ИССЛЕДОВАНИЕ КРИТЕРИЯ ОПТИМАЛЬНОСТИ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ ДЛЯ РЕАЛИЗАЦИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

RESEARCH OF THE CHEMICAL REACTION OPTIMALITY CRITERION FOR TECHNOLOGICAL PROCESS REALIZATION

М.Т. Минхайрова
Madina T. Minkhayrova

Уфимский государственный
нефтяной технический
университет,
г. Уфа, Российская Федерация

Ufa State Petroleum
Technological University,
Ufa, Russian Federation

Д.Г. Халикова
Dilara G. Halikova

Уфимский государственный
нефтяной технический
университет,
г. Уфа, Российская Федерация

Ufa State Petroleum
Technological University,
Ufa, Russian Federation

А.М. Шаяхметов
Aidar M. Shayakhmetov

Уфимский государственный
нефтяной технический
университет,
г. Уфа, Российская Федерация

Ufa State Petroleum
Technological University,
Ufa, Russian Federation

Исследован критерий оптимальности химической реакции методом Эйлера при поиске наиболее целесообразной конструкции реактора для реализации технологического процесса. Критерий оптимальности соответствует минимуму поверхности сравниваемых аппаратов конкретной химической реакции с расчетом ряда реакторов, что позволяет добиться минимума капиталовложений на сооружение пропорционально материалоемкости аппарата. Система простых дифференциальных уравнений, отражающих формальную модель кинетики химической реакции, решалась методом первого порядка. Метод Эйлера выполняет сканирование оси времени с шагами, используя рекуррентное соотношение для расчета концентрации компонента на шаге по результатам расчета концентрации этого компонента на предыдущем шаге. В PascalABC.NET с возможностью определения необходимой продолжительности реакции и вывода промежуточных значений концентраций компонентов реакции в реперных точках был произведен расчет с заданием начальной концентрации компонента. Были определены величины наиболее целесообразной конструкции реакторов идеального вытеснения и идеального смешения для реализации данного процесса.

Проведен анализ моделей идеального смешения периодического и проточного действия, а также реактора идеального вытеснения. Были сформулированы математические модели и получены результаты по кинетическому расчету со значениями времени реакции и объемов аппарата, при которых выход целевого продукта был наивысшим. В ходе рассмотрения в качестве критерия оптимальности была найдена поверхность конструкции реакторов и в сравнении с данными аппаратами отмечена эффективность модели идеального смешения периодического действия.

The optimality criterion of the chemical reaction by the Euler method was investigated in the search for the most suitable reactor design for the realization of the technological process. The optimality criterion corresponds to the minimum of the surface of the compared apparatus of a particular chemical reaction with the calculation of a number of reactors, which allows to achieve a minimum investment in the construction in proportion to the material capacity of the apparatus. A system of simple differential equations reflecting the formal model of the chemical reaction kinetics was solved by a first-order method. The Euler method scans the time axis with steps, using the recurrence relation to calculate the concentration of the component in the step from the results of calculating the concentration of this component in the previous step. In PascalABC.NET with the ability to determine the necessary duration of the reaction

Ключевые слова

химическая реакция,
критерий оптимальности,
химический процесс,
метод Эйлера

Key words

chemical reaction,
optimality criterion,
chemical process,
Euler method

and the output of intermediate values of the concentrations of the reaction components at the reference points, a calculation was made with the initial concentration of the component. The values of the most suitable design of ideal displacement reagents and ideal mixing were determined for this process.

The models of ideal mixing of periodic and flowing action, as well as an ideal displacement reactor, are analyzed. Mathematical models were formulated and kinetic calculation results were obtained with reaction time values and apparatus volumes at which the yield of the target product was the highest. In the course of the examination, as optimality criterion of the surface of reactor construction was found and, in comparison with these devices, the efficiency of the ideal intermixing model of batch action was noted.

В химическом производстве основным аппаратом технологических схем является реактор, в котором осуществляются взаимосвязанные процессы как массопередачи и теплообмена, так и химических превращений. Классификация химических реакторов с большим количеством конструкций и типов может осуществляться по ряду признаков. Приведем здесь сведения о классификации по характеру движения и типу массопередачи смеси в аппарате. Реакторы периодического действия отличаются периодической загрузкой реагентов и выгрузкой продуктов, тогда как реакторы непрерывного действия представляют собой проточные аппараты с постоянными подачей реагирующей смеси и отводом готового продукта. Промежуточное положение занимают полунепрерывные реакторы, где операции загрузки и выгрузки проводятся одни периодически, а другие непрерывно [1]. Выделяют два крайних варианта относительно характера движения элементов реагирующей смеси. Во-первых, когда происходит мгновенное перемешивание содержимого аппарата с вновь поступившей реагирующей смесью. Можно наблюдать во всем объеме в каждый момент времени одинаковые значения концентрации. Данный тип аппарата именуют реактором идеального смешения. Во-вторых, в рассматриваемом слое реагента отсутствуют конвективные и турбулентные перемешивания в направлении выхода из реактора, реагирующая смесь независима от соседних слоев. В этом случае говорят о реакторе идеального вытеснения.

Под термином «критерий оптимальности» подразумевают параметр, характеризующий оптимальность функционирования химико-технологической системы, то есть ее наилучшую реализацию. Им является один из основных результирующих параметров работы системы в целом. В зависимости от подхода к

решаемой задаче могут быть применимы различные критерии оптимальности при одинаковых условиях. Рассмотрение максимального выхода целевого продукта в качестве критерия оптимальности определяет отсутствие концентрации загружаемого сырья на выходе из реактора, что влечет за собой как увеличение времени пребывания в аппарате, так и его габаритов. Возросшее гидравлическое сопротивление несет потерю напора и требует дополнительных затрат энергии на работу насосного оборудования [2]. Следствием являются повышенные капитальные и эксплуатационные затраты, влияющие на себестоимость продукции и прибыль от реализации. В условиях дефицита энергоресурса в определенных географических регионах подключение нового объекта в технологическую систему предполагает выбор в качестве критерия оптимальности минимума энергозатрат. Проводить химическое превращение целесообразно до определенного момента, соответствующего экономичной реакционной зоне, выход целевого продукта находится на уровне 80 % масс. [3]. На выходе из аппарата получают смесь, требующую дальнейшего разделения и выбора соответствующего метода, решаемого поиском нового критерия оптимальности. Таким образом, проблема оптимизации представляет собой сложную задачу.

При выполнении работы по поиску наиболее целесообразной конструкции реактора для реализации данного процесса в качестве критерия оптимальности принимается минимум капиталовложений на сооружение, пропорциональный материалоемкости аппарата, то есть минимум поверхности конструкции сравниваемых реакторов V_p (м³) [4]. Система простых дифференциальных уравнений, отражающая формальную модель кинетики химического процесса, решается методом первого порядка. Метод Эйлера выполняет сканирование оси

времени τ (мин) с шагами $d\tau$, используя рекуррентное соотношение для расчета концентрации i -го компонента $C_{i,j}$ (моль/л) на шаге j по результатам расчета концентрации этого компонента на предыдущем шаге [5]. Точность рассчитываемых кинетических кривых возрастает с уменьшением величины шага интегрирования $d\tau$:

$$C_{i,j} = C_{i,j-1} + \left(\frac{dC_{i,j}}{d\tau} \right)_{\tau=\tau_{j-1}} d\tau. \quad (1)$$

В ходе исследования химической реакции первого порядка (рисунок 1) в изотермических условиях с целевым компонентом С и константами скоростей реакции K (τ^{-1}) была сформулирована математическая модель, ограниченная формальной моделью кинетики химического процесса без учета частной гидродинамической модели:

$$\begin{cases} C_A/d\tau = -K_1 \cdot C_A; \\ C_B/d\tau = +K_1 \cdot C_A - K_2 \cdot C_B - K_4 \cdot C_B; \\ C_C/d\tau = +K_2 \cdot C_B - K_3 \cdot C_D - K_5 \cdot C_F; \\ C_D/d\tau = +K_3 \cdot C_C; \\ C_E/d\tau = +K_4 \cdot C_B; \\ C_F/d\tau = +K_5 \cdot C_C. \end{cases} \quad (2)$$

Рисунок 1. Схема протекания химической реакции

Система дифференциальных уравнений кинетики реакции была рассчитана на основе блок-схемы решения задачи с автоматическим обеспечением правильности решения по величине максимальной концентрации целевого компонента С (рисунок 2).

В PascalABC.NET с возможностью определения необходимой продолжительности реакции и вывода промежуточных значений концентраций компонентов реакции, в реперных точках была подготовлена программа расчета с заданием начальной концентрации компонента А, равной 100 % объемн., при нулевых начальных концентрациях остальных компонентов химической реакции. Константы скорости K_1, K_2, K_3, K_4, K_5 имели значения 1,0; 0,5; 0,2; 0,9; 0,1 τ^{-1} соответственно при производительности реактора 16000 $\text{м}^3/\text{ч}$. Расчет производился в интервале времени от 0 до 3 с

Рисунок 2. Блок-схема решения задачи

с шагом значения 0,01 с для возможности определения временной области, отвечающей максимальной концентрации целевого компонента С. Полученные методом Эйлера (Рунге-Кутта первого порядка) для системы простых дифференциальных уравнений данные сведены в таблицу 1.

В ходе рассмотрения данных было выявлено, что наибольший выход целевого компонента С достигается на 0,620 с с начала химического превращения, и составил 0,196 % объемн. Концентрация продукта С возрастает с накоплением расходуемого на получение компонента В, далее наблюдается их взаимное уменьшение.

Были определены конструктивные параметры аппарата при анализе модели идеального смешения периодического действия. Найден объем реактора согласно формуле:

$$V = v \cdot \tau. \quad (3)$$

Принимая, что реактор представляет собой цилиндрический аппарат, из условия минимизации площади поверхности цилиндра, соответствующего требованию $D = H$, рассчитаны габаритный размер реактора:

$$D = \sqrt[3]{4 \cdot \frac{V}{\pi}}, \quad (4)$$

а также площадь его поверхности:

$$F = 3/2 \cdot \pi \cdot D^2. \quad (5)$$

Получены следующие значения наиболее целесообразной конструкции аппарата для реализации данного процесса: объем реактора V при производительности реактора

$v = 16000 \text{ м}^3/\text{ч}$ и времени $\tau = 0,620 \text{ с}$, равный $2,8 \text{ м}^3$; диаметр реактора D составил $1,53 \text{ м}$ и принимаемая за минимум площади капиталовложений на сооружение, пропорциональный материалоемкости аппарата, то есть минимум поверхности конструкции сравниваемых реакторов, площадь реактора $11,03 \text{ м}^2$. Суммарная площадь поверхности каскада из трех реакторов составит $33,09 \text{ м}^2$.

Математическая модель реактора идеального вытеснения, работающего в стационарном режиме, в сумме частных моделей кинетики и гидродинамики идеального вытеснения после преобразований идентична уравнению формальной кинетики (2), следовательно, продолжительность реакции справедлива и в рассматриваемом случае. Для предотвращения существенного перепада давлений на входе и выходе из аппарата принимается соотношение длины к диаметру реактора L/D , оно лежит в пределах от 100 до 500, при этом объем реактора

$$V = (\pi \cdot D^2/4) \cdot H = \pi \cdot D^2 (200 \cdot D), \quad (6)$$

откуда

$$D = \sqrt[3]{\frac{V}{200 \cdot \pi}}, \quad (7)$$

а площадь поверхности реактора идеального вытеснения составит

$$F = 200 \cdot \pi \cdot D^2. \quad (8)$$

Были определены величины наиболее целесообразной конструкции реактора идеального вытеснения для реализации данного процесса: объем реактора V , равный $2,8 \text{ м}^3$ при

Таблица 1. Данные по расчету концентрации компонентов

Время реакции, мин	Концентрация компонентов реакции, % объемн.					
	СА	СВ	СС	СD	СЕ	СF
2,520	0,079	0,127	0,195	0,059	0,510	0,029
2,530	0,079	0,126	0,195	0,059	0,511	0,030
2,540	0,078	0,125	0,195	0,060	0,512	0,030
2,550	0,077	0,124	0,195	0,060	0,514	0,030
2,560	0,076	0,123	0,195	0,060	0,515	0,030
2,570	0,076	0,122	0,195	0,061	0,516	0,030
0,580	0,075	0,121	0,195	0,061	0,517	0,031
0,590	0,074	0,120	0,195	0,062	0,518	0,031
0,600	0,073	0,119	0,195	0,062	0,519	0,031
0,610	0,073	0,118	0,195	0,062	0,520	0,031
0,620	0,072	0,117	0,196	0,063	0,521	0,031
0,630	0,071	0,117	0,196	0,063	0,522	0,032
0,640	0,070	0,116	0,195	0,063	0,523	0,032
0,650	0,070	0,115	0,195	0,064	0,524	0,032
0,660	0,069	0,114	0,195	0,064	0,525	0,032
0,070	0,068	0,113	0,195	0,065	0,526	0,0323

производительности реактора $v = 16000 \text{ м}^3/\text{ч}$ и времени $\tau = 0,620 \text{ с}$; диаметр реактора D составил $0,16 \text{ м}$ и принимаемая за минимум капиталовложений на сооружение пропорциональный материалоемкости аппарата, то есть минимум поверхности конструкции сравниваемых реакторов, площадь реактора $16,08 \text{ м}^2$. Суммарная площадь поверхности каскада из трех аппаратов идеального вытеснения составит $48,24 \text{ м}^2$.

В ходе исследования химической реакции протекающей в условиях идеального смешения проточного типа, работающего в стационарном режиме, была разработана система алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} C_A/d\tau = 0 = -K_1 \cdot C_A + (1/T) \cdot (C_{A0} - C_{AK}); \\ C_B/d\tau = 0 = +K_1 \cdot C_A - K_2 \cdot C_B - K_4 \cdot C_B + (1/T) \cdot (C_{B0} - C_{BK}); \\ C_C/d\tau = 0 = +K_2 \cdot C_B - K_3 \cdot C_D - K_5 \cdot C_F + (1/T) \cdot (C_{C0} - C_{CK}); \\ C_D/d\tau = 0 = +K_3 \cdot C_C + (1/T) \cdot (C_{D0} - C_{DK}); \\ C_E/d\tau = 0 = +K_4 \cdot C_B + (1/T) \cdot (C_{E0} - C_{EK}); \\ C_F/d\tau = 0 = +K_5 \cdot C_C + (1/T) \cdot (C_{F0} - C_{FK}). \end{cases}$$

В PascalABC.NET с возможностью определения необходимой продолжительности реакции и вывода промежуточных значений концентраций компонентов реакции в реперных точках была подготовлена программа расчета с заданием начальной концентрации компонента А, равной 100% объемн. при нулевых начальных концентрациях остальных компонентов химической реакции.

Константы скорости K_1, K_2, K_3, K_4, K_5 имели значения $1,0; 0,5; 0,2; 0,9; 0,1 \text{ ч}^{-1}$ соответственно при производительности реактора $16000 \text{ м}^3/\text{ч}$. Расчет производился до полного превращения исходного компонента А с шагом значения концентрации равным 5% объемн. для возможности определения временной области, отвечающей максимальной концентрации целевого компонента С. Полученные для системы алгебраических уравнений данные представлены в таблице 2.

В ходе рассмотрения данных было выявлено, что наибольший выход целевого компонента С достигается на 3 минуте с начала химического превращения. Концентрация продукта С возрастает с накоплением расходуемого на получение компонента В, далее наблюдается их взаимное уменьшение.

Графическое изображение изменения концентрации компонента во времени представлено на рисунке 5.

Были определены конструктивные параметры аппарата при анализе модели идеального смешения проточного действия с учетом уравнений (3), (4) и (5).

Получены следующие значения наиболее целесообразной конструкции аппарата для реализации данного процесса: объем реактора V при производительности реактора $v = 16000 \text{ м}^3/\text{ч}$ и времени $\tau = 0,0008 \text{ ч}$, равный

Таблица 2. Данные по расчету концентрации компонентов

Время реакции, мин	Концентрация компонентов реакции, % объемн.					
	CA	CB	CC	CD	CE	CF
0,000	100,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
0,053	95,000	4,657	0,121	0,458	79,630	0,229
0,111	90,000	8,654	0,465	0,837	70,096	0,419
0,176	85,000	12,028	1,008	1,142	61,344	0,571
0,250	80,000	14,815	1,723	1,378	53,333	0,689
0,333	75,000	17,045	2,583	1,550	46,023	0,775
0,429	70,000	18,750	3,560	1,661	39,375	0,831
0,538	65,000	19,956	4,626	1,718	33,355	0,859
0,667	60,000	20,690	5,747	1,724	27,931	0,862
0,818	55,000	20,975	6,889	1,684	23,072	0,842
1,000	50,000	20,833	8,013	1,603	18,750	0,801
1,222	45,000	19,355	9,071	1,484	14,939	0,742
1,500	40,000	19,355	10,011	1,335	11,613	0,667
1,875	35,000	18,056	10,767	1,160	8,750	0,580
2,333	30,000	16,406	11,259	0,965	6,328	0,483
3,000	25,000	14,423	11,387	0,759	4,327	0,380
4,000	20,000	12,121	11,019	0,551	2,727	0,275
5,667	15,000	9,515	9,985	0,352	1,511	0,176
9,000	10,000	6,618	8,048	0,179	0,662	0,089
10,000	5,000	3,442	4,880	0,051	0,163	0,026

12,8 м³; диаметр реактора D составил 2,54 м и площадь поверхности реактора 30,39 м², принимаемая за минимум капиталовложений на сооружение, пропорциональный материалоемкости аппарата, то есть минимум пло-

щади поверхности конструкции сравниваемых реакторов. Суммарная площадь поверхности каскада из трех аппаратов идеального смешения проточного действия составит 91,17 м².

Рисунок 5. График изменения концентраций компонентов во времени

Выводы

При выполнении работы был исследован критерий оптимальности методом Эйлера, соответствующий минимуму поверхности сравниваемых аппаратов конкретной химической реакции с расчетом ряда реакторов. Были сформулированы математические модели и получены результаты по кинетическому рас-

чету со значениями времени реакции и объемов аппарата, при которых выход целевого продукта был наивысшим. В ходе рассмотрения в качестве критерия оптимальности была найдена площадь поверхности конструкции реакторов и в сравнении с данными аппаратами отмечена эффективность модели идеального смешения периодического действия.

СПИСОК ИСПОЛЪЗУЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Игнатович Э. Химическая техника. Процессы и аппараты. Часть 3. М.: Техносфера, 2007. 656 с.
2. Кабанова Н.В. Метод Эйлера и его реализация в PASCAL // Актуальные направления научных исследований XXI века: теория и практика. Воронеж: Изд-во Воронежский государственный лесотехнический университет им. Г.Ф. Морозова, 2015. С 101–105.
3. Исследование состояния и перспектив направлений переработки нефти и газа, нефте- и газохимии в РФ. М.: Экон-информ, 2011. 806 с.
4. Илюшина С.В. Метод оптимизации технологических процессов // Вестник Казанского технического университета. Казань, 2014. Т. 17. Вып. 8. С. 323–327.
5. Levenspiel O. Chemical Reaction Engineering. 3rd edition. New York: John Wiley & Sons, 1998. 684 p.

REFERENCES

1. Ignatovich E. *Khimicheskaya tekhnika. Protsessy i apparaty. Chast' 3* [Chemical Engineering. Processes and

Apparatuses. Part 3]. Moscow, Tekhnosfera Publ., 2007. 656 p. [in Russian].

2. Kabanova N.V. Metod Eilera i ego realizatsiya v PASCAL [Euler Method and its Implementation in PASCAL]. *Aktual'nye napravleniya nauchnykh issledovaniy XXI veka: teoriya i praktika* [Actual Directions of Scientific Researches of the XXI Century: Theory and Practice]. Voronezh, Voronezh State University of Forestry and Technology G.F. Morozova Publ., 2015, pp. 101–105. [in Russian].

3. *Issledovanie sostoyaniya i perspektiv napravleniy pererabotki nefiti i gaza, nefte- i gazokhimii v RF* [Study of the State and Prospects of Oil and Gas Refining, Oil and Gas Chemistry in Russia]. Moscow, Ekon-Inform Publ., 2011. 806 p. [in Russian].

4. Ilyushina S.V. Metod optimizatsii tekhnologicheskikh protsessov [Method of Optimization of Technological Processes]. *Vestnik Kazanskogo tekhnicheskogo universiteta — Bulletin of Kazan Technical University, Kazan'*, 2014, Vol. 17, Issue 8, pp. 323–327. [in Russian].

5. Levenspiel O. *Chemical Reaction Engineering*. 3rd edition. New York, John Wiley & Sons, 1998. 684 p.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ABOUT THE AUTHORS

Минхайрова Мадина Тагировна, магистрант, кафедра «Технология нефти и газа», УГНТУ, г. Уфа, Российская Федерация

Madina T. Minkhayrova, Undergraduate Student of Oil and Gas Technology Department, USPTU, Ufa, Russian Federation

e-mail: minkhayrovamt@mail.ru

Халикова Дилара Глимхановна, старший преподаватель, кафедра иностранных языков, УГНТУ, г. Уфа, Российская Федерация

Dilara G. Halikova, Senior Lecturer of Foreign Languages Department, USPTU, Ufa, Russian Federation

Шаяхметов Айдар Маратович, магистрант, кафедра «Технология нефти и газа», УГНТУ, г. Уфа, Российская Федерация

Aidar M. Shayakhmetov, Undergraduate Student of Oil and Gas Technology Department, USPTU, Ufa, Russian Federation