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:

$$A \xrightarrow{k_1} P \xrightarrow{k_2} S$$

Порядок обеих стадий реакции – первый. Константы скоростей равны:

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

Решение

Материальный баланс по компонентам A и P:

$$\begin{cases} v(x_A^{(0)} - x_A) - Vk_1 x_A = 0 \\ -vx_P + V(k_1 x_A - k_2 x_P) = 0 \end{cases}$$

При делении уравнений на расход реагента v 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 $\tau = V/v$ - 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:

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

Откуда:

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

$$\tau^{onm} = \frac{1}{\sqrt{0{,}35 \cdot 0{,}13}} = 4{,}7\ \textit{часа}$$

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

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, использовав в качестве критерия оптимальности выход целевого продукта P.

Схема реакции:

$$A \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} P$$

Порядок обеих стадий реакции – первый. Константы равны:

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

Задача 3

Значения энергий активации стадий реакции:

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

Время пребывания в реакторе:

$$\tau = 10 \ мин$$

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

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

Необходимое условие существования экстремума:

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

Приравнивая числитель последнего выражения к нулю, получаем:

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

Учитывая, что:

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

Получаем:

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

Из последнего выражения следует:

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

или

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

Логарифмирование последнего выражения даёт:

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

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

Подставляя численные значения параметров, получаем:

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

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, использовав в качестве критерия оптимальности выход целевого продукта P.

Схема реакции:

$$A \xrightarrow{k_1} P \xrightarrow{k_2} S$$

Порядок обеих стадий реакции – первый. Константы скоростей равны:

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

Решение

Материальный баланс по компонентам A и P для периодического реактора:

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

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:

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

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

Откуда следует:

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

Полученное соотношение подставляется во второе уравнение системы:

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

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:

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

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:

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

Логарифмирование последнего выражения даёт:

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

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

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

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

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/м^2*С
4. В качестве критерия оптимальности использовать приведенные затраты на процесс, определяемые по формуле

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

Поверочно-оценочный расчет

Математическое описание

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

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

Необходимо определить $T = ?$ и $Tx = ?$

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: $F^T = ?\ Vx = ?$

Решение методом подстановки:

второе уравнение СЛАУ решается относительно T_x

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

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

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

$$= vC_p \left(T - T^{(0)}\right)$$

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

Производя преобразования в знаменателе последнего выражения и выноса за скобки

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

получим:

$$F^T=\frac{v_xC_{px}}{K^T\left[\left(\frac{T-T_x^{(0)}}{T^{(0)}-T}\right)\frac{v_xC_{px}}{vC_p}-1\right]}$$

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/(м^2·ед. времени)]

В) Таким образом, ресурсами оптимизации – оптимизирующими 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:

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

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

так как

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

где

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

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

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

или

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

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:

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

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

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:

$$v_{x3} = \frac{vC_p}{\gamma C_{px}}$$

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:

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

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

$$v_x^{опт} = v_{x2}$$

т.е.

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

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

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

Значение $R^{\min}$ определяется по формуле:

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