

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ТЕХНИКА

Ա. Տ. ԼԱՆՇԵԼՅԱՆ, Դ. Դ. ՄԱՐԺՋԱՆՅԱՆ, Դ. Դ. ԱՐՄԻՆՅԱՆ,
 Վ. Լ. ԲԱՐՏԵԳՅԱՆ, Տ. Տ. ԽԱՇԱՏՐՅԱՆ

ОПТИМИЗАЦИЯ КВАЗИСТАТИЧЕСКОГО РЕЖИМА В ТРУБЧАТОМ
 РЕАКТОРЕ ПРИ ОГРАНИЧЕНИИ ПО СРЕДНЕЙ
 ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ

Для квазистатических химико-технологических процессов, характеризующихся эффектом «последствия» — влияния решений, принимаемых в текущий момент на последующие состояния, корректная постановка задачи оптимизации предлагает применение интегрального критерия эффективности [1]. Рассматриваемому классу объектов принадлежат, в первую очередь, химические реакторы с изменяющейся во времени активностью каталитической системы.

В настоящей работе представляются кинетическая модель дезактивации катализатора, алгоритм и результаты решения задачи квазистатической оптимизации процесса синтеза винилацетата (ВА) из ацетилена и уксусной кислоты на никель-ацетатном катализаторе в трубчатом реакторе.

Кинетическая модель процесса, описывающая скорости образования основного и побочного продуктов реакции приведена в [2]. Фактор дезактивации при этом учитывается в виде явной функции времени, что делает некорректным применение этой модели в широком диапазоне изменения режимных параметров [3]. В связи с этим на основе анализа экспериментальных данных разработана модель дезактивации катализатора в дифференциальной форме:

$$\frac{d\theta}{dt} = 27,1 u^{0,5} \cdot \exp(-46000/RT), \quad (1)$$

где θ — фактор активности; T — температура в реакционной зоне k ; t — астрономическое время, *сут*; R — универсальная газовая постоянная; u — линейная скорость реакционной смеси, *м/с*.

Технико-экономический анализ функционирования объекта показал, что в качестве критерия оптимизации следует принять интегральную выработку целевого продукта (ВА) за цикл работы катализатора.

В качестве управляющих переменных выбраны входные температуры реакционного газа и теплоносителя межтрубного пространства. Время цикла работы реактора является не фиксированной величиной и

варьируется при оптимизации. В целом, математическая постановка задачи формулируется в виде:

$$\max_{t_u, T^0(\cdot), T_x^0(\cdot)} J = \int_0^{t_u} \Phi dz = \int_0^{t_u} G \cdot C_1(L, \tau) dz, \quad (2)$$

$$t_u \in K_1, \quad T^0(\tau) \in K_2, \quad T_x^0(\tau) \in K_3;$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial l} = f_i(\bar{C}, T, \theta), \quad i = \overline{1, m}; \quad (3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial l} = f_T(\bar{C}, T, T_x, \theta); \quad (4)$$

$$\frac{\partial T_x}{\partial l} = f_x(T, T_x); \quad (5)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = -f_\theta(T, u, \theta), \quad (6)$$

$$0 \leq l \leq L, \quad 0 \leq \tau \leq t_u,$$

$$C_i(0, z) = C_i^0, \quad T(0, \tau) = T^0(\tau), \quad T_x(0, \tau) = T_x^0, \quad \theta(l, 0) = 1;$$

$$C_{2, \min} \leq C_2(l, \tau) \leq C_{2, \max}; \quad (7)$$

$$T_{\min} \leq T(l, \tau) \leq T_{\max}; \quad (8)$$

$$\frac{1}{t_u + t_0} \int_0^{t_u} G \cdot C_1(L, \tau) dz = B_0, \quad (9)$$

где t_u — время работы катализатора; G — расход реакционных газов; C_i — концентрация i -го компонента в реакционном газе; T, T_x — соответственно, температуры реакционного газа и теплоносителя; L, l — текущая и конечная длина реактора; t_0 — время перезагрузки реактора; B_0 — заданная средняя производительность. Система (3—6) представляет собой квазистатическую модель реактора.

Одним из эффективных и наиболее часто применяемых методов, используемых при оптимизации объектов с распределенными параметрами, функционирующими в квазистатическом режиме, является принцип максимума Понтрягина. Применение математического аппарата принципа максимума для рассматриваемого класса задач позволяет строить эффективные алгоритмы поиска оптимального управления путем сведения оптимальной задачи к краевой. Для рассматриваемой задачи (2)—(9) наличие ограничения (8), заложенного на фазовые переменные, а также ограничения (9) осложняют получение условий оптимальности. Помимо этого, в задачах оптимизации режимов распреде-

ленных объектов с одномерными управлениями, какими являются $T(0, \tau)$ и $T_x(0, \tau)$, необходимые условия оптимальности выражаются в форме «слабого принципа» максимума. При этом вычислительные алгоритмы характеризуются ветвлениями и требуют перебора большого числа вариантов [1, 4].

В связи с вышесказанным и учитывая эффективность вычислительных алгоритмов, основанных на «сильном» принципе максимума, который справедлив для задач с двумерными распределенными управлениями, процессе решения рассматриваемой задачи был разбит на два этапа. На первом этапе осуществлялась «теоретическая» оптимизация, заключающаяся в решении задачи

$$\max_{t_u} I, \quad t_u \in K_1 \quad (10)$$

при ограничениях (3), (6) — (9), а на втором — задача

$$\min_{T^0(\tau), T_x^0(\tau)} \sum_{\tau=1}^N (T(t_u, \tau) - T^{opt}(t_u, \tau))^2, \quad (11)$$

$$0 \leq \tau \leq t_u^*$$

при ограничениях (3) — (6), где t_u^{opt} , $T^{opt}(t_u, \tau)$ — решения задачи (10).

Непрерывность и единственность экстремума функции (12)

$$B(t_u) = \max_{T(t, \tau)} \left|_{t_u = t_u^*} \right. \quad (12)$$

вытекающие из физических соображений, позволяют решать задачу (10) по двухуровневой схеме.

На верхнем уровне решается задача

$$\min_{t_u} |B - B_0|. \quad (13)$$

Поиск значения t_u^{opt} осуществляется методом «локализации» экстремума.

Нижним уровнем при каждом заданном верхнем уровне, значении решается задача

$$\max_{t(t, \tau)} I \quad (14)$$

при ограничениях (3), (6) — (9). Алгоритм решения основывается на необходимых условиях оптимальности в форме «сильного» принципа максимума.

Ограничение (7) учитывается составлением штрафной функции:

$$\Phi_m = \beta \left[e^{\alpha_1(C_3 - C_3)} + e^{\alpha_2(C_3 - C_3)} \right], \quad (15)$$

где α_1 , α_2 , β — подбираемые константы. При этом обобщенный критерий, оптимизируемый на нижнем уровне, принимает вид:

$$I_0 = \int_0^{t_n} \Phi_0 d\tau = \int_0^{t_n} (\Phi_0 + \Phi_m) d\tau. \quad (16)$$

Функция Понтрягина и система сопряженных уравнений имеют вид:

$$H = \sum_{i=1}^m \psi_i; \quad (17)$$

$$\frac{d\psi_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial C_i}, \quad i = \overline{1, m}; \quad (18)$$

$$\frac{d\psi_{m+1}}{d\tau} = -\frac{\partial H}{\partial \theta}. \quad (19)$$

с крайними условиями

$$\psi_i(t, \tau) = \frac{\partial \Phi_0(t, \tau)}{\partial C_i(t, \tau)}, \quad i = \overline{1, m}; \quad (20)$$

$$\psi_{m+1}(t, t_n) = 0, \quad (21)$$

где H — функция Понтрягина; $\psi_i, i = \overline{1, m} + 1$ — сопряженные переменные.

Алгоритм решения задачи (14) с применением сопряженных уравнений сводится к итеративно повторяющимся процедурам интегрирования систем (3), (6) и (18), (19). При интегрировании сопряженной системы в каждом узле прямоугольника $0 \leq t \leq L, 0 \leq \tau \leq t_n$ осуществляется поиск значения $T(t, \tau)$, доставляющего максимум H -функции.

Задача в целом была решена по описанной методике для промышленного реактора мощностью 12.5 тыс. т/год . Время полного счета на ЭВМ ЕС 1033 по программе, составленной на языке PL/I, составило 154 мин.

На рисунке представлены кривая изменения производительности реактора $\Phi_r(\tau)$ (1), соответствующая теоретическому оптимальному решению задачи (10), а также кривые изменения одномерных управлений $T^{opt}(\tau), T_x^{opt}(\tau)$ (2 и 3, соответственно), найденные решением задачи (11) и соответствующая кривая изменения производительности реактора $\Phi_p(\tau)$ (4) в течение цикла работы катализатора.

Относительно теоретического решения при управлениях $T^{opt}(\tau), T_x^{opt}(\tau)$, как показали расчеты, выработка целевого продукта за цикл работы катализатора уменьшается на 1.1% , что пренебрежимо мало с практической точки зрения. Управление процессом по расчетным стратегиям $T^{opt}(\tau)$ и $T_x^{opt}(\tau)$ позволяет снизить себестоимость производимой продукции относительно проектной величины на 1.4% .

Близость теоретических и реальных показателей процесса (производительности и времени цикла) подтверждают корректность принятого приближенного метода решения исходной задачи (2) — (9). В целом.

представленная постановка задачи и алгоритм ее решения могут быть использованы для решения аналогичных задач оптимизации трубчатых реакторов, функционирующих в квазистатическом режиме.

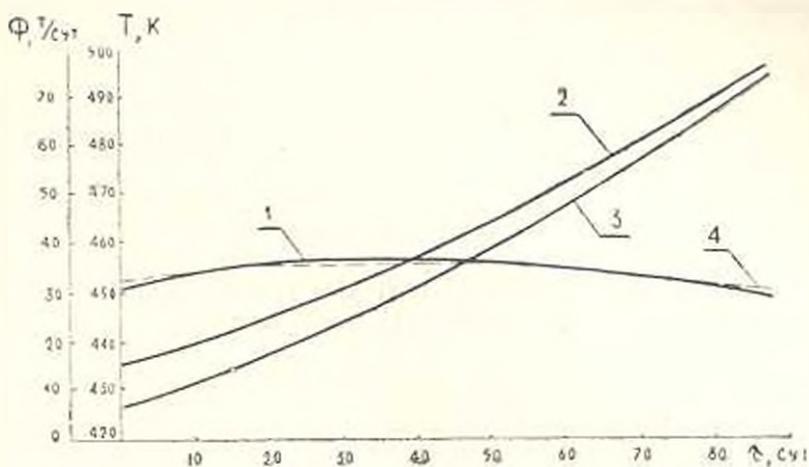


Рис.

Ս. Շ. ԿՆԵՆԻՉՅԱՆ, Գ. Գ. ՄԱՐԶԱՆՅԱՆ, Գ. Գ. ՇԱՐՈՒՆՅԱՆՑ,
Վ. Լ. ԲԱՐՍԵՂՅԱՆ, Ս. Ս. ԿԱԶԱՏՅԱՆ

ԿՈՂՈՎԱԿԱՎՈՐ ԹԵՄԱՍՈՐԻ ԿԵՂՄՍԱՏՅԱՆԿ ԹԵԺՈՄԻ ՍՊՏԻՄԻՉԱՑՈՒՄ
ՄԻՋԻՆ ԱՐՏԱԳԻՐՈՎԱԿԱՆՈՒԹՅԱՆ, ՈԱՆՄԱՆԱՔԱՎԿՄԱՆ ԿԵՊՔՈՒՄ

Ա մ փ ո փ ո լ մ

Մշակված է կատալիզատորի անշարժ շերտով խողովակավոր ռեակտորի կեղծստատիկ սեծիմի օպտիմիզացման ալգորիթմ: Խնդիրը լուծվում է կենտրոնացված կատալիզատորի փոփոխականների դեպրի համար, հաշվի առնելով այն սահմանափակումները, որոնք դրված են ֆազային փոփոխականների փոփոխման տիրույթի և ռեակտորի միջին արտադրողականության վրա:

Ալգորիթմը օգտագործվում է միևնույն պայմանները որոշելու համար: Ռեակտորը նախատեսված է արդյունաբերական մասշտաբների համար: Կատալիզատորն է ջինկի աղիատար:

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Островский Г. М., Возин Ю. М. Методы оптимизации сложных химико-технологических схем — М.: Химия, 1970 — 328 с.
2. Хачатрян С. С. Моделирование каталитического реактора в производстве винилцелюлозы. — Дис. канд. техн. наук — М.: 1969 — 118 с.
3. Казецов Ю. И., Слинько М. Г. Некоторые особенности моделирования процесса с изменяющимся составом катализатора. — В сб. науч. тр.: Моделирование химических процессов в реакторах (Доклады 4-й Всесоюзной конференции по химическим реакторам). — Новосибирск, ИК СО АН СССР, 1972, т. 3, с. 3—9.
4. Островский Г. М., Возин Ю. М. Моделирование сложных химико-технологических схем. — М.: Химия, 1975. — 312 с.