Доклады Академии наук СССР
1974. Том 218, № 3

УДК 519.95 ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

Член-корреспондент АН СССР В. В. КАФАРОВ, В. Л. ПЕРОВ,
Д. А. БОБРОВ, В. В. СУЗДАЛЕВИЧ, Ю. В. ДМИТРИЕВ

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОПТИМАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Одной из задач проектирования химико-технологических систем (ХТС) является задача выбора оптимальной структуры технологических связей. В настоящее время разработаны методы синтеза структуры теплообменных подсистем химических производств, основанные на применении методов линейного ([1]) и эвристического ([2]) программирования. Эти методы предполагают совместный поиск оптимальных решений как на множестве технологических параметров элементов системы, так и на множестве параметров, определяющих структуру ХТС. Это приводит к синтезу такой схемы, которая, будучи оптимальной в целом, не обеспечивает оптимальности для отдельных подсистем, что является характерным свойством действующих и проектируемых ХТС ([3]).

В настоящей работе предлагается принцип построения оптимальной структуры ХТС, которая одновременно обеспечивает как оптимальность системы в целом, так и отдельных ее подсистем. При этом предполагается, что мы располагаем множеством оптимальных решений для типовых подсистем химических производств, из которых можно построить технологическую систему.

Рассмотрим аддитивный критерий оптимальности:

$$R(\bar{x},\bar{u})=\sum_{i=1}^{N} r_i(\bar{x}_i,\bar{u}_i), \tag{1}$$

где r_i — частный критерий i-го элемента; N — количество элементов системы; $\bar{x}_i$ — входной вектор в i-й элемент; $\bar{u}_i$ — внешние управляющие воздействия.

Вектор $\bar{u}\{\bar{u}_i\}$ $i=1, 2, \ldots, N$ — вектор внешних управляющих воздействий таких, как активность катализатора, температура окружающей среды и т. д.

Пусть r_i^* — оптимальное значение частного критерия i-го элемента, а соответствующие этому критерию векторы входа $\bar{x}^*_{i,1}\ldots\bar{x}^*_{i,n_i}$, тогда $\bar{y}^*_{i,1}, \bar{y}^*_{i,2}, \ldots, \bar{y}^*_{i,N_i}$ — векторы выходов из i-го элемента.

Векторы входов и выходов имеют следующие компоненты: (расход каждого реагента, температура, давление). Очевидно, если каждая подсистема ХТС будет иметь входы, соответствующие оптимальным значениям частного критерия оптимальности, то и схема будет оптимальной.

Полагаем, что каждый выход из подсистемы связан с каждым входом всех подсистем ХТС и обладает продувкой, а поступающее в систему сырье может подаваться на каждый вход, тогда оптимальная структура ХТС определяется решением следующей системы линейных уравнений:

$$x^*_{p,l}=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N_i} K^{p,l}_{i,j}\, y^*_{i,j}+K^{p,l}_0\, x_0, \quad p=1,2,\ldots,N; \quad l=1,2,\ldots,n_p; \tag{2}$$

где $K^{p,l}_{i,j}$ — неизвестные коэффициенты разделения потока, связывающего j-й выход i-ой подсистемы с l-м входом p-ой подсистемы; n_p — число входных потоков в подсистему p; N_i — число выходных потоков из подсистемы i; x_0 — внешний входной поток в систему; $K^{p,l}_0$ — коэффициент разделения входного потока, связывающий этот поток с l-м входом p-й подсистемы.

Число неизвестных M^*, которые входят в систему уравнений (2), равно:

$$M^*=\left(\sum_{i=1}^{N} n_i\right)\left(1+\sum_{i=1}^{N} N_i\right). \tag{3}$$

Количество уравнений, определяющих оптимальную технологическую систему, зависит от размерности входных векторов L_i в i-ую подсистему. Пусть L^* — максимальная размерность вектора входа, тогда, полагая часть компонентов равными нулю, будем считать, что повсюду в системе размерность вектора входа одинакова и равна L^*. В этом случае число уравнений F системы (2) будет:

$$F=L^*\sum_{i=1}^{N} n_i. \tag{4}$$

Условием существования хотя бы одного решения системы (2), а следовательно, и необходимым условием существования оптимальной технологической системы в смысле критерия (1), является выполнение неравенства $F\leqslant M^*$, т. е.

$$L^*\sum_{i=1}^{N} n_i\leqslant\left(\sum_{i=1}^{N} n_i\right)\left(1+\sum_{i=1}^{N} N_i\right). \tag{5}$$

отсюда

$$L^*\leqslant 1+\sum_{i=1}^{N} N_i. \tag{6}$$

Принимая во внимание, что $\sum\limits_{i=1}^{N} N_i$ — общее количество выходных потоков из всех элементов системы, можно сделать следующий вывод: если общее количество выходных потоков элементов системы плюс единица не больше максимальной размерности входных векторов элементов системы, то можно построить оптимальную схему. Решение системы (2) необходимо найти таким, чтобы коэффициенты разделения потоков $K^{p,l}_{i,j}$ были положительны и не превышали 1, так как отрицательные значения не имеют физического смысла, а $K>1$ требуют дополнительных источников материальных и тепловых потоков, т. е.

$$0\leqslant K^{p,l}_{i,j}\leqslant 1. \tag{7}$$

Помимо указанных выше ограничений, записываем ограничения по суммарному разделению каждого выходного потока:

$$\sum_{p=1}^{N}\sum_{l=1}^{n_k} K^{p,l}_{i,j}\leqslant 1,\quad i=1,2,\ldots,N;\quad j=1,2,\ldots,N_i. \tag{8}$$

Условие (8), в случае, когда левая часть меньше 1, означает, что в этом месте есть продувка, доля которой равна разности правой и левой частей условия (8). Таким образом, достаточным условием существования оптимальной системы является наличие решения системы линейных уравнений (2) с выполнением ограничений (7) и (8).

Для решения поставленной задачи предлагается следующий алгоритм:

Если $L^{*}=1+\sum\limits_{i=1}^{N} N_i$, то система (2) имеет единственное решение и, получив значения K_i^p, остается только проверить выполнение условий (7) и (8). При невыполнении условий (7) и (8) следует вывод, что из данного набора элементов оптимальную систему построить невозможно. В противном случае единственная оптимальная система получена.

Если $L^{*}<1+\sum\limits_{i=1}^{N} N_i$, то рассмотрим разность $M^{*}-F$, которая определяет количество переменных, позволяющих найти искомое решение.

Количество независимых переменных из $K_{i,j}^{p,l}$ равно:

$$M=\sum_{i=1}^{N} n_i\left(1+\sum_{i=1}^{N} N_i\right)-L^{*}\sum_{i=1}^{N} n_i. \tag{9}$$

Для того чтобы найти решение системы уравнений (2), принадлежащее области G, образованной условиями (7), (8), необходимо сформулировать следующую целевую функцию:

$$\varphi(K_{i,j}^{p,l})=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N_l} U_{i,j}^{2}(K_{i,j}^{p,l})+\sum_{i=1}^{N}\left[\sum_{j=1}^{N_l}\sum_{p=1}^{N}\sum_{l=1}^{n_k} f_{ij,p,l}^{2}(K_{i,j}^{p,l})\right], \tag{10}$$

где функции U и f определены следующим образом:

$$U_{i,j}=\begin{cases}0, & \text{если выполняется условие (8);}\\ \sum\limits_{i=1}^{N}\sum\limits_{l=1}^{n_k} K & \text{если условие (8) не выполняется.}\end{cases}$$

$$f_{i,j,p,l}=\begin{cases}0, & \text{при выполнении условий (7);}\\ K_{i,j}^{p,l}, & \text{при невыполнении условия (7).}\end{cases}$$

Очевидно, функция $\varphi(K_{i,j}^{p,l})=0$, когда точка $\{K_{i,j}^{p,l}\}$ принадлежит области G, т. е. выполняются достаточные условия существования оптимальной технологической схемы.

Поэтому, выбирая M независимых переменных и решая систему линейных уравнений (2), определяем остальные $K_{i,j}^{p,l}$; затем, подставляем полученные значения $\{K\}$ в (10), находим значения функции φ.

Решая задачу минимизации функции φ по M переменным, определяем оптимальную технологическую схему. Если $\min\varphi\neq 0$, то требуются дополнительные исследования, так как при заданном наборе элементов построить оптимальную схему невозможно.

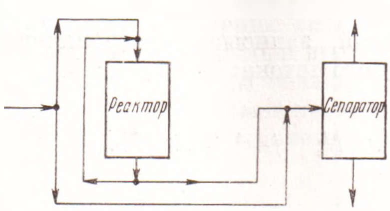

Рис. 1

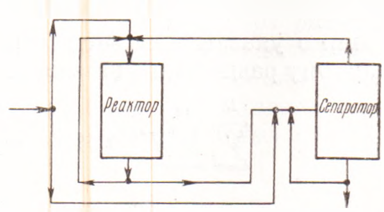

Рис. 2

Таблица 1

	Реактор		Сепаратор		
	вход	выход	вход	выход 1	выход 2
x_1	40	10	20	8	12
x_2	60	90	80	72	8
Общая нагрузка	100	100	100	80	20

При $\min \varphi=0$, что возможно, если точка $\{\overline{K}\}$ находится на границе или внутри области G, получаем оптимальную технологическую схему.

Область G представляет собой n-мерный многогранник, поэтому единственное решение может лежать только на одной из его вершин. Если же найдется хотя бы одно решение для внутренней точки из G, то, в силу непрерывности функции φ, можно найти множество $G_1 \in G$, для которого $\varphi=0$. В этом случае получается множество оптимальных схем, на котором можно поставить еще одну задачу оптимизации для выбора единственной схемы.

Тогда найденную внутреннюю точку из $G_1 \in G$ считаем начальной точкой и определяем оптимум нового критерия $R_1(K_{pl}^{ij})$ при $\{K\} \in G_1$, используя поиск безусловного минимума методами внутренней точки с введением «штрафных» функций ([4]).

Рассмотрим систему, состоящую из двух подсистем: реактора и сепаратора, работающую в изотермических условиях (табл. 1).

Пусть оптимальные режимы работы элементов в смысле некоторого критерия и с учетом технологических ограничений следующие: сырье $x_1=500$; $x_2=500$; общая нагрузка 1000, x_1 — количество первого компонента; x_2 — количество второго компонента (в усл. ед.).

В качестве иллюстрации приведем два решения, т. е. два варианта оптимальных систем:

полагая $K_{21}^{11}=K_{21}^{21}=K_{22}^{11}=K_{22}^{22}=0$,

получим $K_{11}^{11}=0{,}25$; $K_{11}^{21}=0{,}75$; $K_0^{11}={}^3/_{40}$; $K_0^{21}={}^1/_{40}$.

Полученная оптимальная схема представлена на рис. 1.

Задаемся $K_{22}^{11}=1$, $K_{22}^{21}=0$ и $K_{21}^{11}=0$ и подбираем по изложенному выше алгоритму значения остальных $\{\overline{K}\}$. В нашем случае: $K_{11}^{11}=0{,}3$; $K_{11}^{21}=0{,}7$; $K_{21}^{21}={}^1/_{16}$; $K_0^{11}={}^1/_{20}$; $K_0^{21}={}^1/_{40}$. Тогда оптимальная схема будет выглядеть, как показано на рис. 2.

Область G, образованная системой неравенств, выпуклая, поэтому можно построить бесчисленное множество оптимальных систем, для которых есть возможность выбрать наилучшую с точки зрения другого любого критерия.

Предложенный подход позволяет провести построение оптимальной технологической системы для аддитивного критерия и полностью формализован, что дает возможность реализовать его на ЭВМ.

Московский химико-технологический институт им. Д. И. Менделеева

Поступило 24 IV 1974

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] *S. T. Kobayashi, A. Umeda, A. Ichikawa,* Chem. Eng. Sci., v. 26, 1367 (1971). [2] *J. J. Siirola, C. J. Powers, D. F. Rudd,* Am. Inst. Chem. Eng. J., v. 17, 667 (1971). [3] *Leon S. Lasdon,* Optimization Theory for Large Systems, 1970. [4] *A. V. Fiacco, G. P. McCormick,* Sequential Unconstrained Minimization Techniques for Nonlinear Programming, N. Y., 1968.