

**MATHEMATIC
MODELLING AND
PROCESS OPTIMISATION
IN CHEMICAL
TECHNOLOGY**

V. F. SHVETS

Optimisation of the parameters of chemical process with the help of mathematic modelling for manufacturing the chemical products is considered. The main principles of modelling and optimisation are illustrated with the real examples of searching for optimal chemical process parameters on the base of economic criteria.

Рассмотрены основные направления совершенствования химических производств путем оптимизации значений параметров химических процессов с использованием математических моделей. Основные принципы моделирования и оптимизации проиллюстрированы конкретными примерами поиска оптимального набора параметров процесса по экономическим критериям.

© Швец В.Ф., 1998

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ
И ОПТИМИЗАЦИЯ
В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ**

В. Ф. ШВЕЦ

*Российский химико-технологический университет
им. Д.И. Менделеева, Москва*

На химических заводах и комбинатах из сырья минерального, растительного или животного происхождения и различных промежуточных продуктов их переработки производят свыше миллиарда тонн в год химической продукции сотен тысяч наименований. При огромных различиях в масштабах производства (от десятков тонн до десятков миллионов тонн в год) и номенклатуре продукции все химические предприятия имеют общие принципы построения и общие направления развития и совершенствования. Любое химическое производство включает технологические стадии приема и подготовки сырья, химического превращения, разделения реакционной массы, выделения целевого продукта, его очистки, отгрузки и отправки потребителю, а также очистки и переработки отходов и выбросов. Кроме сырья химические производства в значительных количествах потребляют воду, пар и электроэнергию.

Эффективность химического производства определяется экономическими показателями, и ее повышение достигается снижением затрат сырья и материалов, энергии, капитальных вложений, повышением производительности труда и снижением количества отходов. Основная доля затрат при производстве химической продукции приходится на сырье (до 70%) и энергию (до 40%). Снижение их расхода на единицу продукции дает наибольший экономический и экологический эффект. Кардинальный путь снижения этих затрат состоит в использовании новых реакций и каталитических процессов, позволяющих получать из дешевого сырья только необходимые продукты без отходов, в мягких условиях, с минимальными затратами энергии и высокой производительностью. Примеры решения задачи повышения эффективности химических производств таким способом подробно рассмотрены в статьях [1, 2].

Дополнительного снижения затрат на производство химической продукции достигают оптимизацией процессов на всех технологических стадиях. Наибольший экономический эффект дает оптимизация стадии химического превращения (реакционного узла) и связанной с ней стадии

разделения реакционной смеси и выделения продуктов реакции.

Важнейшими характеристиками работы промышленного химического реактора являются удельная производительность (количество целевого продукта, образующегося в единицу времени в единице объема реактора) и селективность (доля превращенного сырья, использованного на образование целевого продукта). Для достижения наилучших экономических результатов необходимо добиваться возможно более высоких значений этих показателей. Они зависят от условий работы химического реактора (параметров процесса), к которым относятся температура, давление, начальные концентрации реагентов, степень их превращения (степень конверсии). Существенное значение имеет также тип реактора.

Характер влияния параметров процесса на его результат зависит от особенностей каждой реакции. При этом варьирование параметров процесса нередко приводит к изменению удельной производительности и селективности в противоположных направлениях, а также может приводить к дополнительным затратам на этой или других стадиях технологического процесса, например разделения реакционной массы или подготовки сырья. Так, снижение степени конверсии или применение избытка второго реагента часто благоприятствуют росту селективности и удельной производительности, но сопровождаются повышенным расходом энергии на выделение и рециркуляцию непревращенных веществ. Применение катализатора увеличивает производительность, но связано с дополнительными материальными затратами. Повышение давления при проведении газофазной реакции повышает производительность, но может снизить селективность и вызывает дополнительный расход энергии на компримирование (сжатие). По этим причинам подбор параметров процесса по таким критериям, как максимум удельной производительности и селективности, не может дать удовлетворительных результатов. Единственно надежными критериями для оптимизации параметров процесса являются экономические факторы. Ими могут быть минимум заводской себестоимости целевого продукта или максимум дохода, полученного от его реализации.

Подбор оптимальных параметров осуществляют с использованием математической модели процесса, в которой заводская себестоимость или доход выражаются в виде функции оптимизируемых параметров. Эта функция может быть построена эмпирически на основании анализа результатов работы промышленной или опытной установки в различных режимах с варьированием параметров. Другой, более надежный и менее затратный путь построения математической модели основан на использовании известных законов природы, лежащих в основе химических и физических процессов, протекающих в

реакторе и других аппаратах различных технологических стадий. К ним относятся уравнения химической кинетики и термодинамики, описывающие скорости образования основных и побочных продуктов реакции и состав реакционной массы как функцию температуры, давления, начальных концентраций реагентов и степени их конверсии, уравнения гидродинамических, тепловых и массообменных процессов, сопровождающих реакцию или протекающих в отдельных аппаратах. Эти уравнения используют затем для построения функции себестоимости или дохода, связывающей эти экономические критерии с параметрами процесса. При разработке таких моделей руководствуются общими принципами математического моделирования, хорошо изложенными в статье Ю.И. Неймарка [3]. Модель должна достаточно хорошо описывать реальный процесс и в то же время быть достаточно простой, обеспечивая точность расчетов, не превышающую точность исходных данных.

Рассмотрим на конкретных примерах несколько реальных решений проблемы оптимизации химико-технологических процессов с использованием простейших моделей.

В качестве первого примера решим задачу подбора параметров процесса для обеспечения максимальной производительности реактора без учета экономических показателей, которая зачастую ставилась в эпоху развитого социализма.

Предположим, что производство продукта В, образующегося по реакции $A \rightarrow B$, функционирует с 40-х годов по старой технологии. Согласно производственному регламенту, реакция проводится в периодическом реакторе, в который загружается раствор исходного реагента А с начальной концентрацией $C_{A,0} = 1$ моль/л в количестве $V = 100$ л. Реакционная масса термостатируется с помощью теплообменных устройств реактора (рубашка, змеевик) в течение времени $t = 3$ ч. За это время часть исходного реагента А превращается в продукт реакции В. При этом степень конверсии X исходного реагента А в В

$$X = \frac{C_{A,0} - C_A}{C_{A,0}} = \frac{C_B}{C_{A,0}} = 0,75, \quad (1)$$

где C_A и C_B – концентрации А и В (моль/л) в реакторе в момент времени $t = 3$ ч.

При достижении заданной конверсии реакционная масса охлаждается, продукт реакции В отделяется, а непревращенный исходный реагент А попадает в отходы производства. Суммарное время загрузки и выгрузки реакционной массы составляет $t_0 = 1$ ч.

Для таких регламентных показателей загрузки реагента А для проведения одной операции составляет $n_{A,0} = V \cdot C_{A,0} = 100$ моль, а количество образовавшегося за время реакции продукта В $n_B = n_{A,0} \cdot X = 100 \cdot 0,75 = 75$ моль. Отсюда часовая

производительность Π установки, выраженная в молях продукта В, полученного в единицу времени:

$$\Pi = \frac{n_B}{t + t_0} = \frac{75}{3 + 1} = 18,75 \text{ моль/ч,}$$

или

$$18,75 \cdot 24 = 450 \text{ моль/сут.}$$

Для решения поставленной задачи достижения максимальной производительности проведем исследование кинетики реакции $A \rightarrow B$. Находим, что ее скорость описывается кинетическим уравнением второго порядка:

$$-\frac{dC_A}{dt} = k \cdot C_A^2 \text{ моль/л} \cdot \text{ч} \quad (2)$$

с константой скорости $k = 1 \text{ л/моль} \cdot \text{ч}$. Уравнение (2) представляет собой в данном случае математическую модель описанного выше периодического реактора. Воспользуемся этой моделью для определения степени конверсии X и времени t , обеспечивающих максимальную производительность установки. Очевидно, что такое время существует, поскольку при малом времени реакции t , несмотря на высокую скорость реакции (C_A близко к $C_{A,0}$), общая производительность установки мала из-за большой доли непроизводительных затрат времени t_0 . К тому же при большом времени реакции t доля непроизводительных затрат снизится, но снизится и скорость реакции из-за малой концентрации C_A к концу реакции (см. уравнение (2)).

Для определения оптимальных значений X и t выразим C_A через X ($C_A = C_{A,0}(1 - X)$), подставим в уравнение (2)

$$\frac{dX}{dt} = kC_{A,0}^2(1 - X)^2$$

и проинтегрируем

$$\int_0^X \frac{dX}{kC_{A,0}^2(1 - X)^2} = \int_0^t dt$$

или

$$t = \frac{X}{kC_{A,0}(1 - X)}.$$

Подставив приведенные выше значения k и $C_{A,0}$ в последнее уравнение, получим

$$t = \frac{X}{1 - X}. \quad (3)$$

Запишем теперь уравнение для расчета производительности установки. Для этого количество молей продукта В, производимых за одну операцию,

$$n_B = VC_B = VC_{A,0}X = 100X, \quad (4)$$

разделим на время операции $t + t_0$:

$$\Pi = \frac{n_B}{t + t_0} = \frac{100X}{t + 1} \text{ моль/ч.}$$

Используя соотношение (3), получим

$$\Pi = 100X(1 - X). \quad (5)$$

Теперь легко найти оптимальное значение X для обеспечения максимального значения Π . Для этого продифференцируем Π по X и приравняем производную нулю:

$$\frac{d\Pi}{dX} = 100 - 200X = 0.$$

Отсюда оптимальное значение $X = 0,5$, а максимальное значение производительности, согласно (5), $\Pi = 25 \text{ моль/ч}$, или $25 \cdot 24 = 600 \text{ моль/сут}$, что на 33,3% выше регламентного показателя. Достигнутый результат, несмотря на ухудшение экологических показателей (выбрасывается в отходы не четверть загруженного в реактор А ($X = 0,75$), а половина ($X = 0,5$)), был вполне достоин премии в размере месячного оклада и помещения портрета автора на доску почета победителей социалистического соревнования.

Переместимся теперь из развитого социализма в период реформирования экономики. Предположим, что описанная выше установка взята нами в аренду и теперь мы вынуждены ее эксплуатировать в режиме обеспечения максимального дохода. Введем экономические показатели, выражая их в долларах, поскольку расчеты в рублях в период гиперинфляции были бессмысленны.

Примем значения рыночных стоимостей исходного реагента А и продукта реакции В равными $S_A = 1 \text{ \$/моль}$ и $S_B = 4 \text{ \$/моль}$. Введем также значения эксплуатационных затрат $S_t = 50 \text{ \$/ч}$, которые не зависят от параметров процесса и включают плату за аренду, заработную плату персонала, оплату энергоресурсов, отчисления рэкетирам и т.п.

Вычислим теперь значение дохода \mathcal{L} , $\text{\$/ч}$, который будем иметь в найденном выше режиме эксплуатации установки, обеспечивающем максимум производительности. За время $t + t_0$ одной операции сумма, полученная от реализации синтезированного продукта В, составит

$$S_B n_B = S_B VC_B = S_B VC_{A,0}X.$$

За это же время расходы на приобретение исходного реагента и эксплуатацию установки будут равны

$$S_A n_{A,0} + S_t(t + t_0) = S_A VC_{A,0} + S_t(t + t_0),$$

где $n_{A,0}$ – число молей исходного реагента А, загружаемого в реактор для проведения одной операции.

Отсюда доход в единицу времени

$$\begin{aligned} D &= \frac{S_B VC_{A,0} X - S_A VC_{A,0} - S_f(t + t_0)}{t + t_0} = \\ &= \frac{4 \cdot 100X - 1 \cdot 100 - 50(t + t_0)}{t + t_0} \text{ \$/ч.} \end{aligned} \quad (6)$$

Как следует из полученного уравнения, при значениях $X = 0,5$ и $t = 1$ ч, обеспечивающих максимальную производительность, значение $D = 0$. То есть в новых экономических условиях арендатору нужно либо закрывать производство, либо перевести его в режим рентабельной работы.

Воспользуемся полученным уравнением (6) для определения оптимальных значений X и t , обеспечивающих максимум дохода в единицу времени. Выразив t через X , согласно (3), получим

$$\begin{aligned} D &= \frac{400X - 100 - 50/(1 - X)}{1/(1 - X)} = \\ &= 400X(1 - X) - 100(1 - X) - 50 = \\ &= -400X^2 + 500X - 150, \text{ \$/ч.} \end{aligned} \quad (7)$$

Продифференцировав по X и приравняв полученное выражение нулю, получим уравнение для расчета конверсии, обеспечивающей максимум дохода:

$$\frac{dD}{dX} = -800X + 500 = 0,$$

$$X = 0,625.$$

При найденном значении конверсии время реакции, согласно (3), равно $t = 1,67$ ч, вычисленное по уравнению (7) значение дохода составляет 6,25 \$/ч, или 150 \$/сут. Производительность установки, вычисленная по уравнению (5), в этих условиях составляет 23,44 моль/ч, или 562,5 моль/сут. Это ниже найденного ранее ее максимального значения (600 моль/сут), но именно этот режим обеспечивает получение дохода. Источником дохода является в данном случае более полное использование сырья (большая степень конверсии).

Заработанную таким образом прибыль можно потратить на реконструкцию установки с целью дальнейшего повышения ее рентабельности. Этого можно достичь путем ввода в эксплуатацию новой технологической стадии выделения непревращенного исходного реагента А с целью организации его рецикла для полного использования в синтезе В. Рентабельность установки при этом возрастет только в случае затрат на рецикл, меньших рыночной стоимости исходного А.

Предположим, нам удалось разработать технологию этой стадии и реализовать ее с затратами 0,5 \$ на 1 моль регенерированного А ($S_{A,R} = 0,5$ \$/моль). Это, несомненно, приведет к повышению дохода за счет снижения затрат на сырье и позволит избежать штрафов за сброс отходов непревращенного А при неизбежном ужесточении в

будущем экологического контроля. Проведенное изменение технологической схемы повлечет за собой, однако, и изменение режима работы реактора, обеспечивающего максимум дохода. Для определения оптимальных значений параметров X и t в новых условиях опять решаем задачу оптимизации.

За время $t + t_0$ одной операции сумма, полученная от реализации продукта В, составит, как и в предыдущем примере,

$$S_B n_B = S_B VC_B = S_B VC_{A,0} X.$$

За это же время расходы на приобретение свежего исходного А составят $S_A n_{A,0} X = S_A VC_{A,0} X$, расходы на регенерацию непревращенного А будут равны $S_{A,R} n_{A,0} (1 - X) = S_{AR} VC_{A,0} (1 - X)$ и эксплуатационные затраты, независимые от параметров процесса, $S_f(t + t_0)$. Отсюда доход в единицу времени при функционировании стадии регенерации непревращенного А составит

$$\begin{aligned} D &= \\ &= \frac{S_B VC_{A,0} X - S_A VC_{A,0} X - S_{AR} VC_{A,0} (1 - X) - S_f(t + t_0)}{t + t_0} = \\ &= \frac{4 \cdot 100X - 1 \cdot 100X - 0,5 \cdot 100(1 - X) - 50(t + t_0)}{t + t_0}. \end{aligned} \quad (8)$$

Подставив $t_0 = 1$ и заменив t на X по уравнению (3), получим

$$\begin{aligned} D &= \frac{300X - 50(1 - X) - 50(1/(1 - X))}{1/(1 - X)} = \\ &= 300X(1 - X) - 50(1 - X)^2 - 50. \end{aligned}$$

После дифференцирования D по X и приравнивания производной нулю имеем

$$\frac{dD}{dX} = 300 - 600X + 100 - 100X = 0,$$

$$X = 0,571.$$

Найденное значение конверсии в соответствии с (3) достигается за время $t = 1,33$ ч. Подставив найденное значение X в (8), вычислим доход в единицу времени: $D = 14,29$ \$/ч, или 342,9 \$/сут. Вычисленная по уравнению (5) производительность установки по продукту В составляет 24,49 моль/ч, или 587,9 моль/сут.

Существенное увеличение дохода по сравнению с предыдущим вариантом (более чем вдвое) произошло как в результате использования части более дешевого регенерированного исходного реагента А, так и в результате некоторого повышения производительности установки из-за уменьшения степени конверсии.

Еще один резерв для повышения рентабельности и увеличения получаемого от эксплуатации установки дохода состоит в исключении времени непродуцированных затрат (t_0). Этого можно добиться путем перевода работы реактора в непрерывный режим,

который обеспечивается путем организации подачи в реактор раствора исходного реагента А с постоянной скоростью и непрерывного отбора из реактора реакционной массы с той же объемной скоростью. При этом производится термостатирование реакционной массы с помощью теплообменных устройств и интенсивное перемешивание реакционной массы таким образом, чтобы обеспечить по всему объему реактора постоянную температуру и постоянный состав, соответствующий составу реакционной массы, вытекающей из реактора. Такой тип непрерывно действующего реактора носит название реактора идеального (или полного) смешения.

Модель этого реактора отличается от использованной в предыдущих примерах модели периодического реактора. Для ее построения воспользуемся приведенными выше кинетическим уравнением реакции (2) и уравнением материального баланса непрерывного реактора. Обозначим через $F_{A,0}$ (моль/ч) мольный поток исходного реагента А, поступающего в реактор. Тогда мольный поток продукта реакции В, покидающего реактор, будет $F_B = F_{A,0}X$ моль/ч. Кроме того, при концентрации исходного реагента в реакторе C_A количество продукта, образующегося в объеме V в единицу времени согласно кинетическому уравнению (2), будет $F_B = V k C_A^2 = V k C_{A,0}^2 (1-X)^2$. Поскольку в стационарном режиме скорость образования продукта В равна скорости его отбора из реактора, приравнявая записанные выше уравнения для F_B , получим математическую модель непрерывного реактора полного смешения применительно к рассматриваемой реакции

$$F_{A,0}X = V k C_A^2 = V k C_{A,0}^2 (1-X)^2$$

или, подставив значения k и $C_{A,0}$,

$$F_{A,0} = V \frac{(1-X)^2}{X} \quad (9)$$

и то же для F_B :

$$F_B = F_{A,0}X = V(1-X)^2. \quad (10)$$

Составим теперь функцию дохода, используя изображенную на рис. 1 диаграмму материальных потоков непрерывно действующей установки, включающей реактор (1) и систему разделения непревращенного А и продукта реакции В (2). Мольный поток свежего исходного А, поступающего на установку, обозначен на схеме как $F_{A,00}$. При полном использовании регенерированного А он равен F_B и в соответствии с (10) связан с объемом реактора и конверсией уравнением

$$F_{A,00} = F_B = F_{A,0}X = V(1-X)^2. \quad (11)$$

Мольный поток $F_{A,0}$ поступающего в реактор исходного реагента равен сумме мольных потоков свежего исходного $F_{A,00}$ и непревращенного А, отде-

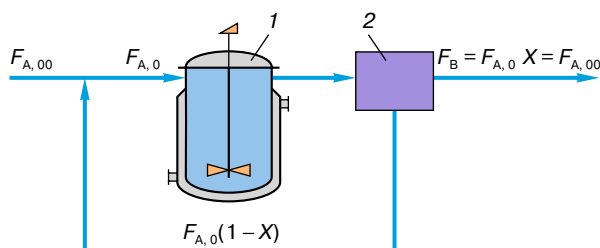


Рис. 1. Схема материальных потоков установки с реактором полного смешения (1) и узлом разделения непревращенного исходного реагента А и продукта реакции В (2)

ленного от продуктов реакции в системе разделения (2) $F_{A,0}(1-X)$.

Величина дохода, получаемого в час, складывается из суммы, полученной за реализацию продукта реакции $F_B S_B$, за вычетом стоимости $F_{A,00} S_A$ исходного А, стоимости регенерации А $F_{A,0}(1-X) S_{AR}$ и расходов, не зависящих от параметров процесса S_r :

$$D = F_B S_B - F_{A,00} S_A - F_{A,0}(1-X) S_{AR} - S_r, \text{ \$/ч.} \quad (12)$$

Выразив мольные потоки через объем и степень конверсии согласно (10) и (11), получим

$$D = S_B V (1-X)^2 - S_A V (1-X)^2 - S_{AR} V \frac{(1-X)^3}{X} - S_r. \quad (13)$$

Подставив численные значения объема реактора и стоимостей в уравнение (13), найдем, как и в предыдущих примерах, значение степени конверсии, обеспечивающей максимум дохода:

$$D = 4 \cdot 100(1-X)^2 - 100(1-X)^2 - 0,5 \cdot 100 \frac{(1-X)^3}{X} - 50, \quad (14)$$

$$\frac{dD}{dX} = -800(1-X) + 200(1-X) - 50 \left(-\frac{1}{X^2} + 3 - 2X \right) = 0,$$

$$14X - 15 + \frac{1}{X^2} = 0,$$

$$X = 0,305.$$

Пользуясь найденным значением X , вычислим по уравнениям (11) и (9) мольные потоки свежего и регенерированного А, которые обеспечат найденное оптимальное значение степени конверсии:

$$F_{A,00} = V(1-X)^2 = 48,3 \text{ моль/ч,}$$

$$F_{A,0}(1-X) = V \frac{(1-X)^3}{X} = 110 \text{ моль/ч.}$$

Производительность установки по продукту В составит $F_B = F_{A,00} = 48,3$ моль/ч, или 1159 моль/сут, что намного выше, чем в рассмотренных выше

вариантах, включая максимально возможную производительность периодического реактора. Это связано как с исключением непроизводительных стадий загрузки и выгрузки, так и с уменьшением степени конверсии.

Вычисленная по уравнению (14) сумма дохода по этим же причинам также максимальна и составляет 39,87 \$/ч, или 957 \$/сут. На этом модернизацию производства можно временно приостановить и на честно заработанные деньги съездить в отпуск на Канары.

Рассмотренные примеры моделирования и оптимизации химико-технологического процесса, несмотря на свою простоту, достаточно близки к реальности и иллюстрируют основные принципы этого метода повышения эффективности химического производства. Эти принципы сохраняются при моделировании и оптимизации значительно более сложных процессов, которые требуют только усложнения моделей и последующих расчетов по ним. В частности, при наличии побочных реакций необходимо использовать кинетические уравнения образования побочных продуктов. Совмещение реакции с переходом реагентов или продуктов в другую фазу и подводом или отводом значительного тепла реакции требует использования в модели уравнений диффузии, массо- и теплопередачи. Эти же уравнения используются для построения моделей аппаратов технологических стадий подготовки

сырья и разделения продуктов реакции путем перегонки, ректификации, кристаллизации, экстракции и других процессов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Темкин О.Н. Промышленный катализ и экологически безопасные технологии // Соросовский Образовательный Журнал. 1997. № 3. С. 42–50.
2. Швец В.Ф. Совершенствование химических производств // Соросовский Образовательный Журнал. 1997. № 6. С. 49–55.
3. Неймарк Ю.И. Простые математические модели и их роль в постижении мира // Соросовский Образовательный Журнал. 1997. № 3. С. 139–143.

* * *

Валерий Федорович Швец, доктор химических наук, профессор Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева, зав. кафедрой технологии основного органического и нефтехимического синтеза. Область научных интересов: исследования в области кинетики, катализа и механизма органических реакций, моделирование и оптимизация на этой основе промышленных реакторов и технологических схем. Автор более 180 научных работ и трех учебников для вузов.