

Модуль 1. Семинар 1.
Безусловная оптимизация методом классического
математического анализа
Определение оптимального времени пребывания в
непрерывном реакторе с мешалкой

Задача 1

Рассчитать оптимальное время проведения химической реакции в аппарате идеального смешения, приняв в качестве критерия оптимальности выход целевого продукта P .

Схема реакции:



Порядок обеих стадий реакции – первый. Константы скоростей равны:

$$k_1 = 0,35 \text{ час}^{-1} \quad k_2 = 0,13 \text{ час}^{-1}$$

Решение

Материальный баланс по компонентам A и P :

$$\begin{cases} v(x_A^{(0)} - x_A) - V k_1 x_A = 0 \\ -v x_P + V(k_1 x_A - k_2 x_P) = 0 \end{cases}$$

При делении уравнений на расход реагента ν получаем:

$$\begin{cases} x_A^{(0)} - x_A - k_1 \cdot \tau \cdot x_A = 0 \\ -x_P + \tau \cdot (k_1 \cdot x_A - k_2 \cdot x_P) = 0 \end{cases}$$

где $\tau = V/\nu$ - среднее время пребывания реагентов в реакторе

Выход продукта P выражается:

$$\psi_P = \frac{x_P}{x_A^{(0)}} = \frac{k_1 \cdot \tau}{(1 + k_1 \cdot \tau) \cdot (1 + k_2 \cdot \tau)}$$

Необходимое условие существования экстремума:

$$\frac{d\psi_P}{d\tau} = 0$$

$$\frac{d\psi_P}{d\tau} = \frac{k_1(1 - k_1 \cdot k_2 \cdot \tau^2)}{[(1 + k_1 \cdot \tau) \cdot (1 + k_2 \cdot \tau)]^2}$$

Поскольку $[(1 + k_1 \cdot \tau) \cdot (1 + k_2 \cdot \tau)]^2 \neq 0$

и $k_1 \neq 0$

Условие экстремума будет иметь вид:


$$1 - k_1 \cdot k_2 \cdot (\tau^{\text{опт}})^2 = 0$$

Откуда:

$$\tau^{\text{опт}} = \frac{1}{\sqrt{k_1 \cdot k_2}}$$

$$\tau_{\text{опт}} = \frac{1}{\sqrt{0,35 \cdot 0,13}} = 4,7 \text{ часа}$$

$$\psi_P^{\text{max}} = \frac{k_1}{(\sqrt{k_1} + \sqrt{k_2})^2} = \frac{0,35}{(\sqrt{0,35} + \sqrt{0,13})^2} = 0,39$$

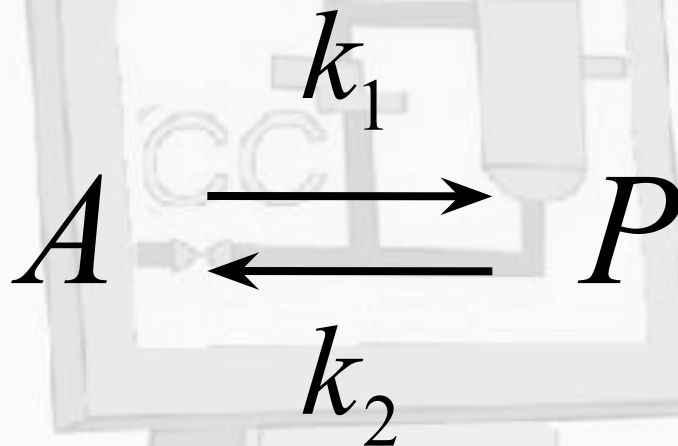


Модуль 1. Семинар 2.
Безусловная оптимизация методом классического
математического анализа.
Определение оптимальной температуры в
непрерывном реакторе с мешалкой

Задача 2

Рассчитать оптимальную температуру проведения обратимой двухкомпонентной реакции в реакторе с мешалкой, используя в качестве критерия оптимальности выход целевого продукта P .

Схема реакции:



Порядок обеих стадий реакции – первый. Константы равны:

$$A_1 = 70 \text{ мин}^{-1} \quad A_2 = 100 \text{ мин}^{-1}$$

Задача 3

Значения энергий активации стадий реакции:

$$E_1 = 2500 \frac{\text{кал}}{\text{моль}} \quad E_2 = 5000 \frac{\text{кал}}{\text{моль}}$$

Время пребывания в реакторе:

$$\tau = 10 \text{ мин}$$

Решение

Материальный баланс по компонентам A и P для реактора идеального перемешивания:

$$\begin{cases} v \cdot (x_A^{(0)} - x_A) = V \cdot (k_1 \cdot x_A - k_2 \cdot x_P) \\ v \cdot x_P = V (k_1 \cdot x_A - k_2 \cdot x_P) \end{cases}$$

Из системы уравнений материального баланса определяется выражение для выхода компонента P :

$$\psi_P = \frac{\tau \cdot k_1}{1 + \tau \cdot (k_1 + k_2)}$$

где $\tau = V/v$ - среднее время пребывания реагентов в реакторе

$$k_1 = A_1 e^{-E_1/RT} \quad k_2 = A_2 e^{-E_2/RT}$$

Необходимое условие существования экстремума:

$$\frac{d\psi_P}{dT} = \frac{\tau \cdot \frac{dk_1}{dT} \cdot [1 + \tau \cdot (k_1 + k_2)] - \tau \cdot \left(\frac{dk_1}{dT} + \frac{dk_2}{dT}\right) \cdot \tau \cdot k_1}{[1 + \tau \cdot (k_1 + k_2)]^2} = 0$$

Приравнивая числитель последнего выражения к нулю, получаем:

$$\frac{dk_1}{dT} (1 + \tau \cdot k_2) - \frac{dk_2}{dT} \cdot \tau \cdot k_1 \equiv 0$$

Учитывая, что:

$$\frac{dk}{dT} = k \cdot \frac{E}{RT^2}$$

Получаем:

$$k_1 \frac{E_1}{R \cdot (T_{opt})^2} (1 + \tau \cdot k_2) = k_2 \frac{E_2}{R \cdot (T_{opt})^2} \cdot \tau \cdot k_1$$

Из последнего выражения следует:

$$k_2 = \frac{E_1}{\tau \cdot (E_2 - E_1)}$$

или


$$A_2 \cdot e^{-\frac{E_2}{RT^{opt}}} = \frac{E_1}{\tau \cdot (E_2 - E_1)}$$

Логарифмирование последнего выражения даёт:

$$\ln A_2 - \frac{E_2}{RT^{opt}} = \ln \frac{E_1}{\tau \cdot (E_2 - E_1)}$$
$$T^{opt} = \frac{E_2}{R \cdot \ln \cdot [\tau \cdot A_2 \left(\frac{E_2}{E_1} - 1 \right)]}$$

Подставляя численные значения параметров, получаем:

$$T^{opt} = \frac{5000}{1,98 \cdot \ln \cdot [10 \cdot 100 \left(\frac{5000}{2500} - 1 \right)]} = 366^{\circ} K$$



Модуль 1. Семинар 3.
Безусловная оптимизация методом классического
математического анализа.
Определение оптимального времени протекания
процесса в периодическом реакторе с мешалкой

Задача 3

Рассчитать оптимальное время проведения реакции в периодическом реакторе с мешалкой, используя в качестве критерия оптимальности выход целевого продукта P .

Схема реакции:



Порядок обеих стадий реакции – первый. Константы скоростей равны:

$$k_1 = 0,35 \text{ час}^{-1} \quad k_2 = 0,13 \text{ час}^{-1}$$

Решение

Материальный баланс по компонентам A и P для периодического реактора:

$$\begin{cases} \frac{dx_A}{dt} = -k_1 \cdot x_A \\ \frac{dx_P}{dt} = k_1 \cdot x_A - k_2 \cdot x_P \end{cases}$$

Начальные условия:

$$x_A \Big|_{t=t^{(0)}} = x_A^{(0)}$$

$$x_P \Big|_{t=t^{(0)}} = 0$$

Первое уравнение системы – с разделяющимися переменными:

$$\frac{dx_A}{x_A} = -k_1 \cdot dt$$

При интегрировании получаем:

$$\int_{x_A^{(0)}}^{x_A} \frac{dx_A}{x_A} = -k_1 \cdot \int_0^t dt$$

$$\ln \frac{x_A}{x_A^{(0)}} = -k_1 \cdot t$$

Откуда следует:

$$x_A = x_A^{(0)} \cdot e^{-k_1 \cdot t}$$

Полученное соотношение подставляется во второе уравнение системы:

$$\frac{dx_P}{dt} + k_2 \cdot x_P = k_1 \cdot x_A^{(0)} \cdot e^{-k_1 \cdot t}$$

При делении обеих частей полученного выражения на $x_A^{(0)}$ получаем дифференциальное уравнение относительно выхода ψ_P :

$$\frac{d\psi_P}{dt} + k_2 \cdot \psi_P = k_1 \cdot e^{-k_1 \cdot t}$$

С начальными условиями:

$$t = 0$$

$$\psi_P = 0$$

Решение полученного дифференциального уравнения стандартными методами даёт:

$$\psi_P = \frac{k_1}{k_1 - k_2} (e^{-k_2 \cdot t} - e^{-k_1 \cdot t})$$

Необходимое условие существования экстремума:

$$\frac{d\psi_P}{dt} = \frac{k_1}{k_1 - k_2} \left(-k_2 \cdot e^{-k_2 \cdot t} + k_1 \cdot e^{-k_1 \cdot t} \right) = 0$$

Поскольку $k_1 \neq k_2$, получаем:

$$k_1 e^{-k_1 \cdot t} - k_2 e^{-k_2 \cdot t} = 0$$

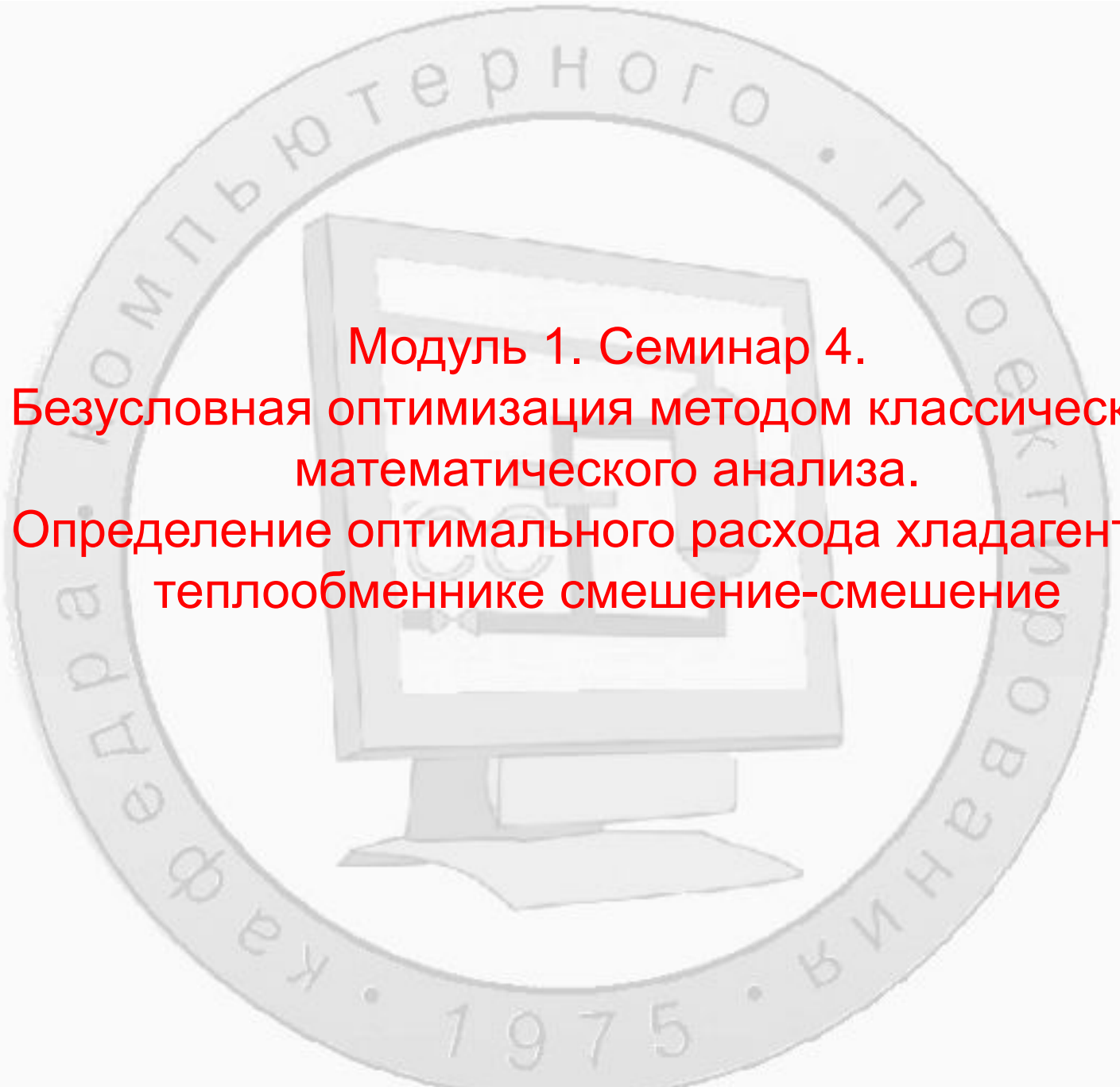
Логарифмирование последнего выражения даёт:

$$t^{opt} = \frac{\ln k_1 / k_2}{k_1 - k_2}$$

$$t^{opt} = \frac{\ln 0,35 / 0,13}{0,35 - 0,13} = 4,5 \text{ часа}$$

Подставляя t^{opt} в выражение для ψ_P , получаем максимально возможный выход целевого продукта P для реактора периодического действия:

$$\psi_P^{\max} = \frac{0,35}{0,35 - 0,13} (e^{-0,13 \cdot 4,5} - e^{-0,35 \cdot 4,5}) = 0,56$$



Модуль 1. Семинар 4.
Безусловная оптимизация методом классического
математического анализа.
Определение оптимального расхода хладагента в
теплообменнике смешение-смешение

Задача 4

Рассчитать оптимальный расход хладагента в теплообменнике смешение-смешение и определить площадь поверхности теплопередачи при следующих параметрах процесса:

1. Горячий теплоноситель – расход 6 кг/вр; теплоемкость 4190 Дж/кг*С; температура на входе и на выходе потока 112.5С и 85.7С
2. Холодный поток – диапазон изменения расхода 1 – 10 кг/вр; теплоемкость 3000 Дж/кг*С; температура на входе потока 20С
3. Коэффициент теплопередачи 500 Вт/м²*С
4. В качестве критерия оптимальности использовать приведенные затраты на процесс, определяемые по формуле

$$R = 1 \cdot (\text{площадь поверхности теплопередачи}) + \\ + 10 \cdot (\text{расход холодного теплоносителя})$$

Поверочно-оценочный расчет

Математическое описание

$$v C_p (T^{(0)} - T) + K^T F^T (T_x - T) = 0$$

$$v_x C_{px} (T_x^{(0)} - T_x) + K^T F^T (T - T_x) = 0$$

Необходимо определить $T = ?$ и $T_x = ?$

Для решения задачи оптимизации необходим конструкционный расчет

Математическое описание преобразуется и записывается с учетом общего теплового баланса

$$vC_p (T^{(0)} - T) + K^T F^T (T_x - T) = 0$$

$$vC_p (T^{(0)} - T) + v_x C_{px} (T_x^{(0)} - T_x) = 0$$

Необходимо определить: $F^T = ?$ $V_x = ?$

Решение методом подстановки:

второе уравнение СЛАУ решается относительно T_x

$$T_x = T_x^{(0)} + (T^{(0)} - T) \frac{vC_p}{v_x C_{px}}$$

затем выражение для T_x подставляется в первое уравнение СЛАУ, которое решается относительно F^T :

$$K^T F^T \left[T_x^{(0)} + (T^{(0)} - T) \frac{vC_p}{v_x C_{px}} - T \right] =$$

$$= vC_p (T - T^{(0)})$$

$$F^T = \frac{vC_p(T - T^{(0)})}{K^T \left[T_x^{(0)} + (T^{(0)} - T) \frac{vC_p}{v_x C_{px}} - T \right]}$$

Производя преобразования в знаменателе последнего выражения и вынося за скобки

$$-vC_p(T - T^{(0)}),$$

получим:

$$F^T = \frac{v_x C_{px}}{K_T \left[\begin{array}{c} \left(\frac{T - T_x^{(0)}}{T^{(0)} - T} \right) \frac{v_x C_{px}}{vC_p} - 1 \end{array} \right]}$$

Обозначим

$$\gamma = \frac{T - T_x^{(0)}}{T^{(0)} - T}$$

Тогда условием физической реализуемости данного теплообменника будет:

$$\gamma \frac{v_x C_{px}}{v C_p} > 1$$

Система двух уравнений в конструкционном расчете решалась относительно T_x и F^T .

Это означает, что температура T на выходе из теплообменника и, соответственно, тепловая нагрузка Q

$$Q = vC_p (T^{(0)} - T)$$

при определении T_x и F^T известны и заданы.

Оптимизация теплообменника типа смешение-смешение

А) Критерий оптимальности - экономический

$$R = C_x v_x + C_F F^T \Rightarrow \min$$

C_x – стоимость единицы расхода хладагента [руб/ед. массы] (в случае задания массового расхода)

C_F - стоимость единицы площади поверхности теплообменника, исчисляемая с учетом амортизации теплообменника [руб/(м²·ед. времени)]

В) Таким образом, ресурсами оптимизации – оптимизируемыми переменными – являются v_x и F^T

Однако, из предыдущих выводов следует, что

$$F^T = F^T(v_x)$$

Поэтому достаточно воспользоваться необходимым условием функции одной переменной:

$$R(v_x) = C_x v_x + C_F F^T(v_x)$$

Необходимое условие экстремума имеет вид:

$$\frac{\partial R}{\partial v_x} = C_x + C_F \frac{dF^T}{dv_x} = 0$$

$$\frac{dF^T}{dv_x} = \frac{C_{px}}{K^T \left(\gamma \frac{v_x C_{px}}{v C_p} - 1 \right)^2}$$

так как

$$F^T = \frac{v_x C_{px}}{K^T \left(\gamma \frac{v_x C_{px}}{v C_p} - 1 \right)}$$

где

$$\gamma = \frac{T - T_x^{(0)}}{T^{(0)} - T}$$

При подстановке полученной производной в необходимое условие существования экстремума R получается:

$$C_x \parallel C_F \frac{C_{px}}{K^T} \frac{1}{\left(\gamma \frac{\nu_x C_{px}}{\nu C_p} - 1 \right)^2}$$

ИЛИ

$$\left(\gamma \frac{\nu_x C_{px}}{\nu C_p} - 1 \right)^2 = \frac{C_F C_{px}}{C_x K^T}$$

Отсюда можно определить:

$$\gamma \frac{\nu_x C_{px}}{\nu C_p} = 1 \pm \sqrt{\frac{C_F C_{px}}{C_x K^T}}$$

ИЛИ

$$v_x = \frac{\nu C_p}{\gamma C_{px}} \left(1 \pm \sqrt{\frac{C_F C_{px}}{C_x K^T}} \right)$$

В результате получаются два корня квадратного уравнения:

$$v_{x1} = \frac{vC_p}{\gamma C_{px}} \left(1 - \sqrt{\frac{C_F C_{px}}{C_x K^T}} \right)$$

$$v_{x2} = \frac{vC_p}{\gamma C_{px}} \left(1 + \sqrt{\frac{C_F C_{px}}{C_x K^T}} \right)$$

Учитывая то обстоятельство, что оптимальное значение может быть в тех точках, где производная целевой функции R не существует, что соответствует обращению в ноль знаменателя dF^T/dv_x , можно записать третье возможное решение:

$$v_{x3} = \frac{\nu C_p}{\gamma C_{px}}$$

Для каждого из этих решений необходимо проверить достаточное условие существования экстремума.

Данное достаточное условие целесообразно проверять, исходя из физического смысла решаемой задачи, т.е. физической реализуемости теплообменника – исходя из выражения:

$$F^T = \frac{v_x C_{px}}{K^T \left(\gamma \frac{v_x C_{px}}{v C_p} - 1 \right)}$$

Отсюда следует, что должно выполняться неравенство:

$$v_x > \frac{vC_p}{\gamma C_{px}}$$

При этих условиях производная dF^T/dv_x является монотонно возрастающей функцией, и достаточное условие существования экстремума выполняется.

Из трех возможных решений только v_{x2} удовлетворяет последнему неравенству.

Поэтому

$$v_x^{opt} = v_{x2}$$

т.е.

$$v_x^{opt} = \frac{v C_p}{\gamma C_{px}} \left[1 + \left(\frac{C_F C_{px}}{C_x K^T} \right)^{0,5} \right]$$

После подстановки выражения для оптимального значения v_x в выражение для $F^T(v_x)$ получается:

$$F^{T(опт)} = \frac{vC_p}{\gamma K^T} \left[1 + \left(\frac{C_x K^T}{C_F C_{px}} \right)^{0,5} \right]$$

Значение R^{\min} определяется по формуле:

$$R^{\min} = C_x v_x^{opt} + C_F F T(opt)$$