دانشگاه آزاد اسلامی واحد اهر
فصلنامه‌ی کاربرد شیمی در محیط زیست

سال هفتم، شماره‌ی ۲۷
تابستان ۱۳۹۵، صفحات ۵۳-۴۹

سنتز شبکه راکتوری با امکان خوراک‌دهی متنوع برای راکتورها

هادی سلطانی
گروه مهندسی شیمی، واحد اهر، دانشگاه آزاد اسلامی ، اهر، ایران
Email h-soltani@iau-ahar.ac.ir

زهرا قلی‌زاده
گروه مهندسی شیمی، واحد اهر، دانشگاه آزاد اسلامی ، اهر، ایران

چکیده
بهینه‌سازی شبکه راکتورها اغلب منجر به بروز مسائل غیرخطی می‌شود که حل آن‌ها جهت رسیدن به ساختار بهینه شبکه راکتورها بسیار مشکل و بعضاً غیرقابل‌حل می‌شود. در این مطالعه تلفیقی از الگوریتم ژنتیک و روش حل برنامه‌ریزی شبه‌خطی برای بهینه‌سازی شبکه راکتورها هم‌دما استفاده شده است. ساختار شبکه راکتوری یک راکتور لوله‌ای بوده که دارای چندین جریان جانبی ورودی می‌باشد. جهت جلوگیری از ظهور معادلات دیفرانسیل به دلیل ماهیت راکتور لوله‌ای، راکتور با چندین راکتور همزن‌دار سری شبیه‌سازی شده که بسته به شرایط مساله مورد بررسی، تعداد راکتورهای همزن‌دار و جریان‌های جانبی ورودی به آنها، متغیر خواهد بود. این نوع سیستم‌های راکتوری بیشتر زمانی کارایی خواهند داشت که خواسته شود، بنا به دلایلی، ماده و یا موادی تدریجاً وارد راکتور شود. مقایسه نتایج حاصل با مراجع نشان می‌دهد که روش مذکور قادر به ایجاد جواب‌های بهینه جدید در سنتز شبکه راکتوری است.

کلید واژه: سنتز شبکه راکتوری، الگوریتم ژنتیک، روش برنامه‌ریزی شبه خطی، راکتور لوله‌ای، جریان‌های جانبی، راکتورهای سری همزندار

مقدمه

یکی از قسمت‌های مهم و اثرگذار در هر واحد صنعتی، قسمت تبدیل مواد خام به محصولات-اعم از محصولات اصلی و یا محصولات جانبی- می‌باشد که می‌توان از آن به‌عنوان قلب تپنده هر واحد صنعتی یاد کرد. از طرفی به جرأت می‌توان گفت، طراحی بهینه قسمت واکنشی هر واحد صنعتی نسبت به طراحی بهینه سایر قسمت‌های آن واحد صنعتی، سهم بیش‌تری بر کاهش هزینه‌های تمام شده واحد مذکور خواهد گذاشت. به دلیل پیچیدگی بیش از اندازه چنین مسائلی، روش‌های متعددی برای حل آن پیشنهاد شده است که هر کدام دارای نقاط قوت و ضعفی هستند. تحقیقات پیشین که بر اساس استراتژی برنامه‌ریزی ریاضی است بهینه‌سازی یک ابرساختار را دنبال می‌کند. این روش خود به دو زیر گروه تقسیم می‌شود که گروه اول به دنبال بهینه‌سازی ابرساختار هستند مانند کارهای ککسیس، آچینی و چیترا [۲-۱] و گروه دوم روش هدفمندی را برای رسیدن به یک ساختار بهینه در نظر می‌گیرند؛ کارهای فینبرگ و بالاکریشنا [۴-۳] از این قبیل هستند. روش بعدی، روش منطقه قابل حصول است.

از این روش در طراحی و سنتز شبکه‌های راکتوری، پیدا کردن تمامی بازه غلظت ممکنه خروجی محصولات از همه سیستم‌ها و چیدمان‌های راکتوری در اثر انجام مجموعه واکنش‌های مشخص، می‌باشد. لذا در این روش نوعی بیان تابعی جهت مدل کردن تمامی واکنش‌ها و حالت‌های اختلاط، به‌کار گرفته می‌شود. این کار بر اساس فضای حالت غلظت می‌باشد و با نام منطقه قابل حصول شناخته می‌شود. اصول این روش که به‌صورت مجموعه نقاطی در فضای غلظت که قابل دستیابی به وسیله تعدادی راکتور حالت پایا با خوراک مشخص تعریف می‌شود، برای اولین بار توسط هورن [۵] پایه‌ریزی شد. بعد از این‌که گلسر و همکاران [۶] روش هدفمند هندسی را برای ساختار روش منطقه قابل حصول پیشنهاد کردند، این روش طرفداران زیادی در زمینه طراحی و سنتز شبکه راکتورها پیدا کرد.

روش آخر روش‌هایی را در بر می‌گرفت که در حل مسئله سنتز شبکه راکتوری از روش‌های تصادفی به‌تنهایی و یا در کنار روش‌های ذکر شده، استفاده می‌کرد. استفاده از این نوع روش را نیز می‌توان در کارهای جین، سیلوا، گلسر، رولار، اشلی، لینک و مارکولاکی [۸-۵] مشاهده کرد. لازم به ذکر است که روش استفاده شده در این مقاله در این گروه قرار دارد. معایب روش‌های ذکر شده، کارایی برای مسایل کوچک و زمان‌گیر بودن، پیچیدگی معادله‌های حاکم ابر ساختار، عدم اطمینان از پوشش‌دهی جواب بهینه مدل به‌دست آمده است.

هدف عمده روش پیشنهادی که تلفیقی از روش‌های بهینه‌سازی ریاضی و روش تصادفی الگوریتم ژنتیک است، کاهش پیچیدگی مسئله و تبدیل آن به مسائل خطی و یا شبه خطی است، به طوری که حل آن راحت‌تر و قابل اعتمادتر در رسیدن به جواب‌هایی در مقایسه با روش‌های قبلی است.

مواد و روش‌ها

شبکه راکتوری در نظر گرفته شده شامل یک راکتوری لوله‌ای با چندین جریان جانبی ورودی به آن می‌باشد که در کل یک مدل غیرخطی را تشکیل می‌دهد. برای جلوگیری از حضور معادلات دیفرانسیل در مدل که ناشی از رفتار راکتور لوله‌ای است، این راکتور لوله‌ای با استفاده از چندین راکتور همزن‌دار سری با حجم‌های برابر، شبیه‌سازی شده است.

برای کاهش پیچیدگی حل مدل اشاره شده، متغیرها به دو گروه تقسیم می‌شوند.

گروه اول: شامل دبی جریان‌ها و غلظت مواد در داخل آن‌ها.

گروه دوم: شامل متغیرهای نسبت شکست جریان‌ها و حجم کلی راکتور لوله‌ای.

البته با داشتن مقادیر این متغیرها، حجم تک‌تک راکتورهای همزن‌دار، میزان تبدیل مواد در داخل هر راکتور همزن‌دار و همچنین راکتور لوله‌ای، انتخاب‌پذیری و سایر مواد مشابه، به راحتی قابل محاسبه خواهد بود. شکل (۱) فلوچارت استفاده شده در این مقاله را جهت سنتز شبکه راکتوری نشان می‌دهد.

شکل ۱: فلوچارت الگوریتم ژنتیک و برنامه ریزی شبه خطی

همان‌طور که از این شکل مشخص است مقادیر بهینه این متغیرها با استفاده از دو حلقه تو در تو محاسبه می‌شوند. مقادیر بهینه متغیرهای گروه دوم با استفاده از الگوریتم ژنتیک و در حلقه بیرونی برآورد شده در حالی‌که مقادیر بهینه متغیرهای گروه اول و سایر متغیرهای اشاره شده در حلقه درونی و با استفاده از ساختار برنامه‌ریزی شبه‌خطی محاسبه می‌شوند.

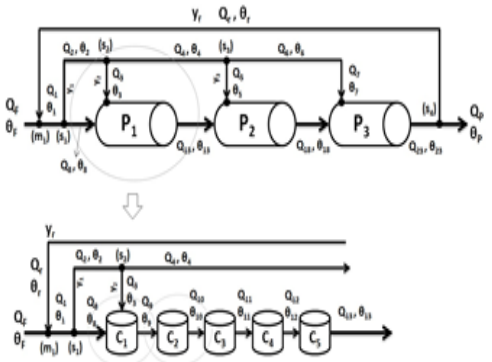
برای داشتن درک درستی از تقسیم‌بندی متغیرهای پیوسته مدل و محاسبه مقادیر بهینه آن‌ها در دو حلقه تو در تو، معادلات حاکم بر مدل شبکه راکتوری بایستی نوشته می‌شود.

به‌عنوان مثال برای شکل (۲) معادلات حاکم شامل موارد زیر خواهد بود:

موازنه جرم کلی و جزئی مواد حول نقاط اختلاط (mi ها)،

موازنه کلی و جزئی مواد حول نقطه جدایش (si ها)،

موازنه جرم کلی و جزیی مواد حول راکتورهای همزن‌دار.



شکل ۲: راکتور لوله ای و سری راکتورهای همزن‌دار

در این شکل θ نماینده غلظت مواد مانند A، B و ...، Q دبی جریان‌ها و y نسبت شکست جریان‌ها می‌باشد. موازنه‌های جرمی (حجمی در صورت فرض چگالی ثابت) و مولی با فرض عملیات هم‌دما در داخل راکتورها و ناچیز بودن تغییرات حجمی جریان‌ها در اثر اختلاط و یا عبور از داخل راکتور، به‌صورت زیر خواهد بود:

موازنه جرم کلی و جزیی مواد برای نقاط اختلاط (m_i ها)- برای مثال برای نقطه m_1:

$$\begin{aligned} &Q_F + Q_r = Q_1 \\ &Q_F C_{\theta F} + Q_r C_{\theta_r} = Q_1 C_{\theta_1} \end{aligned} \qquad (۱)$$

موازنه جرم کلی و جزیی مواد برای نقاط جدایش (si ها)- برای مثال برای نقطه s1:

$$\begin{aligned} &Q_2 = y_1 Q_1 \\ &Q_8 = (1-y_1) Q_1 \\ &C_{\theta_2} = C_{\theta_1} = C_{\theta_8} \end{aligned} \qquad (۲)$$

برای سایر نقاط اختلاط و جدایش، معادلاتی شبیه شبیه معادلات بالا را خواهیم داشت. برای موازنه جرم کلی و جزیی مواد حول راکتورهای همزن‌دار، دو نوع راکتور همزن‌دار را در نظر می‌گیریم.

برای راکتور همزن‌داری که دارای یک جریان ورودی است (مانند راکتور C_2 و یا C_3تا C_5):

$$\begin{aligned} &Q_9 = Q_{10} \\ &Q_9 C_{\theta_9} - Q_{10} C_{\theta 10} + R_\theta V_c = 0 \end{aligned} \qquad (۳)$$

برای راکتور همزن‌داری که دارای دو جریان ورودی است (مانند راکتور C_1):

$$\begin{aligned} &Q_8 + Q_3 = Q_9 \\ &Q_8 C_{\theta_8} + Q_3 C_{\theta_3} - Q_9 C_{\theta_9} + R_\theta V_c = 0 \end{aligned} \qquad (۴)$$

در این معادلات Q دبی جریانه‌ها، C_θ غلظت ماده θ، V_C حجم راکتور همزن‌دار و R_θ مربوط به سرعت واکنش (تولید و یا مصرف) ماده θ می‌باشد. با توجه به معادله‌های بالا، مشخص است که به دلیل ضرب شدن برخی متغیرها به یکدیگر در بعضی معادلات و همچنین ماهیت سرعت واکنش مواد، با دستگاه معادلات غیرخطی روبرو هستیم؛ اما با استفاده از روش پیشنهادی در این مقاله، یعنی حل جداگانه متغیرهای گروه اول و دوم با توجه به تابع هدف، مسئله از حالت غیرخطی به حالت شبه‌خطی در خواهد آمد.

یافته‌ها و بحث

برای بررسی کارایی روش پیشنهادی سیستم واکنشی معروف ون د ووس که متشکل از چهار ماده بوده و شامل واکنش‌های سری و موازی و برگشت‌پذیر است را در نظر می‌گیریم. این سیستم واکنشی به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

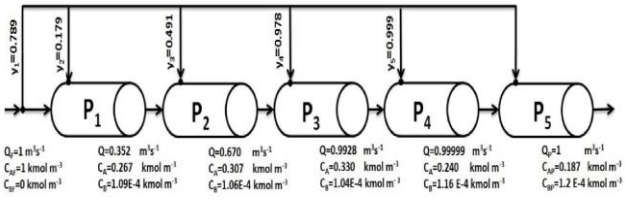
$$\left.\begin{aligned} &A \xrightarrow{k_1} B, \quad r_1 = -k_1 C_A \\ &B \xrightarrow{k_2} A, \quad r_2 = -k_2 C_B \\ &B \xrightarrow{k_3} C, \quad r_3 = -k_3 C_B \\ &2A \xrightarrow{k_4} D, \quad r_4 = -k_4 C_A^2 \end{aligned}\right\} \quad \begin{aligned} r_A &= -k_1 C_A + k_2 C_B - k_4 C_A^2 \\ r_B &= k_1 C_A - k_2 C_B - k_3 C_B \\ r_C &= k_3 C_B \\ r_D &= k_4 C_A^2 \end{aligned} \qquad (۵)$$

در این سیستم واکنشی ماده B ماده مطلوبی بوده که بیشنه غلظت این ماده در خروجی شبکه راکتوری تابع هدف می‌باشد. اطلاعات ترمودینامیکی در جدول (۱) نشان داده شده است. لازم به توضیح است غلظت سایر مواد به غیر از ماده A در جریان خوراک برابر صفر می‌باشد.

جدول ۱- اطلاعات واکنش ون د ووس-مورد مطالعاتی دوم

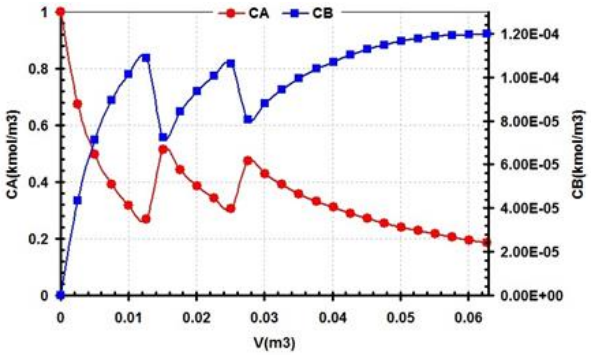
Q_F m^3s^{-1}	C_{AF} $kmol.m^{-3}$	k_1 s^{-1}	k_2 s^{-1}	k_3 s^{-1}	k_4 $m^3kmol^{-1}s^{-1}$
۱	۱	۰/۰۱	۵	۱۰	۱۰۰

در این سیستم تعداد جمعیت اولیه و تعداد تکرارها برای الگوریتم ژنتیک ۲۰۰ در نظر گرفته شد. برای این سیستم راکتوری، تعداد ۵ راکتور لوله‌ای کوچک‌تر که هر کدام از کنار هم قرار گرفتن ۵ راکتور همزن‌دار سری مدل می‌شدند، استفاده شد. شکل (۳) بهترین شبکه بهینه به‌دست آمده توسط روش پیشنهادی را نشان می‌دهد. حجم تمامی راکتورهای همزن‌دار یکسان بوده و برابر ۲/۵۱ لیتر می‌باشد. همان‌طور که از شکل مشخص است مقدار تابع هدف به دست آمده (بیشینه غلظت ماده B خروجی) برابر ۱/۲×۱۰-۴ کیلو مول بر متر مکعب برای به‌دست آمد.



شکل ۳: بهترین شبکه راکتوری بهینه بدست آمده، سیستم واکنشی ون د ووس

شکل (۴) نیز تغییرات غلظت مواد A و B را در طول راکتور را نشان می‌دهد. نوسانات موجود در این نمودارها نیز موید وجود جریان‌های جانبی ورودی به راکتور می‌باشد.



شکل ۴: تغییرات غلظت مواد A و B در طول راکتور لوله‌ای سیستم واکنشی ون د ووس

جدول (۲) مقایسه نتایج به‌دست آمده برای این سیستم واکنشی با استفاده از روش پیشنهادی در این مقاله، با نتایج حاصل در مرجع [۹] را نشان می‌دهد. همان‌طور که از این جدول مشخص است روش پیشنهادی توانسته به خوبی مقدار تابع هدفی تقریباً برابر مقدار به‌ست آمده در مرجع [۹] به‌دست آورد.

جدول ۲- مقایسه نتایج به‌دست آمده با مراجع

حجم کل راکتورها (m^3)	تابع هدف (C_{Bmax})	
-	*حدوداً ۱/۲۳۳×۱۰$^{-۴}$	بوری و همکاران [۹]
۰/۰۶۲۷	۱/۲×۱۰$^{-۴}$	نتایج حاصل مقاله

* این مقدار به دلیل خواندن از نمودار به صورت تقریبی ذکر گردیده است.

نتیجه‌گیری

سنتز و یا طراحی شبکه راکتوری یکی از پیچیده‌ترین و مشکل‌ترین مسائل طراحی، در زمینه مسائل بهینه‌سازی محسوب می‌شود چراکه مدل بهینه‌سازی حاصله برای چنین مسائلی از نوع MINLP می‌باشد. روش‌های زیادی در زمینه کاهش پیچیدگی حل مساله سنتز شبکه راکتوری تاکنون ارائه شده است. در این مقاله سنتز شبکه راکتوری هم‌دما با استفاده از تلفیق الگوریتم ژنتیک و روش برنامه‌ریزی شبه‌خطی ارائه شد که ساختار شبکه راکتور شامل راکتور لوله‌ای (متشکل از چندین راکتور لوله‌ای کوچکتر) با چندین جریان جانبی در نظر گرفته شد. برای جلوگیری از حضور معادلات دیفرانسیل به دلیل ماهیت راکتورهای لوله‌ای، هر یک از راکتورهای لوله‌ای کوچکتر نیز خود از کنار هم قرار گرفتن چندین راکتور همزن‌دار شبیه‌سازی شدند. برای چنین مدلی به‌دست آوردن هم‌زمان تمامی متغیرها منجر به حل دستگاه معادلات غیر خطی می‌شد که به دلیل وجود تعداد متغیرهای زیاد (بسته به بزرگی شبکه راکتوری) در صورت امکان حل چنین دستگاهی، زمان‌گیر خواهد شد. لذا در روش پیشنهادی متغیرها به دو گروه تقسیم شدند. مقادیر بهینه گروهی از متغیرها که باعث غیرخطی شدن معادلات می‌شدند، توسط الگوریتم ژنتیک و گروه دیگر که شامل متغیرهای دبی جریان‌ها و غلظت مواد در داخل آن‌ها می‌شد، به‌وسیله روش برنامه‌ریزی شبه خطی، در دو حلقه تو در تو و با توجه به تابع هدف تعریف شده، محاسبه می‌شد. بررسی نتایج حاصل با مراجع نشان داد که اولاً روش پیشنهادی برای حل مساله شبکه راکتورها، به‌ویژه مسائل پیچیده و واقعی صنعتی- مسائل غیرهم‌دما-می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد که به عنوان ایده‌ای برای کارهای آینده می‌تواند در نظر گرفته شود. ثانیاً به‌دلیل تبدیل مدل پیچیده غیرخطی به یک مدل شبه‌خطی، بهتر از روش‌های دیگر می‌تواند در مورد ساختارهای خیلی پیچیده واکنشی، جواب‌گو باشد.

منابع

[1] Kokossis, A. C., Christodoulos, A., 1990, Optimization of complex reactor networks—I. Isothermal operation. Chemical Engineering Science, 45 (3): 595-614.
[2] Chitra, S. P., Govind, R., 1985, Synthesis of optimal serial reactor structures for homogeneous reactions. Part I: Isothermal reactors, AIChE Journal, 31 (2): 177-184.
[3] Feinberg, M., 2003, Toward a Theory of Process Synthesis. Industrial & Engineering Chemistry Research, 41(16): 3751-3761

[4] Balakrishna, S., Biegler, L. T., 1992, Constructive targeting approaches for the synthesis of chemical reactor networks. Industrial & Engineering Chemistry Research, 31(1): 300-312. (1992).
[5] Horn, F., 1964, Attainable and non-attainable regions in chemical reactor technique. in Third European Symposium on Chemical Reaction Engineering. London: Pergamon Press
[6] Glasser, D., Crowe, C., Hildebrandt, D., geometric, A., (1987), approach to steady flow reactors: the attainable region and optimization in concentration space. Industrial & Engineering Chemistry Research, 26 (9): 1803-1810.
[7] Marcoulaki, E., Kokossis, A., 1996, Stochastic optimisation of complex reaction systems. Computers & Chemical Engineering, 1: 231-236.
[8] Jin, S., Li, X., Tao, S., 2012, Globally optimal reactor network synthesis via the combination of linear programming and stochastic optimization approach. Chemical Engineering Research and Design, 90 (6): 808-813.
[9] Lincoln, K., Silva, M. A., 2008, dGiovani Pissinati Menoci and Marcia Marcondes Altimari Samed, Reactor network synthesis for isothermal conditions Acta Sci. Technol., 30: 199-207.
[9] Jeremy, F., Burri, S., Wilson, D., Vasilios, I., 2002, Manousiouthakis, Infinite DimEnsionAl State-space approach to reactor network synthesis: application to attainable region construction. Computers and Chemical Engineering, 26: 849–862.