

**Н. П. Мидуков
В. С. Куров
А. О. Никифоров**

**МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ И ОРГАНИЗАЦИИ
ЭНЕРГО- И РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИХ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

Практикум

**Санкт-Петербург
2022**

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
**«Санкт-Петербургский государственный университет
промышленных технологий и дизайна»
Высшая школа технологии и энергетики**

**Н. П. Мидуков
В. С. Куров
А. О. Никифоров**

**МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ И ОРГАНИЗАЦИИ
ЭНЕРГО- И РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИХ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

Практикум

Утверждено Редакционно-издательским советом ВШТЭ СПбГУПТД

Санкт-Петербург
2022

УДК 66.012.1.37(07)

ББК 35.115я7

М 744

Рецензент

кандидат технических наук, доцент Высшей школы технологии и энергетики
Санкт-Петербургского государственного университета промышленных технологий и дизайна
А. Н. Евдокимов

Мидуков, Н. П.

М 744 Методы оптимизации и организации энерго- и ресурсосберегающих химико-технологических систем: Практикум / Н. П. Мидуков, В. С. Куров, А. О. Никифоров. — СПб.: ВШТЭ СПбГУПТД, 2022. — 43 с.

Практикум соответствует программам и учебным планам дисциплины «Методы оптимизации и организации энерго- и ресурсосберегающих химико-технологических систем» для студентов, обучающихся по направлению подготовки 18.04.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии». В практикуме собраны упражнения для выполнения практических работ по дисциплине. Приведены примеры применения методов оптимизации и организации энерго- и ресурсосберегающих химико-технологических систем.

Практикум предназначен для подготовки магистров очной и заочной форм обучения. Отдельные разделы практикума могут быть полезны аспирантам и специалистам, работающим в области моделирования систем.

УДК 66.012.37(07)

ББК 35.115я7

© ВШТЭ СПбГУПТД, 2022

© Мидуков Н. П., Куров В. С.,
Никифоров А. О., 2022

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
Оптимизация однофакторных систем.....	5
Оптимизация трубчатого реактора.....	13
Оптимизация технологического процесса в каскаде реакторов идеального смешения (метод Лагранжа).....	33
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК.....	43

ВВЕДЕНИЕ

Цель настоящего практикума – оказать магистрам конкретную помощь в развитии умения решать задачи по курсу «Методы оптимизации и организации энерго- и ресурсосберегающих химико-технологических систем».

Каждый из разделов практикума содержит теоретические положения, подробное решение соответствующих задач как аналитически, так и с использованием пакета MathCAD.

Первая часть практикума посвящена изложению основных терминов и определений, используемых при решении оптимизации однофакторных систем. Материал излагается с учетом терминологии и обозначений, предусмотренных программой вуза.

Во второй части изложены решения задач оптимизации трубчатого реактора.

В третьей части приведена задача оптимизации технологического процесса в каскаде реакторов идеального смешения (метод Лагранжа).

При пользовании практикума рекомендуется следующий порядок работы. Сначала следует повторить теоретическую часть, которая изложена в начале каждого раздела пособия. Затем ознакомиться с пояснениями и решениями задач, содержащимися в практикуме. И только после этого перейти к выполнению контрольных упражнений.

ОПТИМИЗАЦИЯ ОДНОФАКТОРНЫХ СИСТЕМ

Математические модели технических систем описывают зависимости между независимыми варьируемыми факторами и параметрами, характеризующими функционирование технических систем. С помощью математических моделей могут быть решены задачи 3-х типов: задачи анализа, синтеза и оптимизации.

Цель задач анализа – определить параметры системы, которые достигаются при заданных значениях факторов. Задачи этого типа для детерминированных систем имеют только одно решение: заданной совокупности факторов соответствует единственная совокупность параметров.

Цель задач синтеза – определить совокупность факторов, обеспечивающих требуемые значения параметров системы. Задачи этого типа могут иметь не единственное решение, так как в технических системах требуемые параметры могут быть достигнуты различными комбинациями значений независимых факторов.

Цель задач оптимизации – определить комбинацию значений независимых факторов, которая из множества возможных решений, обеспечивающих требуемые параметры системы, позволяет получить решение, оптимальное по заданному критерию [1].

Процесс оптимизации лежит в основе всей инженерной деятельности, поскольку классические функции инженера заключаются в том, чтобы, с одной стороны, проектировать новые, более эффективные и менее дорогостоящие технические системы и, с другой стороны, разрабатывать методы повышения качества функционирования существующих систем.

Постановка задачи оптимизации включает следующие пункты:

Установить границы системы, подлежащей оптимизации.

Определить количественный параметр (критерий оптимизации), на основе которого можно произвести анализ вариантов для выявления наилучшего.

Выбрать внутрисистемные независимые переменные, которые используются для определения параметров системы и идентификации вариантов.

Построить математическую модель, отражающую взаимосвязь между переменными и параметрами системы.

Границы оптимизируемой системы служат для ее выделения из окружающей среды. Факторы окружающей среды являются постоянными и не изменяются при поиске оптимального варианта.

Критерий оптимизации – количественная оценка оптимизируемой характеристики системы, позволяющая выбрать наилучший вариант из множества возможных. Наилучшему варианту всегда соответствует минимальное или максимальное значение критерия оптимизации. Только один критерий может использоваться для определения оптимума.

Необходимо выбирать только основные независимые переменные, которые оказывают существенное влияние на функционирование системы.

Количество выбранных переменных – компромисс, так как большое количество переменных усложняет решение задачи, малое количество может привести к неоптимальному решению.

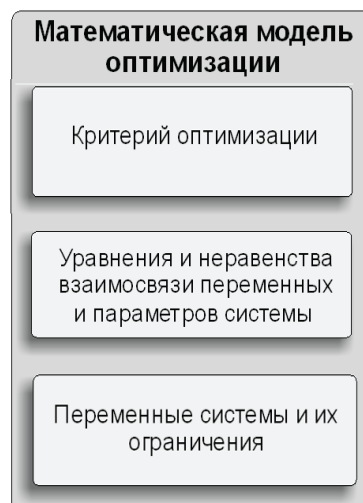


Рис. 1. Структура

Математические модели включают уравнения, описывающие физические процессы, протекающие в системе, уравнения материальных и энергетических балансов, а также соотношения, связанные с проектными решениями. Такие уравнения позволяют рассчитывать параметры системы, характеризующие ее функционирование. Эти уравнения обычно дополняются неравенствами, которые определяют область допустимых значений независимых переменных, накладывают ограничения на верхние и/или нижние границы изменения характеристик функционирования системы (параметров) или устанавливают лимиты имеющихся ресурсов. Таким образом, элементы математической модели содержат всю информацию, которая обычно используется при расчетах и оценках качества проекта или прогнозирования характеристик инженерной системы. Важно понимать, что математическая модель для решения оптимизационных задач представляет собой некую совокупность уравнений и неравенств, которые определяют взаимосвязь между переменными системы и ограничивают область допустимых значений независимых переменных и параметров системы. Поэтому ее структуру можно представить в виде 3-х обязательных блоков (рис. 1).

Такая структура математических моделей задач оптимизации позволяет записывать их в единой математической формулировке, называемой канонической формой задачи оптимизации:

Минимизировать (максимизировать) вещественную функцию от N аргументов:

$$F(x_1, x_2, \dots, x_N) \rightarrow \min,$$

которые (аргументы) удовлетворяют системе уравнений:

$$\begin{cases} h_1(x_1, x_2, \dots, x_N) = 0 \\ h_2(x_1, x_2, \dots, x_N) = 0 \\ \dots \\ h_k(x_1, x_2, \dots, x_N) = 0 \end{cases},$$

и/или неравенств:

$$\begin{cases} g_1(x_1, x_2, \dots, x_N) \geq 0 \\ g_2(x_1, x_2, \dots, x_N) \geq 0 \\ \dots \\ g_j(x_1, x_2, \dots, x_N) \geq 0 \end{cases},$$

а также ограничениям сверху и снизу:

$$\begin{cases} x_{1\min} \leq x_1 \leq x_{1\max} \\ x_{2\min} \leq x_2 \leq x_{2\max} \\ \dots \\ x_{i\min} \leq x_i \leq x_{i\max} \end{cases}.$$

Функцию $F(x_1, x_2, \dots, x_N)$ далее будем называть целевой функцией, а системы равенств и неравенств – ограничениями в виде равенств и ограничениями в виде неравенств соответственно.

Оптимизационные задачи с ограничениями определяют еще как задачи условной оптимизации, а без ограничений – задачи безусловной оптимизации. В инженерной практике решают преимущественно задачи условной оптимизации.

Задачи оптимизации можно классифицировать и по числу переменных N . Простейший класс таких задач представляют задачи оптимизации без ограничений с одной переменной.

В программе Mathcad для поиска экстремумов функции используются численные методы, реализованные во встроенных функциях Minimize (F, x1, x2, x3) и Maximize (F, x1, x2, x3) и направленные на поиск минимума и максимума соответственно, где F – целевая функция от аргументов x1, x2, x3 (аргументов может быть один и более). Перед вызовом функций оптимизации аргументам необходимо присвоить начальные значения варьируемых факторов, которые, по возможности, должны лежать в области допустимых значений для этих факторов.

Пример решения подобной задачи с помощью программы Mathcad рассмотрен ниже.

Цель работы: освоить методы математического моделирования и оптимизации однофакторных технических систем.

Формулировка задачи. Проектируется установка для прокачки жидкости (например, молока в установке автоматизированного доения), включающая трубы из нержавеющей стали, центробежный насос и электродвигатель.

Трубопровод длиной L , м должен обеспечить подачу жидкости с производительностью Q , м³/мин. Известно, что функция капитальных затрат на создание рассматриваемой установки для прокачки жидкости описывается следующим уравнением:

$$C = 1.476L + 6.28 \times 10^{-3} LD^{\frac{3}{2}} + 61.6h(D)^{0.925} + 325\sqrt{h(D)},$$

где $h(D) = \frac{4.47 \times 10^4 LQ^{2.68}}{D^{4.68}} + \frac{1.62 \times 10^7 LQ^3}{D^5},$

где C – капитальные затраты на создание рассматриваемой установки, у. е;

L – длина трубопровода, м;

D – диаметр труб трубопровода, мм;

Q , – производительность установки, м³/мин.

Требуется выбрать наиболее экономичный диаметр труб D для минимизации капитальных затрат. При этом можно заказывать трубы диаметром, соответствующим производимому сортаменту: 10; 15; 20; 25; 32; 40; 50; 57; 64; 70; 76; 89; 102; 108; 133; 159 (мм).

План решения задачи:

- Внимательно прочитать условия задачи. Понять, что является объектом моделирования.
- Установить границы моделируемой системы.
- Установить критерий оптимизации.
- Установить, какие параметры системы должны быть обеспечены.
- Установить, какие параметры и факторы влияют на критерий оптимизации.
- Записать уравнения взаимосвязи целевой функции, факторов и параметров оптимизируемой системы.
- Создать математическую модель в программе Mathcad.
- Выполнить расчет оптимального варианта.
- Выполнить анализ полученного решения.
- Оформить результаты.

Объектом моделирования является установка для прокачки жидкости.

Моделируемая система ограничена рассмотрением трубопровода, изготавливаемого из труб необходимого диаметра.

Критерий оптимизации – величина капитальных затрат на создание установки C .

Установка должна обеспечить транспортировку жидкости на длину L , м, с производительностью Q , м³/мин.

Критерий оптимизации зависит от требуемых параметров установки – длины транспортировки L , м, производительности Q , м³/мин, варьируемого фактора – диаметра труб D , мм.

Уравнения, связывающие целевую функцию с параметрами и фактором:

$$C = 1.48L + 6.28 \times 10^{-3} L\sqrt{D^3} + 61.6h(D)^{0.925} + 325\sqrt{h(D)},$$

где $h(D) = \frac{3600\sqrt{Q^5}L(4500\sqrt{Q} + 11)}{D^5},$

где C – целевая функция: капитальные затраты на создание рассматриваемой установки, у.е;

$L = 300$ – длина трубопровода, м;

$Q = 0.5$ – производительность установки, м³/мин;

D – варьируемый фактор: диаметр труб трубопровода, мм.

В программе Mathcad опишем целевую функцию и построим график ее зависимости от варьируемого фактора – диаметра труб трубопровода (рис. 2):

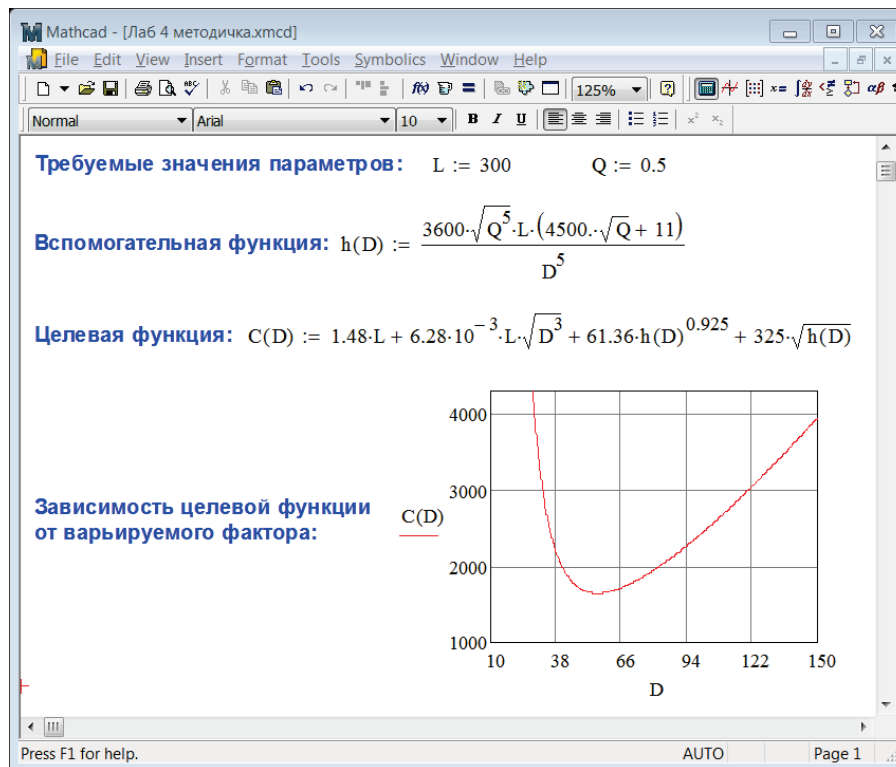


Рис. 2. График зависимости целевой функции от варьируемого фактора

На графике видно, что минимальное значение целевой функции достигается при значении варьируемого фактора приблизительно $D = 50$. Выберем это значение в качестве начальной точки. Найдём оптимальное решение с помощью функции Minimize (рис. 3):

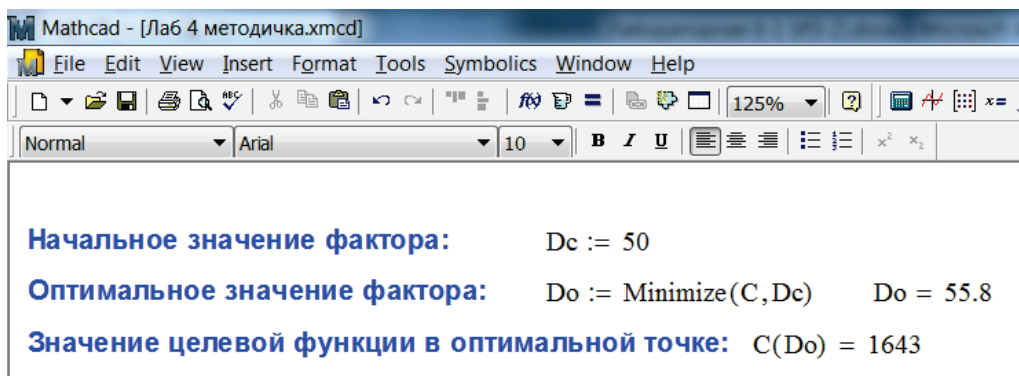


Рис. 3. Оптимальное решение с помощью функции Minimize

Анализ полученного решения показывает, что минимальные капитальные затраты на создание установки могли бы быть достигнуты, если применять трубы $\varnothing 55,8$ мм. При этом капитальные затраты составят 1643 у. е.

Поскольку таких труб в поставляемом сортаменте нет, рассчитаем значение целевой функции для ближайшего меньшего (50 мм) и ближайшего большего (57 мм) диаметра производимого сортамента труб, а также найдем разницу в стоимости капитальных затрат для этих диаметров и оптимального значения (рис. 4):

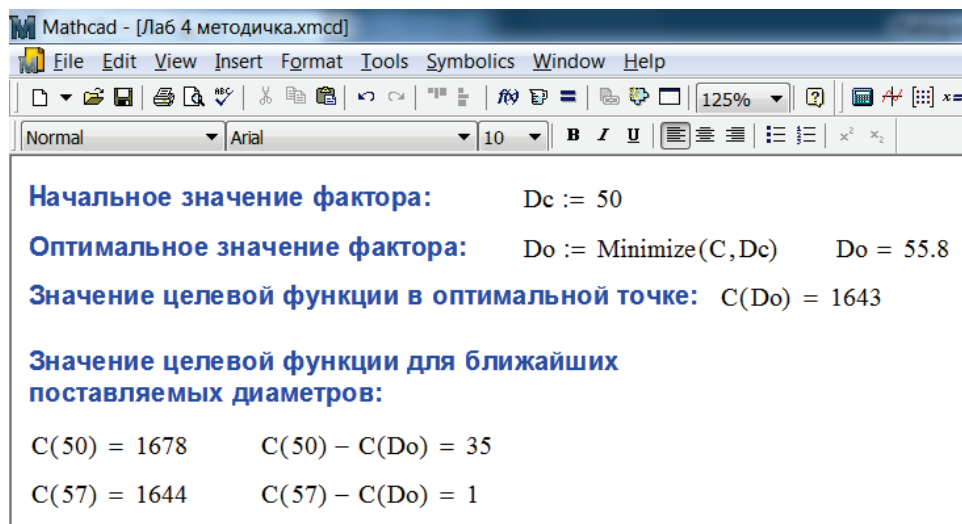


Рис. 4. Разница стоимости капитальных затрат

Анализ полученного решения показывает, что минимальное значение капитальных затрат на создание установки для транспортировки жидкости может быть достигнуто при использовании труб $\varnothing 57$ мм и составит 1644 у. е., что на 1 у.е. дороже оптимального решения, которое могло быть достигнуто при использовании труб $\varnothing 55,8$ мм.

При форматировании вычисляемых значений в программе Mathcad округлять диаметры до десятых, а стоимости до целых разрядов, как показано в примере (рис. 5):

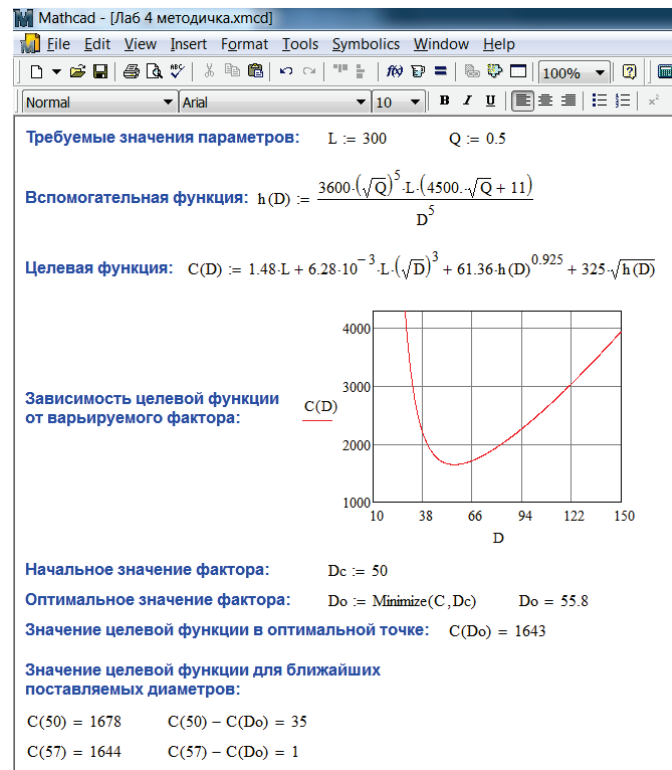


Рис. 5. Пример форматирования вычисляемых значений

Объектом моделирования является установка для прокачки жидкости.

Моделируемая система ограничена рассмотрением трубопровода, изготавливаемого из труб необходимого диаметра.

Критерий оптимизации – величина капитальных затрат на создание установки C .

Установка должна обеспечить транспортировку жидкости на длину 300 м с производительностью 0.5, м³/мин.

Критерий оптимизации зависит от требуемых параметров установки – длины транспортировки L , м, производительности Q , м³/мин – и варьируемого фактора – диаметра труб D , мм.

Уравнения, связывающие целевую функцию с параметрами и фактором:

$$C = 1.476L + 6.28 \times 10^{-3} L D^{\frac{3}{2}} + 61.6 h(D)^{0.925} + 325 \sqrt{h(D)},$$

$$h(D) = \frac{4.47 \times 10^4 L Q^{2.68}}{D^{4.68}} + \frac{1.62 \times 10^7 L Q^3}{D^5},$$

где C – целевая функция: капитальные затраты на создание рассматриваемой установки;

$L = 300$ – длина трубопровода, м;

$Q, = 0.5$ – производительность установки, м³/мин;

D – варьируемый фактор: диаметр труб трубопровода, мм.

Минимальное значение капитальных затрат на создание установки для транспортировки жидкости может быть достигнуто при использовании труб $\varnothing 57$ мм и составит 1644 у. е., что на 1 у. е. дороже оптимального решения, которое могло быть достигнуто при использовании труб $\varnothing 55,8$ мм.

Таблица 1 – Варианты заданий

Вариант	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
$L, м$	600	100	200	150	400	500	100	150	300	250	500	450	600	150	200
$Q, м^3/с$	0.25	0.5	0.15	0.75	0.5	0.07	0.25	0.05	0.5	0.1	0.8	0.1	0.05	0.1	0.07
Вариант	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
$L, м$	500	400	150	300	250	150	600	200	500	100	450	500	100	450	300
$Q, м^3/с$	0.15	0.25	0.8	0.25	0.8	0.25	0.07	0.25	0.5	0.05	0.02	0.4	0.6	0.5	0.05

ОПТИМИЗАЦИЯ ТРУБЧАТОГО РЕАКТОРА

Химическим реактором называется аппарат, в котором осуществляются химические процессы, сочетающие химические реакции массо- и теплопереноса. Одной из разновидностей химических реакторов является трубчатый реактор. Он представляется собой аппарат с множеством трубок, внутри которых находится катализатор. Трубки помещены в кожух. Таким образом в реакторе есть трубное и межтрубное пространство. В трубном пространстве происходит реакция, а межтрубное пространство заполняется хладагентом, отводящим тепло реакции.

Для трубчатого реактора при соотношении $L/d \geq 100$ применима модель идеального вытеснения.

В таком реакторе приняты следующие допущения:

- все частицы движутся в заданном направлении, не перемешиваясь с движущимися впереди и сзади и полностью вытесняя подобно поршню находящиеся впереди частицы потока (плотность реакционной смеси по длине остается постоянной);
- время пребывания всех частиц внутри реактора одинаково;
- градиенты температур и концентраций по радиусу трубок отсутствуют.

В реакторе происходит реакция вида (рис. 6):

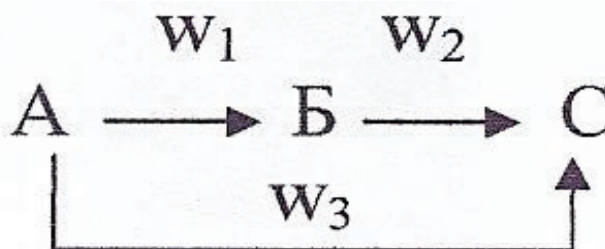


Рис. 6. Химическая реакция для реактора идеального вытеснения

где А – исходная смесь;

Б – целевой продукт;

С – побочный продукт.

w_1, w_2, w_3 – скорости реакций соответственно $A \rightarrow B$, $B \rightarrow C$ и $A \rightarrow C$.

Физическую модель реактора можно представить следующим образом (рис. 7):

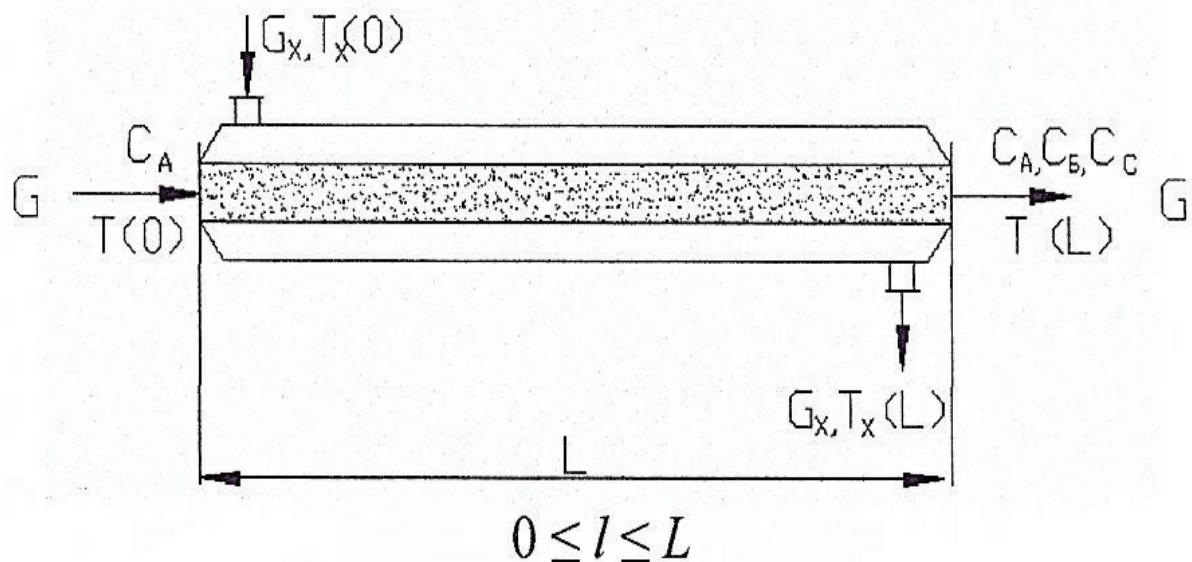


Рис. 7. Физическая модель реактора

Графики распределения температур и концентраций по длине аппарата выглядят следующим образом (рис. 8):

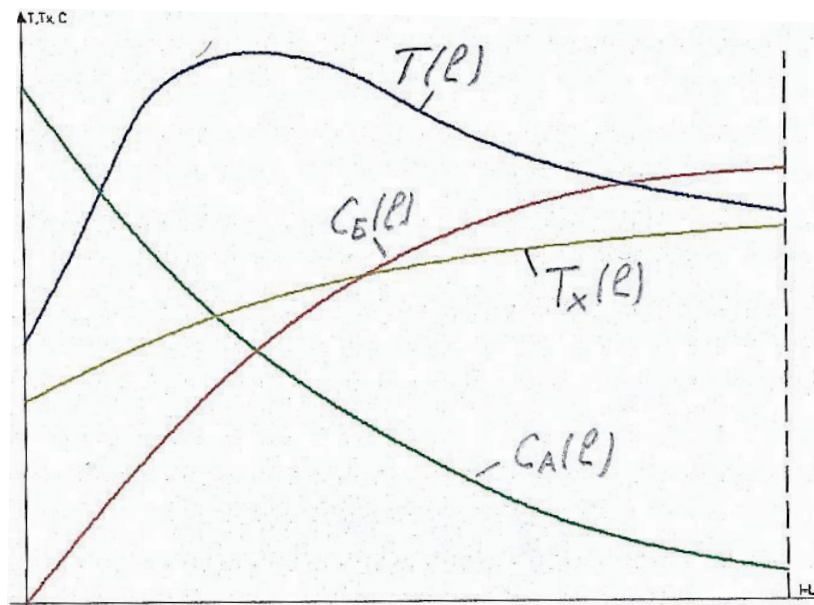


Рис. 8. Графики распределения температур и концентраций по длине аппарата

Общая постановка задачи выглядит следующим образом: необходимо найти такие значения $C_{A0}, G, T(l), L, d$, что критерий оптимальности $C_B(L) C_A, G, T(l), L, d$ достигает максимума при выполнении условий:

$$\begin{aligned}
\frac{dC_A(l)}{dl} &= -\frac{S \cdot F}{G}(W_1 + W_3); \\
\frac{dC_B(l)}{dl} &= \frac{S \cdot F}{G}(W_1 - W_2); \\
C_A(0) &= C_A; C_B(0) = 0; 0 \leq l \leq L; \\
T_m &\leq T(l) \leq T_m; C_{A0m} \leq C_A \leq C_{A0m}; \\
G_m &\leq G \leq G_m; d \in \{d_n\} \quad n = \overline{1, m}; \\
W_1 &= K_1 \cdot \frac{C_B^v}{1 + b \cdot C_A^c}; \quad W_2 = K_2 \cdot C_A; \quad W_3 = K_3 \cdot \frac{C_B^{\gamma}}{1 + b^* \cdot C_A^c}; \\
K_i &= K_{i0} \cdot \exp\left(\frac{-E_i}{RT}\right), \quad i = \overline{1, 3},
\end{aligned} \tag{1}$$

где А, В, В – реагенты: А – сырье, В – побочный продукт, Б – целевой продукт;

C_A, C_B – концентрация сырья и целевого продукта;

W_1, W_2, W_3 – скорости химических реакций;

L – длина реакционной зоны;

d – диаметр трубы;

S – удельная поверхность катализатора;

F – площадь поперечного сечения трубы;

G – расход сырья;

T – температура в зоне реакций;

c, γ, v – стехиометрические коэффициенты;

$K_{i0}, i = 1, 2, 3$ – предэкспоненциальные множители;

$E_i, i = 1, 2, 3$ – энергии активации реакций;

R – универсальная газовая постоянная;

b – константа.

Система (1) – математическая модель трубчатого реактора для задачи поиска максимального, теоретически возможного выхода целевого продукта.

Поставленная задача относится к классу вариационных задач, для решения которых чаще всего используются прямые вариационные методы, общая схема применения которых заключается в том, что исходная (вариационная) постановка задачи сводится к постановке задачи в виде поиска экстремума функции многих переменных с ограничениями, т.е. к задаче математического программирования [2].

Постановка задачи для одной трубы фиксированного диаметра d сводится к поиску таких значений $T(l), G, C_A(0), L$, что функционал $I[T(l), G, C_A(0), L] = C_B(L)$ достигает максимума при выполнении условий (1).

Зададим искомую экстремаль $T(l)$ в какой-либо форме, удобной для дальнейшего применения, например, в виде степенного полинома:

$$T(l) = \sum_{i=0}^n a_i \cdot l^i \tag{2}$$

С учетом ограничения выражение (2) примет следующий вид:

$$T(l) = \begin{cases} T_{\max}, & \text{если } T(l) \geq T_{\max}; \\ \sum_{i=0}^n a_i \cdot l^i, & \text{если } T_{\min} < T(l) < T_{\max}; \\ T_{\min}, & \text{если } T(l) \leq T_{\min}. \end{cases} \quad (3)$$

Тогда критерий оптимальности $I[T(l), G, C_A(0), L]$ будет преобразован к функции многих переменных, т. е.:

$$I[T(l), G, C_A(0), L] = I[G, C_A(0), L, a_i, n] \quad i = \overline{0, n}.$$

Таким образом, вариационная задача сводится к задаче математического программирования: необходимо найти такие $G, C_A(0), L, n, a_i, i = \overline{0, n}$, что критерий оптимальности $I[G, C_A(0), L, n, a_i] = C_B(L)$ достигает максимума при выполнении условий (3.1), (3.3).

Решение этой задачи может быть осуществлено с применением одного из методов непрерывного нелинейного программирования, например, методом наискорейшего спуска.

Функция $T(l)$ может быть найдена как в классе непрерывных, так и в классе кусочно-постоянных функций. В последнем случае выражение (3) преобразуется к виду:

$$T(l) = \begin{cases} T_m, a e_x & c 0 \leq l \leq l_{\text{п}} \\ T_m, i e_n & c l_{\text{п}} \leq l \leq L \end{cases} \quad (4)$$

или

$$T(l) = \begin{cases} T_m, i e_n & c 0 \leq l \leq l_{\text{п}} \\ T_m, a e_x & c l_{\text{п}} \leq l \leq L \end{cases}$$

где $l_{\text{пер}}$ – координата «точки переключения».

При этом критерий оптимальности примет вид:

$$I[C_A(0), G, L, l_{\text{п}}] = C_B(L), \quad (5)$$

а постановка задачи сведется к следующему: необходимо найти такие $C_A(0), G, L, l_{\text{п}}$, что критерий (5) достигает максимума при выполнении условий (1), (4).

Графическое представление решений математических моделей (1) – (3) приведено на рис. 9.

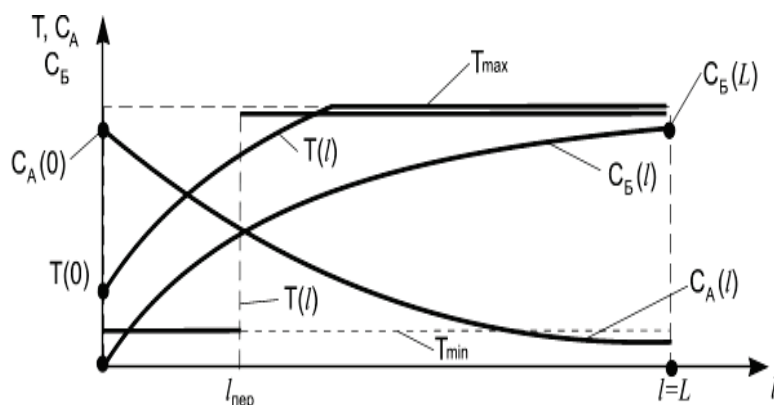


Рис. 9. Результаты решения задачи теоретической оптимизации

Решение задачи теоретической оптимизации позволяет получить верхнюю оценку выхода целевого продукта $C_B(L)$ в трубчатом реакторе с заданным кинетическим механизмом протекания химических превращений. Наличие такого решения дает проектировщику представление о том, насколько близко он находится к теоретически возможному выходу $C_B(L)$ при решении реальной задачи. Очевидно, что этот показатель при любых ухищрениях проектировщика, связанных с конструкцией аппарата, не может быть превышен.

Постановка задач реализации процесса в реакторе имеет следующий вид: необходимо найти такие значения $d, L, C_A(0), G, T(0), T_x(0), G_x$, что критерий оптимальности $I = C_B(L)[d, L, C_A(0), G, T, T_x(0), G_x]$ достигает максимума при выполнении условий математической модели.

Рассмотрим вид этих условий. Искомые параметры из условий физической реализуемости должны быть ограничены:

$$\begin{aligned}
 d_{\min} &\leq d \leq d_{\max} \\
 L_{\min} &\leq L \leq L_{\max} \\
 C_A(0)_{\min} &\leq C_A(0) \leq C_A(0)_{\max} \\
 G_{\min} &\leq G \leq G_{\max} \\
 T(0)_{\min} &\leq T(0) \leq T(0)_{\max} \\
 T_x(0)_{\min} &\leq T_x(0) \leq T_x(0)_{\max} \\
 G_{x\min} &\leq G_x \leq G_{x\max}
 \end{aligned} \tag{6}$$

Предположим, что все три реакции экзотермические, т. е. при превращении (расходовании, получении) одного моля реагента образуется Q_i количество тепла, $i = \overline{1,3}$. Таким образом, в процессе получения веществ Б и С в реакционной зоне имеются внутренние источники тепла. С учетом принятых допущений уравнения, описывающие изменение концентраций и температур в зоне реакции и межтрубном пространстве, можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned}
 \frac{dC_A(l)}{dl} &= -\frac{S \cdot F}{G}(W_1 + W_3); \\
 \frac{dC_B(l)}{dl} &= \frac{S \cdot F}{G}(W_1 - W_2);
 \end{aligned}$$

$$\frac{dT(l)}{dl} = \frac{S \cdot F}{G \cdot c} \sum_{i=1}^3 W_i \cdot Q_i - \frac{K_T \cdot \Pi}{G \cdot c} (T - T_x);$$

$$\frac{dT_x(l)}{dl} = \frac{K_t \cdot \Pi}{G_x \cdot c_x} (T - T_x); \quad (7)$$

$$C_A(0) = C_{A0}; C_B(0) = 0; T(0) = T_0; T_x(0) = T_{x0}; 0 \leq l \leq L;$$

$$W_1 = K_1 \cdot \frac{C_B^v}{1 + b \cdot C_A^c}; \quad W_2 = K_2 \cdot C_A; \quad W_3 = K_3 \cdot \frac{C_B^y}{1 + b \cdot C_A^c};$$

$$K_i = K_{i0} \cdot \exp\left(\frac{-E_i}{RT}\right), \quad i = \overline{1,3},$$

где C_A, C_B – концентрации сырья и полезного продукта;

$T(l)$ – температура в зоне реакции;

S_0 – удельная поверхность катализатора $\text{м}^2/\text{м}^3$;

F – поверхность раздела реакционной зоны и рубашки;

G – расход исходной смеси, поступающей в реактор;

L – длина реакционной зоны;

K_{i0} – константы скорости i -й реакции, $i = 1, 2, 3$;

γ, ν, c – стехиометрические коэффициенты;

R – универсальная газовая постоянная;

E_i – энергия активации i -й реакции;

Q_i – тепловой эффект i -й реакции.

Для решения уравнений математической модели (7) может быть использован метод Рунге-Кутты.

Таким образом, математическая модель трубчатого реактора с последовательно-параллельным кинетическим механизмом получения целевого продукта Б, предназначенная для поиска основных конструктивных и режимных характеристик аппарата, может быть представлена системой (5), (6).

В окончательном виде формализованная постановка задачи поиска режимных и конструктивных характеристик реактора выглядит так: необходимо найти такие $d, L, m, C_A(0), G, T(0), T_x(0), G_x$, что критерий оптимальности $I = C_B(L)[d, L, m, C_A(0), G, T(0), T_x(0), G_x]$ достигает максимума. Здесь m – число труб реактора, которое определяет его производительность [3].

Далее расчетные соотношения приводятся для одной трубы. Поставленная задача относится к классу задач непрерывного математического программирования и может быть решена одним из градиентных или безградиентных методов. В результате решения задачи реализации исследователь получает следующие результаты: максимальное значение $C_B(L)$, величины $C_A(0), T(0), G, G_x, T_x(0), d$, проскок сырья $C_A(L)$ распределения $T(l), T_x(l), C_A(l), C_B(l)$ по длине реакционной зоны, предельное значение температуры в зоне реакции, длину реакционной зоны L . На рис. 10 приводится графическая иллюстрация решения задачи реализации. Температурный «выброс» в начале реакционной зоны объясняется экзотермическим характером всех трех реакций.

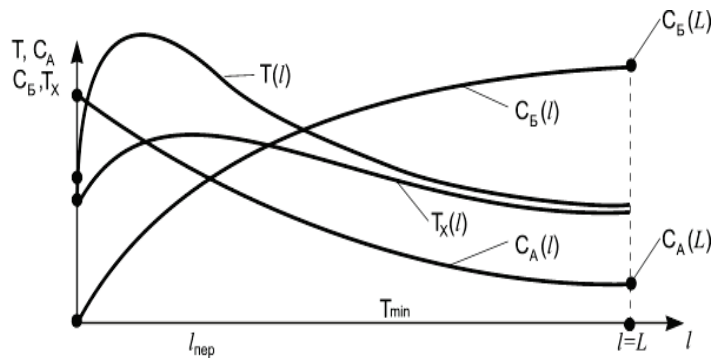


Рис. 10. Решение задачи реализации режимных и конструктивных характеристик трубчатого реактора

Решение задачи реализации учитывает реальные условия теплообмена. Как частный случай решения задач теоретической оптимизации и реализации можно осуществлять при фиксированной, т.е. задаваемой заранее проектировщиком длины реакционной зоны.

Рассмотрим ситуацию, когда кроме перечисленных выше параметров, в качестве варьируемой величины используется активность катализатора, изменяющаяся по длине реакционной зоны. Подобный подход позволяет устранить перегрев в реакционной зоне и устранить его отрицательное влияние на выход целевого продукта. Естественно, что осуществить загрузку катализатора с различной активностью при числе труб более тысячи штук затруднительно, а порой невозможно. Поэтому постановку задачи поиска режимных и конструктивных характеристик трубчатого реактора будем осуществлять в классе непрерывных и кусочно-постоянных функций, которые характеризуют изменение активности катализатора по длине реакционной зоны.

Постановка задачи управления активностью катализатора в реакторе имеет следующий вид: необходимо найти такие значения $\varphi(l), d, L, C_A(0), G, T(0), T_x(0), G_x$, что критерий оптимальности $I = C_A(L)[\varphi(l), d, L, C_A(0), G, T, T_x(0), G_x]$ достигает максимума при выполнении условий математической модели. В случае задания распределения активности катализатора в виде непрерывной функции будет получена верхняя оценка решения задачи (теоретически возможная, но на практике неприменимая). Введем понятие функции распределения активности катализатора по длине реакционной зоны:

$$\varphi(l), \quad 0 \leq l \leq L, \quad 0 \leq \varphi(l) \leq 1 \quad (8)$$

За меру активности катализатора в рассмотренных выше примерах использовалась удельная поверхность S . Тогда

$$S = S_0 \cdot \varphi(l), \quad 0 \leq l \leq L, \quad (9)$$

где S_0 – удельная поверхность катализатора при загрузке; S – текущее значение удельной поверхности катализатора.

Если $\varphi(l)$ непрерывная функция, то ее вид может быть следующим:

$$\varphi(l) = \sum_{i=0}^K b_i \cdot l^i \quad (10)$$

Тогда постановка задачи поиска режимных и конструктивных характеристик трубчатого реактора примет следующий вид: необходимо найти такие $T(l), \varphi(l), G, C_A(0), L, d, m$, что критерий оптимальности $I[T(l), \varphi(l), G, C_A(0), L, d, m] = C_6(L)$ достигает максимума.

Эта постановка задачи (вариационной) позволяет найти теоретически возможный выход целевого продукта $C_B(L)$ при произвольном, не зависящем от условий реализации $T(l)$ и $\varphi(l)$ изменении этих величин.

В реальных условиях число зон с различной активностью катализатора может колебаться от двух до трех-пяти, так как в промышленном реакторе провести более мелкое разбиение рабочей зоны трубы весьма трудно.

Таким образом, постановка задачи реализации условий теплопередачи и распределения активности катализатора по длине реакционной зоны сводится к следующему: необходимо найти такие $T(0), C_A(0), G, T_x(0), G_x, L, d, m, \varphi_1, l_{\text{пер}}$, что критерий оптимальности:

$$I[T(0), C_A(0), G, T_x(0), G_x, L, d, m, \varphi_1, l_{\text{пер}}] = C_B(L) \quad (11)$$

достигает максимума при выполнении условий: математической модели трубчатого реактора, учитывающей реальное распределение $T(l)$ и $\varphi(l)$ по длине реакционной зоны.

Таким образом, поиск функции $\varphi(l)$ осуществляется в классе кусочно-постоянных функций. Представим $\varphi(l)$ в следующем виде:

$$\varphi(l) = \begin{cases} \varphi_1, & \text{если } 0 \leq l \leq l_{\text{пер}} \\ 1, & \text{если } l_{\text{пер}} < l \leq L \end{cases}$$

или

$$\varphi(l) = \begin{cases} 1, & \text{если } 0 \leq l \leq l_{\text{пер}} \\ \varphi_1, & \text{если } l_{\text{пер}} < l \leq L \end{cases} \quad (12)$$

Условие (8) записано для случая, когда число зон с различной активностью катализатора равно двум. Для трех зон условие (12) примет следующий вид:

$$\varphi(l) = \begin{cases} \varphi_1, & \text{если } 0 \leq l \leq l_{\text{пер1}} \\ \varphi_2, & \text{если } l_{\text{пер1}} < l \leq l_{\text{пер2}} \\ 1, & \text{если } l_{\text{пер2}} < l \leq L \end{cases}$$

или

$$\varphi(l) = \begin{cases} 1, & \text{если } 0 \leq l \leq l_{\text{пер1}} \\ \varphi_1, & \text{если } l_{\text{пер1}} < l \leq l_{\text{пер2}} \\ \varphi_2, & \text{если } l_{\text{пер2}} < l \leq L \end{cases} \quad (13)$$

Аналогично можно записать условие определения $\varphi(l)$ при четырех или пяти зонах.

В условиях (12), (13) верхняя запись представляет возрастающую функцию $\varphi(l)$, нижняя – убывающую. Использование той или другой формы записи для определения $\varphi(l)$ зависит от характера тепловых эффектов реакций и конструкции теплообменных устройств реактора. Уточним условия, входящие в математическую модель реактора в соответствии с поставленной задачей. Математическая модель трубчатого реактора для приведенной выше постановки задачи примет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{dC_A(l)}{dl} &= -\frac{S \cdot F}{G} (W_1 + W_3); \\ \frac{dC_B(l)}{dl} &= \frac{S \cdot F}{G} (W_1 - W_2); \\ \frac{dT(l)}{dl} &= \frac{S \cdot F}{G \cdot c} \sum_{i=1}^3 W_i \cdot Q_i - \frac{K_T \cdot \Pi}{G \cdot c} (T - T_x); \\ \frac{dT_x(l)}{dl} &= \frac{K_t \cdot \Pi}{G_x \cdot c_x} (T - T_x); \\ C_A(0) &= C_{A0}; C_B(0) = 0; T(0) = T_0; T_x(0) = T_{x0}; 0 \leq l \leq L; \\ W_1 &= K_1 \cdot \frac{C_B^v}{1 + b \cdot C_A^c}; \quad W_2 = K_2 \cdot C_A; \quad W_3 = K_3 \cdot \frac{C_B^y}{1 + b \cdot C_A^c}; \\ K_i &= K_{i0} \cdot \exp\left(\frac{-E_i}{RT}\right), \quad i = \overline{1,3}. \end{aligned} \quad (14)$$

$$\varphi(l) = \begin{cases} \varphi_1, & \text{если } 0 \leq l \leq l_{\text{пер}} \\ 1, & \text{если } l_{\text{пер}} < l \leq L \end{cases}$$

$$\begin{aligned} d_{\min} \leq d \leq d_{\max}; \quad L_{\min} \leq L \leq L_{\max}; \quad C_A(0)_{\min} \leq C_A(0) \leq C_A(0)_{\max}; \\ G_{\min} \leq G \leq G_{\max}; \quad T(0)_{\min} \leq T(0) \leq T(0)_{\max}; \quad C_{x\min} \leq C_x \leq C_{x\max}; \\ T_x(0)_{\min} \leq T_x(0) \leq T_x(0)_{\max}; \quad 0 \leq \varphi_1 \leq 1; \quad 0 \leq l_{\text{пер}} \leq L. \end{aligned}$$

При разработке математической модели (14) сделано дополнительное допущение, что число зон с различной активностью катализатора равно двум, а функция $\varphi(l)$ – возрастающая.

Таким образом, формализованная (окончательная) постановка задачи поиска конструктивных и режимных характеристик трубчатого реактора сводится к следующему: необходимо найти такие $T(0), C_A(0), G, T_x(0), G_x, L, d, n, \varphi_1, l_{\text{пер}}$, что критерий оптимальности (12) достигает своего максимума при ограничениях (14).

Решение подобной задачи позволяет «разгрузить» лобовой слой катализатора при сильно экзотермических реакциях и упростить систему теплоотвода. Кроме этого, количество катализатора, необходимое для загрузки в реактор, снизилось. Выравнивание температурного режима и снижение количества катализатора в реакционной зоне способствует снижению себестоимости готовой продукции.

Рассмотрим работу программы. При запуске программы перед пользователем загружается главное окно программы (рис. 11). В этом окне представлена кинетика реакции и соответствующие формулы для расчета скоростей реакции.

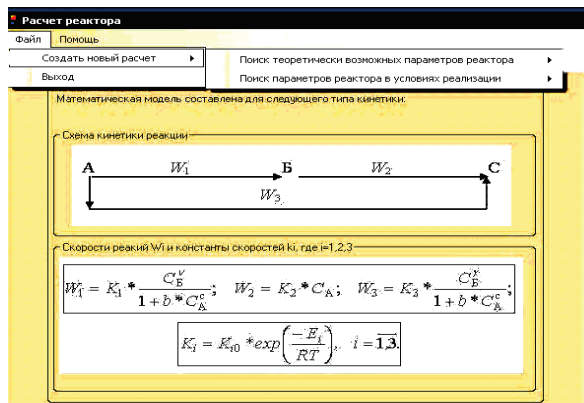


Рис. 11. Главное окно программы

В верхней части главного окна программы находится панель с двумя вкладками: «файл» и «помощь». Во вкладке «файл» находится две кнопки: «сделать расчет» и «выход» (рис. 12).

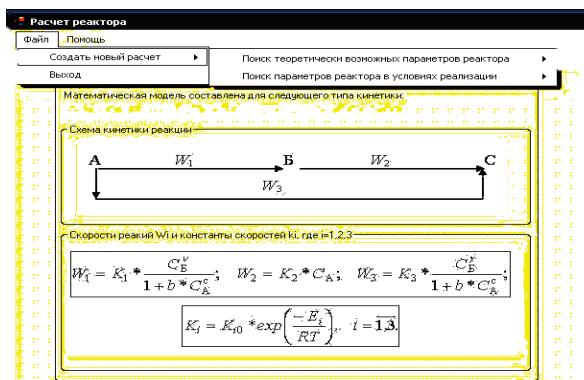


Рис. 12. Выбор вида расчета

Для решения задачи реализации необходимо выбрать пункты меню «Файл» → «Создать новый расчет» → «Поиск параметров реактора в условиях реализации» → «Поиск параметров реактора с реальным температурным полем». После выбора появится окно решения задачи реализации (рис. 13).

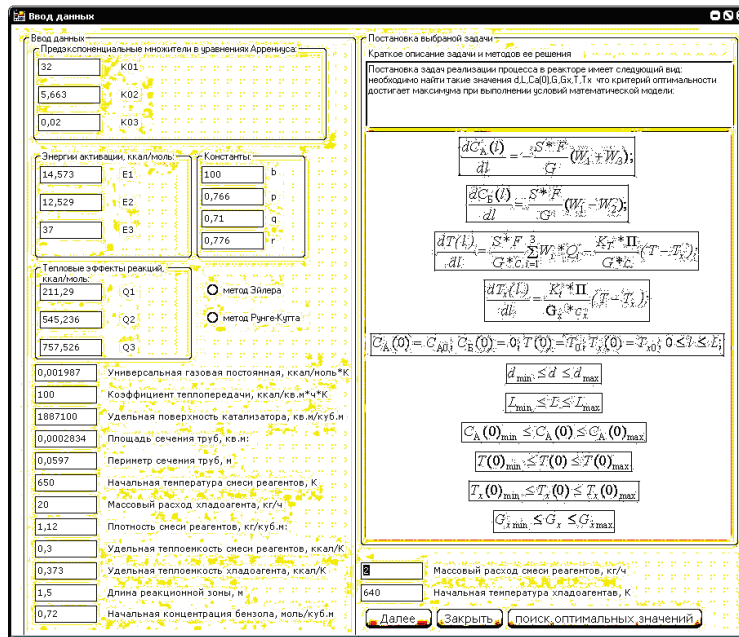


Рис. 13. Окно решения задачи реализации

В левой части окна представлены поля ввода данных. В правой части окна находится поле постановки задачи. Внизу окна расположены три кнопки: «далее», «закрывать» и «поиск оптимальных значений». Также пользователю на выбор предоставляется метод решения системы дифференциальных уравнений: метод Рунге-Кутты и модифицированный метод Эйлера [4] (рис. 14).

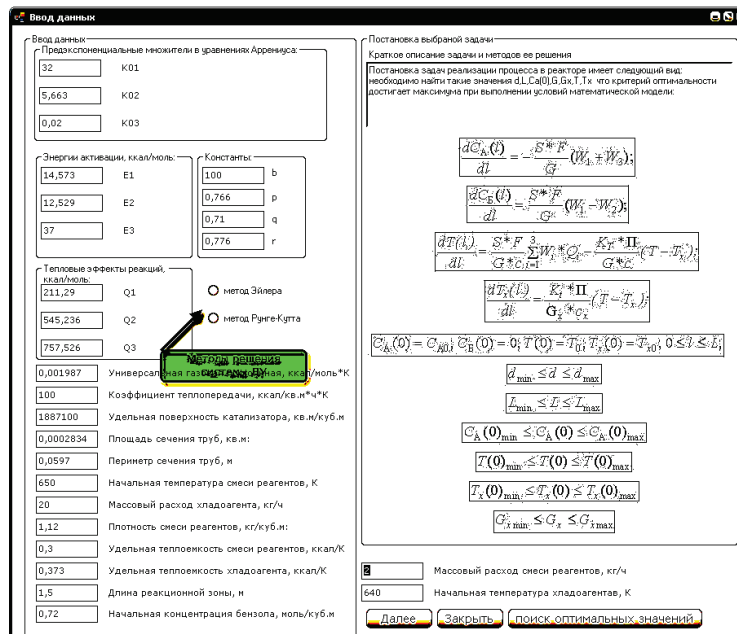


Рис. 14. Выбор метода решения системы уравнений

При нажатии пользователем кнопки «далее» перед ним появляется окно с графиками распределения концентраций исходной смеси и продукта и температур смеси и хладагента (рис. 15).

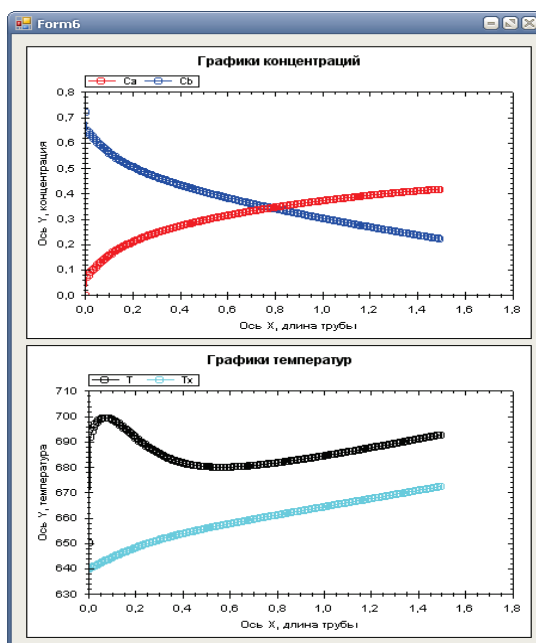


Рис. 15. Графики распределения температур и концентраций

При нажатии кнопки «поиск оптимальных значений» программа производит поиск наиболее оптимальных режимных и конструктивных характеристик и выводит пользователю сообщение с найденными значениями (рис. 16).

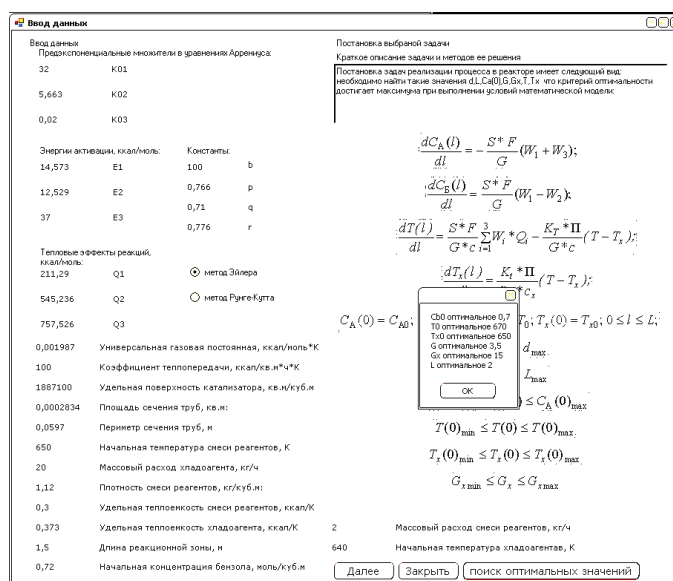


Рис. 16. Нахождение оптимальных характеристик

При нажатии кнопки «заккрыть» программа закрывает окно решения задачи реализации трубчатого реактора.

Таким образом, в данном окне программы пользователь может решить задачу реализации, т. е. произвести поиск оптимальных режимных и конструктивных характеристик реактора, а также наглядно посмотреть распределение температур и концентраций по длине реактора.

Рассмотрим расчет для задачи поиска оптимальных режимных и конструктивных характеристик при помощи управления активностью катализатора.

Выше был рассмотрен интерфейс главного окна программы, поэтому далее он будет пропущен, а работу будем рассматривать уже непосредственно с окна решения задачи управления активностью катализатора.

Для того чтобы загрузить окно решения задачи управления активностью катализатора, необходимо выбрать в верхнем меню «Файл» → «Создать новый расчет» → «Поиск параметров реактора в условиях реализации» → «Управление активностью катализатора» (рис. 17).

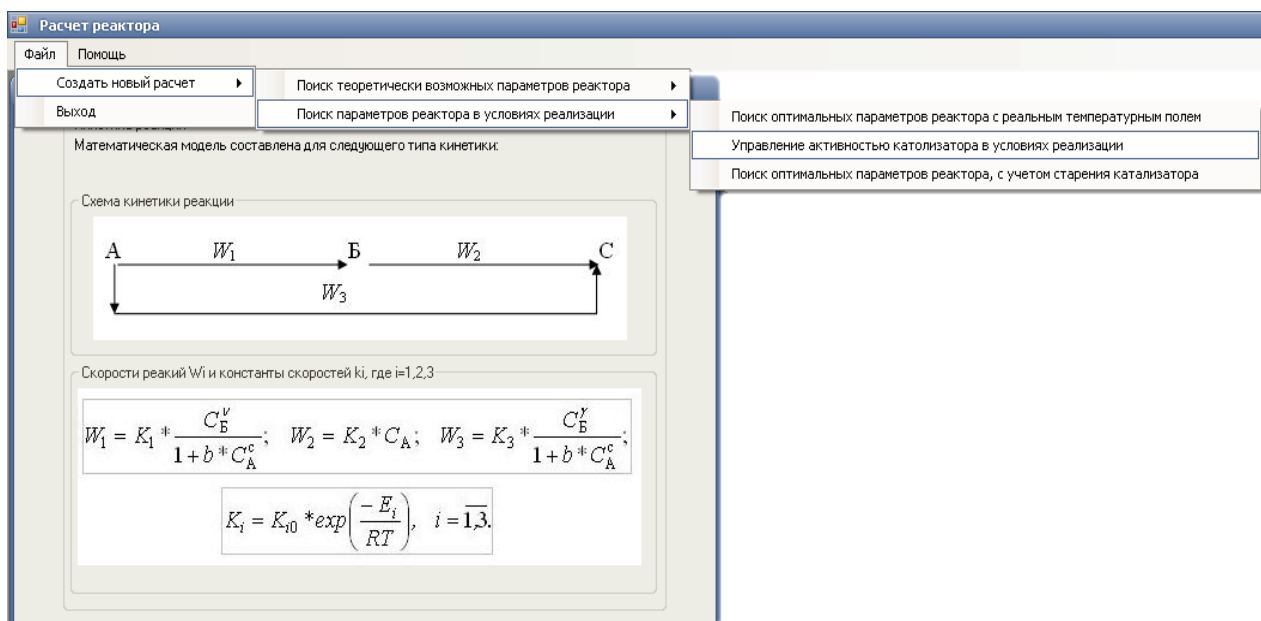


Рис. 17. Выбор вида расчета

После выбора этого пункта меню перед пользователем загрузится окно решения задачи (рис. 18).

Ввод данных

Предэкспоненциальные множители в уравнениях Аррениуса:

32 K01
5,663 K02
0,02 K03

Энергии активации, ккал/моль:

14,573 E1
12,529 E2
37 E3

Тепловые эффекты реакций, ккал/моль:

211,29 Q1
545,236 Q2
757,526 Q3

Константы:

100 b
0,766 p
0,71 q
0,776 r

Методы решения:

метод Эйлера
 метод Рунге-Кутты

0,001987 Универсальная газовая постоянная, ккал/моль*К
100 Коэффициент теплопередачи, ккал/кв.м*ч*К
1887100 Удельная поверхность катализатора, кв.м/куб.м
0,0002834 Площадь сечения труб, кв.м:
0,0597 Периметр сечения труб, м
650 Начальная температура смеси реагентов, К
20 Массовый расход хладагента, кг/ч
1,12 Плотность смеси реагентов, кг/куб.м:
0,3 Удельная теплоемкость смеси реагентов, ккал/К
0,373 Удельная теплоемкость хладагента, ккал/К
1,5 Длина реакционной зоны, м
0,72 Начальная концентрация бензола, моль/куб.м
0,5 Расстояние до точки переключения, м

Постановка выбранной задачи

Краткое описание задачи и методов ее решения

Постановка задач реализации процесса в реакторе имеет следующий вид: необходимо найти такие значения $dL, Ca(0), G_x, T_x, l_{пер}$ что критерий оптимальности достигнет максимума при выполнении условий математической модели.

$$\varphi(l) = \begin{cases} \varphi_1, & \text{если } 0 \leq l \leq l_{пер} \\ 1, & \text{если } l_{пер} < l \leq L \end{cases}$$

$$\varphi(l) = \sum_{i=0}^K b_i * l^i$$

$$\frac{dC_A(l)}{dl} = -\frac{S * F}{G} (W_1 + W_2);$$

$$\frac{dC_B(l)}{dl} = \frac{S * F}{G} (W_1 - W_2);$$

$$\frac{dT(l)}{dl} = \frac{S * F}{G * c} \sum_{i=1}^3 W_i * Q_i - \frac{K_T * \Pi}{G * c} (T - T_x);$$

$$S = S_0 * \varphi(l), \quad \frac{dT_x(l)}{dl} = \frac{K_t * \Pi}{G_x * c_x} (T - T_x);$$

$$C_A(0) = C_{A0}; C_B(0) = 0; T(0) = T_0; T_x(0) = T_{x0}; 0 \leq l \leq L;$$

$$d_{min} \leq d \leq d_{max} \quad 0 \leq \varphi_1 \leq 1; \quad 0 \leq l_{пер} \leq L;$$

$$l_{min} \leq L \leq l_{max}$$

$$C_A(0)_{min} \leq C_A(0) \leq C_A(0)_{max}$$

$$T(0)_{min} \leq T(0) \leq T(0)_{max}$$

$$T_x(0)_{min} \leq T_x(0) \leq T_x(0)_{max}$$

$$G_x_{min} \leq G_x \leq G_x_{max};$$

Активность катализатора до точки переключения
2 Массовый расход смеси реагентов, кг/ч
640 Начальная температура хладагента, К

Далее Закрыть оптимизация

Рис. 18. Окно решения задачи

В этом окне слева представлены поля для ввода информации. Слева находится постановка выбранной задачи. Также пользователь может выбрать метод решения системы дифференциальных уравнений (рис. 19). Также в верхней части есть выбор вида функции распределения активностью катализатора: в виде кусочно-постоянной функции (реализация) и в виде непрерывной функции (верхняя оценка) (рис. 20).

При нажатии пользователем кнопки «далее» перед пользователем появляется окно с графиками распределения концентраций исходной смеси и продукта и температур смеси и хладагента и функцией распределения активности катализатора (рис. 21).

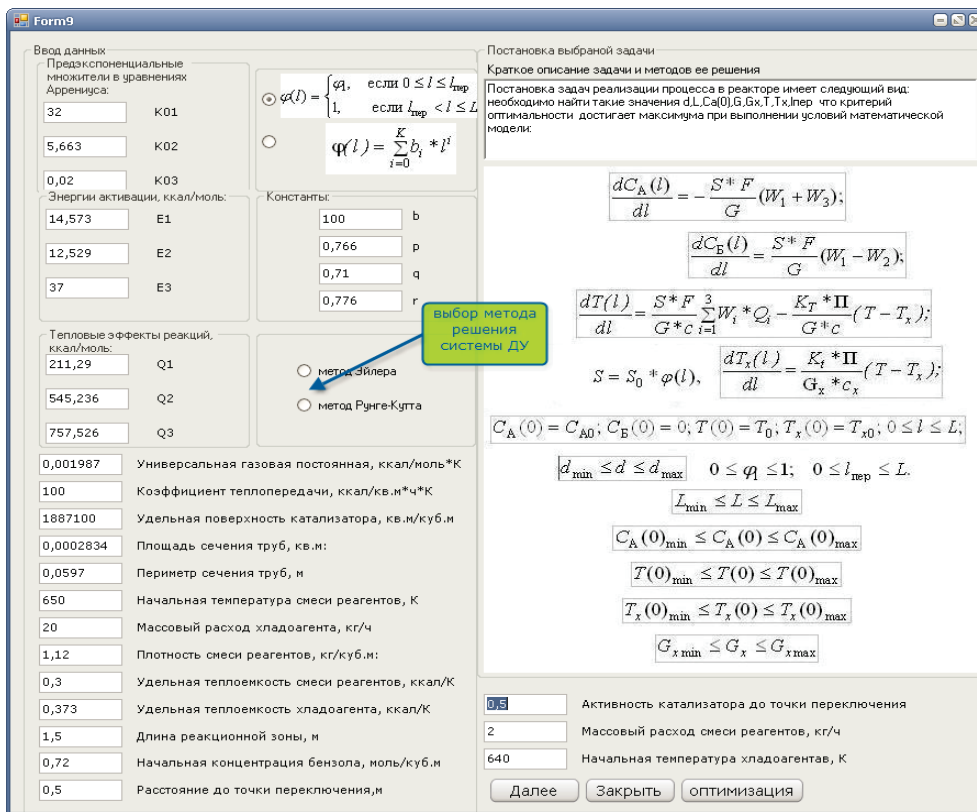


Рис. 19. Выбор метода решения системы

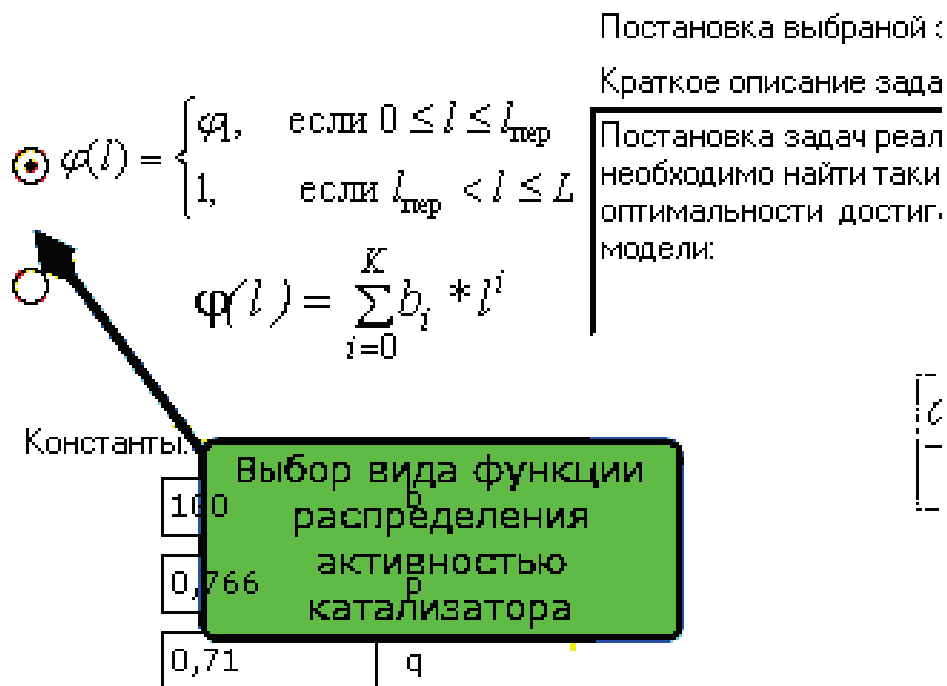


Рис. 20. Выбор вида функции распределения активности катализатора

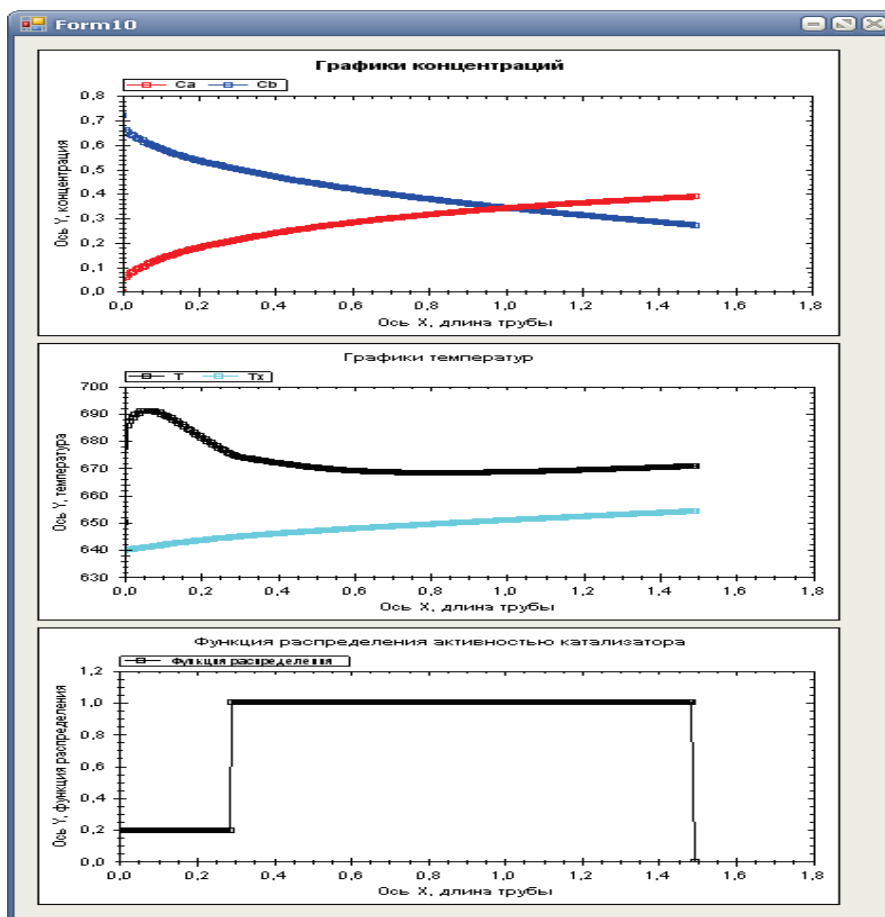


Рис. 21. Графики распределения температур и концентраций и функции распределения активности катализатора

При нажатии кнопки «поиск оптимальных значений» программа производит поиск наиболее оптимальных режимных и конструктивных характеристик и выводит пользователю сообщение с найденными значениями.

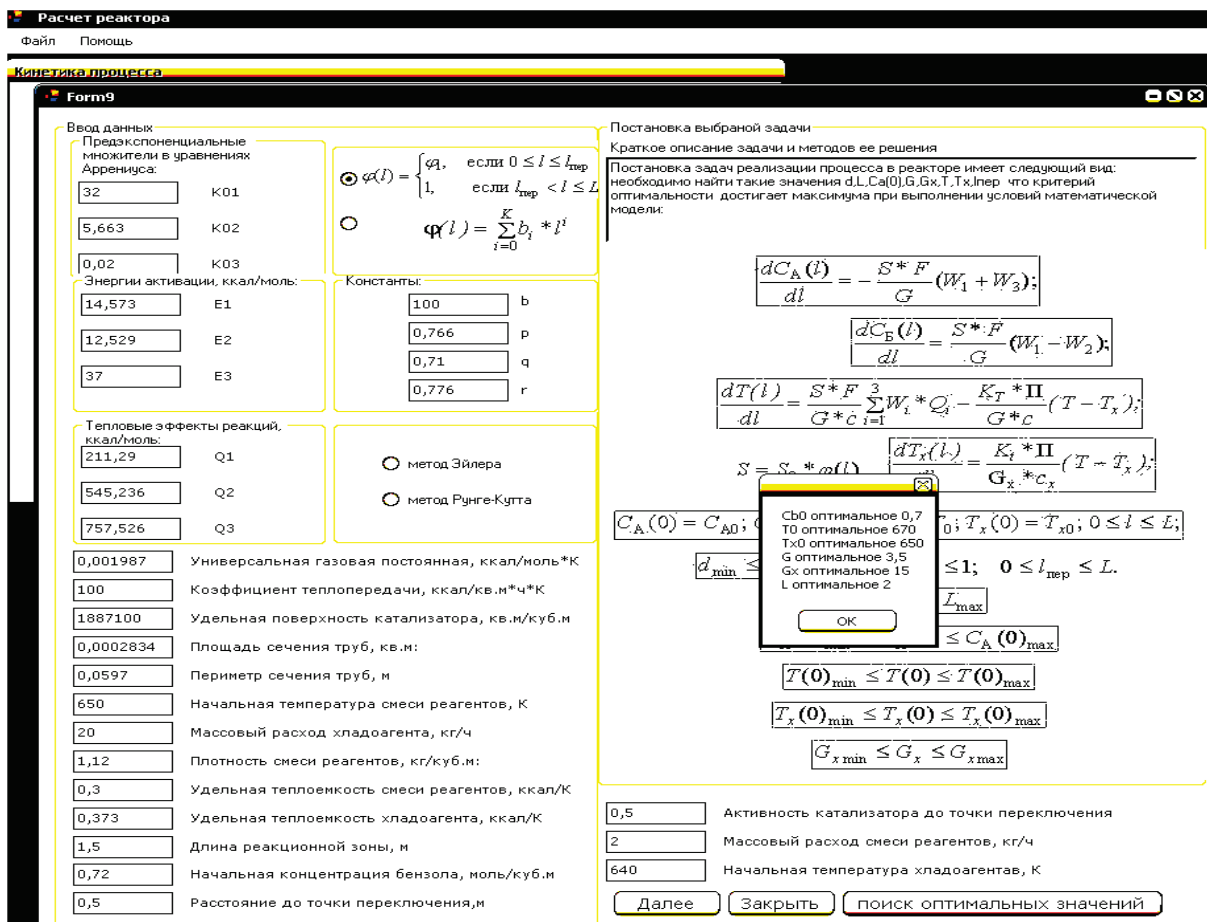


Рис. 22. Поиск оптимальных характеристик

При нажатии кнопки «закрыть» программа закрывает окно решения задачи управления активностью катализатора трубчатого реактора.

Таким образом, в данном окне программы пользователь может решить задачу управления активностью катализатора, т. е. произвести поиск оптимальных режимных и конструктивных характеристик реактора, а также наглядно посмотреть распределение температур и концентраций по длине реактора.

Теперь рассмотрим расчет задачи теоретической оптимизации.

Для того чтобы загрузить окно решения задачи управления активностью катализатора, необходимо выбрать в верхнем меню «Файл» → «Создать новый расчет» → «Поиск теоретически возможных параметров реактора» → «Функция температуры представлена полиномом» → «Сформировать расчет» (рис. 22).

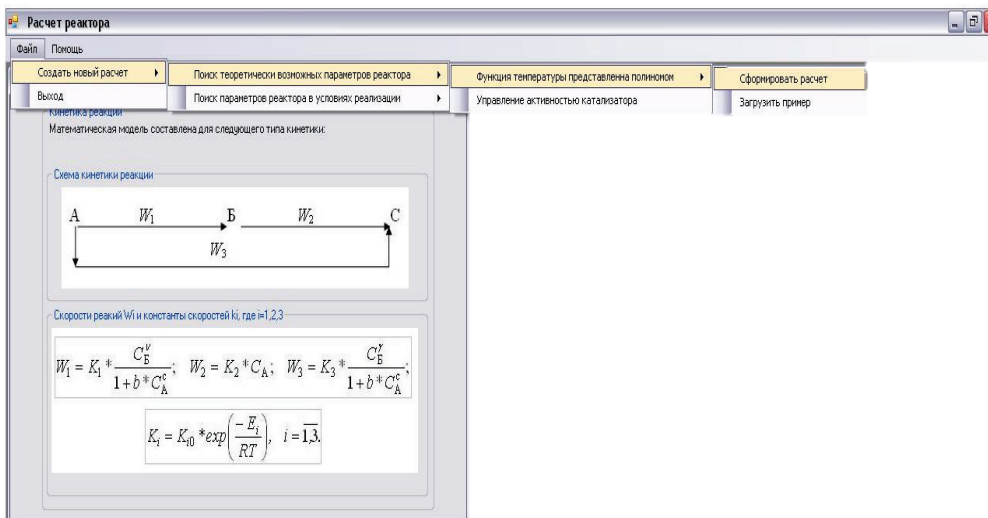


Рис. 23. Выбор вида расчета

После выбора этого пункта меню перед пользователем загрузится окно решения задачи (рис. 23).

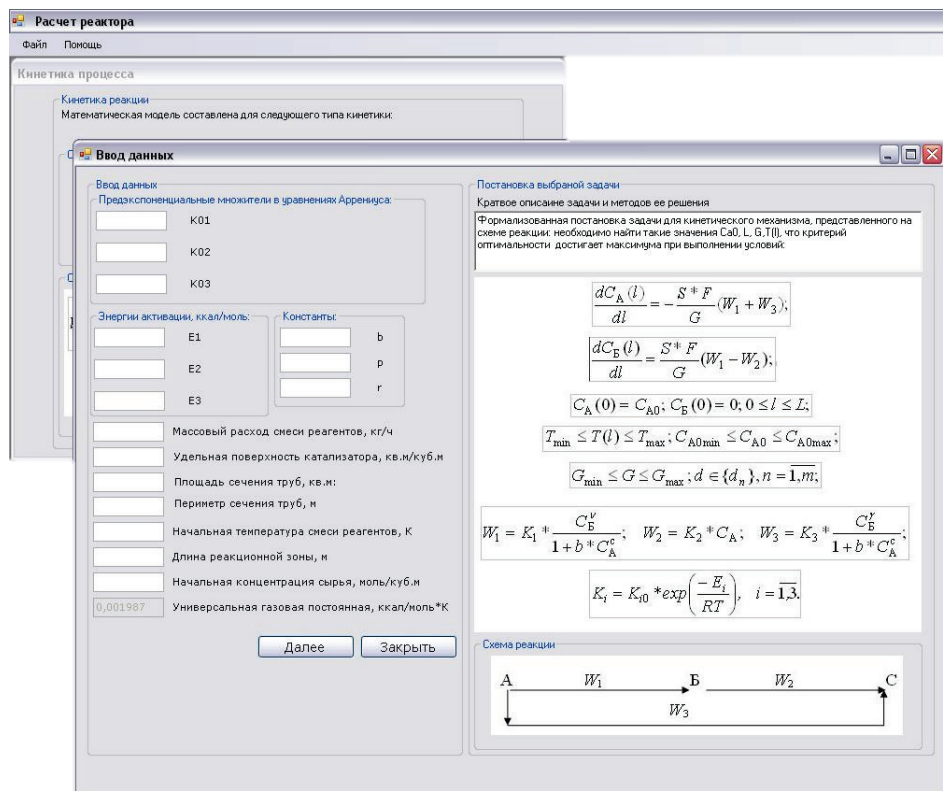


Рис. 24. Окно решения задачи

В этом окне слева представлены поля для ввода информации. Слева находится постановка выбранной задачи. Эти поля необходимо заполнить для дальнейшего решения (рис. 24 и 25).

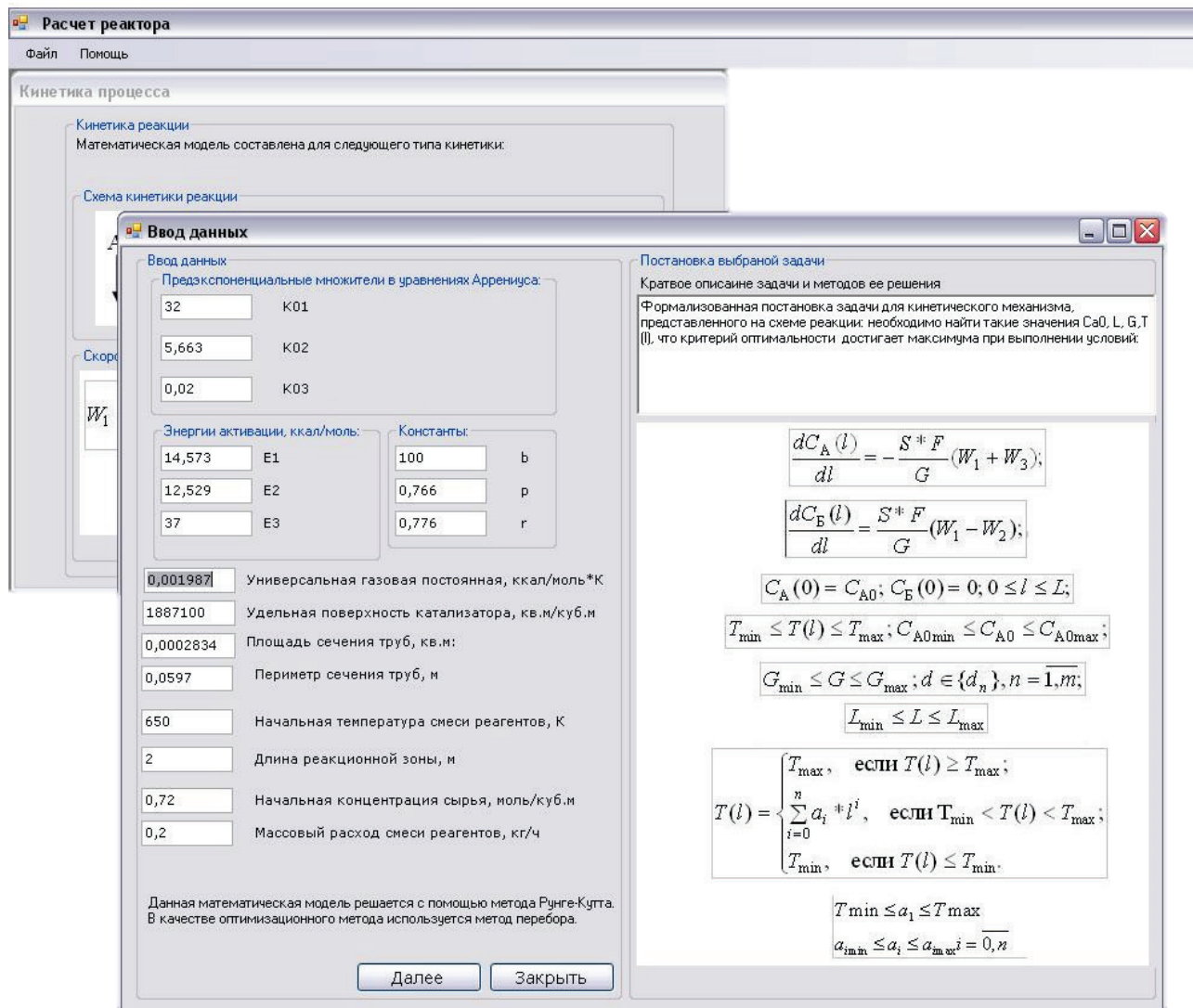


Рис. 25. Выбор метода решения системы

После того как введены данные, необходимо нажать кнопку «далее» для произведения расчета. Перед пользователем появится результат расчета и графики распределения концентраций и температур (рис. 26).



Рис. 26. Графики распределения температур и концентраций

При нажатии кнопки «заккрыть» программа закрывает окно решения задачи. Таким образом, в данном окне программы пользователь может решить задачу теоретической оптимизации, т. е. произвести поиск оптимальных режимных и конструктивных характеристик реактора, а также наглядно посмотреть распределение температур и концентраций по длине реактора. Решение этой задачи позволяет пользователю знать верхнюю оценку выхода продукта из реактора. Это является необходимым для дальнейшего анализа решения задач реализации.

ОПТИМИЗАЦИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА В КАСКАДЕ РЕАКТОРОВ ИДЕАЛЬНОГО СМЕШЕНИЯ (МЕТОД ЛАГРАНЖА)

Математические модели химических реакторов строятся на основе гидродинамических моделей, учитывающих характер распределения времени пребывания частиц потока реагирующей смеси в данном реакторе [5].

Модель идеального смешения. Условия физической реализуемости этой модели выполняются, если во всем потоке происходит полное смешение частиц потока. Любое изменение концентрации вещества на входе потока в зону идеального смешения мгновенно распределяется по всему объему.

Каскадная модель. Она представляет собой последовательное соединение аппаратов идеального перемешивания.

Закон Аррениуса: Зависимость константы скорости реакции от температуры представляется в виде закона Аррениуса:

$$K(T) = k_0 \exp \left[\frac{E}{R} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T} \right) \right], \quad (15)$$

где T – абсолютная температура реакции, K ;

T_0 – расчетное значение абсолютной температуры, K ;

k_0 – постоянный множитель температурного коэффициента;

E – энергия активации, $[кДж/кмоль]$;

R – универсальная газовая постоянная $[кДж/кмоль * K]$.

Из рис. 27 видно, что в диапазоне допустимого изменения температуры кривая закона Аррениуса может быть аппроксимирована прямой линией вида:

$$K(T) = \frac{Ek_0}{RT_0^2} T + k_0 \left(1 - \frac{E}{RT_0} \right) \quad (16)$$

С учетом сказанного выше, обозначив через общее фиксированное время пребывания в каскаде, можем описать процесс в каскаде следующей системой уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_{i-1} - x_i - \tau K(T_i) x_i = 0 \\ \sum_{i=1}^2 \tau_i = \tau \\ K(T_i) = \frac{Ek_0}{RT_0^2} T_i + k_0 \left(1 - \frac{E}{RT_0} \right) \end{array} \right. \quad (17)$$

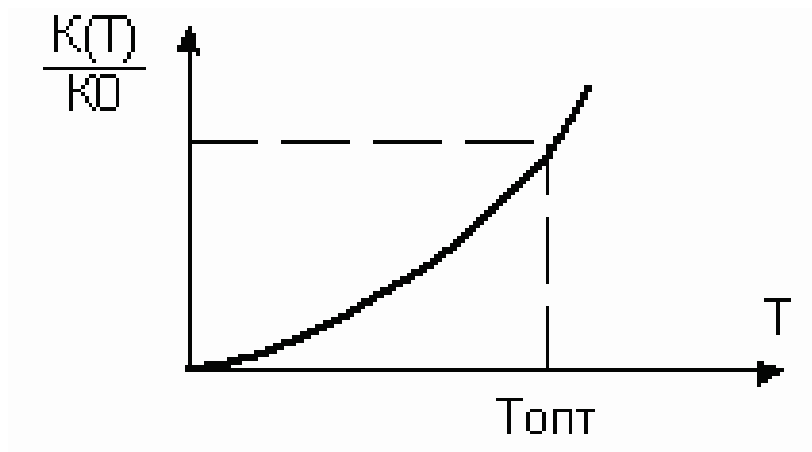


Рис. 27. Определение оптимальной температуры

Решение задач, связанных с отысканием оптимальных условий проведения химических реакций, имеет важное значение при выборе эксплуатационных параметров химических реакторов.

Под оптимальными условиями понимаются оптимальное время пребывания реагентов в реакторе τ и оптимальная температура в реакторе $T_{опт}$, обеспечивающие максимальное или минимальное значение заданного критерия $R_{опт}$ (концентрация продукта на выходе реактора), т. е. для оценки оптимума необходимо выбрать критерии оптимизации (выходной параметр). На основании выбранного критерия оптимизации составляется целевая функция (функция выгоды), представляющая собой зависимость критерия оптимизации от параметров, влияющих на его значение [6].

Задача оптимизации сводится к нахождению экстремума целевой функции.

Постановка оптимальной задачи для каскада идеального перемешивания (рис. 28).

Необходимо найти значение $T_{опт}$ и $\tau_{опт}$, обеспечивающие экстремум критерия оптимальности при наличии ограничений в виде гидродинамических

уравнений при условии $\sum_{i=1}^N \tau_i = \tau$.

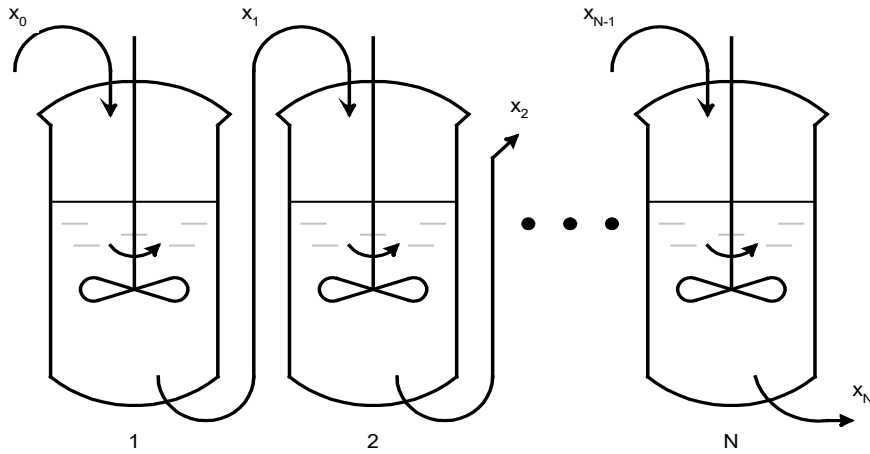


Рис. 28. Схема процесса перемешивания

Аналитический метод нахождения оптимального времени пребывания частиц $\tau_{\text{опт}}$ и $T_{\text{опт}}$.

Для реакции типа $A \rightarrow P \rightarrow S$ найдем состав смеси на выходе реактора идеального смешения.

Аналитические выражения для скоростей образования реагентов А и Р имеют вид:

$$\omega_A = -K(T_1)x_A \quad (18)$$

$$\omega_P = K(T_1)x_A - K(T_2)x_P \quad (19)$$

Стационарный режим определяется системой гидродинамических уравнений (при $\tau_1 = \tau_2$):

$$x_A^{(0)} - x_A - \tau K(T_1)x_A = 0 \quad (20)$$

$$x_P^{(0)} - x_P + \tau(K(T_1)x_A - K(T_2)x_P) = 0, \quad (21)$$

в результате решения которой находим:

$$x_A = \frac{x_A^{(0)}}{1 + \tau K(T_1)} \quad (22)$$

$$x_P = \frac{x_P^{(0)} + \tau K(T_1) \cdot (x_A^{(0)} - x_P^{(0)})}{(1 + \tau K(T_1))(1 + \tau K(T_2))} \quad (23)$$

В частном случае $x_P^{(0)} = 0$ из уравнения (10) получим:

$$x_P = x_A^{(0)} \frac{\tau K(T_1)}{(1 + \tau K(T_1))(1 + \tau K(T_2))} \quad (24)$$

Критерием оптимальности является максимальная концентрация (степень превращения) продукта Р на выходе реактора. Для критерия оптимальности:

$$R_{\text{опт}} = x_P = x_A^{(0)} \frac{\tau K(T_1)}{(1 + \tau K(T_1))(1 + \tau K(T_2))}, \quad (25)$$

где $K(T_1)$, $K(T_2)$ – константы скорости реакции;

t – время пребывания частиц в реакторе;

R – универсальная газовая постоянная;

T_1 – температура реагента А;

T_2 – температура реагента В.

Дифференцируем выражение (12) по τ и T , находим систему уравнений, определяющих оптимальные условия реакции:

$$\frac{\partial R_{opt}}{\partial \tau} = x_A^{(0)} \cdot K(T_1) \cdot \frac{1 - \tau^2 K(T_1)K(T_2)}{[(1 + \tau K(T_1))(1 + \tau K(T_2))]^2} = 0 \quad (26)$$

$$\frac{\partial R_{opt}}{\partial T} = \tau \cdot x_A^{(0)} \cdot K(T_1) \cdot \frac{E_1 \cdot (1 + \tau K(T_2)) - E_2 \cdot \tau \cdot K(T_2) \cdot (1 + \tau K(T_1))}{[(1 + \tau K(T_1))(1 + \tau K(T_2))]^2} = 0 \quad (27)$$

Эта система эквивалентна следующей системе:

$$1 - \tau^2 \cdot K(T_1) \cdot K(T_2) = 0 \quad (28)$$

$$E_1 \cdot (1 + \tau \cdot K(T_2)) - E_2 \cdot \tau \cdot K(T_2) \cdot (1 + \tau \cdot K(T_1)) = 0 \quad (29)$$

Из уравнения (28) выводим формулу для нахождения оптимального времени пребывания в реакторе при заданном значении температуры:

$$\tau_{opt} = [K(T_1) \cdot K(T_2)]^{-0.5} \quad (30)$$

Подставляя выражение (29) в уравнение (30), имеем:

$$E_1 = E_2 \quad (31)$$

Решение уравнения (30) для заданного времени пребывания имеет вид:

$$\frac{1}{\tau \cdot K(T_2)} + 1 = \frac{E_2}{E_1} \cdot (1 + \tau \cdot K(T_1)) \quad (32)$$

Отсутствие абсолютного экстремума у критерия оптимальности (25) означает, что его наибольшее значение следует искать на границе области допустимых значений переменных T и τ .

Для определения оптимальной температуры необходимо решить уравнение (29). Подставим выражение (30) в соотношение для критерия оптимальности (25). В результате получим:

$$R_{opt}(T) = x_A^0 \cdot [1 + (\frac{K(T_1)}{K(T_2)})^{0.5}]^{-2} \quad (33)$$

Если заданы ограничения на температуру $T_m \leq T \leq T_M$, то оптимальная температура будет:

$$T_M \text{ при } E_1 \geq E_2$$

$$T_m \text{ при } E_1 \leq E_2$$

Метод Лагранжа [6]

Если требуется найти экстремум функции:

$$F(x_1, x_2, \dots, x_n) = x^N, \quad (34)$$

которая зависит от n -переменных $x_k (k = 1, 2, \dots, n)$, на которые накладываются ограничения:

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \quad (35)$$
$$i = 1, 2, \dots, m, \quad m < n,$$

то вместо условного экстремума функции можно искать безусловный экстремум обобщенной целевой функции вида:

$$\varphi(x_1 \dots x_n, \lambda_1 \dots \lambda_m) = F(x_1 \dots x_n) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x_1 \dots x_n), \quad (36)$$

где $\lambda_i (i = 1 \dots m)$ – неопределенные множители Лагранжа.

Оптимум определяется из системы уравнений, в которых частные производные функции Лагранжа по всем переменным и множителям Лагранжа приравниваются к нулю.

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi(x_1 \dots x_n, \lambda_1 \dots \lambda_m)}{\partial x_k} = 0 \\ \frac{\partial \varphi(x_1 \dots x_n, \lambda_1 \dots \lambda_m)}{\partial \lambda_i} = 0 \end{cases} \quad (37)$$

РЕШЕНИЕ:

Исходные данные:

$$R := 8.32 \quad x_0 := 0.2$$

$$E := 1000 \quad \tau := 0.820$$

$$K_0 := 0.03$$

$$T_1 := 290$$

$$T_2 := 330$$

$$T_{\max} := 573\text{K}$$

$$T_{\min} := 288$$

Аналитический метод

Используя закон Аррениуса (3), найдем необходимые значения $K(T_1)$ и $K(T_2)$.

$$K(T) := \frac{E \cdot K_0 \cdot T}{R \cdot T_{\min}^2} + K_0 \cdot \left(1 - \frac{E}{R \cdot T_{\min}} \right)$$

$$K(T_1) = 0.03$$

$$K(T_2) = 0.032$$

Из уравнения (30) найдем оптимальное время пребывания в реакторе при заданной температуре:

$$\tau_{\text{опт}} := (K(T1) \cdot K(T2))^{-0.5}$$

$$\tau_{\text{опт}} = 32.316$$

$$x_p(\tau) := x_0 \cdot \frac{\tau \cdot K(T1)}{(1 + \tau \cdot K(T1))(1 + K(T2))}$$

По формуле (24) найдем концентрацию продукта Р на выходе реактора:

$$x_p(\tau) = 0.096$$

$$K(T) := K_0 \cdot \exp\left[\left(\frac{1}{T_{\text{min}}} - \frac{1}{T}\right) \cdot \frac{E}{R}\right]$$

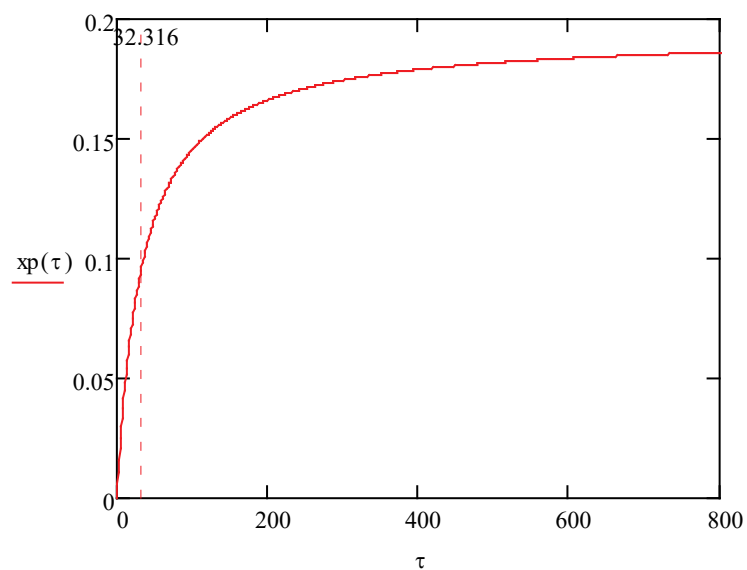


Рис. 29. График зависимости концентрации вещества на выходе от времени пребывания реагентов в реакторе

Для определения оптимальной температуры построим следующий график:

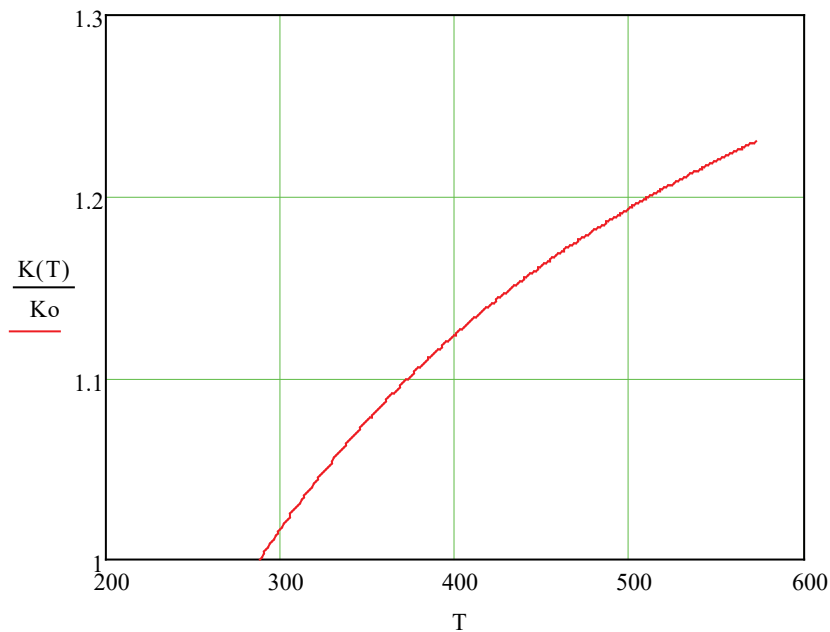


Рис. 30. Определение оптимальной температуры

Из уравнения (32) выразим отношение:

$$\frac{E_2}{E_1} = \left(\frac{1}{\tau_{opt} \cdot K(T_2)} + 1 \right) \cdot \frac{1}{1 + \tau_{opt} \cdot K(T_1)}$$

$$\frac{E_2}{E_1} = 1.003$$

Из этого следует, что $E_2 \geq E_1$, следовательно $T_{opt} = T_{min} = 288 \text{ } ^\circ\text{C}$

Метод Лагранжа

В явном виде выражение для концентрации ключевого реагента на выходе из каскада реакторов имеет вид:

$$x_p = \frac{x_0 \cdot \tau \cdot K(T_1)}{(1 + \tau \cdot K(T_1)) \cdot (1 + \tau \cdot K(T_2))} \text{ при } \tau_1 = \tau_2 = \tau$$

Прологарифмировав, получим:

$$\ln x_p = \ln x_0 + \ln \tau + \ln K(T_1) - \ln[1 + \tau \cdot K(T_1)] - \ln[1 + \tau \cdot K(T_2)]$$

Введем обозначения:

$$\ln x_p = y_1$$

$$\ln[1 + \tau \cdot K(T_1)] = y_2$$

$$\ln[1 + \tau \cdot K(T_2)] = y_3$$

$$\ln x_0 = a_0$$

$$\ln \tau = a_1$$

$$\ln K(T1) = a_2$$

Выражение для ограничения по времени пребывания реагента в каскаде следует из вышеизложенных обозначений:

$$y_2 := \ln(1 + 820 \cdot K(T1))$$

$$y_3 := \ln(1 + 820 \cdot K(T2))$$

$$\frac{\exp(y_2) - 1}{K(T1)} + \frac{\exp(y_3) - 1}{K(T2)} = \tau$$

$$\tau = 1.64 \times 10^3$$

или $a_3 \cdot y_4 - a_3 + a_4 \cdot y_5 - a_4 - \tau = 0$,

где $a_3 = \frac{1}{K(T1)}$; $a_4 = \frac{1}{K(T2)}$; $\exp(y_2) = y_4$; $\exp(y_3) = y_5$

С учетом вышеизложенного задача отыскания оптимальных значений переменных в данном случае выглядит следующим образом:

$$y_1 \rightarrow \max$$

Подставим исходные данные в прологарифмированную формулу:

$$\ln \frac{0.7 \cdot 0.03 \cdot \tau}{(1 + 0.03 \cdot \tau) \cdot (1 + 0.032 \cdot \tau)} - \ln 0.7 - \ln \tau - \ln 0.03 + \ln 1 + 0.03 \ln \tau + \ln 1 + 0.032 \ln \tau = 0$$

$$0.006 \ln \tau - \ln(1 + 0.03 \cdot \tau)(1 + 0.032 \cdot \tau) + 1.609 - \ln \tau + 3.507 + 0.03 \ln \tau + 0.032 \ln \tau = 0$$

$$-0.996 \ln \tau = -5.116$$

$$\ln \tau = 5.13655$$

$$\tau_{opt} = e^{5.13655} = 170.127$$

$$x_p = 0.334$$

1. Запишем обобщенное выражение целевой функции через множители Лагранжа при ограничениях $2 \cdot \tau \leq 870$ и $288 \leq T \leq 573$.

$$\phi(t, T, a1, a2, a3, \lambda1, \lambda2, \lambda3) := Xa0 \cdot \frac{t \cdot k01 \cdot e^{\frac{-E1}{R \cdot T}}}{\left(1 + t \cdot k01 \cdot e^{\frac{-E1}{R \cdot T}}\right) \cdot \left(1 + t \cdot k02 \cdot e^{\frac{-E2}{R \cdot T}}\right)} + \lambda1 \cdot (2t + a1^2 - \tau) + \lambda2 \cdot (T + a2 - 532) + \lambda3 \cdot (T - a3^2 - 280)$$

2. В среде MathCad решим систему уравнений с помощью блока Given-Find [7].

$$\begin{aligned}
T &:= 1 & a1 &:= 0 & \lambda1 &:= 0 \\
t &:= 0 & a2 &:= 0 & \lambda2 &:= 0 \\
& & a3 &:= 0 & \lambda3 &:= 0
\end{aligned}$$

Given

$$\frac{d}{dt} \phi(t, T, a1, a2, a3, \lambda1, \lambda2, \lambda3) = 0$$

$$\frac{d}{dT} \phi(t, T, a1, a2, a3, \lambda1, \lambda2, \lambda3) = 0$$

$$\frac{d}{da1} \phi(t, T, a1, a2, a3, \lambda1, \lambda2, \lambda3) = 0$$

$$\frac{d}{da2} \phi(t, T, a1, a2, a3, \lambda1, \lambda2, \lambda3) = 0$$

$$\frac{d}{da3} \phi(t, T, a1, a2, a3, \lambda1, \lambda2, \lambda3) = 0$$

$$\frac{d}{d\lambda1} \phi(t, T, a1, a2, a3, \lambda1, \lambda2, \lambda3) = 0$$

$$\frac{d}{d\lambda2} \phi(t, T, a1, a2, a3, \lambda1, \lambda2, \lambda3) = 0$$

$$\frac{d}{d\lambda3} \phi(t, T, a1, a2, a3, \lambda1, \lambda2, \lambda3) = 0$$

$$\text{Find}(t, T, a1, a2, a3, \lambda1, \lambda2, \lambda3) = \begin{pmatrix} 435 \\ 288 & 280 \\ 0 \\ 252 \\ 0 \\ 3.067 \times 10^{-6} \\ -1.024 \times 10^{-13} \\ 4.131 \times 10^{-6} \end{pmatrix}$$

Таким образом, $t = 455c$, $T = 288K$, и расчеты аналитического метода сошлись с расчетами метода Лагранжа.

Вывод: таким образом, мы закрепили свои знания о постановке и методах решения оптимизационных задач, решили систему уравнений на ЭВМ в программе Mathcad Professional. При решении поставленной задачи аналитическим методом мы получили, что максимальная концентрация вещества на выходе из реактора достигается в момент времени $\tau = 32.316$ секунд при минимальной температуре $288^\circ C$. При решении задачи методом Лагранжа мы получили, что необходимая нам концентрация вещества на выходе с каскадов реакторов, равная 0.668 , будет получена в момент времени $\tau = 170.127$ секунд.

Порядок выполнения задания

1. Составить в соответствии с заданной схемой реакций на основании закона действующих масс кинетическую модель.
2. Разработать алгоритм расчета составленной кинетической модели с использованием численных.
3. Разработать программу расчета кинетики с учетом температурной зависимости констант скорости гомогенной химической реакции.
4. Обсудить результаты. Сделать выводы по работе.
5. Составить отчет.

Таблица 2 – Варианты заданий

Задания	Уравнение химической реакции	Начальные концентрации, моль/л	Значение констант скоростей при $T = 380$ К			Значения энергии активации E , Дж/моль		
			k_1	k_2	k_3	E_1	E_2	E_3
1	k_1 $2A < 2B + C$ k_2	$CA_0 = 0,5$	0,2	0,5	-	$9,305 \cdot 10^4$	$10,211 \cdot 10^4$	-
2	k_1 $2A > B + C$ k_2 k_3 $D + E > B$	$CA_0=0,3;$ $CE_0=0,2;$ $CD_0=0,2$	0,4	0,2	0,3	$11,514 \cdot 10^4$	$9,524 \cdot 10^4$	$7,254 \cdot 10^4$
3	k_1 $A > 2B + C$ k_2 k_3 $B + D > C$	$CA_0=0,3;$ $CD_0=0,4$	0,2	0,2	0,1	$12,444 \cdot 10^4$	$14,897 \cdot 10^4$	$14,421 \cdot 10^4$
4	k_1 $A + B \gg 2C$ k_2 k_3 $C + D > E$	$CA_0=0,2;$ $CB_0=0,3;$ $CD_0=0,1$	0,4	0,2	0,15	$14,305 \cdot 10^4$	$12,594 \cdot 10^4$	$13,517 \cdot 10^4$
5	k_1 $A + B > C$ k_2	$CA_0=0,2$ $CB_0=0,1$	0,4	0,2	-	$11,514 \cdot 10^4$	$10,386 \cdot 10^4$	-
6	k_1 $A + 2C < B$ k_2 k_3 $B > 2D$	$CA_0=0,6;$ $CC_0=0,8$	0,42	0,2	0,25	$11,354 \cdot 10^4$	$9,592 \cdot 10^4$	$9,436 \cdot 10^4$
7	k_1 $A > E + C$ k_2 $2C < > D$ k_3	$CA_0=0,3$	0,3	0,25	0,1	$14,184 \cdot 10^4$	$13,3444 \cdot 10^4$	$13,762 \cdot 10^4$

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Рыков, С. В., Кудрявцева, И. В., Рыков, С. А., Рыков, В. А. Методы оптимизации в примерах в пакете MathCAD 15. Часть 3. Многомерная оптимизация. Аналитические методы [Текст] / С. В. Рыков, И. В. Кудрявцева, С. А. Рыков, В. А. Рыков. – СПб.: Университет ИТМО, 2018. – 165 с.
2. Мидуков, Н. П. Моделирование технологических и природных систем [Текст]: практикум / Н. П. Мидуков, В. С. Куров, А. О. Никифоров. – СПб.: ВШТЭ СПбГУПТД, 2022 – 41 с.. – URL: <http://nizrp.narod.ru/metod/kafpriarxt/1644427658.pdf> (дата обращения 14.09.22). – Текст: электронный.
3. Моделирование технологических и природных систем. Выполнение курсовой работы [Текст]: методические указания / сост. Н. П. Мидуков, В. С. Куров, А. О. Никифоров. – СПб.: ВШТЭ СПбГУПТД, 2021. – 53 с. – URL: <http://nizrp.narod.ru/metod/kafpriarxt/1637757575.pdf> (дата обращения 14.09.22). – Текст: электронный.
4. Мидуков, Н. П. Сборник кейсов по дисциплине «Процессы и аппараты химической технологии» [Текст]: учебно-практическое пособие / Н. П. Мидуков, В. С. Куров, А. О. Никифоров. – СПб.: ВШТЭ СПбГУПТД, 2018. – 98 с. – URL: http://nizrp.narod.ru/metod/kafpriarxt/2018_10_03_01.pdf (дата обращения 14.09.22). – Текст: электронный.
5. Гребенникова, И. В. Методы оптимизации [Текст]: учебное пособие / И. В. Гребенникова. – Екатеринбург: УрФу, 2017. – 148 с.
6. Моделирование и методы оптимизации [Текст]: методические указания / сост. Е. Г. Суздалов, Т. А. Кравец – СПб.: СПбГУПТД, 2018. – 46 с. – URL: http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=2018392, (дата обращения 14.09.22). – Режим доступа: по паролю. – Текст: электронный..
7. Холоднов, В. А. Системный анализ и принятиерешений. Компьютерное моделирование и оптимизация объектов химической технологии в Mathcad и Excel [Текст]: учебное пособие / В. А. Холоднов, В. П. Решетиловский, М. Ю. Лебедева, Е. С. Боровинская. – СПб.: СПбГИ (ТУ), 2007. – 425 с.

Учебное издание

**Мидуков Николай Петрович
Куров Виктор Сергеевич
Никифоров Аркадий Олегович**

Методы оптимизации и организации энерго- и ресурсосберегающих химико-технологических систем

Практикум

Редактор и корректор А. А. Чернышева
Техн. редактор Д. А. Романова

Учебное электронное издание сетевого распространения

Системные требования:
электронное устройство с программным обеспечением
для воспроизведения файлов формата PDF

Режим доступа: http://publish.sutd.ru/tp_get_file.php?id=202016, по паролю.
- Загл. с экрана.

Дата подписания к использованию 22.11.2022 г. Рег.№ 5082/22

Высшая школа технологии и энергетики СПбГУПТД
198095, СПб., ул. Ивана Черных, 4.