

ВОПРОСЫ РАСЧЕТА СЛОЖНЫХ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СХЕМ

Ю. М. Волин, В. И. Мешков, Г. М. Островский /Москва/

В последнее время большое значение приобрела задача оптимизации сложных химико-технологических схем [1, 2]. Существенным этапом при применении любого метода оптимизации является задача расчета схемы. Эта задача особенно осложняется для замкнутых схем, т.е. схем, имеющих обратные связи /например, "рециклы"/, так как в этом случае приходится проводить итерационную процедуру для сведения материальных и тепловых балансов в схеме [3]. Если же учесть, что сложная схема состоит из большого числа аппаратов, описываемых дифференциальными и конечными уравнениями, так что даже простой расчет всех аппаратов схемы занимает много времени, то ясно, что расчет сложной замкнутой схемы еще более удлинит время счета. Поскольку при оптимизации расчет схемы проводится неоднократно, то ясно, что для расчета схем должны быть разработаны экономичные и эффективные методы.

Известно [3, 4], что задача расчета замкнутой схемы эквивалентна решению системы нелинейных конечных уравнений. Поэтому стратегия итерационной процедуры расчета замкнутых схем может строиться на основе методов решения систем нелинейных уравнений — простой итерации, метода Ньютона [5], метода Вольфа [6] и др. Метод Вольфа выгодно отличается от метода Ньютона тем, что для его применения не нужно вычислять матрицу частных производных от левых частей уравнений. Однако недостаток его в том, что для определения первой итерации требуется $n + 1$ начальных приближений. При большом n может потребоваться много начальных приближений. В связи с этим изложим здесь некоторую модификацию метода Вольфа, требующую меньшего числа начальных приближений.

Пусть необходимо решить систему уравнений:

$$f_i(x) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad /1/$$

где x — вектор с координатами x_1, \dots, x_n .

Пусть на j -й итерации известно $m + 1$ приближений $x^{j-m}, \dots, x^{j-(m-s)}, \dots, x^j$ и значений вектор-функции $f(x)$ в соответствующих точках $f^{j-m}, \dots, f^{j-(m-s)}, \dots, f^j$. При этом $1 \leq m < n$.

Предположим, что точки $x^{j-m}, \dots, x^{j-(m-s)}, \dots, x^j$ находятся достаточно близко от точки \bar{x} , которая является решением системы /1/. Будем предполагать, что в окрестности точки \bar{x} функции $f_i(x)$ достаточно хорошо описываются с помощью линейного приближения. Как и в методе Вольфа, имеем формулу для $j + 1$ приближения:

$$x^{j+1} = \sum_{s=0}^m q_s x^{j-(m-s)}, \quad /2/$$

$$\sum_{s=0}^m q_s = 1. \quad /3/$$

Подставив значение x^{j+1} из /2/ в систему /1/ и предположив линейность функций $f_i(x)$, получим следующую систему линейных уравнений:

$$\sum_{s=0}^m q_s f_i^{j-(m-s)} = 0, \quad i=1, \dots, n. \quad /4/$$

В данном случае система /4/, /3/ представляет собой систему $n+1$ уравнений с $m+1$ неизвестными q_0, q_1, \dots, q_m . Поскольку $m < n$, то эта система, вообще говоря, не имеет решения. В связи с этим будем находить такие q_s , чтобы сумма квадратов левых частей системы /4/

$$\sigma = \sum_{i=1}^n \left[\sum_{s=0}^m q_s f_i^{j-(m-s)} \right]^2 \quad /5/$$

принимала минимальное значение.

Выразив q_0 через остальные q_s из ограничения /3/ и подставив его значение в /5/, получим для σ следующее выражение

$$\sigma = \sum_{i=1}^n \left[\sum_{s=1}^m (f_i^{j-m} + (f_i^{j-m} - f_i^{j-(m-s)}) q_s) \right]^2. \quad /5a/$$

Приравнявая производные $\frac{\partial \sigma}{\partial q_s}$ нулю, получим систему m линейных уравнений относительно m неизвестных q_1, \dots, q_m :

$$\sum_{i=1}^n \sum_{s=1}^m (f_i^{j-m} - f_i^{j-(m-s)}) (f_i^{j-m} - f_i^{j-(m-s)}) q_s = \sum_{i=1}^n f_i^{j-m} (f_i^{j-m} - f_i^{j-(m-n)}) \quad /6/$$

$n=1, \dots, m$

Решив систему /6/ и определив q_0 из /3/, можно применить формулу /2/. Алгоритм /6/, /2/ позволяет на первой итерации использовать $m < n$ начальных приближений. В самом деле, задавшись любым m и получив $m+1$ начальных приближений и соответствующих значений вектор - функции $f(x)$, можно решать систему /6/ относительно неизвестных коэффициентов q_s . Далее, с учетом /3/ применяется формула /2/. С помощью этого алгоритма можно построить различные варианты итерационного процесса.

Рассмотрим здесь вариант, когда m изменяется по определенным правилам в зависимости от хода итерационного процесса. Один из способов изменения m состоит в том, чтобы, начиная с $m=1$, увеличивать m на единицу через определенное, не заданное заранее число итераций, до тех пор, пока m не станет равным $n-1$. При

$m = 1$ метод будет работать как двухточечный, при $m = 2$ - как трехточечный и т.д.

Чтобы изменять m , необходимо выбрать некоторый критерий. С этой целью каждому m поставим в соответствие некоторое малое число ε_m , которое назовем критерием изменения базиса. Пусть заданы $m = 1, \varepsilon_1, \varepsilon$, где ε - заданная точность, с которой находится решение. Выбрав начальное приближение χ^0 и применив простую итерацию, получим базисные точки χ^0, χ^1 . В базисных точках вычислим значения вектор-функции f^0, f^1 и соответствующие нормы

$$\|f^0\| = \sum_{i=1}^n |f_i^0|, \quad \|f^1\| = \sum_{i=1}^n |f_i^1|.$$

Далее применяется алгоритм /6/, /2/. В полученной точке χ^2 вычисляются f^2 и $\|f^2\|$. Если $\|f^2\| < \varepsilon$, то решение найдено и машина останавливается. В противном случае выполняется сравнение

$$\|f^2\| < \min \{ \|f^0\|, \|f^1\| \}. \quad /7/$$

Если это неравенство выполняется, то точка χ^2 вводится в систему базисных точек, вытесняя ту из них, в которой норма наибольшая. После этого производим сравнение $\|f^2\| < \varepsilon_1$.

Если это неравенство выполняется, то из точки χ^2 производится простая итерация, формируется система из трех базисных точек, m принимает значение, равное 2, и алгоритм продолжает работать по /6/, /2/ с критерием ε_2 . Если неравенство /7/ не выполняется, то базисная система формируется выбрасыванием первой точки и далее применяется алгоритм /6/, /2/. В пределе, когда $m = n$, метод будет работать так же, как и метод Вольфа, однако решение может быть получено с заданной точностью при $m \neq n$.

Пример

Рассмотрим процесс получения окиси этилена из этилена, проходящий в реакторе с неподвижным слоем катализатора. Этот процесс характеризуется двумя реакциями:

Реакции окисления и горения этилена экзотермичны, поэтому процесс проводят в трубчатом реакторе с теплообменом, причем теплоносителем является кипящая вода, температура которой постоянна. Для повышения эффективности процесса применяют схему с рециклом /рис. I/.

На рис. I обозначено: 1 - реактор; 2 - аппарат разделения, q_1, q_2 - входные потоки этилена и кислорода. Входные потоки и рециркулирующий поток смешиваются в точке 0 и поступают в реактор. В качестве ключевых компонентов выберем концентрации /в мольных

долях/ этилена и кислорода - C_1, C_2 . Тогда удельные числа молей остальных компонентов выражаются следующим образом:

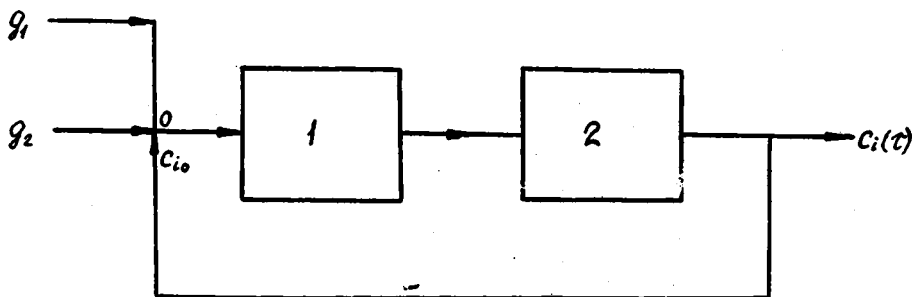


Рис. 1.

$$\begin{aligned} C_3 &= C_{30} + 3(C_1 - C_{10}) + 2,5(C_2 - C_{20}), \\ C_4 &= C_{40} + 2(C_{10} - C_1) + 2(C_{20} - C_2), \\ C_5 &= C_{50} + 2(C_{10} - C_1) + 2(C_{20} - C_2), \end{aligned} \quad /8/$$

где $C_{i0} = C_i(0)$ - концентрации соответствующих компонентов на входе в реактор. Математическая модель процесса имеет вид:

$$\begin{aligned} dc_1/d\tau &= -(w_1 + w_2), \\ dc_2/d\tau &= w_1, \quad 0 \leq \tau \leq \tau_k, \end{aligned} \quad /9/$$

где τ_k - время контакта.

$$w_i = \frac{K_i DC_1}{1 + 3,5 \frac{C_1}{C_3} (1 + K_3 C_2) + K_4 C_2 + K_5 C_4 + K_6 C_5}, \quad i=1,2 \quad /10/$$

$$K_i = K_{i0} \exp(-E_i/RT), \quad i=1,2 \quad /11/$$

$$K_j = K_{j0} \exp(Q/RT), \quad j=3,4,5,6.$$

E_i - энергия активации; K_j - адсорбционные коэффициенты; Q - теплота адсорбции; P - давление в реакторе; T - абсолютная температура; R - газовая постоянная.

В точке 0 выполняются следующие соотношения:

$$\begin{aligned} C_1(0) &= \rho C_1(\tau_k) + q_1, \\ C_2(0) &= \rho(1 - \eta_2)C_2(\tau_k), \\ C_3(0) &= \rho C_3(\tau_k) + q_2, \\ C_4(0) &= \rho(1 - \eta_4)C_4(\tau_k), \\ C_5(0) &= \rho(1 - \eta_5)C_5(\tau_k), \end{aligned} \quad /12/$$

где $C_j(\tau_k)$ - концентрации соответствующих компонентов на выходе реактора; ρ - коэффициент рециркуляции; η_2, η_4, η_5 - коэффициенты извлечения компонентов в аппарате разделения.

Значения констант в выражениях /10/, /11/, /12/ приняты следующими:

$$K_{10} = 2,4 \cdot 10^3, K_{20} = 3,7 \cdot 10^5, K_{30} = K_{50} = 3,8 \cdot 10^{-2}, K_{40} = 2,5 \cdot 10^{-1},$$

$$K_{60} = 0,64 \cdot 10^{-2}, E_1/R = 4076, E_2/R = 7096, Q = 7000, R = 1,98,$$

$$T = 528^\circ\text{K}, \tau_k = 0,6, \rho = 0,85, \eta_2 = \eta_4 = 0,95, \eta_5 = 0,5 \cdot 10^{-1},$$

$$g_1 = 0,2 \cdot 10^{-1}, g_2 = 0,27 \cdot 10^{-1}.$$

Так как концентрации $C_j(\tau_k)$ на выходе из реактора являются функциями концентраций на входе в реактор, то уравнения /12/ можно рассматривать как систему нелинейных уравнений относительно неизвестных $C_i(0)$.

Решение этой задачи было выполнено на ЭЦМ "МИНСК - 2". Система /6/ решалась методом Гаусса, система /10/ - методом Рунге-Кутты с постоянным шагом. В качестве начального приближения выбрана точка с координатами:

$$C_1(0) = 0,2 \cdot 10^{-1}, C_2(0) = 0, C_3(0) = 0,27 \cdot 10^{-1}, C_4(0) = 0, C_5(0) = 0.$$

Критерии: $\varepsilon_1 = 1 \cdot 10^{-1}, \varepsilon = 1 \cdot 10^{-5}$.

В результате счета получено решение:

$$C_1(0) = 0,26003 \cdot 10^{-1}, C_2(0) = 0,58352 \cdot 10^{-3}, C_3(0) = 0,28930 \cdot 10^{-1}$$

$$C_4(0) = 0,59447 \cdot 10^{-3}, C_5(0) = 0,56175 \cdot 10^{-1}$$

за 10 итераций, значение нормы равно $0,83539 \cdot 10^{-5}$. Концентрации компонентов на выходе реактора получены следующими:

$$C_1(\tau_k) = 0,10223 \cdot 10^{-2}, C_2(\tau_k) = 0,13730 \cdot 10^{-1}, C_3(\tau_k) = 0,22713 \cdot 10^{-2},$$

$$C_4(\tau_k) = 0,13987 \cdot 10^{-1}, C_5(\tau_k) = 0,6956 \cdot 10^{-1}.$$

С того же начального приближения для решения системы /12/ применялась простая итерация, в результате чего на 10-й итерации получены следующие результаты:

$$C_1(0) = 0,20880 \cdot 10^{-1}, C_2(0) = 0,58392 \cdot 10^{-3}, C_3(0) = 0,28757 \cdot 10^{-1},$$

$$C_4(0) = 0,59395 \cdot 10^{-1}, C_5(0) = 0,49475 \cdot 10^{-1}.$$

Значение нормы равно $0,16283 \cdot 10^{-2}$. Отсюда следует, что простая итерация сходится хуже и для получения решения с заданной точностью потребуется большее время счета.

Поступила в редакцию 15.10.1970 г.

Л и т е р а т у р а

1. Liang-Tseng Fan, The continuous maximum principle.
2. Т.А.Бережинский, К.М.Волин, Г.М.Островский. Теоретические основы химической технологии, № 5, 1967.
3. М.Ф.Нагиев. Учение о рециркуляционных процессах в химической технологии, Азгосиздат, 1965.
4. Ю.М.Волин, Г.М.Островский. Теоретические основы химической технологии, № 6, 1969.
5. С.С.Бroyden, Mathematics of Computation, v.19, N92, 1965
6. Wolfe, Com.ACM, v.2, december, 1959.