

*И. КИРЬЯНЕН, Г. РАЯЛО*

## ТЕХНИКО-ЭКОНОМИЧЕСКАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ РЕАКТОРОВ, НАХОДЯЩИХСЯ В СЛОЖНОЙ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ

В последнее время большое значение в химической промышленности приобретает оптимизация химико-технологических схем с точки зрения экономической эффективности производства. Критерием оптимизации при этом обычно является обобщенный экономический показатель — приведенный доход или приведенные расходы [1].

В задаче оптимизации реакторов в системе могут быть два крайних подхода: оптимизируется каждый аппарат в отдельности или оптимизируется целая система. Оба подхода широко обсуждаются в литературе, но они имеют общеизвестные недостатки. В настоящее время наиболее приемлемым считается такой подход, когда процесс оптимизации схемы должен рассматриваться как процесс последовательных приближений, на первом этапе которого проводится оптимизация реакторов и других аппаратов схемы на основе тех или иных локальных критериев, а на втором этапе — оптимизация всей схемы [2].

Нами предлагается такой подход, когда критерий формируется таким образом, чтобы в нем отражалась вся информация о всей системе, уже известная до данного этапа оптимизации системы. Из методов оптимизации подробнее мы останавливаемся на использовании принципа максимума, позволяющего определить распределение параметров по длине аппаратов. Однако приведенную ниже методику расчета целевой функции можно применять при любом методе оптимизации. Предлагаемая нами методика расчета целевой функции является общеиспользуемой. Здесь принимается во внимание непосредственно структура схемы, и, как нам представляется, эта методика эффективна не только при оптимизации схем заданной структуры, но и (даже особенно) при нахождении оптимальной структуры схемы.

Одной из основных проблем при технико-экономической оптимизации с применением принципа максимума является нахождение функционала, дающего критерий оптимизации. Нам выводится один из видов такого функционала, имеющий применение при обширном классе процессов.

Сущность нашего подхода можно рассматривать в двух, относительно самостоятельных, частях: образование и расчет целевой функции и оптимизация.

Образование и расчет целевой функции. За критерий оптимизации принимаются приведенные расходы производства целой системы. Все аппараты в схеме делятся на две группы: оптимизируемые и неоптимизируемые на данном этапе. Неоптимизируемые блоки мы

описываем с помощью операционных матриц. Для описания оптимизируемых блоков нами используются точные физико-химические математические модели, которые обычно являются системами обыкновенных или дифференциальных уравнений. Но результаты действия этих моделей на входные потоки можно также представить в виде «фиктивных» матриц, которые в конкретном случае являются операционными. Отличие их от других операционных матриц состоит в том, что элементы «фиктивных» матриц не постоянны, а меняются в зависимости от изменения (оптимизации) параметров точных математических моделей. Теперь на основе всех операционных матриц схемы и при известной структуре схемы можно найти эквивалентную матрицу преобразования системы. На базе этой матрицы возможны определение всех потоков в схеме и расчет приведенных расходов производства системы.

Оптимизация. Ниже рассмотрим случай, когда оптимизируется лишь один реактор, так как применение данного метода в случае нескольких реакторов не представляет трудностей. Математическое описание процесса имеет вид:

$$\frac{dx_i}{d\tau} = r_i(\bar{x}, \bar{u}) \quad (i=1, 2, \dots, m), \quad (1)$$

где  $\bar{x} = (x_1, x_2, \dots, x_m)$  — состояние процесса и  $\bar{u} = (u_1, u_2, \dots, u_s) \in U$  — вектор управления,  $U$  — допустимая область определения векторов управления.

Пусть приведенные расходы  $\Psi$  зависят от времени окончания реакции  $\tau_k$

$$\Psi = \Psi(\tau_k) \quad (0 \leq \tau_k \leq \tau_{\text{оссм}}), \quad (2)$$

где  $\tau_{\text{оссм}}$  — граница рассматриваемого промежутка времени.

За значение  $\Psi(0) = \Psi_0$ , которое отвечает приведенным расходам при нулевой степени превращения реагентов, нужно принять фиктивное «большое» число, обусловленное ниженазванным требованием. Вектор управления следует определять так, чтобы приведенные расходы  $\Psi(\tau_k)$  были минимальные. Значение  $\tau_k$  можно фиксировать или же оставить свободным.

Задачу можно сформулировать как задачу минимизации функционала  $I$ , где

$$I = \int_0^{\tau_k} \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} d\tau \quad (0 \leq \tau_k \leq \tau_{\text{оссм}}), \quad (3)$$

так как

$$I = \Psi(\tau_k) - \Psi(0) = \Psi(\tau_k) - \text{const.}$$

Принимаем, что функция

$$I(\tau) = \int_0^{\tau} \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} d\tau \quad (0 \leq \tau \leq \tau_k) \quad (4)$$

монотонная. Это требование обычно выполняется, поскольку приведенные расходы (2) описываются как монотонно убывающая функция времени окончания реакции в промежутке  $[0, \tau'_k]$  ( $0 \leq \tau_k \leq \tau'_k \leq \tau_{\text{оссм}}$ ),

где  $\tau'_k$  — оптимальное время окончания реакции. Причем скорость этого убывания замедляется с приближением  $\tau_k$  к оптимальному значению

$\tau'_k$ . Можно доказать, что в таком случае задачу можно свести к задаче о быстройдействии [3].

При нефиксированном значении  $\tau_k$  задачу можно сформулировать следующим образом: найти оптимальную траекторию  $\bar{u}_{\text{опт}}(\tau)$  и значение  $\tau_k$  из условия

$$H(\lambda_0, \bar{\lambda}(\tau), \bar{x}'(\tau), \bar{u}_{\text{опт}}(\tau)) = \max_{\substack{\bar{u} \in U, \tau_k \\ \tau \leq \tau_k}} H(\lambda_0, \bar{\lambda}(\tau), \bar{x}'(\tau), \bar{u}(\tau)) \equiv 0, \quad (5)$$

где функция  $H$  имеет вид

$$H(\lambda_0, \bar{\lambda}(\tau), \bar{x}'(\tau), \bar{u}(\tau)) = \lambda_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} + \sum_{h=1}^m \lambda_h(\tau) r_h(\bar{x}'(\tau), \bar{u}(\tau)) + \lambda_{m+1} \quad (6)$$

и вектор  $\bar{x}' = (x_1, x_2, \dots, x_m, \tau)$ .

В данном случае функция  $\lambda_0$  равна неположительной константе  $\lambda_0 = \text{const} \leq 0$ . Поскольку функции  $\lambda_i(\tau)$  при интегрировании описывающей их системы уравнений (8) находятся с точностью до произвольного постоянного множителя, можно считать  $\lambda_0 = -1$ . Следовательно, функция  $H$  (6) имеет вид

$$H = -\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} + \sum_{h=1}^m \lambda_h(\tau) r_h(\bar{x}'(\tau), \bar{u}(\tau)) + \lambda_{m+1}. \quad (7)$$

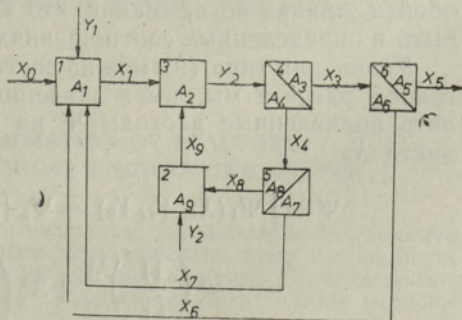
Функции  $\lambda_k(\tau)$  ( $k=1, 2, \dots, m+1$ ) определяются из системы уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\lambda_k}{d\tau} &= \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tau \partial x_k} - \sum_{i=1}^m \lambda_i(\tau) \frac{\partial r_i(\bar{x}'(\tau), \bar{u}_{\text{опт}}(\tau))}{\partial x_k} \\ &\quad (k=1, 2, \dots, m) \\ \frac{d\lambda_{m+1}}{d\tau} &= \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tau^2} \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

а функции  $x_k(\tau)$  ( $k=1, 2, \dots, m$ ) — из системы уравнений (1).

При фиксированном значении времени окончания реакции постановка задачи меняется по известным правилам. Вопрос о граничных условиях рассматривается также согласно общепринятой методике [3, 4].

В качестве примера рассмотрим применение вышеописанной методики при оптимизации реактора в основной стадии производства синтетических душистых веществ.



Структурная схема основной стадии производства синтетических душистых веществ.

На приведенной схеме (рисунок) блоки обозначены ящиками и пронумерованы: 1, ..., 6, потоки обозначены стрелками. В ящиках и над стрелками даны обозначения соответствующих операционных матриц и векторов потоков. Система состоит из следующих процессов: двух процессов смещения — 1 (матрица  $A_1$ ) и 2 ( $A_9$ ); трех процессов разделения на два потока — 4 ( $A_3$  и  $A_4$ ), 6 ( $A_5$  и  $A_6$ ) и 7 ( $A_7$  и  $A_8$ ); одного процесса химического превращения 5 ( $A_2$ ).

При образовании эквивалентной матрицы преобразования системы можно учесть своеобразие рассматриваемой системы. Зная, что входные потоки  $Y_1$  и  $Y_2$  зависят от промежуточных потоков системы, можно найти матрицы  $B_1$  и  $B_2$  так, что

$$Y_1 = B_1(X_0 + X_6 + X_7),$$

$$Y_2 = B_2X_1 - X_8.$$

Можем ограничиться рассмотрением только таких потоков, в которых имеются вещества, рециркулирующие в системе. Операционные матрицы процессов смещения являются единичными, и, следовательно, при умножении матриц ими можно пренебречь.

При расчете эквивалентной матрицы преобразования можно использовать метод свертки на основе информации структурного анализа [5]. Эквивалентная матрица преобразования данной системы следующая:

$$X_5 = A_5 A_3 A_2 (I + B_2) [I - (I + B_1) (A_7 A_4 + A_6 A_3) A_2 (I + B_2)]^{-1} (I + B_1) X_0,$$

где  $I$  — единичная матрица.

Блок 3 является оптимизируемым, следовательно, матрица  $A_2$  — «фиктивной». Обычно «фиктивную» матрицу  $A$  можно представить в виде диагональной ( $a_{ij} = 0, i \neq j$ ). Пусть математическая модель устанавливает соответствие между входным потоком  $X$  и выходным потоком  $Y$  ( $X \xrightarrow{A} Y$ ), тогда за диагональные элементы матрицы  $A$  принимаем

$$a_{ii} = \frac{y_i}{x_i}.$$

Если  $x_i = 0$  и  $y_i = 0$ , то  $a_{ii} = 0$ , а если  $x_i = 0$  и  $y_i \neq 0$ , то нельзя использовать «чисто» диагональную матрицу, в строке  $i$ , где  $x_i = 0$ , нужно некоторое  $a_{ij} \neq 0$ , где  $j \neq i$ , так что  $Y = AX$ .

Входной поток  $X_1$  в оптимизируемый блок 3 зависит от «фиктивной» матрицы  $A_2$ :

$$X_1 = [I - (I + B_1) (A_7 A_4 + A_6 A_3) A_2 (I + B_2)]^{-1} (I + B_1) X_0. \quad (9)$$

Следовательно, возникает итеративный процесс. Но обычно это можно обойти, приняв во внимание, что входящие в реактор вещества должны быть в определенных соотношениях.

Уравнения типа (9) можно составить и для остальных потоков. После такого расчета мы, имея значения всех потоков схемы, можем вычислить приведенные расходы  $\Psi$  на производство единицы целевого продукта  $X_5$ :

$$\Psi = \left[ \Psi_1(X_0, Y_1, Y_2) - \Psi_2 + 3_3^0 \frac{\Pi}{\Pi^0} + (3_a^0 + 3_p^0 + EK_T^0) \times \right. \\ \left. \times \left( \frac{\Pi}{\Pi^0} \right)^{0,7} + 3_3^0 \left( \frac{\Pi}{\Pi^0} \right)^{0,1} + 3_n^0 \right] / X_5, \quad (10)$$

где  $\Psi_1$  — стоимость сырья в зависимости от входящих в систему потоков и цен сырьевых компонентов,  $\Psi_2$  — стоимость побочных продуктов и реализуемых отходов (в рассматриваемом случае  $\Psi_2=0$ ).  $Z_a^0, Z_n^0, Z_p^0, Z_3^0, Z_n^0, K_T^0, P^0$  — соответственно, энергетические расходы, амортизационные отчисления, затраты на ремонт, заработная плата и начисления, цеховые и общезаводские расходы, производственные фонды и объем главного потока, — все показатели определены по базовому варианту производства на опытно-производственной установке,  $E$  — нормативный коэффициент эффективности капиталовложений,  $\Pi$  — текущее значение объема главного потока (в данном случае потока  $X_2$ ). С помощью уравнения (10) можно рассчитать целевую функцию и использовать ее в процедурах оптимизации, например, в случае применения принципа максимума, согласно вышеприведенным уравнениям (1—8).

Нами найдены оптимальные температурные профили реакционной смеси и теплоносителя, а также оптимальная степень превращения для трубчатого реактора гомогенного жидкофазного катализа (блок 3), являющегося основным звеном данного технологического процесса.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Островский Г. М., Волин Ю. М. Моделирование сложных химико-технологических схем. М., 1975.
2. Островский Г. М., Слинко Н. Г. Оптимизация химических реакторов и процессов. — Теор. основы хим. технол., 1975, т. 9, № 6, с. 853—862.
3. Болтянский В. Г. Математические методы оптимального управления. М., 1969.
4. Бояринов А. И., Кафаров В. В. Методы оптимизации в химической технологии. М., 1971.
5. Кирьянен И., Раяло Г. Программа структурного анализа сложных химико-технологических схем. Таллин, препринт К-3, Отд. хим., геол. и биол. н. АН ЭССР, 1977.

*Институт химии  
Академии наук Эстонской ССР*

Поступила в редакцию  
29/XII 1977

*I. KIRJANEN, G. RAJALO*

#### KEERUKASSE KEEMILIS-TEHNOLOOGILISSE SÜSTEEMI KUULUVATE REAKTORITE TEHNILIS-MAJANDUSLIK OPTIMEERIMINE

Artiklis on esitatud meetoodika, mis käsitleb sihifunktsiooni moodustamist, arvutamist ning rakendamist reaktori optimeerimisel maksimumprintsipi alusel. Optimeerimiskriteeriumiks on kogu süsteemi taandatud tootmiskulud toodanguühiku kohta. On esitatud näide meetodi rakendamisest konkreetse tehnoloogilise süsteemi puhul.

*I. KIRJANEN, G. RAJALO*

#### TECHNO-ECONOMICAL OPTIMIZATION OF REACTORS BELONGING TO A COMPLEX CHEMICAL ENGINEERING SYSTEM

An optimization method, consisting of the formation and calculation of the objective function and its application to the reactor optimization procedure, using the maximum principle, is described. As optimum criterion, the reduced operating costs of all the system are used. An example regarding the application of the method to a concrete technological system is presented.