

УДК 66-9+66.012.2

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

Академик К. А. АНДРИАНОВ, Б. А. КАМАРИЦКИЙ,
Б. И. ДЬЯЧЕНКО, В. Д. НЕДОРΟΣОЛ

ОБ ЭФФЕКТИВНОМ ЭКСПЕРИМЕНТИРОВАНИИ ПРИ МИНИМИЗАЦИИ РАСХОДА СЫРЬЕВЫХ КОМПОНЕНТОВ

При оптимизации существующих технологических процессов, как и при разработке новых, возникают такие ситуации, при которых объектом оптимизации становятся независимые переменные — факторы, при сохранении отклика постоянным. В частности, одной из таких задач является минимизация удельного расхода сырьевых компонентов (цель) при таких соотношениях этих компонентов (исследуемые факторы), чтобы обеспечить постоянный — максимальный — выход целевого продукта при условии протекания процесса в некритической зоне (ограничения).

Таким образом, оптимизации подлежит система, на исследуемые факторы которой формально наложено ограничение: $\sum_{i=1}^h X_i = 1, X_i \geq 0$. Зада-

чи такого типа, где переменные не являются независимыми, решаются либо при помощи планирования эксперимента на диаграммах состав свойства (планы Шеффе), либо исключением из рассмотрения одного из факторов (преобразованием барицентрической системы координат в декартову размерности $k-1$), а для новой системы с $k-1$ независимыми факторами в зависимости от ситуации применяются те или иные факторные методы оптимизации (¹).

Следует, однако, заметить, что рассматриваемый в данной работе класс задач характеризуется существенной нелинейностью поверхностей откликов (из-за неаддитивного вклада рассматриваемых факторов вследствие взаимодействий между ними) и наличием ограничений. Поэтому применение методов, предусматривающих нахождение математической модели (таких, как метод Бокса — Уилсона), становится весьма громоздким. Кроме того, применение таких методов проблематично вследствие неопределенности функции отклика: по существу подразумевается модель $Y = \text{const} \cong 100\% = f(X_1, X_2, \dots, X_j, \dots, X_k)$, а оптимизация в соответствии с целью должна проводиться на базе моделей типа

$$\sum_{i=1}^h X_i = f(X_1, X_2, \dots, X_j, \dots, X_k),$$

для которых нельзя обеспечить исходные предпосылки регрессионного анализа.

Построение же эмпирических моделей типа $X_i = f(X_2, X_3, \dots, X_j, \dots, X_k)$ или детерминированных моделей явлений переноса, основанных на физико-химических принципах, представляет отдельные задачи, и оптимизация удельного расхода сырьевых компонентов может быть выполнена только после соответствующего анализа этих моделей для всего факторного пространства (²).

Для решения подобного рода задач весьма перспективным, по нашему мнению, является применение последовательного симплексного метода оптимизации (п.с.м.), поскольку процедура нахождения градиента движения в факторном пространстве не требует построения математической

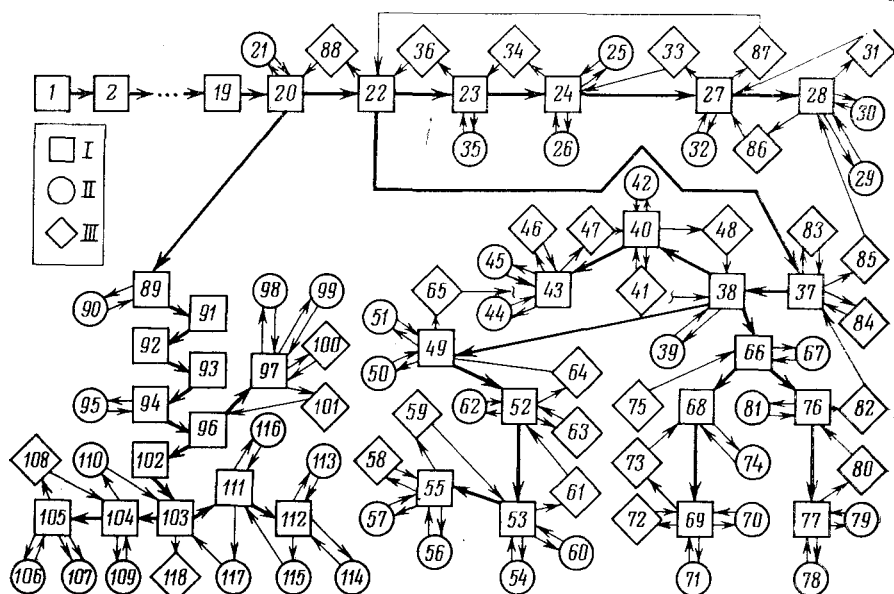


Рис. 1. Схема движения симплекса при оптимизации периодического процесса. I — симплексы на основном направлении; II — симплексы, в которых нарушены ограничения; III — симплексы, в которых происходили колебания и заикливания. Арабские цифры соответствуют порядковому номеру симплекса

модели и сводится лишь к сравнению вершин симплекса, в силу чего п.с.м. хорошо работает в условиях нелинейности. Кроме того, планы п.с.м. эффективны при решении задач с несколькими откликами и ограничениями и являются насыщенными, что существенно сокращает объем эксперимента ⁽³⁾.

Эффективность п.с.м. для рассматриваемой задачи минимизации удельного расхода сырьевых компонентов проверялась на примерах совмещенного процесса гидролитической поликонденсации и экстракции четырехкомпонентной смеси для существующего в промышленности периодического и разрабатываемого непрерывного процессов.

При оптимизации периодического процесса в соответствии с поставленной целью в качестве отклика был принят суммарный удельный расход растворителей по отношению к мономеру: $Y_1 = Z_1 + Z_2 + Z_3$ *, а в качестве исследуемых факторов — удельные расходы всех компонентов.

П.с.м. осуществлялся при наличии следующих ограничений: $Y_2 \approx 100\%$ — отсутствие брака в целевом продукте; Y_3 — реакционная смесь расслаивается на два слоя; Y_4 — целевой продукт в органической фазе. Технологические факторы — температура, скорость ввода реагентов, скорость перемешивания — фиксировались на определенном уровне.

Для реализации п.с.м. был выбран правильный симплекс с началом координат в центре тяжести симплекса. За центр плана была принята существующая промышленная рецептура (см. табл. 1).

После реализации исходного симплекса результаты анализировали с целью выявления наихудшей точки. Наихудшей считали точку с максимальным удельным расходом растворителей. Отражение ее относительно центра противоположной грани симплекса производили по известным формулам ⁽⁴⁾. При нарушении ограничений отражали в предыдущем симплексе худшую точку, не считая наихудшей. Описанную процедуру

* Z_4 — удельный расход воды не минимизировался, так как влияние его на стоимость продукта незначительно.

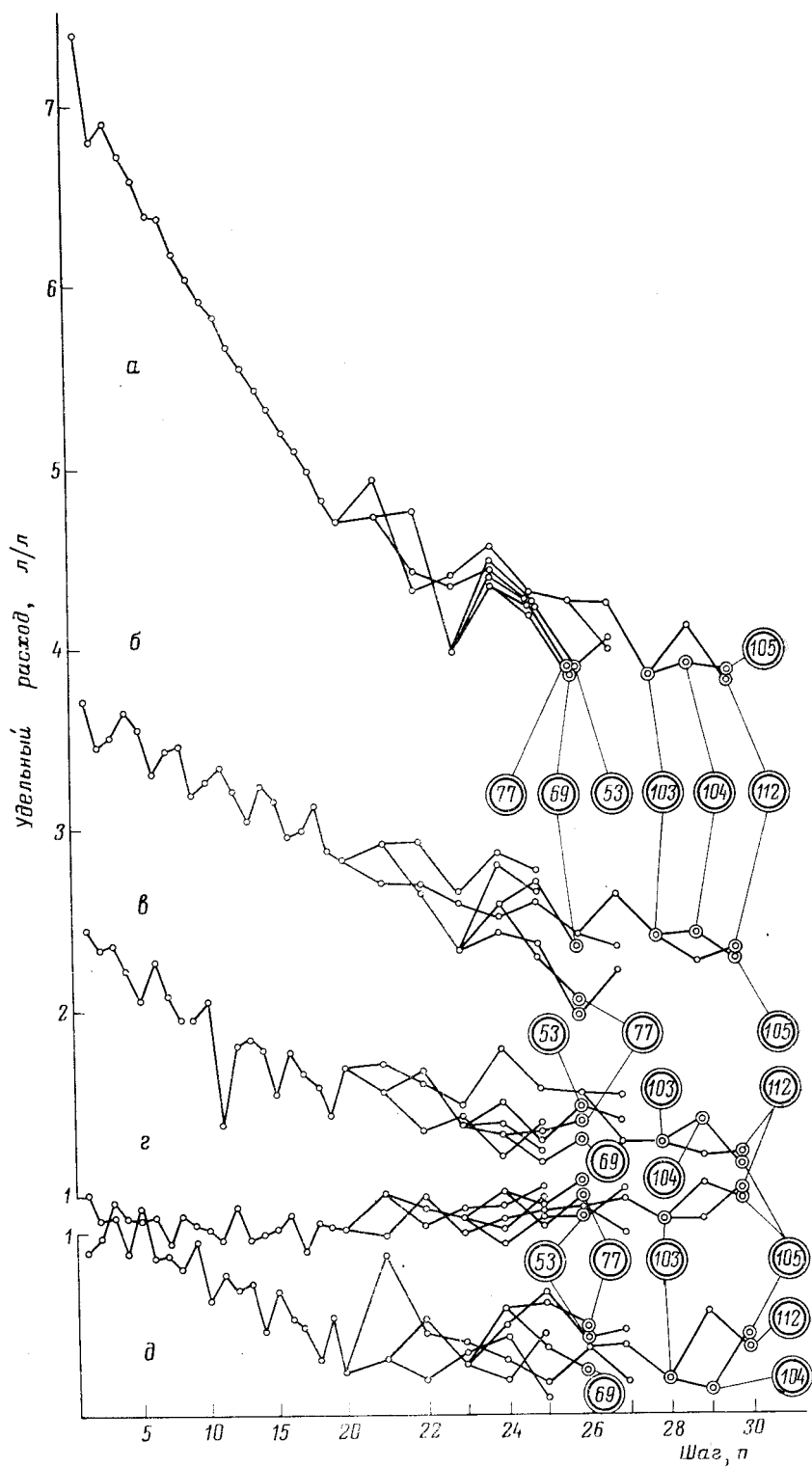


Рис. 2. Дрейф отклика и факторов при оптимизации периодического процесса. *a* — Y , *б* — Z_1 , *в* — Z_3 , *г* — Z_4 , *д* — Z_2

Таблица 1

Натуральные значения факторов и интервалы при варьировании

Обознач.		Удельный расход компонента	Нулевой уровень		Интервал варьиров.	
код.	натур.		период. * процесс	непрер. ** процесс	период. процесс	непрер. процесс
X_1	Z_1	А, ввод с мономером	3,700	3,000	0,333	0,500
X_2	Z_2	А, ввод с водой	1,200	—	0,333	—
X_3	Z_3	Б, ввод с мономером	2,440	1,000	0,333	0,519
X_4	Z_4	Вода	1,000	2,000	0,200	0,490

* $Y_0 = Z_{1,0} + Z_{2,0} + Z_{3,0} = 7,340$.** $Y_0 = Z_{1,0} + Z_{3,0} = 4,0$.

выполняли до получения минимального значения отклика. С целью выяснения, не является ли данный оптимум локальным, симплекс-процедуру повторяли из различных точек факторного пространства.

Схема движения правильного симплекса в процессе оптимизации представлена на рис. 1. Построение такой схемы непосредственно в процессе оптимизации позволяет, во-первых, получить информацию о том, насколько полно реализованы все возможные направления в исследуемом факторном пространстве; во-вторых, предупредить ошибки, которые могут возникнуть при отражении вершин, особенно в случаях попадания в область ограничений или при возникновении колебаний и заикливаниях. Как видно из рис. 1, перемещение симплекса проходило по четырем основным направлениям, в результате чего было получено семь точек (53, 69, 77, 103, 104, 105, 112) с практически одинаковым удельным расходом растворителей (3,83).

Анализ полученных данных показывает (рис. 2), что этот минимальный расход достигнут при одинаковых значениях Z_1 , Z_2 и Z_3 в пределах интервалов варьирования, что позволяет сделать вывод о достижении истинного оптимума. Кроме того, при рассмотрении дрейфа отклика и факторов в процессе оптимизации (рис. 2) видно, что уменьшение отклика достигалось за счет уменьшения факторов Z_1 , Z_2 и Z_3 при незначительном увеличении фактора Z_4 .

Таким образом, в результате оптимизации периодического процесса было достигнуто уменьшение удельного расхода растворителей в $7,34:3,83=1,92$ раза, в том числе по Z_1 в $3,70:2,23=1,66$ раза, по Z_2 в $1,20:0,30=3,96$ раза, по Z_3 в $2,44:1,30=1,88$ раза, за 26—30 шагов по каждому направлению.

Оптимизация непрерывного процесса. Предварительные исследования показали, что проведение процесса без брака возможно лишь при введении компонентов А и Б с мономером. Поэтому, в соответствии с целью, в качестве отклика был принят суммарный удельный расход растворителей А и Б при вводе их с мономером. Симплекс-процедура осуществлялась при наличии тех же ограничений, что и в периодическом процессе. Натуральные значения факторов в центре плана и интервалы их варьирования приведены в табл. 1. В результате оптимизации за 6 шагов была получена одна точка с минимальным расходом растворителей А и Б, равным 2,17 и 0,64 соответственно. Достигнуто уменьшение удельных расходов растворителей А в $4,90:2,17=2,25$ раза и Б в $2,44:0,64=3,81$ раза.

Московский институт тонкой
химической технологии
им. М. В. Ломоносова

Поступило
4 VII 1975

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

¹ Применение математических методов для исследования многокомпонентных систем, М., «Металлургия», 1974. ² Д. Химмельблау, Анализ процессов статистическими методами, М., «Мир», 1973. ³ В. Г. Горский, Ю. П. Адлер, Планирование промышленных экспериментов, М., «Металлургия», 1974. ⁴ В. Б. Тихомиров, Планирование и анализ эксперимента, М., «Легкая индустрия», 1974.