

К РАСЧЕТУ ТЕМПЕРАТУРНЫХ РЕЖИМОВ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ

А.И.Рубан, В.Н.Климова

Решается задача вычисления по известным кинетическим уравнениям температурного режима и начальных концентраций, обеспечивающих экстремум некоторой функции качества. Например, критерием качества для реактора идеального вытеснения часто служит максимум выхода продукта.

В данной работе показано, что эффективный путь решения вышепоставленной задачи дает совместное использование метода Рунге [1] сопряженных уравнений [2] и чисел Фибоначчи [3,4].

На первом этапе бесконечномерная задача сводится по методу Рунге к конечномерной и из решения сопряженных уравнений определяется направление градиента по искомым параметрам: начальным условиям кинетических уравнений и коэффициенту разложения зависимости температуры от времени контакта. Затем вдоль направления градиента экстремум функции качества с любой заранее заданной точностью отыскивается с помощью итерационной процедуры, основанной на использовании чисел Фибоначчи. В новой точке пространства параметров все расчеты повторяются сначала, и мы получаем итерационный алгоритм решения задачи.

Рассмотрим пример — нахождение оптимального температурного профиля, обеспечивающего максимум выхода продукта P в реакторе идеального вытеснения для обратимой реакции первого порядка $A \rightleftharpoons P$

Математическое описание реактора имеет вид

$$\frac{dC(\ell)}{d\ell} = +K_1(T)(C_0 - C(\ell)) - K_2(T)C(\ell), \quad C(0) = 0 \quad (I)$$

где C_0 — концентрация сырья на входе реактора, $C(\ell)$ — концентрация продукта P по длине реактора, $\ell \in [0, 1]$; на температуру реактора наложено ограничение $T(\ell) \leq T_0$.

В данном примере перейти к конечномерной задаче можно, исполь-

зую принцип максимума [1,2]. Тогда после соответствующих образований получаем уравнение для температуры при $T(\rho) \leq T_0$

$$\frac{dT_{\text{онт}}}{d\rho} = -RT_{\text{онт}}^2 \frac{K_2(T_{\text{онт}})C_0}{E_1(C_0 - C(\rho))}. \quad (2)$$

Так как на $T(\rho)$ наложено ограничение и решение (2) является монотонно убывающей функцией, то в интервале $[0, \rho_1]$ $T_{\text{онт}}(\rho) = T_0$, а в интервале $[\rho_1, 1]$ определяются уравнением (2). Таким образом, неизвестным параметром в этой задаче остается ρ_1 .

Поиск ρ_1 производится с помощью конечной шаговой итерационной процедуры на основе использования чисел Фибоначчи [3,4]:

u_1, u_2, \dots, u_n , где $u_1 = u_2 = 1$ и при $n > 2$ $u_n = u_{n-1} + u_{n-2}$. Для заданного n ошибка расчета величины ρ_1 не превосходит $\frac{1}{u_{n+2}}$.

При $n = 7$ был просчитан ряд вариантов, два из которых приведены ниже.

I. $K_1 = 0,5 \cdot 10^8 \exp\left\{-\frac{10000}{RT}\right\}$, $K_2 = 10^8 \exp\left\{-\frac{12000}{RT}\right\}$, $C_0 = 1$, $T = 500^\circ\text{C}$.

В результате подстройки $\rho_1 = 0,46 \pm 0,03$. Следовательно, оптимальная температура на участке $[0; 0,46]$ равна максимальной 500°C , а на участке $[0,46; 1]$ в соответствии с уравнением (2) она падает на $40,4^\circ\text{C}$.

II. $K_1 = 0,5 \cdot 10^8 \exp\left\{-\frac{9000}{RT}\right\}$, $K_2 = 10^8 \exp\left\{-\frac{10000}{RT}\right\}$, $C = 1$, $T_0 = 500^\circ\text{C}$.

При $n = 7$ $\rho_1 = 0,577$, и в интервале $[0,577; 1]$ температурный профиль падает до $448,7^\circ\text{C}$.

Таким образом, удачное сочетание принципа максимума и поисковой процедуры, основанной на числах Фибоначчи, позволяет достаточно просто решать некоторые задачи на поиск оптимальных температурных режимов химических реакторов.

Л и т е р а т у р а

1. А.А.Фельдбаум. Основы теории оптимальных автоматических систем. "Наука", М., 1966.
2. Г.М.Островский, Ю.И.Волин. Методы оптимизации химических реакторов. "Химия", М., 1967.
3. Д.Дж.Уайлд. Методы поиска экстремума. "Наука", М., 1967.
4. Г.Н.Воробьев. Числа Фибоначчи. "Наука", М., 1969.