Лекция 2. Технологические основы процессов – оптимизация условий протекания химических реакций.

План лекции:

1. Основные понятия.

2. Показатели эффективности химико-технологических процессов

3. Характеристика методов оптимизации химико-технологических процессов

1.Основные понятия. Целью любой деятельности специалистов в сфере химического производства в конечном итоге является поиск наилучших условий проведения технологических процессов, проектирование и организация рациональных технологических схем, оптимальных экспериментальных исследований.

Задача оптимизации ХТС является комплексной, т. к. она включает в себя как оптимизацию структуры, так и оптимизацию режимов функционирования элементов.

Основной целью оптимизации ХТС является обеспечение наиболее высоких технико-экономических показателей. Понятие «оптимизация» можно определить следующим образом. Оптимизацией называется целенаправленная деятельность, заключающаяся в получении наилучших результатов при соответствующих условиях. Оптимизация – процесс достижения наилучших или определение (нахождение) наиболее благоприятных условий проведения какого-либо процесса (действия). В приложении к технологическому процессу – определение наилучших условий проведения процесса. Исторически, сама проблема оптимизации возникла с техническим прогрессом и появлением конкуренции, т. е. производители одинаковых товаров стали искать условия выпуска продукции, позволяющие выпускать один и тот же товар с минимальными издержками.

Поиски оптимальных решений привели к созданию специальных математических методов и уже в XVIII веке были заложены математические основы оптимизации (вариационное исчисление, численные методы и др.). Однако до второй половины XX века методы оптимизации во многих областях науки и техники применялись очень редко, поскольку практическое использование математических методов оптимизации требовало огромной вычислительной работы, которую без ЭВМ реализовать было крайне трудно, а в ряде случаев – невозможно.

Особенно большие трудности возникали при решении задач оптимизации процессов в химической технологии из-за большого числа параметров и их сложной взаимосвязи между собой.

Любая оптимизация предполагает наличие множества вариантов функционирования системы, оценка которых позволяет выявить, какой 9 вариант лучше. При постановке задачи оптимизации необходимо иметь количественную оценку качества работы оптимизируемой системы, которая позволяет сравнивать различные состояния системы между собой. Эта количественная оценка носит название критерия оптимизации. При постановке задачи оптимизации необходимо требовать достижения экстремального значения лишь одной величины.

Таким образом, одновременно системе не должно приписываться два или более критериев оптимальности, поскольку практически во всех случаях экстремум одного критерия не соответствует экстремуму другого. Поэтому неправильная постановка задачи: получить максимальную производительность при минимальной себестоимости продукта; правильная постановка задачи: получить максимальную производительность при заданной себестоимости или получить минимальную себестоимость при заданной производительности. В первом случае критерий оптимальности – производительность, во втором – себестоимость. При постановке задачи оптимизации необходимо иметь возможность вариации состояний системы, причем количество вариантов различных ее состояний зависит от вида и числа степеней свободы оптимизируемой системы.

Параметры, позволяющие реализовать различные варианты состояния системы, носят название управляющих воздействий или управлений. К управлениям могут быть отнесены самые различные параметры.

Например, если в аппарате с мешалкой проводится химическая реакция типа A $\rightarrow$ $\rightarrow$R S и качество работы этого аппарата оценивается концентрацией промежуточного продукта R, то различные значения концентрации CR могут быть получены при различных нагрузках на аппарат W0, различных температурах в аппарате T и т. д. Если по условиям данного производства имеется возможность изменять W0 и T, то обе эти величины являются управляющими параметрами в данном процессе. Если аппарат только проектируется, и на этом этапе можно изменять реакционный объем аппарата Vp, величина которого также определяет CR, то объем реактора также является управляющим параметром в данном процессе.

При решении задача оптимизации находят такие значения управляющих параметров, при которых критерий оптимальности достигает экстремума.

2. Показатели эффективности химико-технологических процессов

При оптимизации химико-технологических систем (ХТС) качество функционирования систем определяют с помощью критериев, или

показателей эффективности, под которыми понимают числовые характеристики системы, оценивающие степень приспособления системы к выполнению поставленных перед ней задач. 10 Критерием оптимальности называется количественная оценка качества работы оптимизируемой системы. Критерий оптимальности – это главный признак, по которому судят о том, насколько хорошо функционирует технологическая система, работает данный процесс, и т. д., а также насколько хорошо решена задача оптимизации.

Критерий оптимальности является одним из выходных параметров системы, и к нему предъявляются следующие требования:

1) критерий оптимальности должен выражаться количественно;

2) критерий оптимальности должен быть единственным;

3) величина критерия оптимальности должна изменяться монотонно (без разрывов и скачков);

4) критерий оптимальности должен отражать наиболее существенные стороны процесса;

5) желательно чтобы критерий оптимальности имел ясный физический смысл и легко рассчитывался.

На основании выбранного критерия оптимальности составляется целевая функция, представляющая собой зависимость критерия оптимальности от параметров, влияющих на ее значение. Вид критерия оптимальности или целевой функции определяется конкретной задачей оптимизации.

Таким образом, задача оптимизации сводится к нахождению экстремума целевой функции. Наиболее общей постановкой оптимальной задачи является выражение критерия оптимальности в виде экономической оценки (производительность, себестоимость продукции, прибыль, рентабельность). Однако в частных задачах оптимизации, когда объект является частью технологического процесса, не всегда удается или не всегда целесообразно выделять прямой экономический показатель, который бы полностью характеризовал эффективность работы рассматриваемого объекта.

В таких случаях критерием оптимальности может служить технологическая характеристика, косвенно оценивающая экономичность работы агрегата (время контакта, выход продукта, степень превращения, температура).

Например, устанавливается оптимальный температурный профиль, длительность цикла – «реакция – регенерация» и т. п. Однако в любом случае критерий оптимальности имеет экономическую природу. Различают простые и сложные критерии оптимальности. Критерий оптимальности называется простым, если требуется определить экстремум целевой функции без задания

условий на какие-либо другие величины. Такие критерии обычно используются при решении частных задач оптимизации (например, определение максимальной концентрации целевого продукта, оптимального времени пребывания реакционной смеси в аппарате и др.).

Критерий оптимальности называется сложным, если необходимо установить экстремум целевой функции при некоторых условиях, которые накладываются на ряд других величин и ограничений.

Таким образом, процедура решения задачи оптимизации обязательно включает, помимо выбора управляющих параметров, еще и установление ограничений на эти параметры. Ограничения могут накладываться как по технологическим, так и по экономическим соображениям.

Основные показатели эффективности, по которым оценивается деятельность любой ХТС, следующие:

1) технологические показатели;

2) качественные показатели выпускаемой продукции;

3) экономические показатели.

Каждую ступень химического предприятия характеризуют определенными показателями эффективности функционирования. Показателями эффективности отдельных аппаратов, узлов, отделений чаще всего являются технологические критерии: удельная производительность, выход целевого продукта, коэффициент полезного действия и т. д. Для отдельных элементов ХТС, например узлов кристаллизации, ректификации, абсорбции и т.д. могут быть использованы качественные критерии эффективности.

Показателями эффективности функционирования технологических цехов и отдельных химических производств, представляющих собой сложные ХТС, могут являться: расходные нормы на сырье, топливо, электроэнергию, греющий пар и охлаждающую воду (технологические критерии); себестоимость продукции, приведенные затраты, фондоотдача, прибыль, рентабельность (экономические критерии); качество и ассортимент выпускаемой продукции (качественные показатели).

1.3. Характеристика методов оптимизации химико-технологических процессов

Для управляемых химико-технологических процессов или систем различают две стадии оптимизации: статистическую и динамическую. Проблемы создания и реализации оптимального стационарного режима непрерывного процесса решает статистическая оптимизация; создания и

реализации системы оптимального уравнения периодическим или полунепрерывным процессом – динамическая оптимизация.

В зависимости от характера рассматриваемых математических моделей, применяются различные математические методы оптимизации: аналитические, методы математического программирования, статистические. Группа аналитических методов оптимизации объединяет аналитический поиск экстремума функции, метод множителей Лагранжа, вариационные методы и принцип максимума. Аналитический поиск экстремума функции, заданных без ограничений на независимые переменные является наиболее простым, но применяется к задачам, у которых оптимизируемая функция имеет аналитическое выражение, дифференцируемое во всем диапазоне исследования, а число переменных невелико.

Аналитические методы оптимизации применяются, когда оптимизируемые функции заданы аналитически и число независимых переменных невелико. При большом числе переменных возникает так называемый барьер многомерности, и применение аналитических методов становится затруднительными. Осложняет применение аналитически использование аналитических методов в их классическом виде довольно ограничено. Группа методов математического программирования включает: динамическое программирование, линейное программирование и нелинейное программирование. Динамическое программирование – эффективный метод решения задач оптимизации многостадийных процессов.

Метод предполагает разбивку анализируемого процесса на стадии (во времени или в пространстве), например реактор в каскаде или тарелка в колонне. Рассмотрение задачи начинается с последней стадии процесса, и оптимальный режим определяется постадийно.

Линейное программирование – метод для решения задач оптимизации с линейными выражениями для критерия оптимальности и линейными ограничениями на область изменения переменных. Подобные задачи решаются итерационными способами. Эти методы используются при оптимальном планировании производства при ограниченном количестве ресурсов, для транспортных задач и др.

Методы нелинейного программирования объединяют различные способы решения оптимальных задач: градиентные, безградиентные и случайного поиска. Общим для методов нелинейного программирования является то, что их используют при решении задач с нелинейными критериями оптимальности. Все методы нелинейного программирования – это численные методы поискового типа. Суть их заключается в определении набора независимых переменных, дающих наибольшее приращение оптимизируемой

функции. Данная группа методов применяется как для детерминированных, так и стохастических процессов. Методы математического программирования используются в тех случаях, когда оптимизируемые функции описываются линейными уравнениями, функциями-полиномами аддитивными функциями.

Они обычно используются для решения задач максимизации дохода при ограничении ресурсов, оптимального использования оборудования, транспортных задач, оптимального управления многостадийными процессами. Рассмотренные методы оптимизации процессов химической технологии предполагают в качестве обязательного условия наличие аналитической или графической зависимости критерия оптимальности от параметров, характеризующих состояние технологического процесса и наличие математической модели процесса.

Во многих случаях построение такой модели оказывается невозможным ввиду недостаточной информации об условиях протекания процесса. Отсутствие математической модели процесса приводит к возможности форматирования аналитической зависимости критерия оптимальности от параметров управления, и, таким образом, в подобных ситуациях вышеуказанные методы оказываются непригодными. В этих случаях задача оптимизации технологических процессов решается непосредственно в рамках действующего производства, используя статистические методы.

Интенсификация технологических процессов в химической промышленности привела к необходимости управлять процессами, протекающими с предельными скоростями, при высоких температурах и давлениях, когда малейшие изменения параметров могут привести к нарушению режима эксплуатации оборудования. Для оптимального управления такими технологическими процессами используют автоматические самонастраивающиеся системы управления. В этих случаях в контур управления включается вычислительная машина.

Контрольные вопросы:

1. Чем принципиально отличается задача оптимизации химической реакции в промышленности от лабораторного синтеза? Назовите основные критерии успеха для промышленного процесса.
2. Что важнее для рентабельности производства: высокая конверсия исходного реагента или высокая селективность по целевому продукту? Ответ обоснуйте на конкретном примере.
3. Почему повышение температуры – самый мощный, но и самый опасный инструмент управления реакцией? Объясните физический смысл.

4. Почему для эндотермических реакций (идущих с поглощением тепла) проблема оптимизации температуры выглядит иначе, чем для экзотермических?

5. Как избыток одного из реагентов влияет на скорость и равновесие реакции? Почему в промышленности редко используют сильный избыток, несмотря на ускорение?

6. Каким образом катализатор меняет условия оптимизации? Какие новые «рычаги управления» (помимо температуры и давления) появляются у технолога при использовании катализатора?

7. Сравните гомогенный и гетерогенный катализ с точки зрения возможности оптимизации: что проще регулировать, а что сложнее?

Рекомендуемая литература:

1. Игнатенков, В. И. Общая химическая технология: теория, примеры, задачи: учебник для вузов / В. И. Игнатенков. — 2-е изд. — Москва: Издательство Юрайт, 2026. — 195 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-09222-6. — Текст: электронный. — URL: https://urait.ru/bcode/583768

2. Кутяшева Н.В. Лабораторный практикум по прикладной химии, химической технологии и экологической безопасности: учебное пособие / Кутяшева Н.В., Курочкина Г.И., Грачев М.К. — Москва: Московский педагогический государственный университет, 2023. — 60 с. — ISBN 978-5-4263-1239-5. — Текст: электронный. — URL: https://www.iprbookshop.ru/139168.html

3. Общая химическая технология: методические указания / составители Л. Ч. Гагиева, М. Ю. Кабулова. — Владикавказ: Горский ГАУ, 2025. — 72 с. — Текст: электронный. — URL: https://e.lanbook.com/book/504195

4. Григорьева Л.С. Прикладная химия: учебное пособие для обучающихся по направлению подготовки «Строительство» / Григорьева Л.С., Орлова А.М., Трифонова О.Н. — Москва: МИСИ-МГСУ, Ай Пи Ар Медиа, ЭБС АСВ, 2024. — 216 с. — ISBN 978-5-7264-3459-9. — Текст: электронный. — URL: https://www.iprbookshop.ru/140504.html