

АЛЕКСАНДР ЛАБУТИН, ГАЛИНА ВОЛКОВА*

ОПТИМАЛЬНЫЙ СИНТЕЗ МНОГОПРОДУКТОВЫХ РЕАКТОРНЫХ СИСТЕМ

AN OPTIMA PROCEDURE FOR SYNTHESIS OF MULTIPRODUCT REACTOR SYSTEMS

Аннотация

Предложена процедура оптимального синтеза многопродуктовых реакторных систем. На первом этапе для заданного рыночного спроса на продукты и стехиометрии реакций определяются теоретически возможные значения селективностей по продуктам. При этом задана мощность по переработке исходного реагента. На втором этапе определяются конструктивные, режимные и структурные параметры установки, обеспечивающие значения селективностей наиболее близкие к теоретическим.

Ключевые слова: реакторная система, оптимизация, селективность

Abstract

An optima procedure for synthesis of multiproduct reactor systems is suggested. The first step is to determine theoretically possible values of product selectivities for given market demand and reaction scheme. At this stage the processing power for supplied material is given. The second step is to determine reactors constructional, regime and structural parameters delivering selectivities values closest to the theoretical ones.

Keywords: reactor system, optimization, selectivities

* Д. т. н. профессор Александр Лабутин, к. т. н. доцент Галина Волкова, Ивановский Государственный Химико-Технологический Университет.

Способы и приемы ресурсосбережения в химической технологии изложены в работах академиков Кафарова В.В., Кутепова А.М. и др. [1–5]:

- эффективное использование движущей силы химико-технологического процесса (ХТП),
- наиболее полная переработка сырья с использованием рецикла,
- оптимальное функционально-структурное использование аппаратов и машин, входящих в химико-технологическую схему (ХТС),
- реализация ресурсосберегающих режимов работы аппаратов с использованием систем оптимального адаптивного управления.

Практическая реализация различных способов ресурсосбережения осуществляется путем: режимно-параметрической, аппаратурно-технологической, конструкционной, организационно-технической и технико-экономической оптимизации ХТП и ХТС, оптимального управления процессами.

Многие промышленно важные продукты и полупродукты в химической промышленности производятся путем реализации сложных многостадийных многопродуктовых реакций. Вместе с тем большинство существующих производств имеют жесткое аппаратурно-технологическое оформление и ориентированы на выпуск одного-двух целевых продуктов. В тоже время, во-первых, все ужесточающиеся требования экологической безопасности заставляют современное производство быть малоотходным, обладать свойством реутилизации, основываться на ВАТ-технологиях (*the best available technique – лучшие из доступных технологий*), быть ресурсосберегающим. Во-вторых, рыночная экономика с изменяющимся спросом и ценами на сырье и продукты требует от современного производства оперативно реагировать на смену рыночной ситуации путем изменения объема выпускаемой продукции и соотношения производительности по различным продуктам.

Все перечисленные требования делают необходимым реконструкцию действующих и создание новых многопродуктовых производств непрерывного типа, основной стадией которых является реакторная подсистема, обладающая свойством гибкости. В связи с чем, необходимо решение задачи оптимального аппаратурно-технологического оформления и организации оптимального функционирования химико-технологической системы в изменяющихся условиях.

Базируясь на идеях интегро-гипотетического подхода к синтезу ХТС [7, 9] в работах [6, 10] предложена обобщенная структура реакторного узла, которая для случая подачи исходных реагентов отдельными потоками может быть представлена как это показано на рис. 1.

На рис. 1 обозначено: ИС₁ – реактор идеального смешения; ИС₂...ИС_N – аппроксимация реактора идеального вытеснения; $G_{вх_i}, i = \overline{1, M}$ – расходы входных потоков; $\alpha_{i,j}^I, i = \overline{1, M}, j = \overline{1, N}$ – разделитель $i^{\text{то}}$ входного потока т.е. доля $i^{\text{то}}$ входного потока подаваемая на вход $j^{\text{ой}}$ ячейки; $\alpha_{i,j}, i, j = \overline{1, N}$ – доля выходного потока $i^{\text{ой}}$ ячейки направляемая на вход $j^{\text{ой}}$; $\alpha_i^F, i = \overline{1, N}$ – доля потока с выхода $i^{\text{ой}}$ ячейки направляемая на выход из системы; $\gamma_{i,j}, i = \overline{1, P}, j = \overline{1, N}$ – доля потока $i^{\text{то}}$ продукта с выхода стадии разделения подаваемая на вход $j^{\text{ой}}$ ячейки; \otimes, \bullet – сумматоры и делители потоков.

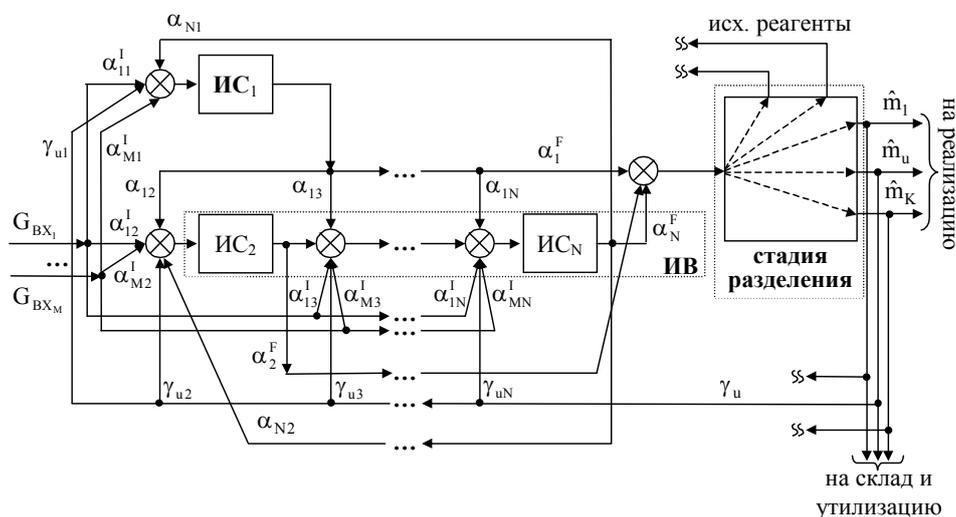


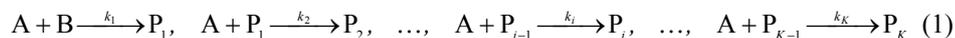
Рис. 1. Гипотетическая структура реакторного узла

Fig. 1. Hypothetical structure of tank unit

Реакторная подсистема состоит как минимум из аппарата идеального смешения (ИС₁) и аппарата идеального вытеснения (ИВ), аппроксимируемого каскадом из (N – 1) элементов смешения (ИС_i). Такая структура и аппаратное оформление реакторной системы позволяют целенаправленно управлять селективностью процесса по различным продуктам путем изменения времени пребывания компонентов в системе и изменения скорости той или иной стадии сложной многостадийной реакции.

В работах [6, 11, 12] предложена двухуровневая процедура технико-экономической оптимизации реакторной подсистемы. На верхнем уровне производится оптимизация взаимодействия системы с внешней средой — рынком. Здесь при заданной мощности по переработке исходного “ведущего” реагента определяются теоретически возможные значения потоков продуктов реакции, т.е. селективностей по продуктам, обеспечивающих верхнюю границу возможного дохода от их реализации в сложившихся или прогнозируемых условиях рынка. Рассмотрим пример постановки и решения задачи верхнего уровня.

Пусть в системе реализуется последовательно-параллельная реакция



где: A и B – исходные реагенты; P_i – продукты реакции $i = \overline{1, K}$, K – количество продуктов.

Необходимо определить производительность ХТС по продуктам реакции, обеспечивающую максимальный доход и минимизирующую различие между предложением и спросом потребителей на различные продукты.

Исходными данными для решения этой задачи являются две матрицы: матрица спроса \mathbf{P} с элементами P_{ij} – потребность в $i^{\text{том}}$ продукте у $j^{\text{го}}$ потребителя и матрица договорных оптово-отпускных цен \mathbf{S} с элементами S_{ij} – цена единицы $i^{\text{го}}$ продукта у $j^{\text{го}}$ потребителя

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} P_{1,1} & P_{1,2} & \dots & P_{1,L} \\ P_{2,1} & P_{2,2} & \dots & P_{2,L} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ P_{K,1} & P_{K,2} & \dots & P_{K,L} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} S_{1,1} & S_{1,2} & \dots & S_{1,L} \\ S_{2,1} & S_{2,2} & \dots & S_{2,L} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ S_{K,1} & S_{K,2} & \dots & S_{K,L} \end{bmatrix} \quad (2)$$

где: L – число потребителей продуктов, P_{ij} – задается в молях на плановый период. Ввиду того, что в различные моменты времени спрос меняется, то формируется множество матриц \mathbf{P} и \mathbf{S} , определяющее программу выпуска и реализации продуктов. Критерий оптимальности будет иметь вид

$$R = \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^L [S_{i,j} (P_{i,j} - \hat{m}_{i,j})]^2 \rightarrow \min \quad (3)$$

где $\hat{m}_{i,j}$ – предложение (поток) $i^{\text{го}}$ продукта $j^{\text{му}}$ потребителю, которое может обеспечить рассматриваемая ХТС. Потоки реагентов на выходе системы определяются соотношением $\hat{m}_i = \sum_{j=1}^L \hat{m}_{i,j}$, $i = \overline{1, K}$. В качестве ограничения выступает мощность установки по переработке либо исходного реагента А – F_{0A} , либо исходного реагента В – F_{0B} . Такая формулировка ограничений позволяет использовать стехиометрию реакции для записи ограничений

$$F_{0B} = \sum_{i=1}^K \hat{m}_i \quad (4)$$

или

$$F_{0A} = \sum_{i=1}^K i \cdot \hat{m}_i \quad (5)$$

Выбор ограничения в форме (4) или (5) определяется особенностями конкретной реакции, способом ее реализации и особенностями системы разделения реакционной массы. Для определенности выберем ограничения в форме (4). Необходимым условием существования задачи оптимизации является превышение спроса над предложением, т.е. $\sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^L P_{i,j} \geq \sum_{i=1}^K \hat{m}_i$. Таким образом, имеем задачу на условный экстремум

$$m_{i,j}^* = \arg \min_{m_{i,j}} R(\hat{m}_{i,j})$$

$$\hat{m}_{i,j} = \left\{ \hat{m}_{i,j} \in E_{K \times L}, \quad \varphi = \left(F_{0B} - \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^L \hat{m}_{i,j} \right) = 0, \quad P_{i,j} \geq \hat{m}_{i,j} \geq 0 \right\} \quad (6)$$

Решение задачи осуществляется методом неопределенных множителей Лагранжа

$$L(\lambda, \hat{m}_{i,j}) = \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^L [S_{i,j} (P_{i,j} - \hat{m}_{i,j})]^2 + 2\lambda \left(F_{0B} - \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^L \hat{m}_{i,j} \right) \quad (7)$$

Аналитическое решение задачи

$$\lambda^* = \frac{F_{0B} - \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^L P_{i,j}}{\sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^L \frac{1}{S_{i,j}^2}}; \quad m_{i,j}^* = P_{i,j} + \frac{1}{S_{i,j}^2} \lambda^* \quad (8)$$

При выборе ограничений в форме (5) решение системы будет иметь вид

$$\lambda^* = \frac{F_{0A} - \sum_{i=1}^K i \sum_{j=1}^L P_{i,j}}{\sum_{i=1}^K i^2 \sum_{j=1}^L \frac{1}{S_{i,j}^2}}; \quad m_{i,j}^* = P_{i,j} + \frac{i}{S_{i,j}^2} \cdot \lambda^* \quad (9)$$

Оптимальные значения потоков продуктов на выходе схемы определяются соотношением

$$m_i^* = \sum_{j=1}^L m_{i,j}^* \quad (10)$$

По величинам m_i^* можно определить теоретически оптимальные значения селективностей по продуктам реакции

$$\sigma_i^* = \frac{m_i^*}{F_{0B}}, \quad i = \overline{1, K} \quad (11)$$

На нижнем уровне решается задача определения размеров аппаратов, оптимальных режимов и структуры реакторного узла, обеспечивающих минимальное расхождение между оптимальными с экономической точки зрения значениями селективностей по продуктам – σ_i^* и реально возможными значениями – $\hat{\sigma}_i$. Очевидно, что обеспечить равенство $\sigma_i^* = \hat{\sigma}_i$ для всех продуктов невозможно, т.к. на процесс накладываются ограничения в виде: кинетических закономерностей реакции, макрогидродинамической структуры потоков в отдельных модулях и системе в целом, уровня микросмешения элементов жидкости (максимальная смешенность, полная сегрегация).

Основным подходом к решению задачи оптимального синтеза является алгоритмический подход, базирующийся на принципах системного анализа и синтеза ХТП [8]. Содержательная формулировка задачи выглядит следующим образом: определить значения режимно-технологических переменных (объемы аппаратов, температурный режим, концентрации исходных реагентов и т.п.), структуру системы и величины потоков между элементами, значения рециркуляционных потоков продуктов со стадии разделения, обеспечивающих экстремум некоторого критерия оптимальности при заданной мощности по переработке исходного “ведущего”

реагента и заданной степени превращения этого реагента. В качестве критерия оптимальности предлагается использовать величину

$$R = \sum_{i=1}^k b_i (\sigma_i^* - \hat{\sigma}_i)^2 \quad \text{или} \quad R = \sum_{i=1}^k b_i \left(1 - \frac{\hat{\sigma}_i}{\sigma_i^*}\right)^2 \quad (12)$$

где: k – число продуктов пользующихся спросом на рынке, b_i – весовой множитель, пропорциональный вкладу того или иного продукта в общий доход от реализации всех продуктов. Величина R характеризует потери производителя при реализации продуктов, обусловленные несовершенством процесса.

Вид критерия оптимальности может модифицироваться в зависимости от конкретной формулировки решаемой задачи. Например, если требования к составу на выходе реакторной системы таковы, что селективность по последнему продукту не должна превышать предельной величины σ_k^{max} и при этом необходимо обеспечить заданную степень превращения ведущего реагента в реакторном узле φ_A^* , то критерий оптимальности можно записать так: $\tilde{R} = (1 - C) \cdot R + C \cdot f(\hat{\varphi}_A, \varphi_A^*)$, где: R – критерий в формулировке (12), из которого исключено слагаемое соответствующее последнему продукту, $f(\hat{\varphi}_A, \varphi_A^*)$ – некоторая функция от текущей и заданной степени превращения ведущего компонента, C – весовой множитель. Дополнительно необходимо записать ограничение на селективность по последнему продукту $\hat{\sigma}_k \leq \sigma_k^{max}$.

Задача оптимизации заключается в минимизации (12)

$$\{\alpha^*, \bar{U}^*\} = \arg \min_{\alpha, \bar{U}} R(\alpha, \bar{U}) = \arg \min_{\alpha, \bar{U}} \sum_{i=1}^k b_i \left(1 - \frac{\hat{\sigma}_i(\alpha, \bar{U})}{\sigma_i^*}\right)^2 \quad (13)$$

где: α^* – оптимальные значения структурных переменных, \bar{U}^* – вектор оптимальных режимно-технологических управляющих переменных.

Математическая модель системы состоит из двух частей: моделей отдельных блоков или элементов и модели структуры системы.

$$\mathbf{Y}^{(k)} = f^{(k)}[\mathbf{X}^{(k)}, \mathbf{U}^{(k)}, \theta^{(k)}], \quad k = \overline{1, N} \quad (14)$$

$$\Psi^{(k)}(\mathbf{U}^{(k)}, \mathbf{Y}^{(k)}) \leq 0 \quad (15)$$

$$\sum_{k=1}^N \alpha_{m,k}^I = 1, \quad m = \overline{1, M}; \quad \sum_{k=1}^N \alpha_{i,k} + \alpha_i^F = 1, \quad i = \overline{1, N} \quad (16)$$

$$\mathbf{X}^{(k)} = \sum_{i=1}^N \alpha_{i,k} \cdot \mathbf{Y}^{(i)} + \sum_{m=1}^M \alpha_{m,k}^J \cdot \mathbf{X}_{\text{вх}}^{(m)} + \sum_{i=1}^P \gamma_{i,k} \cdot \mathbf{Y}_i^F; \quad k = \overline{1, N} \quad (17)$$

$$0 \leq \gamma_{i,k} \leq 1; \quad \sum_{k=1}^N \gamma_{i,k} = 1, \quad i = \overline{1, P} \quad (18)$$

$$0 \leq \alpha_{m,k}^I \leq 1; \quad 0 \leq \alpha_{i,k} \leq 1; \quad 0 \leq \alpha_i^F \leq 1 \quad (19)$$

где: $\mathbf{X}^{(k)}, \mathbf{Y}^{(k)}, \mathbf{X}_{ex}^{(m)}, \mathbf{Y}^F$ – векторы потоков вещества и энергии на входе и выходе k -ого элемента, в m -ом входном потоке и на выходе реакторной системы соответственно; $\mathbf{U}^{(k)}, \boldsymbol{\theta}^{(k)}$ – вектор управляющих режимно-технологических переменных и параметров модели k -ого элемента; $\alpha_{m,k}^I$ – доля m -го входного потока, направляемая в k -ый элемент; α_i^F – доля выходного потока i -го элемента, подаваемая на выход системы; $\alpha_{i,k}$ – доля выходного потока i -го элемента, подаваемая на вход k -го; $\gamma_{i,k}$ – доля потока i -го вещества, подаваемая со стадии разделения на вход k -го элемента; N, M, P – число элементов, входных потоков и компонентов реакционной системы, соответственно. Система (14) и (15) – уравнения модели k -го блока и ограничения на управляющие и выходные переменные. Соотношения (16) являются уравнениями материального баланса делителей входных потоков системы и делителей выходных потоков элементов, соответственно. Уравнения (17)–(19) – это уравнения баланса вещества и энергии смесителей и ограничения на структурные переменные, соответственно. Таким образом, задача оптимизации реакторного узла (13)–(19) является задачей нелинейного программирования, достаточно высокой размерности. Оптимизирующими переменными являются режимно-технологические и конструктивные переменные $\mathbf{U}^{(k)}$ и структурные переменные $\alpha_{i,k}, \alpha_{m,k}^I, \alpha_i^F$.

Поиск экстремума функционала (12) осуществляли посредством алгоритма, основная идея которого заключается в том, что исходная задача оптимизации высокой размерности с использованием некоторых эвристических соображений делится на ряд подзадач меньшей размерности. В связи с этим, все оптимизирующие переменные разбиваются на несколько групп: объемы реакторов смешения и вытеснения $V_{ис}, V_{ив}$; делитель выходного потока реактора вытеснения $\alpha_{Ni}, i = \overline{1, N-1}, \alpha_N^F$; делитель выхода реактора смешения $\alpha_{1i}, i = \overline{2, N}, \alpha_1^F$; делитель m -го входного потока $\alpha_{m,i}^I, i = \overline{1, N}$; расход m -го входного потока G_{BX_m} ; концентрации компонентов в m -ом входном потоке $X_{BX}^{(m)}$; температура m -го входного потока $T_{BX}^{(m)}$; $m = \overline{1, M}$, делитель потока p -го компонента реакционной системы со стадии разделения $\gamma_{p,i}, i = \overline{1, N}, p = \overline{1, P}$.

Прежде всего, исходя из требований простоты практической реализации, формируется базовый вариант системы, представляющий собой последовательно-параллельное соединение реакторов смешения и вытеснения без распределенной подачи потоков по длине реактора вытеснения. Начальная структура базовой схемы определяется значениями структурных переменных $\alpha = 0,5$. Оптимизация функционирования базового варианта осуществляется путем варьирования режимно-технологических и структурных переменных влияющих на состояние объекта.

Следующий этап оптимального синтеза реакторной системы заключается в определении значений рециклических потоков продуктов со стадии разделения на реакторную систему и оптимального их распределения по элементам системы. Такое

распределение позволяет изменять скорость той или иной стадии реакции в нужную сторону. Но, прежде всего на данном этапе определяются продукты, для которых в первую очередь целесообразно организовывать рецикл. По продукту с номером u ($u = \overline{1, K-1}$) целесообразно организовать рецикл, если выполняются два условия: а) $\hat{\sigma}_u > \sigma_u^*$; б) найдется продукт с номером $j > u$, для которого $\hat{\sigma}_j < \sigma_j^*$.

На последующих этапах определяются оптимальные значения всех групп структурных переменных, оптимальное время пребывания и состав входных потоков (на каждом этапе оптимизации прежде всего определяется возможность рециркуляции продуктов). Каждая подзадача решается методом проектирования статистического градиента.

В качестве примера рассмотрим задачу синтеза реакторной системы, для проведения жидкофазной реакции оксиэтилирования бутилового спирта в изотермических условиях [13]



где: А – оксид этилена; В – бутиловый спирт; P_1, P_2, P_3 – продукты реакции. Мощность установки по переработке оксида этилена принята $F_{0A} = 5,9$ кмоль в сутки, т.е. $F_{0A} = 530$ кмоль в квартал. Результаты решения задачи для различных состояний рынка представлены в таблице.

Т а б л и ц а 1

№	Матрица потребностей $\{P_{ij}\}$	Матрица цен $\{S_{ij}\}$	Потоки продуктов на выходе схемы m_i^*	Селективность σ_i^*
А	$\begin{bmatrix} 42 & 35 & 39 \\ 39 & 57 & 52 \\ 18 & 14 & 11 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 6 & 7 & 6 \\ 8 & 9 & 7 \\ 10 & 12 & 10 \end{bmatrix}$	$m_1^* = 114,4$ $m_2^* = 145,9$ $m_3^* = 41,26$	$\sigma_1^* = 0,22$ $\sigma_2^* = 0,28$ $\sigma_3^* = 0,08$
Б	$\begin{bmatrix} 22 & 15 & 19 \\ 39 & 57 & 52 \\ 25 & 18 & 20 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 6 & 7 & 6 \\ 8 & 9 & 7 \\ 10 & 12 & 10 \end{bmatrix}$	$m_1^* = 54,4$ $m_2^* = 145,9$ $m_3^* = 61,3$	$\sigma_1^* = 0,10$ $\sigma_2^* = 0,28$ $\sigma_3^* = 0,12$

Оптимальная структура реакторного узла, значения потоков веществ определены путём решения задачи оптимизации нижнего уровня (рис. 2).

При решении более общей задачи создания гибкой многопродуктовой реакторной системы в качестве итоговой может быть рекомендована система, которая получится в результате объединения оптимальных вариантов аппаратурно-технологического оформления процесса, найденных для всех прогнозируемых временных периодов.

Разработанный алгоритм и его программная реализация могут использоваться в многоуровневых автоматизированных системах оптимального оперативного управления реакторными узлами.

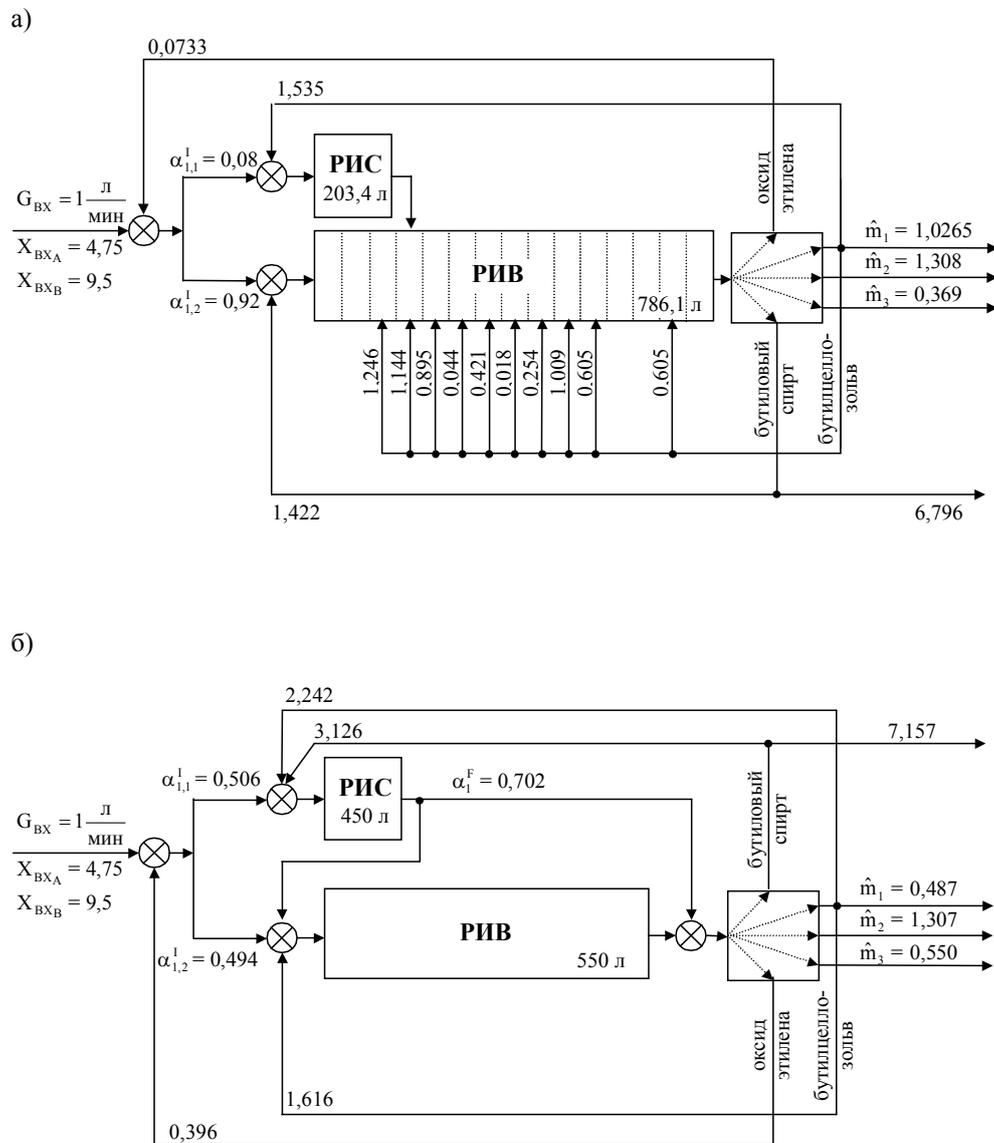


Рис. 2. Оптимальная структура реакторного узла:
 а), б) – структура для соответствующих исходных данных таблицы.
 Числа – величины мольных потоков (моль/мин) и значения структурных параметров

Fig. 2. Optimal structure of tank unit:
 а), б) – structure corresponding to original table data.
 Number are values of fluxes (moll/min) and of structure parameters

Литература

- [1] Кафаров В. В.: *Принципы создания безотходных химических производств*, М.: Химия, 1982, 288.
- [2] Кутепов А. М., Бондарева Т. И., Беренгартен М. Г.: *Общая химическая технология*. М.: ИКЦ Академкнига, 2003, 528.
- [3] Кафаров В. В., Мешалкин В. П.: *Ресурсосберегающие химические производства*, Итоги науки и техники "Процессы и аппараты химической технологии", Т. 15. М., ВИНТИ, 1987, 85-158.
- [4] Левеншпиль О.: *Инженерное оформление химических процессов*. Пер. с англ. /Под ред. Слинько М. Г., М., Химия, 1969, 624.
- [5] Нагиев М.Ф.: *Химическая рециркуляция*. М., Наука, 1978, 87.
- [6] Лабутин А. Н.: *Анализ и оптимальный синтез гибких многопродуктовых реакторных систем непрерывного типа*, Сб. докладов III третьей международной конференции "Теоретические и экспериментальные основы создания нового оборудования", Иваново, 1997, 110-119.
- [7] Легасов В. А. и др.: *Гибкие системы в химической технологии*, Журнал ВХО им. Д. И. Менделеева, 1987, Т. 32, № 3, 18-25.
- [8] Островский Г. М.: *Проектирование эффективных химико-технологических процессов в условиях неполной физико-химической и технологической информации*, Тр. Второй сессии международной школы "Инженерно-химическая наука для передовых технологий". М., НИФХИ им. Карпова, 1996, 420-437.
- [9] Кафаров В. В., Мешалкин В. П., Перов В. П.: *Математические основы автоматического проектирование химических производств*. М., Химия, 1979, 315.
- [10] Лабутин А. Н., Гордеев Л. С., Поздняков А. Б., Гриневич П. В.: *Моделирование структуры однородных реакторных систем*, Тезисы докладов международной конференции "ММХ – 10", Тула, 1996, 109-110.
- [11] Лабутин А. Н., Гордеев Л. С., Поздняков А. Б.: *Синтез и оптимизация гибких многопродуктовых ХТС непрерывного типа*, Тезисы докладов международной конференции "ММХ – 9", ч. 2, Тверь, 1995, 21-22.
- [12] Лабутин А. Н.: *Оперативное управление гибкой многопродуктовой реакторной системой*, Межвузовский сборник научных трудов "Проблемы экономики, финансов и управления производством", вып. 2, Иваново, 1998, 321-334.
- [13] Емельянов В. И., Асриев С. Д., Стуль Б. Я. и др.: *Оптимизация процесса совместного получения бутиловых эфиров моно- и диэтиленгликоля*, Хим. пром., № 12, 1989, 18-20.