С., Володин В.М., Цирлин А.М. Оптимальное управление процессами химической технологии. – М.: Химия, 1978. – 384 с.

149. Straub D.A., Grossmann I.E. Design optimization of stochastic flexibility // Comput. Chem. Eng. – 1993. – V. 17, № 4. – P. 339 – 354.

150. Островский Г.М., Зиятдинов Н.Н., Лаптева Т.В. Оптимизация технических систем. – М.: КНОРУС, 2012. – 432 с.

151. Баранов Б.А., Бодров В.И., Дворецкий С.И. и др. Макрокинетика процесса растворения 3-нитро-4-амино-толуола // Кинетика и катализ. – 1984. – Т. 25, № 6. – С. 1457 – 1461.

152. Казаков А.С., Дворецкий С.И. Автоматизация периодических процессов в малотоннажной химии // Химикаты для полимерных материалов: Обзор. информация. – М.: НИИТЭХИМ, 1987. – 30 с.

153. Дульнев Т.Н., Заричняк Ю.П. Теплопроводность смесей и композиционных материалов. – М.: Энергия, 1974. – 264 с.

НАУЧНОЕ ИЗДАНИЕ

ДВОРЕЦКИЙ Дмитрий Станиславович,
ДВОРЕЦКИЙ Станислав Иванович,
ОСТРОВСКИЙ Геннадий Маркович

**НОВЫЕ ПОДХОДЫ К ПРОЕКТИРОВАНИЮ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ,
АППАРАТОВ И СИСТЕМ В УСЛОВИЯХ
ИНТЕРВАЛЬНОЙ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ**

Редактор Л.В. Комбарова

Инженер по компьютерному макетированию М.Н. Рыжкова

Сдано в набор 05.09.2012.

Подписано в печать 10.09.2012. Формат 60×84/16.

Бумага офсетная. Гарнитура Times New Roman. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 19,99. Уч.-изд. л. 21,5. Тираж 400 экз. Заказ № 478

ISBN 978-5-4442-0011-7



ООО «Издательский дом «Спектр»,
119048, Москва, ул. Усачева, д. 35, стр. 1
[Http://www.idspektr.ru](http://www.idspektr.ru). E-mail: idspektr@rambler.ru

Подготовлено к печати и отпечатано в Издательско-
полиграфическом центре ФГБОУ ВПО «ТГТУ»
392000, г. Тамбов, ул. Советская, д. 106, к. 14

По вопросам приобретения книги обращаться
по телефону 8(4752)638108

E-mail: izdatelstvo@admin.tstu.ru