

УДК 66.011+66.048.3

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

**В. А. ДОЗОРОВ, Ф. Ф. МИНЧУК, член-корреспондент АН СССР Г. Г. ДЕВЯТЫХ
К РАСЧЕТУ ОПТИМАЛЬНОГО ЗАПОЛНЕНИЯ КАТАЛИЗАТОРОМ
ХЕМОРЕКТИФИКАЦИОННОЙ КОЛОННЫ**

Ректификация бинарных смесей, осложненная химической реакцией, была предметом ряда исследований (¹⁻⁴). Из физических соображений ясно, что, вообще говоря, в хеморектификационной колонне должен существовать оптимальный режим, когда на некоторой ее части осуществляется «чистая» ректификация, а на остальной — хеморектификация.

В данной работе в отличие от (¹⁻⁴) рассматривается задача об оптимальном (в смысле максимального значения фактора разделения) заполнении хеморектификационной колонны катализатором. В стационарном режиме и безразмерных переменных распределение концентраций $x(z)$, $y(z)$ в жидкой и паровой фазах соответственно по длине хеморектификационной колонны z при отборе сверху ($z = 0$) без учета продольного перемешивания подчиняется система дифференциальных уравнений

$$dx/dz = k(\bar{x}(y) - x) - \gamma(z) \Psi(x), \quad dy/dz = \frac{k}{r}(\bar{x}(y) - x) \quad (1)$$

с краевыми условиями

$$x(0) = y(0), \quad x(1) = ry(1) - (r-1)x_{\text{вх}}, \quad (2)$$

где $\bar{x}(y)$ — равновесное значение x , $\gamma(z) \Psi(x)$ — скорость поступления редкого компонента в жидкую фазу, k — константа массообмена, r — доля отбора, $\gamma(z)$ — суммарная безразмерная константа скорости реакции, $x_{\text{вх}}$ — концентрация подаваемой в колонну смеси.

В классе кусочно-непрерывных функций из области

$$0 \leq \gamma(z) \leq \bar{\gamma} = \text{const} \quad (3)$$

найдем зависимость $\gamma(z)$, дающую величине фактора разделения $F = x(0) / x_{\text{вх}}$ — максимальное значение.

Нетрудно видеть, что в режиме отбора ($r-1 > 0$) задача максимизации фактора разделения эквивалентна задаче определения $\gamma(z)$, доставляющей минимальное значение интегральному критерию

$$I = \int_0^1 \gamma(z) \Psi(x(z)) dz, \quad (4)$$

где $x(z)$ — решение системы (1) с начальными условиями из (2). Функции $\bar{x}(y)$, $\Psi(x)$ будем предполагать дифференцируемыми с неотрицательными производными ($\bar{x}_y' \geq 0$, $\Psi_x' > 0$).

Последовательное применение принципа максимума Л. С. Понтрягина (⁵⁻⁷) к задаче минимизации функционала (4) для системы уравнений (1) с начальными условиями из (2) позволяет найти оптимальный закон изменения $\gamma(z)$ (3) в виде

$$\gamma(z) = 1/2\bar{\gamma}(1 - \text{sign}[\Psi(x)\eta(\tau)]), \quad (5)$$

где вспомогательная переменная $\eta(\tau)$ ($\tau = 1 - z$) подчиняется дифференциальному уравнению второго порядка (при $\gamma(z) = \bar{\gamma}$)

$$\eta'' + p(\tau)\eta' + q(\tau)\eta = 0, \quad \eta(0) = 1, \quad \eta(1) = -\bar{\gamma}b,$$

$$p(\tau) = k(1 - \bar{x}_y/r) + \bar{\gamma}\Psi'_x, \quad q(\tau) = -\frac{k}{r}\bar{\gamma}\bar{x}_y\Psi'_x, \quad b = \Psi'_x(x(z))|_{z=1}. \quad (6)$$

Из (5) для монотонно убывающей функции $\Psi(x(z))$ следует, что сечение колонны $\bar{z}$, определяющее оптимальное заполнение ее катализатором, единственно и находится из равенства

$$\Psi(x(z)) = 0, \quad (7)$$

если

$$\eta(\tau) > 0, \quad \tau \in [0, 1]. \quad (8)$$

Для доказательства неравенства (8) применим теорему С. А. Чаплыгина о дифференциальных неравенствах^(8, 9), для чего заменой $u = \eta'/\eta$, $\eta = \exp(\int u d\tau)$ уравнение (6) сведем к уравнению Риккати⁽¹⁰⁾

$$u' = -u^2 - p(\tau)u - q(\tau) \equiv f(\tau, u), \quad u(0) = -\bar{\gamma}b \quad (9)$$

и введем функцию сравнения

$$\Phi(\tau, u) \equiv -u^2 - \bar{p}u - \bar{q},$$

$$\bar{p} = h + \bar{\gamma}b, \quad \bar{q} = -\frac{k}{r}\bar{\gamma}ab, \quad h = k(1 - a/r), \quad a = \min_{y \in [0, 1]} \bar{x}'_y > 0 \quad (10)$$

такую, чтобы разность

$$f(\tau, u) - \Phi(\tau, u) = \frac{k}{r} \left[\left(\bar{x}'_y - a + \frac{r}{k} \bar{\gamma}(b - \Psi'_x) \right) u + \bar{\gamma}(\bar{x}'_y \Psi'_x - ab) \right] \quad (11)$$

была положительной для всех $\tau \in (0, 1)$. Тогда, согласно теореме С. А. Чаплыгина,

$$u(\tau) \geq v(\tau) = \bar{\eta}'/\bar{\eta}, \quad \tau \in [0, 1], \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned} \bar{\eta}(\tau) = & [(h - \bar{\gamma}b) \operatorname{sh}({}^{1/2}\tau(\lambda_1 - \lambda_2)) + \\ & + (\lambda_1 - \lambda_2) \operatorname{ch}({}^{1/2}\tau(\lambda_1 - \lambda_2))] (\lambda_1 - \lambda_2)^{-1} \exp[-{}^{1/2}\tau(h + \bar{\gamma}b)], \\ \lambda_{1,2} = & -{}^{1/2}(h + \bar{\gamma}b) \pm {}^{1/2} \left[(h + \bar{\gamma}b)^2 + 4 \frac{k}{r} \bar{\gamma}ab \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (13)$$

— решение линейного дифференциального уравнения с постоянными коэффициентами, полученного из (6) заменой $p(\tau)$, $q(\tau)$ на $\bar{p}$ и $\bar{q}$ соответственно. Функция $\Psi(x)$, в силу (12), (13) и положительности (11), должна удовлетворять условиям

$$\begin{aligned} \left(\bar{x}'_y - a + \frac{r}{k} \bar{\gamma}(b - \Psi'_x) \right) v + \bar{\gamma}(\bar{x}'_y \Psi'_x - ab) &> 0, \\ \bar{x}'_y - a + \frac{r}{k} \bar{\gamma}(b - \Psi'_x) &> 0, \quad \Psi'_x > 0 \end{aligned} \quad (14)$$

для всех $\tau \in (0, 1)$. Справедливость неравенства (8) при $\gamma(z) = \bar{\gamma}$ следует из (12) с учетом $\bar{\eta}(\tau) > 0$ для всех $\tau \in [0, 1]$, так как $\lambda_1 - \lambda_2 > |h - \bar{\gamma}b|$, а на участке $0 \leq z \leq \bar{z}(\gamma(z) = 0)$ доказательство проводится аналогично.

Например, в случае идеальной смеси и обратимой реакции первого порядка ($\bar{x}(y) = y(\alpha - (\alpha - 1)y)^{-1}$, $\Psi(x) = x - \beta$, α — коэффициент разделения, β — константа равновесия реакции) неравенства (14) выполняются

ся, а выражение для оптимальной величины не заполненной катализатором части колонны, согласно (7), имеет вид

$$\bar{z} = \frac{1}{k} \left[\frac{1 + c/2}{d} \ln \frac{(2(\alpha - 1)\beta - c - d)(2(\alpha - 1)x(0) - c + d)}{(2(\alpha - 1)\beta - c + d)(2(\alpha - 1)x(0) - c - d)} - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \ln \frac{(\alpha - 1)\beta^2 - c\beta + (\alpha - 1)(r - 1)x(0)}{(\alpha - 1)x^2(0) - cx(0) + (\alpha - 1)(r - 1)x(0)} \right], \quad (15)$$

где $c = \alpha r - (\alpha - 1)(r - 1)x(0) - 1$, $d = [c^2 - 4(\alpha - 1)x(0)]^{1/2}$, и не зависит от свойств ($\bar{y}$) катализатора.

Институт химии
Академии наук СССР
Горький

Поступило
30 X 1972

Горьковский исследовательский физико-технический институт
Горьковского государственного университета
им. Н. И. Лобачевского

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ J. Marek, Chem. Listy, 48, 971 (1954). ² J. Marek, Coll. Czechoslov. Chem. Commun., 19, 1055 (1954). ³ В. В. Зырянов, В. Б. Коган, ЖПХ, 39, № 5, 1070 (1966); 40, № 7, 1531 (1967); 40, № 9, 2059 (1967). ⁴ Ю. Е. Еллиев, Г. Г. Девятых, Теоретические основы химической технологии, 5, 1, 128 (1971). ⁵ Г. М. Островский, Ю. М. Волин, Методы оптимизации химических реакторов, М., 1967. ⁶ Л. И. Розоноэр, Автоматика и телемеханика, 20, 10, 1320 (1959). ⁷ Л. С. Понтрягин, В. Г. Болтянский и др., Математическая теория оптимальных процессов, М., 1961. ⁸ С. А. Чаплыгин, Новый метод приближенного интегрирования дифференциальных уравнений, М.—Л., 1950. ⁹ И. С. Березин, Н. П. Жидков, Методы вычислений, 2, М., 1959. ¹⁰ Р. Беллман, Р. Калаба, Квазилинеаризация и нелинейные краевые задачи, М., 1968.