

Міністерство освіти і науки України
Національний технічний університет України «КПІ»
Хіміко-технологічний факультет НТУУ «КПІ»

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В ХІМІЇ, ТЕХНОЛОГІЯХ І СИСТЕМАХ СТАЛОГО РОЗВИТКУ

Київ 13-15 травня 2014 року

ЗБІРНИК НАУКОВИХ СТАТЕЙ

Четвертої міжнародної
науково-практичної конференції



Київ – 2014

УДК 004.94(082)
ББК 32.97я43
К63

Друкується за рішенням Вченої Ради Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут» Міністерства освіти і науки України

Відповідальні за випуск

Т.В. Бойко
Ю.О. Безносик

Редакційна колегія

Кандидат технічних наук, доцент Бойко Т.В.
Кандидат технічних наук, доцент Безносик Ю.О.
Кандидат технічних наук, доцент Бугаєва Л.М.

Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку – КМХТ-2014: Збірник наукових статей Четвертої міжнар. наук.-практ. конф. – Київ: НТУУ «КПІ», 2014 – 326 с.

ISBN 978-617-696-221-2

Збірник містить наукові статті Четвертої міжнародної науково-практичної конференції «Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку – КМХТ-2014» за такими основними напрямками: комп'ютерна підтримка виробничих процесів, комп'ютерне моделювання хіміко-технологічних та біохімічних процесів і систем, комп'ютерне моделювання в хімії та комп'ютерні методи синтезу нових речовин, комп'ютерне моделювання природоохоронних процесів, сталий розвиток регіонів, комп'ютерно-інформаційні технології в багаторівневій вищій освіті.

Доповіді рецензовані і редаговані Програмним комітетом конференції КМХТ-2014.

ISBN 978-617-696-221-2

© Автори тез доповідей, 2014
© Національний технічний університет України
«КПІ», укладання, оформлення, 2014

ОПТИМІЗАЦІЯ ЗВОРотноОСМОТИЧНОЇ ПІДСИСТЕМИ ПІДГОТОВКИ ВОДИ ДЛЯ ПОТРЕБ ХАРЧОВИХ ПІДПРИЄМСТВ

Білоус Г.М., Квітка О.О., Шахновський А.М., Малецький З.В.

ОПТИМИЗАЦИЯ ОБРАТНООСМОТИЧЕСКОЙ ПОДСИСТЕМЫ ПОДГОТОВКИ ВОДЫ ДЛЯ НУЖД ПИЩЕВЫХ ПРЕДПРИЯТИЙ

Белоус А.Н., Квитка А.А., Шахновский А.М., Малецкий З.В.

OPTIMIZATION OF REVERSE OSMOSIS SUBSYSTEM FOR WATER TREATMENT FOR THE FOOD ENTERPRISES NEEDS

Bilous H., Kvitka O., Shakhnovsky A., Maletskyi Z.

Національний технічний університет України «КПІ», Київ, Україна
annbilous@ukr.net

Робота присвячена розв'язанню задачі оптимального проектування підсистеми зворотноосмотичної демінералізації води. В основу процедури оптимізації покладено задачу нелінійного умовного програмування, складену на базі математичного опису процесу розділення на мембранному елементі, та алгоритм послідовного квадратичного програмування для вирішення вказаної задачі нелінійного програмування. Наведено приклад розрахунку підсистеми для заводу з виробництва пива та безалкогольних напоїв.

Ключові слова: водопідготовка, оптимізація, підсистема демінералізації води, зворотний осмос, нелінійне умовне програмування, харчова промисловість

Работа посвящена решению задачи оптимального проектирования подсистемы обратноосмотической деминерализации воды. В основу процедуры оптимизации положена задача нелинейного условного программирования, составленная на базе математического описания процесса разделения на мембранном элементе, и алгоритм последовательного квадратичного программирования для решения указанной задачи нелинейного программирования. Приведен пример расчета подсистемы для завода по производству пива и безалкогольных напитков.

Ключевые слова: водоподготовка, оптимизация, подсистема деминерализации воды, обратный осмос, нелинейное условное программирование, пищевая промышленность

The paper addresses the problem of optimal design of reverse osmosis subsystem for water demineralization. The design procedure is based on constrained nonlinear programming model as well as the mathematical model of the separation process on the membrane element. The design procedure uses Sequential Quadratic Programming algorithm to solve nonlinear programming problem mentioned above. The case study of design of water treatment subsystem for the beer and soft drinks production plant was presented.

Keywords: water treatment, optimization, subsystem water demineralization, reverse osmosis, conventional nonlinear programming, food industry

В останні роки стан здоров'я населення України погіршився, демографічна ситуація в країні оцінюється як кризова. На сьогодні 80% захворювань в Україні певним чином пов'язані із харчуванням. Нераціональне та незбалансоване харчування на фоні тривалого дефіциту у раціонах якісної питної води, є одним з найважливіших

факторів ризику у виникненні комплексу аліментарних чинників, які обумовлюють високий ризик розвитку поширених хронічних неінфекційних захворювань [1, 2].

Тому якість води, що використовується для виробництва пива та безалкогольних напоїв, повинна суворо відповідати всім нормативним документам, які діють у водопостачанні питної води. Технологічна вода повинна мати не тільки добрі органолептичні властивості, але й збалансований фізико-хімічний склад, який не впливає негативно на технологічні процеси (пивоваріння). Технологічною інструкцією з водопідготовки лімітуються багаточисельні показники складу води. У порівнянні з водопровідною водою корекції потребують нітрати, жорсткість, лужність, вміст магнію та кальцію [3]. І це все не враховуючи шкідливих для здоров'я людини тяжких металів і хлорорганічних сполук. Як правило, в залежності від джерел водопостачання та домішок, що вони містять, вода очищається спочатку одним з методів передпідготовки, вибір якого залежить від складу води, а потім застосовується очищення підготовленої води методом зворотного осмосу [4].

В даній роботі розглянуто задачу проектування оптимальної підсистеми підготовки води на основі процесу зворотного осмосу для потреб харчових підприємств. В якості цільової функції Z використано суму приведених капітальних і експлуатаційних витрат. Капітальні витрати залежать від структури розташування і типів елементів, що застосовуються в системі, на які в свою чергу впливає концентрація вхідної води [5]. Вони визначаються вартістю та кількістю мембранних елементів і мембранотримачів в системі. Експлуатаційні витрати – це витрати на електроенергію і вихідну воду та на утримання мембранних елементів. Постановка задачі оптимізації може бути сформульована наступним чином:

$$\begin{aligned} \min Z(Q_f, m_i) = & \\ = & \frac{\sum_{i=1}^N (0.33 \cdot n_i(Q_f) \cdot m_i \cdot c_{iA} + 0.1 \cdot n_i(Q_f) \cdot c_{iO} + n_i(Q_f) \cdot m_i \cdot c_{iI})}{Q_p \cdot 8400} + \\ & + \frac{Q_f \cdot c_{AA} + W(m_i) \cdot c_e}{Q_p} \end{aligned} \quad (1)$$

При обмеженнях:

$$\begin{cases} 1 \leq m_i \leq 6 \\ 1 \leq N \leq 6 \\ C_p(Q_f, m_i) \leq C_{pmax}, \quad i = 1, \dots, N \\ P_f(m_i) \leq P_{fmax} \\ Q_f \cdot \frac{Y_i(m_i)}{100\%} = Q_p \end{cases} \quad (2)$$

де W – потужність яку потрібно затратити насосу ($W = Q_f \cdot \frac{P_f}{\eta}$ в $m^3 \cdot бар/год$ з

врахуванням переведень величин $W = \frac{Q_f}{3600} \cdot \frac{P_f \cdot 10^5}{\eta} \cdot 10^{-3}$ в $[m^3 / c \quad H/m^2 \cdot 10^{-3} = m \cdot H/c \cdot 10^{-3}$

$= Bm \cdot 10^{-3} = \kappa Bm]$), κBm ; N – кількість підстадій у стадії; m_i – кількість послідовно з'єднаних елементів мембранних елементів i -ої підстадії; n_i – кількість паралельно з'єднаних мембранних модулів у підстадії; c_{el} – приведена вартість мембранних елементів, $\$/рік$; c_e – вартість електроенергії, $\$/\kappa Bm$; c_{oe} – вартість обслуговування мембран, $\$/m^2$; F_e – ефективна площа мембранного елемента, m^2 .

В якості математичної моделі процесу розділення на мембранному елементі (рис. 1) було обрано дифузійну модель Кімури-Соуріраджана [6]:

$$\left\{ \begin{array}{l} P_f = \frac{Q_p}{F_e \cdot FF \cdot a} + \frac{\Delta P_{fc}}{2} + P_p + [\pi_c - \pi_p] \\ \frac{C_{fc}}{C_f} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1 - Y(1 - R)}{1 - Y} \right) \\ Y = \frac{Q_p}{Q_f} \\ R = 1 - \frac{C_p}{C_f} \\ \pi_f = 0,7978C_f - 0,002C_f^2 + 7 \cdot 10^5 C_f^3 - 6 \cdot 10^7 C_f^4 \\ \pi_c = \pi_f \frac{C_{fc}}{C_f} p_f \\ a = a(\pi_c) \\ \Delta P_{fc} = \lambda \left(\frac{Q_f + Q_c}{2\rho} \right)^\alpha \\ C_p = \frac{C_f Q_f - C_c Q_c}{Q_p} \end{array} \right. \quad (3)$$

де P_f – тиск вхідного потоку, Па; Q_p – витрата пермеату через мембрану, кг/с; F_e – активна площа мембрани, м²; FF – коефіцієнт засміченості мембрани; α – проникність розчинника через мембрану, кг/м²·с·Па; ΔP_{fc} – перепад тиску вхідного потоку, Па; P_p – результуючий тиск пермеату, Па; π_c – трансмембранний перепад осмотичного тиску зі сторони концентрату, Па; π_p – трансмембранний перепад осмотичного тиску зі сторони пермеату, Па; C_{fc} – концентрація потоку поблизу стінки зі сторони концентрату, кг солі на кг розчину; C_f – концентрація солей у вхідному потоці, кг солей на кг розчину; Y – показник конверсії мембрани; R – показник солевиділення мембрани; Q_f – масова витрата вхідного потоку, кг/с; C_p – концентрація солей (загальний солевміст) пермеату, кг солей на кг розчинника; C_f – концентрація солей у вхідному потоці, кг солей на кг розчину; π_f – осмотичний тиск, Па; p_f – концентраційна поляризація для мембран фірми *Filmtec*; $\lambda = 9.56 \times 10^8$; $\alpha = 1.7$; ρ – густина розчину величина постійна, і дорівнює 1000 кг/м³.

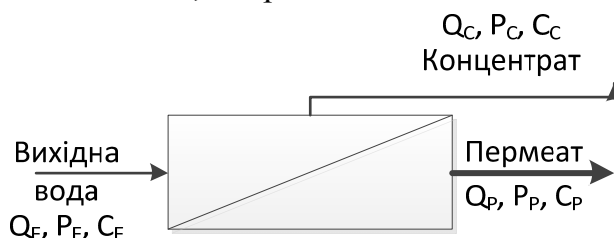


Рис. 1. Процес розділення на мембранному елементі

Ця модель базується на наступних припущеннях:

1. В будь-якій точці шару мембрани температура однакова і дорівнює температурі вхідної води.
2. Концентрація речовин в будь-якій точці на поверхні мембрани також однакова.
3. Густина розчину величина постійна, і дорівнює 1000 кг/м³.

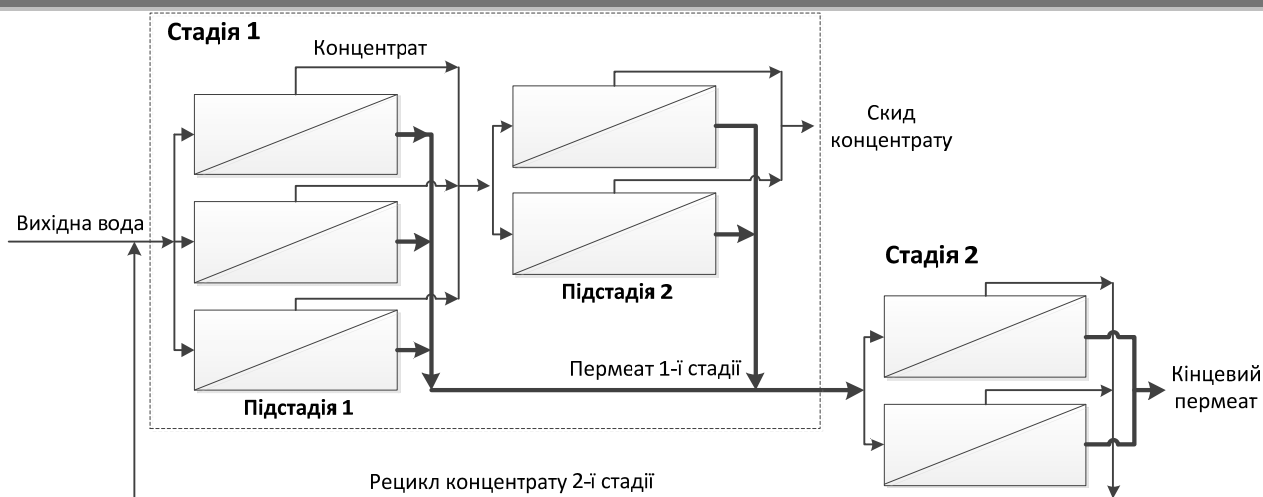


Рис. 2. Приклад підсистеми мембранної демінералізації води

Модель зворотноосмотичної підсистеми демінералізації води (приклад наведено на рис. 2) побудована на основі її матеріальних балансів і має вигляд:

$$\begin{cases} Q_f = Q_c + Q_{p1} & Q_f \cdot C_f + Q_{c2} \cdot C_{c2} = (Q_f + Q_{c2}) \cdot C_{fc2} \\ Q_{p1} = Q_{c2} + Q_p & \frac{Q_{c2}}{Q_{p1}} = \left(\frac{C_{c2}}{C_{p1}} \right)^{-1/R} \\ Q_f \cdot C_f = Q_c \cdot C_c + Q_{p1} \cdot C_{p1} & Q_p = Y \cdot Q_f \\ Q_{p1} \cdot C_{p1} = Q_{c2} \cdot C_{c2} + Q_p \cdot C_p & \end{cases} \quad (4)$$

Кожна стадія підсистеми може мати різну кількість секцій, які складаються з паралельно з'єднаних модулів. В межах секції модулі можуть мати різну кількість мембранних елементів (як правило, не більше шести). В межах стадії використовуються однакові мембранні елементи.

Виходячи з постановки задачі у математичному вигляді, дану задачу слід класифікувати як задачу нелінійного умовного програмування. Генерування технічних рішень щодо структури схеми очищення вимагало вибору ефективного числового методу вирішення задач оптимізації вказаного класу.

За результатами досліджень авторами було обрано наступний підхід до знаходження рішення задачі оптимізації (1)-(2). У рамках даного підходу вихідна задача з обмеженнями замінюється на задачу без обмежень (задачу безумовної оптимізації), за допомогою методу штрафних функцій та рівнянь Куна-Таккера, які при деяких додаткових припущеннях про характер обмежень записуються у вигляді:

$$\begin{aligned} \nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla g_i(\mathbf{x}^*) &= 0, \\ \nabla g_i(\mathbf{x}^*) &= 0, \quad (i = 1, 2, \dots, m_e), \\ \lambda_i^* &= 0, \quad (i = m_e + 1, \dots, m), \end{aligned} \quad (5)$$

де λ_i – множники Лагранжа.

Для вирішення рівнянь (4) може бути використаний алгоритм так званого послідовного квадратичного програмування (Sequential Quadratic Programming, SQP), що представляє собою, по суті, різновид квазіньютонівського методу. Основна ідея SQP полягає в застосуванні квадратичної апроксимації функції Лагранжа (враховує обмеження):

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla g_i(\mathbf{x})$$

так, що на кожній ітерації вирішується задача оптимізації (6):

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n} & \frac{1}{2} \mathbf{d}^T \mathbf{H}_k \mathbf{d} + \nabla f^T(\mathbf{x}_k) \mathbf{d}, \\ \nabla g_i^T(\mathbf{x}_k) \mathbf{d} + g_i(\mathbf{x}_k) &= 0, \quad i = 1, 2, \dots, m_e, \\ \nabla g_i^T(\mathbf{x}_k) \mathbf{d} + g_i(\mathbf{x}_k) &\leq 0, \quad i = m_e + 1, \dots, m. \end{aligned} \quad (6)$$

У формулюванні (6) оптимум даної задачі може бути знайдений будь-яким методом вирішення задач квадратичного програмування.

Описаний підхід добре зарекомендував себе [7], і з успіхом використовується, зокрема, в складі процедур проектування оптимальної структури хіміко-технологічних систем [8].

Зауважимо, що оскільки представлена тут методологія проектування оптимальної підсистем підготовки води знаходиться на стадії апробації, розрахунки за описаним методом послідовного квадратичного програмування здійснюються наразі в програмному продукті GAMS.

В якості прикладу було розглянуто зворотноосмотичну підсистему демінералізації води для заводу по виробництву пива та безалкогольних напоїв продуктивністю 140 м³/год. Оскільки джерелом водопостачання є артезіанська вода з високим вмістом заліза (її склад наведено в таблиці 1), вона спочатку очищається методом Н-катіонування, після чого поступає на зворотноосмотичну підсистему демінералізації води.

Таблиця 1

Склад вихідної води

Показник	Одиниці виміру	Вихідна вода
Водневий показник	од. рН	6,6 – 6,8
Загальна мінералізація	мг/л	≤1000
Жорсткість загальна	мг-екв/л	5,8 – 7,0
Окислювальність перманганат.	мгО ₂ /л	8,4 – 10,6
Лужність загальна	мг-екв/л	3,8 – 4,6
Залізо	мг/л	8,6 – 12,2
Марганець	мг/л	0,2 – 0,34
Нітрати	мг/л	3,0 – 6,8
Сульфати	мг/л	72,0 – 94,0
Сірководень	мг/л	0,4 – 0,6
Хлориди	мг/л	52,0 – 65,0
Силікати	мг/л	20,0 – 30,0

В результаті розрахунку отримано підсистему мембранної демінералізації води, яка складається з п'яти установок з використанням мембран типу FILMTEC XLE-440 фірми Dow Chemical. Кожна установок побудована з трьох підстадій, що складаються, з трьох, двох та одного модуля, які включають, відповідно, 5, 4 та 5 мембранних елементів. Розрахункова продуктивність підсистеми по пермеату складає – 141.24 м³/год. Було також проведено перевірочний розрахунок отриманої

підсистему з використанням сертифікованого продукту ROSA 8.3.0, який дав аналогічний результат (140.52 м³/год).

Отримані результати дозволяють стверджувати, що використаний підхід до розрахунку оптимальної підсистеми мембранної демінералізації води може бути рекомендований для практичних розрахунків. В якості напрямку подальших досліджень автори бачать включення до процедури оптимального проектування інших підсистем у складі системи очищення природних вод.

Література

1. *Капранов С.В.* Показатели и индикаторы состояния водоснабжения, качества питьевой воды и здоровья населения [Текст] / С.В.Капранов // Вода и водоочистные технологии. Научно-технические вестн. – 2011. №3(5). – с.62-67.
2. *Кошлякова Т.О.* Сучасний стан використання питних підземних вод [Електронний ресурс] / [Кошлякова Т.О.] //Збірник наукових статей “ІІІ-го Всеукраїнського з’їзду екологів з міжнародною участю”. – Вінниця, 2011. – Том.1. – с.204–207.
3. *Мельник І.В.* Дослідження відповідності хімічних показників технологічної води стандартам на пивзаводі. [Текст] /І.В.Мельник, Є.В.Чередниченко // Вода в харчовій промисловості: Збірник матеріалів ІV Всеукр. наук.–практ. конф. Одеса: ОНАХТ – 2013. –с.180.
4. *Высоцкий С.П.* Пути совершенствования технологий очистки воды [Текст] / С.П.Высоцкий, А.В.Фаткулина, М.В.Коновальчик // І-й Всеукраїнський з’їзд екологів: міжнар. наук.-техн. конф., 4–7 жовтня 2006 р.: Тези допов. – Вінниця, 2006. – с. 197.
5. *Шоботов С.С.* Структурна оптимізація двохстадійної мембранної системи демінералізації морської води /С.С. Шоботов, О.О.Квітка, З.В.Малецький. Вода і водоочисні технології. Науково-технічні вісті, 2010, №2, с. 59 – 72.
6. *Квітка О.О.* Оптимізація двохстадійної зворотноосмотичної установки демінералізації морської води для промислового підприємства [Текст] / О.О. Квітка, З.В. Малецький, В.А.Тарасюк // Комп’ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку: Збірник наукових статей Третьої міжнар. наук.-практ. конф. Київ – Рубіжне: НТУУ «КПІ» – 2012, с. 145 – 148.
7. *Фиакко А.* Нелинейное программирование. Методы последовательной безусловной минимизации [Текст] / Фиакко А., Мак-Кормик Г. – М.: Мир, 1972. – 240 с.
8. *Dueñas Díez M.* Opportunities and challenges of using sequential quadratic programming (SQP) for optimization of petroleum production networks [Text] / Marta Dueñas Díez, Kari Brusdal, Geir Evensen, Tor Barkve, Are Mjaavatten // Computer Aided Chemical Engineering. Volume 20, 2005, pp 169–174.