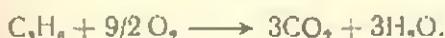


ГИДРАВЛИКА

С. С. ХАЧАТРЯН, Г. Г. МАРДЖАНЫАН, Р. Г. АЛМОЯН, Г. А. МАРТИРОСЯН

ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ПАРОФАЗНОГО СИНТЕЗА
 АЛЛИЛАЦЕТАТА

Согласно [1], реакция на палладий-медь-ацетатном катализаторе в паровой фазе протекает по параллельной схеме:



Процесс характеризуется изменением активности каталитической системы во времени. Кинетическая модель таких процессов, которые протекают в аппарате с гидродинамическим режимом движения потока, близким к режиму идеального вытеснения, представляет собой систему квазилинейных дифференциальных уравнений в частных производных гиперболического типа:

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = \frac{P}{v} \theta \frac{2K_1(T)K_2(T)f_1(C_1, C_2)f_2(C_1, C_2)}{2K_1(T)f_1(C_1, C_2) + K_2(T)f_2(C_1, C_2)}; \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial t} = \frac{P}{v} \theta \frac{2K_1(T)K_2f_1(C_1, C_2)}{2K_1(T)f_1(C_1, C_2) + K_2(T)f_2(C_1, C_2)}; \quad (2)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -K_1(T)\theta. \quad (3)$$

с краевыми условиями

$$C_1(0, t) = C_1^0(t), \quad C_2(0, t) = C_2^0(t), \quad \theta(t, 0) = \theta_n(t),$$

где

$$f_1(C_1, C_2) = C_0^0 - \frac{1}{2}(C_1 - C_1^0) - \frac{3}{2}(C_2 - C_2^0);$$

$$f_2(C_1, C_2) = C_0^0 - (C_1 - C_1^0) - \frac{1}{3}(C_2 - C_2^0);$$

C_1, C_2 — молярная концентрация аллилацетата АЛАС и двуокиси углерода CO_2 в реакционных газах, соответственно; $C_0, C_{C_3H_6}$ — молярная концентрация кислорода и пропилена в исходной парогазовой

смеси (ПГС); ν — молярная подача ПГС, $\text{кмоль}/\text{м}^2 \cdot \text{час}$; l — текущая длина аппарата, м ; t — астрономическое время, час ; θ — коэффициент дезактивации каталитической системы; K_1, K_2, K_3 — константы скоростей отдельных стадий реакции. Проблема оптимизации заключается в выборе оптимальной температурной последовательности $T(l, t)$, молярной подачи ПГС ν и времени работы реактора в цикле работы катализатора t_u , обеспечивающих максимум выхода целевого продукта за цикл:

$$\max_{\nu, T, t_u} J(\nu, T, t_u) = \frac{1}{t_u + t_p + t_n} \int_0^{t_u} S \nu C_2(l, t) dt, \quad (4)$$

где t_u и t_p — время работы аппарата в цикле и регенерации катализатора, час ; t_n — время, необходимое для перехода от режима регенерации к режиму работы, час ; S — поперечное сечение трубки, м^2 , при выполнении ограничений:

$$T_{\min} \leq T(l, t) \leq T_{\max}; \quad \nu_{\min} \leq \nu \leq \nu_{\max}.$$

Физическое существование оптимума критерия (4) можно объяснить следующим образом: при малых значениях t_u суммарный выход за цикл будет мал, при больших же значениях t_u средний выход целевого продукта за цикл будет также небольшой из-за уменьшения производительности катализатора. Следовательно, выход АЛАС за цикл, независимо от времени пребывания, будет иметь максимум по t_u .

Характерной особенностью процесса является то, что на степень превращения кислорода X_{O_2} налагается ограничение типа равенства:

$$X_{O_2}(l, t) = \frac{C_{O_2}^0 - C_{O_2}(l, t)}{C_{O_2}^0} = \gamma = 0,66. \quad (5)$$

Решение задачи оптимизации при наличии ограничения (5) проводилось с помощью «метода штрафов» [2]. Идея метода состоит в том, чтобы сконструировать такую функцию $J_2(\nu, T, t_u)$, которая бы резко возрастала при выходе точки, соответствующей аргументам функции, из области D , где удовлетворяется требование (5). Таким образом, вместо функционала J для максимизации взят вспомогательный функционал J_2 :

$$\max_{\nu, T, t_u} J_2(\nu, T, t_u) = \frac{1}{t_u + t_p + t_n} \int_0^{t_u} S \nu C_1(l, t) dt - \lambda \int_0^{t_u} |X_{O_2}(l, t) - \gamma|^2 dt. \quad (6)$$

После соответствующих преобразований получаем:

$$\max_{\nu, T, t_u} J_2(\nu, T, t_u) = \int_0^{t_u} \frac{S \nu}{t_u + t_p + t_n} \{ C_1(l, t) - \lambda [C_1(l, t) + 3C_2(l, t) - 2C_{O_2}^0 \gamma]^2 \} dt. \quad (7)$$

Для решения задачи применен двухуровневый метод оптимизации. На верхнем уровне осуществляется поиск переменных γ и t_u с помощью метода наискорейшего спуска [3]. На нижнем уровне, для найденных значений γ и t_u с помощью принципа максимума Понтрягина выбирается оптимальное управление.

Критерий оптимизации (7) при этом будет иметь вид:

$$\max_{\gamma} J_{\gamma}(T) = \int_0^{t_u} \frac{S\gamma}{t_u + t_p + t_n} [C_1(L, t) - \alpha |C_1(L, t) + 3C_2(L, t) - 2C_{0,\gamma}^0|^2] dt = \int_0^{t_u} \Phi(C_1, C_2(T)) dt, \quad (8)$$

а функция Понтрягина и система сопряженных уравнений —

$$H = \frac{P}{\gamma} \theta \frac{2K_3 f_1}{2K_1 f_1 + K_3 f_2} (\psi_1 K_3 f_2 + \psi_2 K_4 f_1) - \psi_2 K_4 \theta; \quad (9)$$

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial t} = \frac{P\theta/\gamma}{(2K_1 f_1 + K_3 f_2)^2} \{ \psi_1 (4K_1^2 K_3 f_1^2 + K_1 K_3^2 f_2^2) + \psi_2 [4K_1^2 K_4 f_1 + 2K_1 K_3 K_4 f_2 - 2K_1 K_4 (K_1 + K_3) f_1^2] \}; \quad (10)$$

$$\frac{\partial \psi_2}{\partial t} = \frac{P\theta/\gamma}{(2K_1 f_1 + K_3 f_2)^2} \left\{ \psi_1 \left(\frac{4}{3} K_1^2 K_3 f_1^2 + 3K_1 K_3^2 f_2^2 \right) + \psi_2 \left[12K_1^2 K_4 f_1 + 6K_1 K_3 K_4 f_2 - \frac{2}{3} K_1 K_4 (K_1 + K_3) f_1^2 \right] \right\}; \quad (11)$$

$$\frac{\partial \psi_2}{\partial t} = \psi_2 K_4 - \frac{P/\gamma}{2K_1 f_1 + K_3 f_2} (\psi_1 2K_1 K_3 f_1 f_2 - \psi_2 2K_1 K_4 f_1^2), \quad (12)$$

с красными условиями:

$$\psi_1(L, t) = \frac{\partial \Phi}{\partial C_1} = S \frac{\gamma}{t_u + t_p + t_n} [1 - 2\alpha |C_1(L, t) + 3C_2(L, t) - 2C_{0,\gamma}^0|];$$

$$\psi_2(L, t) = \frac{\partial \Phi}{\partial C_2} = -6S \frac{\gamma}{t_u + t_p + t_n} \alpha |C_1(L, t) + 3C_2(L, t) - 2C_{0,\gamma}^0|];$$

$$\psi_2(L, t_u) = \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} = 0.$$

Алгоритм решения задачи реализуется следующим образом.

1. Задаются исходными значениями γ и t_u .

2. Решается задача выбора $T^{opt}(t, t)$ с помощью принципа максимума, которая позволяет свести оптимальную задачу к краевой для системы дифференциальных уравнений и частных производных. Вначале интегрируются уравнения (1) и (2) по l , затем уравнение (3) по t .

При этом значения C_1 , C_2 и θ сохранялись по (l, t) . Далее, обратно интегрируются уравнения (10) — (12) и на каждом шаге интегрирования определяется $T(l, t)$ из условия достижения максимума функции Понгрягина (9). Максимум функции H находился методом простого перебора температуры в интервале (T_{\min}, T_{\max}) с шагом $0,5^\circ$. Итерационная процедура продолжается до обеспечения сходимости по $T(l, t)$.

3. Используя направленный перебор по v и t_u , повторяется этап 2

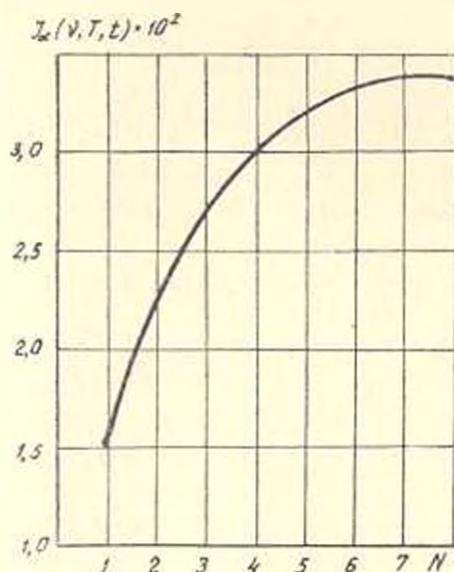
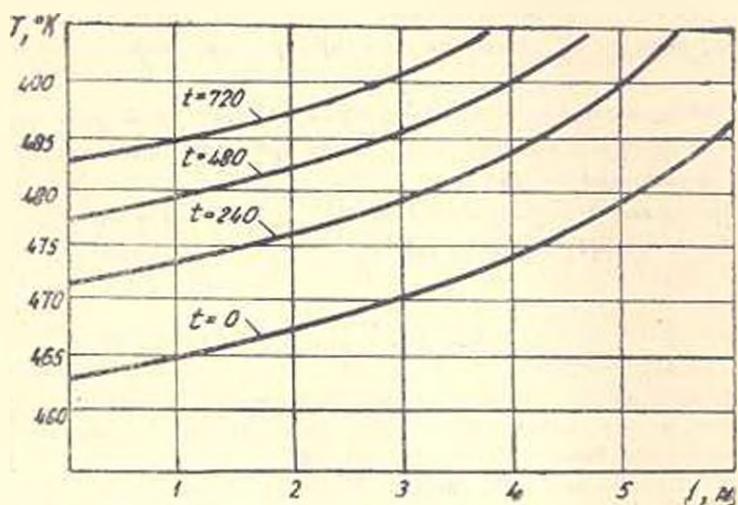


Рис. 1.

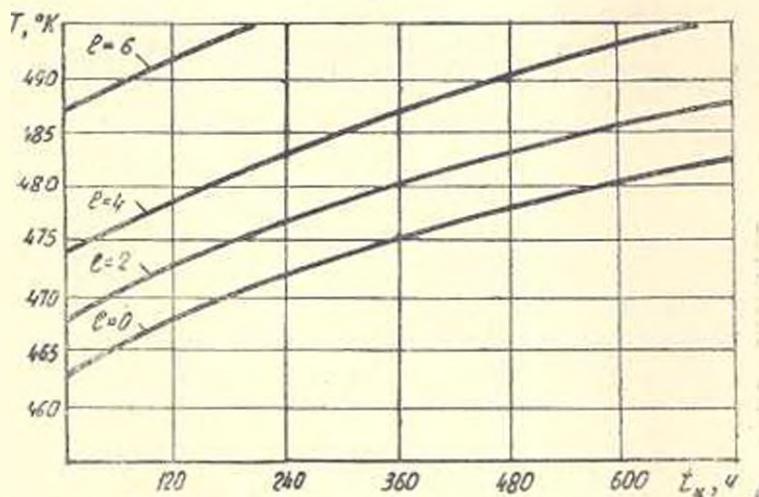
Задача решалась на ЭВМ ЕС-1022 на языке программирования PL/I. С целью экономии затрат машинного времени первоначальный профиль $T(l, t)$ задавался в виде монотонно возрастающей функции. Зависимость величины функционала (8) от номера итерации приведена на рис. 1. Результаты оптимизации показали, что оптимальными являются: $t_u = 720$ ч. и $v = 800$ кмоль/м²ч.а, что для выбранного диаметра трубки соответствует линейной скорости ПГС $U = 0,8$ м/с. При этом перепад давления по высоте чернистого слоя пренебрежимо мал по сравнению с общим давлением системы. Оптимальное распределение температуры $T(l, t)$ при v^{opt} и t_u^{opt} приведены на рис. 2.

Как видно из рисунков, характер оптимальной температурной последовательности по длине аппарата со временем изменяется сравнительно незначительно. В таких случаях процесс достаточно хорошо может быть реализован в трубчатом реакторе с внутренним теплообменом. На этом основании для процесса синтеза аллилацетата выбран кожухотрубчатый реактор со стационарным слоем катализатора в трубном пространстве и циркулирующей хладагента в межтрубном пространстве аппарата.

В результате оптимизации процесса сделан выбор типа реакционного аппарата, найдены оптимальное время работы аппарата в цикле работы катализатора t_n , линейная скорость ПГС U и определена оптимальная температурная стратегия ведения процесса во времени.



а



б

Рис. 2

ԱՂԻԱՅԵՏԱՏԻ ԳԱՐԱՅԱԶԱՅԻՆ ՍԻՆԹԵԶԻ ՊՐՈՑԵՍԻ ՕՊՏԻՄԱԼԱՑՈՒՄԸ

Ա մ փ ո փ ո ս մ

Դիտարկված են արդյունաբերական օրգանական սինթեզում կարևոր մոնոմեր հանդիսացող ալիլացետատի սինթեզի պրոցեսի օպտիմալացման հարցերը:

Մշակված ոչ ստացիոնար կինետիկական մոդելի հիման վրա կատարված է քվադրատատիստիկական պրոցեսի օպտիմալացումը՝ կիրառելով երկմակարդակ օպտիմալացման մեթոդը:

Օպտիմիզացման արդյունքի հիման վրա կատարվել է ռեակտորի տիպի ընտրությունը և որոշվել են պրոցեսի օպտիմալ վարման պարամետրերը:

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Марджанян Г. Г. и др. Кинетика реакции парофазного синтеза аллилацетата из пропилена и уксусной кислоты на палладий содержащих катализаторах.— Кинетика и катализ, 1980, т. XXI, № 3, с. 681—685.
2. Островский Г. М., Волин Ю. М. Методы оптимизации химических реакторов.— М.: Химия, 1967.— 245 с.
3. Бояринов А. И., Кафиров В. В. Методы оптимизации в химической технологии.— М.: Химия, 1969.— 564 с.
4. Сливко М. Г., Быков В. П. и др. Оптимизация каталитических процессов с изменяющейся активностью катализатора.— Проблемы кибернетики, М., вып. 27, 1973, с. 11—16.