ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА АДСОРБЦИИ ОТРАБОТАННЫХ МАСЕЛ СОРБЕНТАМИ МЕСТОРОЖДЕНИЯ ШАРШАР РЕСПУБЛИКИ ТАДЖИКИСТАН

OPTIMIZATION OF ADSORPTION ACTIVITY OF CLAY SORBENTS OF THE SARSHAR DEPOSIT OF THE REPUBLIC OF TAJIKISTAN

A. Sokhibov
I. Lee

Summary. The purpose of the study is to optimize the adsorption pattern of the clay sorbents of the Sharshar deposit of the Republic of Tajikistan. For solving optimization issues, the Minimize function of the mathematical package MathCAD is used. There is determined the quantity of consumption of sorbent for purifying the used oil depending on the moisture content of the acid-activated sorbent, particle size distribution of the sorbent and acid activation of the sorbent. There were determined close to the optimal parameters for the adsorption process during the purification of used industrial oils I-20 by sorbents of the Sharshar deposit of the Republic of Tajikistan. For the implementation of the software system there is used development environment MathCAD.

Keywords: optimization, adsorption, sorbent, gradient method, mathematical model, used oil, numerical methods, acid activation.

Сохибов Авас Бобоевич
Ст. преподаватель, Таджикский технический университет им. М. С. Осими, г. Душанбе, Республика Таджикистан
absohibov@mail.ru
Ли Игорь Тхя-Дюнович
К.т.н., доцент, Российско-Таджикский (Славянский) университет, г. Душанбе, Республика Таджикистан
leer1942@mail.ru

Аннотация. Целью исследования является оптимизация модели адсорбционной активности глинистых сорбентов месторождения Шаршар Республики Таджикистан. Для решения задач оптимизации использована функция Minimize программного пакета MathCAD. Определен расход сорбента на очищаемое отработанное масло в зависимости от влажности кислотноактивированного сорбента, гранулометрического состава сорбента и кислотной активация сорбента. Определены близкие к оптимальным параметры для процесса адсорбции при очистке отработанных индустриальных масел И-20 сорбентами месторождения Шаршар Республики Таджикистан. Для реализации программного комплекса использована среда разработки MathCAD.

Ключевые слова: оптимизация, адсорбция, сорбент, градиентный метод, математический модель, отработанное масло, численные методы, кислотная активация.

Введение

При решении задач оптимизации [1] редко удается воспользоваться аналитическими методами, так как аналитические решения возможны лишь в редких случаях при решении инженерных задач, когда оптимизируемые функции представлены в аналитической форме. Кроме того, математические модели часто задаются не в виде формул, а с помощью оператора и нахождения значений функций $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ осуществляют алгоритмически, путем вычисления по некоторому, например, итерационному алгоритму. В этом случае применение аналитических методов невозможно.

Методы оптимизации процесса адсорбции отработанных масел

Численные методы оптимизации многообразны [1] и их можно классифицировать следующим образом:

- Методы направленного поиска экстремума.
- Методы случайного поиска экстремума.

Остановимся на методах направленного поиска экстремума.

Среди них можно выделить следующие виды:

- Методы нулевого порядка, или методы поиска. Эти методы требуют для своей реализации только вычисления значений функции.
- Методы первого порядка, или градиентные методы. Данные методы требуют для своей реализации вычисления значений функции и ее первых производных.
- Методы второго порядка, или методы Ньютона. Указанные методы требуют для реализации дополнительной информации о вторых производных.

Необходимо отметить, что при численном вычислении производных с помощью конечных разностей все эти методы можно трактовать как методы поиска.

В теории оптимизации функция $f(x)$, описывающая некоторый процесс на множестве $S \subset R$, где S — область допустимых значений x множества R, называется целевой функцией.

Ряд физических процессов можно описать с помощью непрерывных функций, т.е. функций, которые обладают свойством непрерывности в каждой точке $\boldsymbol{x}_i$, принадлежащей областям их определения.

Функция $f(x)$ является монотонной (как при возрастании, так и при убывании), если для двух произвольных точек x_1 и x_2 таких, что $x_1 \leq x_2$, выполняется одно из следующих неравенств: $f(x_1) \leq f(x_2)$ (монотонно возрастающая функция) или $f(x_1) \geq f(x_2)$ (монотонно убывающая функция).

Функция $f(x)$ является унимодальной на отрезке $a \leq x \leq b$ в том и только в том случае, если она монотонна по обе стороны от единственной на рассматриваемом интервале оптимальной точки x^*. Другими словами, если x^* — единственная точка минимума ***f(x)*** на отрезке $a \leq x \leq b$, то $f(x)$ оказывается унимодальной на данном интервале тогда и только тогда, когда для точек x_1 и x_2 :

из $x^* \leq x_1 \leq x_2$ следует, что $f(x^*) \leq f(x_1) \leq f(x_2)$;

из $x^* \geq x_1 \geq x_2$ следует, что $f(x^*) \geq f(x_1) \geq f(x_2)$.

Унимодальная функция необязательно должна быть непрерывной. ***Унимодальность*** функций является исключительно важным свойством, которое широко используется в оптимизационных исследованиях.

Важнейшей задачей применения расчетных методов при компьютерном моделировании химико-технологических процессов (ХТП) является определение оптимальных, т.е. наилучших условий их функционирования [2, 5, 6, 7, 8].

Решение экстремальной задачи заключается в нахождении совокупности значений независимых (оптимизирующих или управляющих) переменных, при которой заданная целевая функция этих переменных имеет максимальное или минимальное значение. Для решения таких задач разработано много математических методов, отличающихся стратегией поиска экстремума.

В дальнейшем полагают, что всегда ищется экстремум, являющийся минимумом заданной целевой функции многих переменных. Задача на поиск максимума сводится к задаче на поиск минимума простым изменением знака функции.

Существуют два типа задач оптимизации: безусловные и условные [2].

Безусловная задача оптимизации состоит в отыскании минимума или максимума действительной функции от ***n*** действительных переменных и определении соответствующих значений аргументов.

$$min\ R(\bar{x})$$

Условные задачи оптимизации, или задачи с ограничениями заключаются в отыскании экстремума целевой функции при заданных ограничениях в виде равенств и (или) неравенств. Ограничения могут быть линейными и (или) нелинейными. Математически задача условной оптимизации формулируется следующим образом:

Найти $f(x) \rightarrow min$ при ограничениях:

$$\varphi_i(x) = 0, \quad i = 1...I$$
$$g_j(x) \leq 0, \quad j = 1...J$$

Решение задач оптимизации, в которых критерий оптимальности является линейной функцией независимых переменных с линейными ограничениями на них, составляет предмет линейного программирования [2]. Предметом нелинейного программирования является решение задач оптимизации, в которых критерий оптимальности является нелинейной функцией независимых переменных с нелинейными ограничениями на неё.

Предполагают [2], что через точку x^{opt} в n — мерном пространстве, соответствующую оптимальному решению задачи, например, минимуму целевой функции, проведена двухмерная плоскость P. Тогда при удалении от точки xo^{pt} по этой плоскости в любом направлении значение $R(x)$ увеличивается. Если $R(x)$ является непрерывной функцией в области X, то вокруг точки xo^{pt} в данной плоскости всегда можно провести замкнутую линию, вдоль которой значение $R(x)$ постоянно. Таких замкнутых линий, называемых линиями постоянного уровня функции $R(x)$ и отвечающих различным значениям $R(x) = c\ k$ можно провести в плоскости P вокруг точки xo^{pt} сколько угодно, причем каждая из этих линий для точки минимума будет целиком охватывать любую линию, для которой значение функции $R(x)$ меньше. Форма линий постоянного уровня, соответствующих разным значениям с k при этом может существенно различаться. При наличии ограничений типа равенств рассмотренный прием изображения целевой функции также можно использовать, если принять во внимание, что каждое из уравнений определяет в n — мерном пространстве $(n\text{-}1)$ — мерную поверхность, пересечение которой с двухмерной плоскостью P имеет вид некоторой линии, вдоль которой и ищется оптимальное решение.

Поиск оптимальной области влияющих факторов на процесс адсорбции проводится следующим образом

[3, 4]. Сначала определяют тип поверхности функции отклика. Оценку производят по полученному уравнению регрессии: одинаковые знаки при квадратах переменных в уравнении свидетельствуют о поверхности отклика типа «вершина»; разные знаки при квадратах переменных в уравнении регрессии свидетельствуют о поверхности отклика типа «седло». В случае, когда поверхность отклика представляет собой «вершину», поиск оптимума процесса ведется в точке максимума функции. Необходимо учитывать, что оптимизация процесса является ограниченной, поскольку влияющие факторы и функции отклика могут изменяться только в определенных пределах. Оптимум в точке экстремума находится путем определения частных производных функции с последующим приравниванием их к нулю и решением полученной системы уравнения. В случае, когда поверхность отклика представляет собой «седло», оптимум процесса определяется следующим образом: находится промежуточный оптимум по переменным без квадратов с учетом ограничений, накладываемых на исследуемый фактор, после чего оптимумы фиксируются путем подстановки в уравнение регрессии.

Для решения задач оптимизации в **MathCAD** имеются две встроенные функции: **Minimize** и **Maximize** [2]. Они относятся к категории функций **Solving** и реализуют процедуру поиска экстремума функции многих переменных, как при наличии, так и при отсутствии ограничений на комбинации последних. Функции в задачах оптимизации могут быть как линейными, так и нелинейными (например, квадратичными). Поэтому при использовании встроенных функций **Minimize** и **Maximize** предусмотрен выбор метода оптимизации (например, метод сопряженных градиентов и метод Ньютона для нелинейных функций), для чего необходимо нажать правую кнопку мыши при наведении курсора на логин **Minimize** или **Maximize**.

Градиентные методы, в частности метод наискорейшего спуска, обладают линейной скоростью сходимости [9]. Метод Ньютона обладает квадратичной скоростью сходимости. Применение метода Ньютона оказывается очень эффективным при условии, что выполняется необходимые и достаточные условия его сходимости. Однако само исследование необходимых и достаточных условий сходимости метода в случае конкретной $f(\overline{x})$ может быть достаточно сложной задачей.

В данной работе для решения задач оптимизации используется функция ***Minimize*** программного пакета ***MathCAD***

Синтаксис функции **Minimize**:

$$Minimize(f, x_1, x_2, \dots, x_n),$$

где f — критерий оптимизации, оформленный как целевая функция пользователя; $x_1, \dots, x_n$ — влияющие факторы.

Функция ***Maximize*** записывается аналогично. Технология использования функций ***Minimize*** и ***Maximize*** выглядит следующим образом:

1. Задается критерий оптимизации (целевая функция, которую нужно минимизировать или максимизировать);
2. Задается начальное приближение для влияющего фактора (для функции одной переменной) или начальные приближения (для функции многих переменных);
3. Если решается оптимизационная задача с ограничениями на управляющие переменные, то для ввода ограничений используется блок ***Given***;
4. Вызывается встроенная функция ***MathCAD Minimize*** или ***Maximize***.

Задается целевая функция (1)

где $x1$ — влажность кислотноактивированного сорбента (в % масс), $x2$ — гранулометрический состав сорбента (в мм), $x3$ — кислотная активация сорбента (в % масс).

Задаются начальные приближения:

$x1{:=}5 \quad x2{:=}0.34 \quad x3{:=}15$

Для ввода ограничений используется блок ***Given***

Given
$3 \le x1 \le 7$
$0.17 \le x2 \le 0.51$
$10 \le x3 \le 20$

Вызывается встроенная функция ***MathCAD Minimize***

$p{:=}Minimize(g1, x1, x2, x3)$

$$p = \begin{bmatrix} 4.65 \\ 0.17 \\ 15.63 \end{bmatrix}$$

$$g(x1,x2,x3) = 15{,}38 + 4{,}99 \cdot \frac{x_1 - 5}{2} + 4{,}18 \cdot \frac{x_2 - 0{,}34}{0{,}17} - 1{,}34 \cdot \frac{x_3 - 15}{5} + 14{,}31 \cdot \left(\frac{x_1 - 5}{2}\right)^2 - 0{,}38 \cdot \left(\frac{x_2 - 0{,}34}{0{,}17}\right)^2 + 5{,}3 \cdot \left(\frac{x_3 - 15}{5}\right)^2 \quad (1)$$

Вычисляется расход сорбента на очищаемое отработанное масло L (в %масс) в зависимости от влажности кислотноактивированного сорбента p_1 (в %масс), гранулометрического состава сорбента p_2 (в мм) и кислотной активация сорбента p_3 (в %масс) (2).

Заключение

Выполнена оптимизация полученной регрессионной модели методом сопряженных градиентов с использованием встроенной функции ***Minimize*** математического пакета ***MathCAD***. Функции в задачах оптимизации могут быть как линейными, так и нелинейными (например, квадратичными). Поэтому при использовании встроенных функций ***Minimize*** и ***Maximize*** предусмотрен выбор метода оптимизации (например, метод сопряженных градиентов и метод Ньютона для нелинейных функций).

Определены близкие к оптимальным параметры для процесса адсорбции при очистке отработанных индустриальных масел И-20 сорбентами месторождения Шаршар Республики Таджикистан.

Определен расход сорбента на очищаемое отработанное масло L в зависимости от влажности кислотноактивированного сорбента x_1, гранулометрического состава сорбента x_2 и кислотной активация сорбента x_3.

$$L := 15{,}38 + 4{,}99 \cdot \frac{p_1 - 5}{2} + 4{,}18 \cdot \frac{p_2 - 0{,}34}{0{,}17} - 1{,}34 \cdot \frac{p_3 - 15}{5} + 14{,}31 \cdot \left(\frac{p_1 - 5}{2}\right)^2 - 0{,}38 \cdot \left(\frac{p_2 - 0{,}34}{0{,}17}\right)^2 + 5{,}3 \cdot \left(\frac{p_3 - 15}{5}\right)^2 \tag{2}$$

$L := 10.3$

ЛИТЕРАТУРА

1. Кудрявцева, И. В. Методы оптимизации в примерах в пакете MathCAD15. Ч. 1: учебное пособие /И.В. Кудрявцева, С. А. Рыков, С. В. Рыков, Е. Д. Скобок — СПб.: НИУ ИТМО, ИХиБТ, 2014.— 166 с.
2. Липин А. А. Системный анализ и методы химической кибернетики: учебное пособие /А.А. Липин.— ИГХТУ, 2014.— 92 с.
3. Никонова, А. С. Совершенствование процесса получения коптильной жидкости с применением ультразвука: дис. … канд. тех. наук: 05.18.12. /Никонова Антонина Сергеевна.— Мурманск, 2015.— 242 с.
4. Ахназарова С. Л. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии \С.Л. Ахназарова, В. В. Кафаров.— М. Высш. шк., 1978.— 213 с.
5. Павлов, К. Ф. Примеры и задачи по курсу процессов и аппаратов химической технологии /К.Ф. Павлов, П. Г. Романков, А. А. Носков.— М.: ООР «РусМедиаКонсалт», 2004.-576 с.
6. Касаткин, А. Г. Основные процессы и аппараты химической технологии /А.Г. Касаткин.— М.: Альянс, 2004.— 751 с.
7. Самойлов, Н. А. Формирование оптимального рабочего пространства в адсорберах с неподвижным и движущимся слоем адсорбента /Н.А. Самойлов // Журн. прикладной химии.— 2001.— Т. 74, № 10.— С. 1655–1663.
8. Митягин, Д. Н. Разработка метода оптимизации адсорбционной установки /Д.Н. Митягин, Н. В. Заиченко, Н. А. Самойлов //58-я научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых: сб: тез. докл. УГНТУ.— Уфа, 2008.— Кн.2.— С. 28
9. Лемешко, Б. Ю. Методы оптимизации: конспект лекций /Б.Ю. Лемешко.— Новосибирск: Издательство НГТУ, 2009.— 126 с.

Журнал «Современная наука: актуальные проблемы теории и практики»