



**ОПТИМАЛЬНОЕ  
ПРОЕКТИРОВАНИЕ  
ХИМИЧЕСКИХ  
РЕАКТОРОВ**



**THE  
OPTIMAL DESIGN  
OF  
CHEMICAL REACTORS**

RUTHERFORD ARIS

1961

**ACADEMIC PRESS**  
NEW YORK—LONDON

Р. АРИС

**ОПТИМАЛЬНОЕ  
ПРОЕКТИРОВАНИЕ  
ХИМИЧЕСКИХ  
РЕАКТОРОВ**

*Перевод с английского*

доц. Э. Г. ЗЕЛЬКИНА,  
канд. физ.-мат. наук М. И. ЗЕЛИКИНА  
доц. Г. Г. ЗЕЛЬКИНА

*Под редакцией*

д-ра техн. наук проф. В. В. КАФАРОВА

**ИЗДАТЕЛЬСТВО ИНОСТРАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ**

МОСКВА, 1963

Книга является первым систематическим изложением применения теории динамического программирования к решению задач оптимального проектирования химических реакторов. В ней приведено большое количество конкретных примеров расчета реакторов различных типов и дан общий алгоритм для решения задач оптимального проектирования.

Книга представляет большой интерес для научных работников и инженеров, занимающихся эксплуатацией и проектированием химических реакторов, а также для математиков, специалистов по автоматизации и вычислительной технике и экономистов. Книга окажется полезной и как дополнительное учебное пособие для аспирантов и студентов старших курсов.

*Редакция литературы по вопросам техники*

## ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА РУССКОГО ИЗДАНИЯ

Расчеты химических реакторов до недавнего времени ограничивались составлением материальных и тепловых балансов процесса и эмпирическим подбором емкости реактора. Анализ работы химического реактора не выходил за пределы использования аппарата формальной химической кинетики — макрокинетические параметры практически не рассматривались.

Бурно развивающиеся математические методы, использование принципов теории автоматического управления, быстрое внедрение в технику расчета счетно-решающих машин и машин, моделирующих и управляющих процессами, подняли сущность и технику расчета химических реакторов на качественно новую ступень.

Применение математических методов открыло широкие возможности изучения макрокинетики, что в свою очередь позволило: 1) выяснить законы протекания химических процессов в реальных условиях, 2) раскрыть истинную кинетику и механизм химических процессов, прямое исследование которых затруднено побочными, осложняющими явлениями гидродинамики, диффузии и тепловыделения; 3) получить ценные сведения и о законах самих процессов переноса вещества и тепла, прежде всего процессов конвективной диффузии, которые иногда удобно изучать именно в связи с химическими процессами. На эту сторону изучения макрокинетики впервые было обращено внимание у нас Д. А. Франк-Каменецким [1], затем это стало предметом широкого обсуждения [2].

Попытки применить к описанию химических процессов метод теории подобия в его классическом виде не

дали существенных результатов из-за несовместимости в общем случае одновременно условий гидродинамического, теплового и химического подобия, так как эти процессы относятся к разным классам явлений. Подобие не выполняется даже в пределах одного химического реактора при изменении его масштабов. На эту сторону изучения химических процессов было указано в недавней работе [3]. Указывалось также, что возможно приближенное моделирование с использованием масштабных уравнений в диффузионно-кинетической области протекания химических процессов. Успешное использование методов подобия применительно к химическим процессам возможно лишь при решении вопросов о равномерности распределения потоков по сечению реактора, при оценке величины обратного перемешивания, при оценке тепловых и диффузионных характеристик.

Принципиально новые возможности расчета и проектирования химических реакторов открылись в связи с использованием идеи устойчивости, впервые развитой Ляпуновым [4]. Согласно этой идее, процесс называется устойчивым, если отклонения от режима, вызванные возмущениями, стремятся к сколь угодно малой наперед заданной величине после устранения источников возмущения.

Знание области устойчивости химических реакторов открывает новые пути для: 1) масштабирования химических процессов — переноса данных с лабораторного реактора на промышленный в пределах одной и той же физико-химической системы [5]; 2) обеспечение длительной работы в стационарном состоянии как в лабораторных, так и в промышленных условиях; 3) проектирования реакторов в оптимальных условиях; 4) разработки алгоритма управления процессом для целей автоматизации.

Принципы устойчивости Ляпунова широко и успешно использованы в работах Борескова и Слинько [6], посвященных расчету каталитических процессов в промышленных реакторах, в работах Байлоуса и Амундсена [7], Ван-Хирдена [8] и др. применительно к расчету гетерогенных и гомогенных реакторов. Работы Ляпунова

положены в основу современной теории автоматического регулирования и управления.

В последние годы появилось много работ, посвященных расчету и определению оптимальных условий проведения химических процессов.

В некоторых случаях оптимальные условия проведения процессов удается свести к отысканию экстремумов — максимума и минимума в изменении определяющей величины (например, определение оптимальной температуры обратимых экзотермических процессов). Нахождение этих экстремумов проводится статистическими методами, методом градиентного поиска и т. д.

Широкое применение нашли методы вариационного исчисления для определения оптимальных условий при проведении химических превращений при наличии параллельных и последовательных реакций в различных комбинациях. Автор предлагаемой книги рассматривает эти процессы, исходя из модели Денбига [9].

Принцип максимума, развитый Понтрягиным с сотр. [10], позволяет решать широкий класс оптимальных задач, в том числе и ряд задач, решаемых автором настоящей книги методом динамического программирования.

Все большее значение начинают приобретать автоматические системы оптимизации с самонастраивающимися моделями, позволяющие осуществить оптимальный поиск и поддержание оптимального режима при наличии возмущений и непредвиденного заранее изменения характеристик реакторов [11].

Для расчета оптимальных условий при проведении химических процессов в каскаде или при многоступенчатом оформлении процесса весьма перспективным оказался метод динамического программирования, разработанный Беллманом [12] и весьма успешно использованный автором настоящей книги для оптимального расчета химических реакторов. Метод динамического программирования получил развитие в работах Слинько с сотр. [13], Письмена и Иоффе [14], Грюттера и Месикоммера [15] и др. при расчете многоступенчатых реакторов.



Сущность метода динамического программирования состоит в том, что если на последней стадии многостадийного процесса режим работы является оптимальным по отношению к поступающему на нее потоку реагентов, то он будет оптимальным в целом для всего процесса. Поэтому расчет сводится к определению такого режима работы на последней стадии, который дает максимум выгоды для любых возможных состояний питания этой стадии. При этом выборы по другим стадиям должны составить оптимальную стратегию относительно выбранного состояния на последней стадии. Такое решение позволяет уменьшить размерность решаемых задач и быстро найти оптимальное распределение температур, концентраций и других определяющих параметров. Таким образом, сущность метода динамического программирования сводится к нахождению максимума функции в многостадийном ( $N$ -стадийном) процессе, записываемом в виде уравнения

$$f_n(c_{n+1}) = \max [p_n + f_{n-1}(c_n)],$$

где  $p_n$  — прирост функции выбранного критерия в результате работы  $n$ -го (считая от конца) реактора или стадии или ступени, в цепочке реакторов, в цепочке стадий или ступеней и т. п.;  $f_{n-1}$  — максимальное значение функции критерия для  $(n-1)$ -стадийной последовательности, зависящей от вектора состояния потока на выходе из  $n$ -го реактора  $c_n$ .

Максимум достигается варьированием  $M$  параметров, управляющих процессом в  $n$ -м реакторе.

Задача динамического программирования сводится к замене одновременного выбора оптимальных значений  $MN$  независимых переменных  $N$ -стадийным выбором, на каждом этапе которого варьируется только  $M$  переменных, что значительно сокращает расчет.

Решение задачи теперь состоит в последовательном вычислении функции  $f_n(c_{n+1})$  при  $n = 1, 2, \dots, N$ , согласно вышеприведенному соотношению, начиная с  $f_0(c_1) = 0$ .

При использовании метода динамического программирования наиболее точно формулируются граничные условия. Метод динамического программирования,

задавая вид функции выгоды, фиксирует получение целенаправленного продукта при учете расходов на поддержание оптимального режима процесса.

В предлагаемой читателю книге, написанной в 1961 г., изложены идеи метода динамического программирования и его приложение к анализу многоступенчатых процессов, дискретных и непрерывных детерминированных и случайных процессов. Показаны примеры нахождения функции выгоды при изменении концентраций веществ, при увеличении стоимости потоков реагирующих веществ с учетом расходов на проведение операции. На примерах двух последовательных и двух одновременно протекающих реакций найдены функции выгоды.

Метод динамического программирования положен Арисом в основу расчета реактора непрерывного действия с мешалкой, цепочки реакторов с мешалками, многослойного адиабатического реактора при разных условиях охлаждения, реактора вытеснения. Даны рекомендации по оптимальному управлению перечисленными выше реакторами. Несомненно, что эти рекомендации могут быть заложены в возможные схемы автоматического управления реакторами. Использование современной вычислительной техники расширяет возможности метода динамического программирования.

Наконец, автор книги привел конкретное решение нескольких стохастических задач, в том числе оптимальный выбор числа операций на вспомогательных процессах и выбор оптимальной смены катализатора.

К сожалению, в книге имеет место излишняя краткость и отрывочность изложения ряда важных вопросов и наряду с этим частое повторение элементов идей динамического программирования. Некоторые математические представления для читателя теряют строгую логичность, так как часто не приводится их обоснование или они заимствуются из других работ или же требуют знакомства с сугубо специальными главами математического анализа.

Однако, несмотря на эти недостатки, книга Ариса достаточно хорошо знакомит читателя с кругом вопросов, ответы на которые может дать метод динамического программирования. Необходима дальнейшая популярри-

зация этого метода и расширение области его применения к расчету химико-технологических процессов.

Книга, несомненно, окажется полезной для специалистов, занимающихся промышленной химической кинетикой, а также расчетом и проектированием химических реакторов и вопросами их эксплуатации и автоматического управления.

В переводе книги принимали участие: М. И. Зеликин, Э. Г. Зелькин, Г. Г. Зелькин.

Проф., д-р техн. наук *В. В. Кафаров*

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Франк-Каменецкий Д. А., Диффузия и теплопередача в химической кинетике, Изд. АН СССР, М.—Л., 1947.
2. Chemical Reaction Engineering, 1-st Europ. Symposium on Chem. Eng., London—New York, Pergamon Press, 1957.
3. Кафаров В. В., Реутский В. А., *Успехи химии*, XXX, вып. 5, 679 (1961).
4. Ляпунов А. М., Общая теория устойчивости движения, ГИТТЛ, 1950.
5. Кафаров В. В., Еременко В. В., *ЖПХ*, XXXV, 2251 (1962).
6. Боресков Г. К., Слинько М. Г., *Химическая промышленность*, № 3, 17 (1960).
7. Vilous O., Amundson N., A. I. Ch. E. Journal, 1, 513 (1955).
8. Van Heerden C., *Ind. Eng. Chem.*, 45, 1242 (1953).
9. Denbigh K. G., *Chem. Eng. Sci.*, 8, 125 (1958).
10. Понтрягин Л. С., Болтянский В. Г., Гамкрелидзе Р. В., Мищенко Е. Ф., Математическая теория оптимальных процессов, ГИФМЛ, 1961.
11. Фельдбаум А. А., *Журнал ВХО им. Д. И. Менделеева*, 6, 487 (1961).
12. Беллман Р., Динамическое программирование, ИЛ, М., 1960.
13. Слинько М. Г., Вуждан Я. М., Бесков В. С., Емельянов И. Д., *Кинетика и катализ*, 3, 145 (1962).
14. Письмен Л. М., Иоффе И. И., *Химическая промышленность*, № 4 (1962).
15. Grütter W. F., Messikommer V. H., *Chem. Eng. Sci.*, 14, 231 (1961).

## ИЗ ПРЕДИСЛОВИЯ АВТОРА

В данной монографии исследуются с единой точки зрения важные задачи химической технологии. Методы динамического программирования уже доказали свою силу и гибкость в ряде отраслей экономики и техники и находят естественное приложение при решении задач проектирования химических реакторов. Инженеру-химику необходима методика практического решения задач, возникающих при проектировании реакторов, и можно надеяться, что он найдет в настоящей книге целый ряд разнообразных примеров для их решения. Для ясности более простые задачи при изложении исследуются детально, но во всех случаях указываются самые общие методы решения. Математики и все те, кто заинтересован в быстром развитии методов динамического программирования, найдут здесь экологическое изучение видов, анатомия, физиология и естественная история которых были открыты Беллманом.

*Р. Арис*

Отделение химического машиностроения  
Миннесотского университета,  
февраль 1961 г.

## ГЛАВА I

### ВВЕДЕНИЕ

Вот уже много лет химическая промышленность занимается поисками путей повышения производительности. К этому ее побуждают как ограниченность природных ресурсов, так и стремление повысить свою конкурентоспособность. В этих поисках изобретательность практика сильно довлела на первых порах над аналитическим подходом теоретика. Но потом более полное овладение теоретическими основами процессов постепенно позволило записывать их в математическом виде, все шире открывая двери для расчетных выкладок возрастающей точности. В то же время развитие быстродействующей вычислительной техники сделало возможными вычисления, на которые несколько лет назад никто не пошел бы из-за их чрезмерной продолжительности. При практической работе навыки и опыт все еще играют первостепенную роль, а теоретический анализ вместо того, чтобы утвердить за собой в новой эре ведущую роль, пока смиренно выполняет только роль служанки, но никак не королевы<sup>1</sup>).

Однако для сохранения тех темпов развития, свидетелями которого мы были последние несколько лет, нельзя сбрасывать со счетов того, что может дать теоретический анализ. Как и в других отраслях техники, сохранение темпов развития требует, чтобы вычисления заменили эксперимент там, где это возможно. Это сокращает интервал между решением о производстве того или иного химиката и получением конечного продукта. Действительно, на этом пути существует несколько этапов, на которых осуществимость всего

---

<sup>1</sup> Имеется в виду известный афоризм: «Математика — королева и служанка всех наук». — *Прим. перев.*

проекта может подвергнуться сомнению, причем на любом таком этапе приходится производить переоценку как оптимальности, так и практической осуществимости проекта. О различных взглядах на это положение довольно неплохо написал Хорн: «Все те, кто считает себя «практиком», в большинстве случаев скептически относятся к усилиям тех, кто считает себя «теоретиком»; наоборот, многие такие «теоретики» склонны переоценивать свои достижения, ибо они неправильно представляют себе границы практической приложимости теории». У нас будут возможности время от времени наблюдать границы подобной приложимости, причем мы попытаемся умерить скепсис «практиков», воспользовавшись математическими представлениями, которые по существу являются элементарными.

Практические преимущества оптимального конструирования высоко ценились даже в древние времена, в то же время понятие об оптимуме привлекало математиков с чисто эстетической точки зрения. Исчисление бесконечно малых, вариационное исчисление и функциональный анализ применимы к отысканию экстремального значения, причем все они прилагались ко многим экстремальным задачам, включая задачи химического производства. Однако многие из этих классических методов стали менее подходящими, когда потребовалось рассматривать задачи со многими независимыми переменными и с ограничениями в виде неравенства. Рост объема выкладок переключил внимание техников от аналитических вычислений к прямым методам расчета. Ведь нужен только принцип, который позволяет расчленив задачу со многими переменными на несколько частей, каждая из которых доступна для расчетов, да еще метод, позволяющий воспользоваться преимуществами большой скорости счета на современных вычислительных машинах. При всем этом еще остается место и для изобретательности при преодолении индивидуальных особенностей конкретных задач. Все это подготовило почву для динамического программирования, методы которого были заложены в работах Беллмана и опубликованы в его книге «Динамическое программирование» [16]. Многие в ранних работах стимулировалось труд-

ностями экономического порядка. Методы динамического программирования применимы и к решению задач химической промышленности. Однако самое естественное приложение они находят при решении задач, возникающих при проектировании химических реакторов. Поскольку этот математический метод имеет много как технических, так и экономических приложений, его необходимо изучить подробнее.

В этой главе описан принцип оптимальности в общем толковании для химических процессов и дан обзор аналогичных работ и их основные идеи.

### 1.1. Принцип оптимальности

Химическое производство состоит из целого ряда связанных между собой единичных процессов, каждый из которых есть стадия превращения сырья в конечный продукт. И естественно желание получать от этих превращений максимальный доход. В широком смысле слова этот доход едва ли может быть выражен математически, ибо учет техники безопасности и хороших отношений между предпринимателем и рабочим при продолжительной работе так же важен, как и сама прибыль<sup>1)</sup>. Математическая необходимость, а не политические склонности<sup>2)</sup> заставляет выбирать доход и рассматривать только те элементы, которые могут быть выражены в терминах денежной стоимости и цены. Однако задача получения максимального дохода производства

---

<sup>1)</sup> В буржуазной литературе по экономике и организации производства уделяется много внимания проблеме «человеческих отношений». Повышенный интерес к вопросам установления «хороших отношений» между предпринимателями и рабочими связан с обострением классово-борьбы в капиталистических странах. Одним из ее проявлений является рост забастовочного движения, что связано с наступлением монополий на права трудящихся, снижением их жизненного уровня, интенсификацией труда.

Что же касается «заботы» предпринимателей о технике безопасности, то о ее результатах свидетельствует рост травматизма на производстве. — *Прим. ред.*

<sup>2)</sup> Как известно, в капиталистических условиях любые научные исследования и технические нововведения могут быть реализованы лишь в том случае, если они сулят прибыли предпринимателям и соответствуют интересам правящих кругов. — *Прим. ред.*

в целом слишком сложна, и поэтому мы ограничимся рассмотрением задачи применительно к отдельным производственным участкам предприятия. Правда, на цифровой вычислительной машине уже была исследована модель сахарного завода и эта модель использовалась для приближения к выбору оптимальных режимов работы, но строгая оптимизация была еще невозможна. В качестве простого примера рассмотрим поток реагирующих веществ, проходящий из смесителя в подогреватель, реактор, холодильник и, наконец, в экстракционную колонну. На каждой стадии режим работы характеризуется переменными, такими, например, как температура в подогревателе или время пребывания в реакторе. Наша задача — отыскать режим работы, который является в некотором смысле оптимальным. Само течение процесса характеризуется некоторыми значениями переменных, таких, как температура и состав реагирующей смеси. Эти переменные изменяются на каждой стадии в зависимости от режима работы. Входящий поток и выходящие продукты имеют некоторую стоимость, в то же время при выборе режима работы была предусмотрена определенная стоимость. Доход, т. е. разность между увеличением стоимости продукта, происходящим в результате процесса<sup>1)</sup>, и затратами на этот процесс, необходимо максимизировать.

Используя динамическое программирование, рассмотрим сначала последнюю стадию процесса. Основная идея заключается в том, что поток изменяется на каждой стадии процесса, но какой бы ни был режим работы на всех стадиях до последней, если на последней стадии режим работы не будет оптимальным по отношению к поступающему на нее продукту, то он не будет оптимальным и в целом. Итак, первый шаг состоит в определении такого режима работы, который максимизирует доход на этой стадии для любых возможных состояний поступающего продукта. В нашем примере мы будем рассматривать сначала процесс экстракции и для целого ряда

---

<sup>1)</sup> Доход, или прибыль, образуется за счет той части стоимости продукта, которая увеличивается в процессе производства, а именно за счет прибавочной стоимости, создаваемой неоплаченным трудом рабочего. — *Прим. ред.*



возможных состояний поступающего продукта определим условия, максимизирующие увеличение стоимости потока минус расходы на экстракцию. Далее рассмотрим две последние стадии процесса. Комбинированный режим работы на этих стадиях состоит в том, чтобы для любых состояний поступления на первую из них максимизировать чистый доход от обеих стадий. В этом оптимальном двухстадийном режиме работы на первой стадии не обязательно используется оптимальный одностадийный режим по отношению к поступающему на нее продукту. Но при этом вторая стадия должна использовать оптимальный режим по отношению к продукту, который она получает с первой стадии, ибо иначе комбинированный режим может оказаться не оптимальным. Таким образом, максимальный доход от двух стадий задается так:

$$\text{Максимальный доход от двух стадий} = \text{Максимум от} \left( \begin{array}{l} \text{Доход на} \\ \text{первой} \\ \text{стадии} \end{array} + \begin{array}{l} \text{Максимальный} \\ \text{доход от второй} \\ \text{стадии при дан-} \\ \text{ном состоянии} \\ \text{поступающего} \\ \text{на нее продукта} \\ \text{от первой ста-} \\ \text{дии} \end{array} \right) \quad (1)$$

Чтобы найти этот максимум, мы должны варьировать условия работы лишь на первой из двух стадий, так как мы уже знаем оптимальные условия работы на второй стадии. В нашем примере режим работы холодильника, выбранный согласно уравнению (1), дает наибольший суммарный доход. Это должно быть сделано для достаточного диапазона состояний поступающего с реактора продукта.

Далее рассмотрим последние три стадии как две псевдостадии: реактор и комбинацию холодильника с экстракционной колонной. Так как условия оптимальности на последних двух стадиях известны, можно применить уравнение (1) к этим псевдостадиям. Максимальный доход от всех трех стадий не может быть получен, если в холодильнике и экстракторе не будет выдержан комбинированный оптимальный режим по отношению к выходу реактора. Следовательно, при этой максимизации мы должны изменять лишь расчет реактора.

Продолжая таким же образом, построим полный оптимальный режим постадийно. Рассматривая области возможных состояний поступающих продуктов на каждой стадии, мы изменяем условия работы лишь на одной стадии. Это дает большую экономию в поиске оптимальных условий; напротив, одновременная вариация большого числа условий — занятие весьма бесполезное. Пример, приведенный в разд. 2.1, покажет, как бессмысленное перечисление различных вариантов может быстро привести к задачам, намного превышающим возможности самых больших вычислительных машин.

Таково главное приложение принципа оптимальности к многостадийным процессам. Разумеется, он применяется во многих отраслях химического производства [40, 14, 20], но наше внимание будут привлекать только вопросы, касающиеся проектирования химических реакторов.

Для понимания любого метода полезнее и интереснее всего рассмотреть конкретные примеры. В этой книге будет приведено много таких примеров в дополнение к схеме общего алгоритма решения задач оптимального проектирования.

## 1.2. Обзор родственных работ

Полезно дать краткий обзор уже опубликованных работ по оптимальному проектированию химических реакторов. К счастью, эта литература не многотомна, несмотря на популярность методов оптимизации. В целях популяризации оптимального подхода к проектированию реакторов было написано много работ, но довольно поверхностных. Заслуживает внимания литература, относящаяся к вопросам химической промышленности, однако задачи оптимального проектирования в ней освещены слабо. Возможно также, что были проведены работы частными фирмами в промышленности, но эти работы не были опубликованы. Основные предпосылки экономики химических процессов приведены в книге Хэппеля [32], в которой имеется несколько общих замечаний по оптимизации. Общей обзор математических методов оптимизации в применении к проблемам хи-

мической техники был дан Амундсеном в лекциях в Американском институте химического машиностроения в 1958 г. [2]. Литературу, относящуюся к специальной области проектирования химических реакторов, целесообразнее всего классифицировать в соответствии с типом рассматриваемых реакторов, как это сделано в табл. 1.1.

Таблица 1

| Тип реактора   | Единственная реакция  | Одновременные реакции  |
|--|---|--|
| Последовательность реакторов с мешалками               | Денбиг [25, 29], Хорн [33], Пайрет и Трэмбоуз [45]  | Денбиг [25, 27, 28], Хорн [33, 36], Грюттер и Мессикоммер [31], Вестбрук и Арис [55]                                     |
| Многослойный адиабатический реактор                    | Ляйтенбергер [44], Колдербэнк [22], Хорн [33], Хорн и Кюхлер [37]   |  |
| Реактор вытеснения или реактор периодического действия | Ляйтенбергер [44], Денбиг [25, 27, 29], Энэйбл [6], Колдербэнк [22], Амундсен [1], Амундсен и Байлоус [4], Хорн [33, 35], Пайрет и Трэмбоуз [45], Беллман, Колаба и Арис [20] | Денбиг [27], Амундсен [1], Амундсен и Байлоус [4], Хорн [33—36], Хорн и Кюхлер [37], Хорн и Тролтенир [38], Кац [42, 43] |

Так как задача значительно усложняется при наличии нескольких реакций, то не удивительно, что случай одной реакции доминирует в большинстве ранних работ. Среди первых работ следует отметить работы Ляйтенбергера, Денбига и Амундсена, более обширные результаты представлены в работах Хорна. Однако ни одна из этих статей, за исключением статьи Грюттера и Мессикоммера, не использует понятий динамического программирования и интересно сравнить эти методы с нашим.

Работа Ляйтенбергера [44] посвящена окислению сернистого газа в адиабатических слоях и в реакторах вытеснения. Используя кинетическое уравнение Борескова — Слинько, Ляйтенбергер вычислял оптимальную температуру для заданной степени превращения. Для адиабатического слоя им предложена диаграмма, аналогичная фиг. 1 гл. 8. Он осуществил быстрый расчет многослойного реактора, все слои которого работают в условиях, близких к максимальной скорости реакции, пользуясь графиками температуры и времени пребывания в реакторе. Колдербэнк [22] изучал ту же самую реакцию, используя другое кинетическое выражение. Он привел пример, показывающий, что в двухслойном адиабатическом реакторе производство 50 т серной кислоты в день требует 14,7 т катализатора. В противоположность этому при оптимальном температурном градиенте в реакторе вытеснения потребовалось бы только 0,93 т. Фактически 4,4 т, которые затрачиваются на промышленных установках, показывают, что, с одной стороны, достигнута хорошая производительность, а с другой стороны, есть еще возможности для дальнейшего улучшения. Энэйбл [6], Ляйтенбергер [44] и Колдербэнк [22] сравнивали оптимальную температурную кривую с той, которая действительно получается в реакторе вытеснения с противоточным охлаждением.

Одна из ранних работ Денбинга [25] посвящена рассмотрению скорости реакции и выходу в реакторе с мешалкой и периодического действия или вытеснения. Он показал, что для данного превращения реактор с мешалкой требует гораздо большего объема, чем реактор вытеснения, вследствие низкой скорости реакции, которая наблюдается в случае полного перемешивания. Однако он приводит пример, в котором требуемый объем для некоторой реакции в десять раз уменьшается при использовании двух реакторов вместо одного. Далее он показал, что если порядки реакций больше единицы, то объем отдельных стадий должен быть увеличен для того, чтобы работа реактора была оптимальной. В заключение дано обсуждение непрерывного изменения параметра, такого, как температура, по пути осуществления реакции. Для одной реакции показано, что выбор пара-

метра всегда должен соответствовать максимуму локальной скорости реакции. Этот принцип был им применен к реакции синтеза аммиака. В более поздней работе [27] Денбиг показал, что убывающий градиент температур может быть оптимально выбран для последовательных реакций  $A \rightarrow B \rightarrow C$ . Это действительно справедливо, но немедленная максимизация локальной скорости реакции больше не является обоснованным принципом. Это различие в случаях одной и многих реакций (которое в последней главе рассматривается как несвязность режима) было замечено Амундсеном [1] и очень ясно показано Хорном в работе [35].

С нашей точки зрения, наибольший интерес представляет доклад Денбига на первом Европейском симпозиуме по химической кинетике промышленных процессов [28]. Денбиг рассматривал систему четырех реакций  $A + B \rightarrow X \rightarrow Y$ ,  $A + B \rightarrow P$  и  $X \rightarrow Q$ , где  $Y$  — желаемый продукт,  $X$  — промежуточный, а  $P$  и  $Q$  — отходы производства. При подходящем соотношении скоростей реакций выход  $Y$  может быть сильно увеличен при соответствующем выборе температуры в двух реакторах с мешалками. Столь изящный пример естественно вызвал интерес, и Хорн [35] дал полное обсуждение различных типов оптимальных кривых, требуемых для этой системы реакций. Это будет рассмотрено подробно в разд. 6 гл. 5 (см. также Арис [7]). Доклад Денбига на втором Европейском симпозиуме [29] касался оптимального выбора времени пребывания в реакторах, составляющих каскад реакторов с мешалками. Он ввел метод «максимизации угла», очень похожий на метод динамического программирования. Именно этот метод составляет сущность графических построений в разд. 4 гл. 5.

Работа Амундсена и Байлоуса [4] была первым полным исследованием последовательных реакций  $A \rightarrow B \rightarrow C$ . Если энергия активации на первой стадии меньше, чем на второй, то следует ожидать, что уменьшающийся температурный градиент будет стимулировать получение продукта  $B$ , так как на ранней стадии реакции требуются весьма высокие температуры, чтобы сократить время пребывания в реакторе. В то же время к концу реакции гораздо более низкие температуры минимизи-

руют образование продукта  $C$ . Амундсен и Байлоус вывели уравнение для оптимальной температурной кривой, которое может быть решено совместно с уравнениями материального баланса. Мы получим те же самые уравнения методом динамического программирования в разд. 3 гл. 7.

Вариационное исчисление впервые было применено к этой задаче Свинертоном — Дайером [50] в статье об одной экстремальной задаче. Этот случай подробно разбирался также Кацем [43]. Хорн [33] дал детальные исследования этого случая и показал, что результат может быть выражен через элементарные интегралы, если отношение энергий активации рационально. Кац [42, 43] применил вариационное исчисление к задаче отыскания оптимальной кривой в общем случае. Им выведена система уравнений, по существу совпадающая с системой, данной Хорном [33] и приведенной в настоящей книге в гл. 7. Он также рассматривал одновременное изменение давления, температуры и контролируемого добавления одного из реагентов. Работа Хорна [33] заслуживает особого внимания, в ней удачно совмещен инженерный подход с высокой математической техникой.

В этой работе он исследовал целый ряд оптимальных проблем для непрерывных химических процессов. Хорн показал, каково наименьшее число независимых уравнений, и вывел их вид для реактора с мешалкой и реактора вытеснения. Затем он рассмотрел требования оптимизации на различных примерах и сформулировал общий алгоритм. Решения задачи отыскания оптимальной кривой для реакции первого и второго порядка даны им в замкнутой форме. Они включают в себя некоторые интегралы, таблицы которых даны в приложении к его работе. Для более чем одной независимой реакции необходимо интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений, но в случае только двух реакций возможны определенные упрощения (см. Амундсен и Байлоус [4], Хорн [35], Арис [11] и разд. 4 гл. 7). Решение параллельных и последовательных реакций дано также в замкнутой форме. И, наконец, рассматривалось оптимальное проектирование многослойного адиабатического реактора.

Это основное направление развивалось в ряде статей. У Хорна и Кюхлера [37] даны результаты для адиабатического слоя и некоторые результаты для реактора вытеснения. В сообщении Хорна [35] на втором Европейском симпозиуме по химической кинетике промышленных процессов детально разбирался реактор вытеснения. Показано, что кривые для одной обратимой реакции и параллельных реакций  $A_1 \rightarrow A_2$ ,  $A_1 \rightarrow A_3$  являются зеркальным отображением одна другой и, следовательно, последняя кривая зависит от длины реактора так же, как и от начального состояния. Статья Хорна и Трельтенира [38] содержит весьма полное обсуждение системы Денбига для проточного реактора в предположении, что конечная изотермическая стадия достаточно длинна для того, чтобы привести реакцию к завершению. Цепочка реакторов с мешалками рассматривается в последней статье Хорна [36], в которой получены оптимальные температуры и времена пребывания в реакторах по схеме вычислений, основанной на введении множителей Лагранжа. Показано, что размерность пространств, которые надо рассматривать при решении задачи, в некоторых случаях может быть уменьшена посредством преобразования координат. В результате этого преобразования он получает такой же результат, который в явном виде был найден методом динамического программирования.

Этим заканчивается обзор литературы по промышленной химической кинетике. Мы не будем пытаться делать подобный обзор по динамическому программированию, который благодаря обширности понятий оказался бы чрезмерно большим. Все, что потребуется дополнительно в настоящем рассмотрении и помимо него, можно найти в книге Беллмана «Динамическое программирование» [16].

### 1.3. Содержание данной монографии

Мы сосредоточим наше внимание на целом ряде оптимальных задач расчета химических реакторов методами динамического программирования и попытаемся дать их полное решение в разумных пределах. Это

сделано не из-за незнания или пренебрежения к другим методам, а для того чтобы показать, что все такие задачи могут быть исследованы методом динамического программирования. Основные математические идеи просты и для их понимания требуются не знания, а размышления. В следующей главе мы ознакомимся с этими понятиями в общем виде, в дальнейшем же будем заниматься только конкретными вопросами.

В гл. 3 представлены основные уравнения реакций и расчета реакторов. Чтобы реально поставить оптимальную задачу, необходимы функции выгоды, которые обсуждаются в гл. 4. Далее, естественно рассмотреть основные типы химических реакторов и задачи, связанные с ними. В гл. 8 описаны три задачи со стохастическими элементами. Гл. 9 касается нахождения оптимального управления существующими реакторами. Это можно рассматривать как частный случай проектирования, в котором только часть переменных, характеризующих режим работы, может быть выбрана оптимально. С некоторыми современными успехами оптимального регулирования, которые, однако, лежат вне данного рассмотрения, можно ознакомиться в работе Кальмана, Лapidуса и Шапиро [41], Радда, Ариса и Амундсена [50].

В настоящей книге везде предполагается, что выражение для скорости реакции доступно лишь в терминах локальных термодинамических переменных. Решение таких выражений — процесс трудоемкий (см., например, Хоуген и Ватсон [39]). Существует ряд промышленных реакций, для которых неизвестно ни одного кинетического выражения. Также не всегда легко получить выражения, которые используются частными компаниями. Излагаемые методы никак не связаны с конкретной формой выражения для скорости реакции, причем в определенных случаях результаты покажут, как можно улучшить проектирование даже тогда, когда форма этих выражений неизвестна. Но когда знаешь, что можно извлечь из того или иного выражения, тогда легче составить представление о том, что требуется от такого выражения, а это дает толчок к нахождению последнего.



## ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ ДИНАМИЧЕСКОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ

В этой главе излагаются принципы динамического программирования с учетом их дальнейшего применения к задачам оптимального проектирования. Для дальнейших приложений важно заложить основу, поэтому в данной главе мы дадим относительно абстрактные представления и лишь коснемся их приложения в химической технологии.

Читатель, интересующийся приложениями, изложенными в следующих главах, может при желании прочесть эту главу сначала довольно бегло и при необходимости вернуться к ней позднее. В разд. 1, 2 и 4 вводятся основные идеи и понятия динамического программирования.

### 2.1. Многостадийные процессы и принцип оптимальности

Назначение химического реактора состоит в том, чтобы преобразовать отдельную часть или поток вещества из одного состояния в другое, более ценное. Процесс превращения проходит через одну или несколько стадий, и получаемый продукт зависит от решений, принимаемых на каждой стадии. Эти решения влияют на преобразование состояния вещества, производимое на каждой данной стадии и, следовательно, сказываются на конечном продукте. Множество всех решений называется режимом работы или просто режимом. Оптимальным является такой режим, который в некотором смысле дает наилучший выход процесса в целом, максимизируя ценность продукта. Для постановки задачи оптимального проектирования необходимо провести:

- 1) выбор переменных, характеризующих состояния протекающего процесса;
- 2) выбор переменных, характеризующих режим работы и последствий, вызываемых их изменением<sup>1)</sup>;
- 3) выбор функции выгоды, которую желательно оптимизировать.

Для химических процессов первое требование может включать концентрацию различных химических веществ, температуру и давление потока. В качестве переменных, характеризующих режим работы, можно выбрать объем реактора или количество необходимого хладагента, от выбора которых зависит преобразование состояния вещества. Эта зависимость для основных типов реакторов изучается в следующей главе. Функция выгоды служит некоторой мерой увеличения ценности вещества в результате процесса. Этот вопрос рассматривается в гл. 4.

Впервые принцип нахождения оптимального режима, когда состояние потока преобразуется на последовательных стадиях, сформулировал Беллман. Он нашел, что какие бы преобразования ни осуществлялись на первой стадии  $R$ -стадийного процесса, на последующих стадиях должен использоваться оптимальный  $(R - 1)$ -стадийный режим, по отношению к состоянию поступающего с первой стадии продукта, если только есть какая-либо возможность оптимизации процесса в целом. Кроме того, систематически изменяя условия работы на первой стадии и все время используя оптимальный  $(R - 1)$ -стадийный режим на последующих стадиях, в конце концов найдем оптимальный режим для всех  $R$  стадий. Таким образом, переходя с конца от одной к двум и от двух к трем стадиям, мы можем постепенно построить оптимальный режим для любого числа стадий. На каждом этапе расчета нужно изменять переменные, характеризующие режим работы только на одной стадии.

---

<sup>1)</sup> Переменными, характеризующими состояние процесса, называются переменные, которые не поддаются непосредственному воздействию (неуправляемые переменные).

Переменными, характеризующими режим работы, называются переменные, которые мы можем изменять, воздействуя тем самым на течение процесса (управляемые переменные). — *Прим. ред.*

Чтобы убедиться в преимуществах такого подхода, предположим, что имеется  $m$  переменных, характеризующих режим работы на каждой стадии, и что состояние характеризуется  $n$  переменными; тогда отыскание максимума какой-либо одной стадии требует числа операций порядка  $a^m$  (где  $a$  некоторое фиксированное число). Чтобы перейти от одной стадии к следующей, нужно исследовать достаточное число состояний поступающего продукта; это число будет иметь порядок  $b^{n-1}$ . Однако если мы ищем оптимальный  $R$ -стадийный режим для данного состояния поступающего продукта, то на последнем этапе расчета достаточно отыскать максимизирующее значение переменных, характеризующих режим работы, только для этого состояния. Итак, требуемое число операций будет порядка  $\{(R-1)b^n + 1\}a^m$ . Если же все переменные, характеризующие режим работы, варьировать одновременно, то для той же самой работы потребуется  $a^{Rm}$  операций, и при увеличении  $R$  это число возрастает гораздо быстрее, чем число операций при методе динамического программирования. Но еще более важным является тот факт, что прямые поиски с одновременной вариацией всех условий работы дают только один оптимальный режим, именно тот, который относится к данному начальному состоянию для всех  $R$  стадий. Напротив, динамическое программирование указывает как этот режим, так и целую совокупность режимов для любого меньшего числа стадий. Если проблема осложняется требованием полного охвата всех состояний поступающего продукта, то по методу динамического программирования нужно выполнить  $Ramb^n$  операций и  $a^{Rmb^n}$  операций при прямых поисках. Но  $a^{(R-1)m}$  несравненно больше, чем  $R$ . Таким образом, метод динамического программирования значительно сокращает при проектировании количество необходимых вычислений. Некоторые оптимисты необоснованно полагают, что высокая скорость современных

<sup>1)</sup>  $a$  — число математических действий, необходимых для расчета при одной переменной на одной стадии;  $b$  — число математических действий, необходимых для определения оптимального состояния потока между стадиями в случае одной переменной, характеризующей состояние потока. — *Прим. ред.*

счетно-решающих машин позволяет для отыскания результатов использовать самые громоздкие методы расчета. Пусть  $n = m = 2$ ,  $a = b = 10$ ,  $R = 6$  и на операцию в среднем уходит  $10^{-3}$  сек. Тогда динамическое программирование требует минуты, в то время как прямой поиск — более трех тысячелетий.

Принцип оптимальности, который вносит разумную организацию в поиски оптимального режима многостадийного процесса, был провозглашен Беллманом [16] в следующей форме:

«Оптимальное поведение обладает тем свойством, что каковы бы ни были первоначальное состояние и решение в начальный момент, последующие решения должны составлять оптимальное поведение относительно состояния, получающегося в результате первого решения».

Из этого принципа мы будем исходить во всех случаях для получения функционального уравнения, форма которого очень удобна для расчетов на вычислительных машинах. В то же время любая возможность, которая позволяет сократить число переменных, имеет огромную ценность, причем одним из преимуществ динамического программирования является то, что оно оставляет широкое поле для изобретательности при преодолении специфических особенностей задачи.

## 2.2. Дискретный детерминированный процесс

Рассмотрим процесс, изображенный на фиг. 1, имеющий  $R$  различных стадий. Они пронумерованы в направлении, противоположном направлению течения процесса, так что стадия  $r$  есть  $r$ -я стадия от конца.

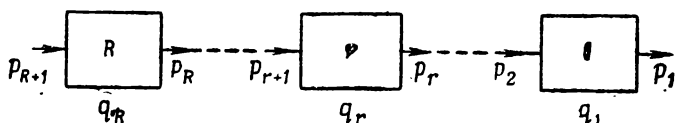
Пусть состояние потока, покидающего стадию  $r$ , обозначается вектором  $\mathbf{p}_r = (p_{1r}, p_{2r}, \dots, p_{nr})$  и вектор переменных, характеризующих режим работы на этой стадии, обозначается через  $\mathbf{q}_r = (q_{1r}, \dots, q_{mr})$ . Таким образом,  $\mathbf{p}_{R+1}$  означает состояние потока, который подается на стадию  $R$ , а  $\mathbf{p}_1$  — состояние потока после конечной стадии. Каждая стадия преобразует состояние  $\mathbf{p}_{r+1}$  поступающего на нее продукта в состояние  $\mathbf{p}_r$  способом, зависящим от выбора переменных  $\mathbf{q}_r$ , характеризующих

режим работы. Запишем это так:

$$\mathbf{p}_r = \mathfrak{F}(\mathbf{p}_{r+1}; \mathbf{q}_r) = \mathfrak{F}_r(\mathbf{p}_{r+1}). \quad (1)$$

Это преобразование однозначно определяется величинами  $\mathbf{q}_r$  и, следовательно, процесс является детерминированным.

На практике на допустимые условия работы накладываются ограничения, и мы будем считать, что векторы переменных, характеризующих режим работы, принадлежат фиксированному ограниченному множеству  $S$ .



Ф и г. 1. Дискретный процесс.

Совокупность векторов  $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_R$  составляет режим работы, который является допустимым, если все  $\mathbf{q}_r$  принадлежат множеству  $S$ . Если режим выбран, то состояние продукта на выходе может быть получено из начального состояния повторным применением преобразования (1).

Таким образом,

$$\mathbf{p}_1 = \mathfrak{F}_1 \mathfrak{F}_2 \dots \mathfrak{F}_R(\mathbf{p}_{R+1}). \quad (2)$$

Функция выгоды, которая должна быть максимизирована, есть некоторая, обычно кусочно непрерывная функция от состояния продукта. Обозначим ее через

$$P(\mathbf{p}_1) = P(p_{11}, \dots, p_{1n}). \quad (3)$$

Оптимальный режим есть такой допустимый режим  $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_R$ , который максимизирует функцию  $P$ . Этот режим может оказаться не единственным, но максимальное значение  $P$  определено будет единственным. Один из режимов, дающий это максимальное значение, может быть вычислен по уравнениям (2) и (3) как функция начального состояния  $\mathbf{p}_{R+1}$ . Пусть

$$f_R(\mathbf{p}_{R+1}) = \max P(\mathbf{p}_1), \quad (4)$$

где максимум берется по всем допустимым значениям режимов  $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_R$ . В случае необходимости будем

говорить, что данный оптимальный режим есть оптимальный  $R$ -стадийный режим по отношению к начальному состоянию  $\mathbf{p}_{R+1}$ .

При любом выборе допустимого режима  $\mathbf{q}_R$  на первой стадии состояние потока на выходе этой стадии дается следующим уравнением:

$$\mathbf{p}_R = \mathfrak{Z}(\mathbf{p}_{R+1}; \mathbf{q}_R). \quad (5)$$

Это — начальное состояние для последующих  $(R - 1)$  стадий, на которых, согласно принципу оптимальности, нужно использовать оптимальный  $(R - 1)$ -стадийный режим по отношению к этому начальному состоянию.  $(R - 1)$ -стадийный режим придаст функции выгоды значение  $f_{R-1}(\mathbf{p}_R)$ , и если  $\mathbf{q}_R$  выбрано правильно, то оно должно придать функции выгоды максимальное значение  $f_R(\mathbf{p}_{R+1})$ .

Таким образом,

$$f_R(\mathbf{p}_{R+1}) = \max f_{R-1}(\mathbf{p}_R). \quad (6)$$

Здесь максимум берется по всем допустимым  $\mathbf{q}_R$ , а  $\mathbf{p}_R$  связано с  $\mathbf{p}_{R+1}$  соотношением (5). Последовательность уравнений (6) может быть решена для  $R = 2, 3, \dots$ , если  $f_1$  известно. Ясно, что

$$f_1(\mathbf{p}_2) = \max P(\mathbf{p}_1), \quad (7)$$

где максимум берется по всем допустимым значениям  $\mathbf{q}_1$ .

Система уравнений (5), (6) и начальное уравнение (7) являются рекуррентными и хорошо подходят для программирования на цифровых вычислительных машинах. Для нахождения оптимального  $R$ -стадийного режима из оптимального  $(R - 1)$ -стадийного необходима лишь функция  $f_{R-1}$ . После того как найдена  $f_R$ , ее нужно перенести в ту ячейку запоминающего устройства, где хранились  $f_{R-1}$ , и все вычисления повторяются. Покажем, как составить таблицу результатов расчета, однако если  $n$  (число переменных состояния) велико, то таблица окажется громоздкой. Таблица или система таблиц может быть составлена по образцу табл. 2.1.

Чтобы выделить оптимальный  $R$ -стадийный режим по отношению к состоянию поступления  $\mathbf{p}_{R+1}$ , начнем

Таблица 2.1

| Номер стадии с конца | Состояние поступающего продукта | Переменные, характеризующие режим работы | Результирующее состояние потока | Максимум функции выгоды |
|----------------------|---------------------------------|--|---------------------------------|-------------------------|
| 1                    | $p_2$                           | $q_1$                                    | $p_1$                           | $f_1(p_2)$              |
| 2                    | $p_3$                           | $q_2$                                    | $p_2$                           | $f_2(p_3)$              |
| $R-1$                | $p_R$                           | $q_{R-1}$                                | $p_{R-1}$                       | $f_{R-1}(p_R)$          |
| $R$                  | $p_{R+1}$                       | $q_R$                                    | $p_R$                           | $f_R(p_{R+1})$          |

со строки  $R$  в таблице при состоянии  $p_{R+1}$  и в последнем столбце непосредственно получим максимальную величину функции выгоды. В третьем столбце дается оптимальный режим на стадии  $R$ , а в четвертом — результирующее состояние потока при использовании этого режима. Так как, согласно принципу оптимальности, последующие стадии работают на оптимальном  $(R-1)$ -стадийном режиме по отношению к  $p_R$ , мы можем начать  $(R-1)$ -строку таблицы с этого состояния  $p_R$  и получить оптимальный режим на  $(R-1)$ -стадии и результирующее состояние  $p_{R-1}$ .

Продолжая таким же образом, мы получим в таблице полный оптимальный режим и, при желании можно проверить значение  $f_R$ , вычисляя  $P(p_1)$  на последней стадии.

Может оказаться, что функция выгоды зависит не только от  $p_1$ , но и от  $q_1, q_R$ , если учитываются расходы на создание данного режима работы. Как нетрудно заметить, приведенные выше алгоритм и табулирование одинаково подходят и к этому случаю. Функции выгоды, которые нам часто будут встречаться, имеют вид

$$\begin{aligned}
 P(p_1) &= V(p_1) - V(p_{R+1}) - \sum_{r=1}^R C(q_r) = \\
 &= \sum_{r=1}^R [V(p_r) - V(p_{r+1}) - C(q_r)]. \quad (8)
 \end{aligned}$$

Здесь  $V(\mathbf{p})$  представляет стоимость потока в состоянии  $\mathbf{p}$  и  $C(\mathbf{q})$  — расходы на создание режима работы с условиями  $\mathbf{q}$ . Следовательно,  $P$  есть увеличение стоимости потока минус расходы на режим, т. е. чистый доход. Если

$$P_r = V(\mathbf{p}_r) - V(\mathbf{p}_{r+1}) - C(\mathbf{q}_r) \quad (9)$$

обозначает чистый доход на  $r$ -й стадии и

$$f_R(\mathbf{p}_{R+1}) = \max \sum_1^R P_r, \quad (10)$$

то принцип оптимальности дает

$$f_r(\mathbf{p}_{R+1}) = \max [P_r + f_{R-1}(\mathbf{p}_R)]. \quad (11)$$

Решение последовательности уравнений (11) может быть начато с замечания, что при отсутствии процесса ( $R=0$ ) нет дохода, т. е.

$$f_0(\mathbf{p}_1) = 0. \quad (12)$$

### 2.3. Дискретный случайный процесс

Интересно также рассмотреть случай, когда выход на любой данной стадии процесса известен лишь статистически, хотя для проектирования химических реакторов более важен случай детерминированного процесса. В рассматриваемом случае  $r$ -я стадия процесса при условии  $\mathbf{q}_r$  преобразует состояние потока из  $\mathbf{p}_{r+1}$  в  $\mathbf{p}_r$ , но известно лишь вероятностное распределение  $\mathbf{p}_r$ . Оно задается функцией распределения  $dG(\mathbf{p}_{r+1}, \mathbf{p}_r; \mathbf{q}_r)$ , так, что вероятность того, что  $\mathbf{p}_r$  окажется в некоторой области  $D$  пространства состояний, есть  $\int_D dG(\mathbf{p}_{r+1}, \mathbf{p}_r; \mathbf{q}_r)$ .

Мы не можем говорить о максимизации функции выгоды, поскольку теперь эта функция известна лишь в вероятностном смысле. Можно, однако, максимизировать математическое ожидание. Для одной стадии определим

$$f_1(\mathbf{p}_2) = \max \int P(\mathbf{p}_1) dG(\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1; \mathbf{q}_1), \quad (1)$$



где максимизация происходит по  $q_1$ . Итак, мы имеем оптимальный режим, который максимизирует математическое ожидание функции выгоды для данного  $p_2$ . Если мы рассмотрим процесс, в котором выход с одной стадии известен перед прохождением следующей, то принцип оптимальности показывает, что режим на последующей стадии должен быть оптимальным по отношению к выходу этой предыдущей. Тогда

$$f_R(p_{R+1}) = \max \int f_{R-1}(p_R) dG(p_{R+1}, p_R; q_R). \quad (2)$$

Здесь производится максимизация по всем допустимым  $q_R$  и интегрирование по всему пространству состояний.

Способ табулирования, применяемый при детерминированных процессах, может быть использован и в этом случае. Гораздо более трудной является задача нахождения оптимального режима в том случае, когда нельзя определить состояние потока в промежутках между стадиями.

#### 2.4. Непрерывный детерминированный процесс

Во многих случаях невозможно разделить процесс на конечное число дискретных стадий, так как состояние потока непрерывно изменяется на протяжении процесса. Вместо числа стадий от конца процесса  $r$  введем непрерывно изменяющееся переменное  $t$ , которое измеряется «расстоянием» рассматриваемой точки от конца процесса. Слово «расстояние» использовано здесь в обобщенном смысле. Фактически оно может быть временем, которое остается до конца процесса. Если  $T$  — общая «продолжительность» процесса, то его начальное состояние можно обозначить вектором  $p(T)$ , а конечное состояние —  $p(0)$ .  $p(t)$  означает состояние в любой точке  $t$ , а  $q(t)$  есть вектор переменных, характеризующих режим работы (см. фиг. 2).

Процесс детерминирован в том смысле, что, задав функцию  $q(t)$  на любом интервале  $(\sigma, \tau)$ ,  $0 \leq \sigma < \tau \leq T$ , мы однозначно определяем  $p(\sigma)$  по  $p(\tau)$ .

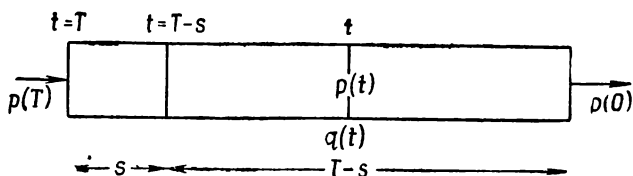
Запишем

$$\mathbf{p}(\sigma) = \mathfrak{F}[\mathbf{p}(\tau), \tau - \sigma; \mathbf{q}(t)], \quad 0 \leq \sigma \leq t \leq \tau \leq T. \quad (1)$$

В частности, состояние на выходе получается из начального состояния при  $\mathbf{q}(t)$ , выбранном на интервале  $0 \leq t \leq T$

$$\mathbf{p}(0) = \mathfrak{F}[\mathbf{p}(T), T; \mathbf{q}(t)]. \quad (2)$$

Точно так же, как в дискретном случае, функцию выгоды можно считать функцией, зависящей от конечного



Фиг. 2. Непрерывный процесс.

состояния продукта  $P[\mathbf{p}(0)]$ . Тогда оптимальный режим есть такая допустимая функция  $\mathbf{q}(t)$ ,  $0 \leq t \leq T$ , которая максимизирует  $P[\mathbf{p}(0)]$ .

Пусть

$$f[\mathbf{p}(T), T] = \max P[\mathbf{p}(0)], \quad (3)$$

где  $\mathbf{p}(0)$  задается уравнением (2), а максимизация производится по всем допустимым  $\mathbf{q}(t)$ ,  $0 \leq t \leq T$ . Из принципа оптимальности следует, что, как бы ни выбирать  $\mathbf{q}$  на интервале  $(T-s, T)$ , на оставшемся интервале  $(T-s, 0)$  должен применяться оптимальный режим по отношению к состоянию  $\mathbf{p}(T-s)$ . Итак,

$$f[\mathbf{p}(T), T] = \max f[\mathbf{p}(T-s), T-s], \quad 0 \leq s \leq T, \quad (4)$$

где

$$\mathbf{p}(T-s) = \mathfrak{F}[\mathbf{p}(T), s; \mathbf{q}(t)] \quad (5)$$

и максимизация проводится по всем допустимым функциям  $\mathbf{q}(t)$  в интервале  $T-s \leq t \leq T$ .

Если  $f$  и  $\mathfrak{J}$  — дифференцируемые и произвольный отрезок  $(T-s, T)$  очень мал, то

$$f[\mathbf{p}(T-s), T-s] = f[\mathbf{p}(T), T] - s \left\{ \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \frac{d\mathbf{p}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial T} \right\} + O(s^2).$$

Тогда выражение (4) переходит в пределе при  $s \rightarrow 0$  в

$$\frac{\partial f}{\partial T} = \max \left\{ - \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \frac{d\mathbf{p}}{dt} \right\}, \quad (6)$$

где  $d\mathbf{p}/dt$  — есть дифференциальная форма преобразования  $\mathfrak{J}$ , а выражение в правой части есть скалярное произведение. Производные  $d\mathbf{p}/dt$  нужно вычислить лишь при  $t = T$ , и, следовательно, из условия максимума должен быть выбран только вектор  $\mathbf{q}(T)$ , а не вся вектор-функция  $\mathbf{q}(t)$ .

### 2.5. Динамическое программирование — подход к вариационному исчислению

В предыдущем разделе изложен новый подход к вариационному исчислению, который был выдвинут Беллманом [16]. Мы ищем максимум интеграла, зависящего от функций

$$\int_0^T F(\mathbf{p}, \mathbf{q}) dt = \int_0^T F(p_1 \dots p_n; q_1 \dots q_m) dt. \quad (1)$$

Преобразование  $\mathfrak{J}$  предыдущего раздела есть интеграл системы дифференциальных уравнений

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{G}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \quad (2)$$

с начальными условиями

$$\mathbf{p}(T) = \mathbf{u}. \quad (3)$$

Вектор  $\mathbf{G}$  зависит от режима работы  $\mathbf{q}$ . Оптимальный режим — это тот, который максимизирует интеграл (1). Допустимые функции  $\mathbf{q}(t)$  изменяются на некотором ограниченном множестве, и в ряде задач необходимо накладывать ограничения на переменные, характеризующие

состояние потока. Форма ограничений, которую мы будем часто использовать, имеет вид неравенств

$$\mathbf{u}_* \leq \mathbf{p}(t) \leq \mathbf{u}^*, \quad (4)$$

$$\mathbf{v}_* \leq \mathbf{q}(t) \leq \mathbf{v}^*. \quad (5)$$

Заметим, что когда выбор режима работы сделан, интеграл становится функцией лишь от начального состояния  $\mathbf{u}$  и от продолжительности процесса  $T$ . Пусть

$$f(\mathbf{u}, T) = \max \int_0^T F(\mathbf{p}; \mathbf{q}) dt, \quad (6)$$

где максимум берется по  $\mathbf{q}(t)$ , удовлетворяющим условию (5), и  $\mathbf{p}$  связано с  $\mathbf{q}$  уравнениями (3) и (4). Интеграл можно переписать в виде

$$\int_{T-s}^T F dt + \int_0^{T-s} F dt,$$

и по принципу оптимальности во второй интеграл нужно ввести оптимальный режим по отношению к состоянию  $\mathbf{p}(T-s)$ .

Итак, для любого  $s$ ,  $0 \leq s \leq T$

$$f(\mathbf{u}, T) = \max \left\{ \int_{T-s}^T F(\mathbf{p}, \mathbf{q}) dt + f[\mathbf{p}(T-s), T-s] \right\}, \quad (7)$$

где максимум берется по всем допустимым  $\mathbf{q}(t)$ ,  $T-s \leq t \leq T$ . При малых  $s$

$$f[\mathbf{p}(T-s), T-s] = f(\mathbf{u}, T) - s \left\{ \frac{\partial f}{\partial \mathbf{u}} \frac{d\mathbf{p}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial T} \right\} + O(s^2),$$

где  $d\mathbf{p}/dt$  и  $\mathbf{G}(\mathbf{u}, \mathbf{v})$  вычисляются при  $t = T$ , здесь  $\mathbf{q}(T)$  обозначено через  $\mathbf{v}$ .

Итак, в пределе при  $s \rightarrow 0$

$$\frac{\partial f}{\partial T} = \max \left\{ F(\mathbf{u}, \mathbf{v}) - \frac{\partial f}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{G}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \right\}, \quad (8)$$

где максимизация производится по всем допустимым  $\mathbf{q}(T) = \mathbf{v}$ . Как и прежде, второй член в правой части надо понимать как скалярное произведение  $\sum_{l=1}^n \left( \frac{\partial f}{\partial u_l} \right) G_l(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ .

Это квазилинейное дифференциальное уравнение в частных производных первого порядка, хотя вследствие наличия максимума в правой части оно записано в необычной форме. Это уравнение должно быть проинтегрировано при краевых условиях

$$f(\mathbf{u}, 0) \equiv 0, \tag{9}$$

которое означает, что

$$\frac{\partial f}{\partial u_i} = 0, \quad i = 1, \quad n, \tag{10}$$

$$\frac{\partial f}{\partial T} = \max F(\mathbf{u}, \mathbf{v}). \tag{11}$$

Беллман ([16] стр. 254) предлагал интегрировать это уравнение методом конечных разностей, но, сознавая трудоемкость предстоящих вычислений, вынужден был сформулировать дискретный вариант проблемы. К счастью, в случае, который мы будем разбирать, для интегрирования этих уравнений можно с успехом использовать метод характеристик.

Чтобы проиллюстрировать этот метод, предположим, что режим работы характеризуется только одним переменным, при котором правая часть равенства (8) есть всегда унимодальная функция. Каким бы частным ни казался этот случай, в гл. 7 он будет играть важную роль. Обозначим  $\partial f / \partial T$  через  $f_T$  и  $\partial f / \partial u_i$  через  $f_i$  и используем соглашение о суммировании по повторяющемуся индексу  $i = 1, \dots, n$ . Тогда уравнение (8) может принять одну из трех форм

$$f_T = \begin{cases} F(\mathbf{u}, v_*) - f_i G_i(\mathbf{u}, v_*), \\ F(\mathbf{u}, v) - f_i G_i(\mathbf{u}, v), \\ F(\mathbf{u}, v^*) - f_i G_i(\mathbf{u}, v^*) \end{cases} \tag{12}$$

соответственно тому, лежит ли единственный максимум на левом, внутри или на правом конце интервала ( $v_*$ ,  $v^*$ ). Во втором случае удовлетворяется уравнение

$$F_{,v} - f_i G_{i,v} = 0. \quad (13)$$

$v$  как функция от  $f_i$  и  $u_i$  вычисляется из этого уравнения ( $v$  в индексе означает частное дифференцирование по  $v$ ).

В первом и последнем случаях уравнения характеристик могут быть записаны в виде

$$\frac{du_j}{ds} = G_j(\mathbf{u}, v), \quad j = 1, \quad n, \quad (14)$$

$$\frac{dT}{ds} = 1, \quad (15)$$

$$\frac{df}{ds} = F(\mathbf{u}, v), \quad (16)$$

$$\frac{df_j}{ds} = F_{,j} - f_i G_{i,j}, \quad j = 1, \quad n, \quad (17)$$

$$\frac{df_T}{ds} = 0, \quad (18)$$

где  $s$  соответствует времени и изменяется вдоль характеристики,  $v$  принимает значение  $v_*$  или  $v^*$ , а  $G_{i,j}$  означает  $\partial G_i / \partial u_j$ . Разумеется, в этом случае уравнения (17) и (18) не нужны, так как, разделив уравнение (14) на (15), получим уравнение

$$\frac{du_j}{dT} = G_j(\mathbf{u}, v),$$

которое является другой формой уравнения (2)<sup>1)</sup>. Комбинируя подобным образом уравнения (15) и (16), приходим к уравнению (1).

Дифференцируя уравнения характеристик для  $v_* \leq v \leq v^*$ , мы должны принимать во внимание тот

<sup>1)</sup> Выбор направления изменения переменных  $t$  или  $T$  определяет знак в уравнении (19) и его следует брать совпадающим со знаком уравнения (2). Отсчет  $t$  от конца согласуется с принятой нами нумерацией дискретных стадий, и он окажется более удобным для определения оптимального режима.

факт, что  $v$  есть функция от  $f_i$  и  $u_i$ , так что, например,

$$\frac{du_j}{ds} = \frac{\partial}{\partial f_j} (f_T + f_i G_i - F) = G_j + (f_i G_i - F) \cdot v \frac{\partial v}{\partial f_j},$$

но так как  $v$  удовлетворяет уравнению (13), это выражение сводится к уравнению (14). Фактически уравнения характеристик даны уже в уравнениях (14) — (18), но теперь  $v$  удовлетворяет и уравнению (13). Мы можем дифференцировать это уравнение вдоль характеристик и получить, таким образом, уравнение для  $v$ :

$$\frac{dv}{ds} = \frac{(F, jG_j, v - G_j F, jv) - f_i (G_i, jG_j, v - G_j G_i, jv)}{F, vv - f_i G_i, vv}. \quad (19)$$

Пока  $v_* \leq v \leq v^*$ , его можно интегрировать вдоль характеристики вместе с уравнениями (14) — (18), и оптимальный режим может быть получен одновременно с траекторией и функцией выгоды.

Уравнение (18) по виду тривиальное, но на самом деле оно показывает, что  $f_T$  не изменяется вдоль характеристики. Поскольку отыскивается максимум, то мы определенно не заинтересованы в процессе, для которого  $f_T$  отрицательно. Таким образом, уравнение (18) дает нам уверенность, что, интегрируя вдоль характеристики, для которой  $f_T > 0$  в начальной плоскости  $T = 0$ , мы построим решение лишь в той части пространства  $(u, T)$ , которая нас интересует.

Уравнение (19) фактически дает наилучший способ отслеживания  $v$ . Начальная плоскость  $T = 0$  разделяется на три области соответственно с тем, попадает ли максимум  $F(u, v)$  в интервалы  $(-\infty, v_*)$ ,  $(v_*, v^*)$  или  $(v^*, \infty)$ . Характеристики, выходящие из второй из этих областей, находятся интегрированием уравнений (14) — (19) с начальными значениями, данными в уравнениях (9) — (11) при подстановке  $v$ , которое максимизирует  $F$ .

Интегрирование происходит до тех пор, пока одно из неравенств (4) не нарушится или пока  $v$  не достигнет  $v^*$  или  $v_*$ . Предположим, что в некоторой точке характеристики  $v = v^*$ , тогда должны решаться уравнения (14) — (16) с  $v = v^*$ . Вдоль этой характеристики мы движемся до тех пор, пока выполняются неравенства (14)

или пока оптимальное значение  $v$  не станет снова меньше  $v^*$ . Для выяснения последнего условия мы всегда можем найти, в каком интервале лежит корень уравнения (13), в крайнем случае методом проб. Однако если мы продолжаем использовать уравнение (19) как результат дифференцирования уравнения (18) вдоль характеристики, то уравнение (19) будет отслеживать корень уравнения (12) и показывать нам, когда  $v$  опять вернется в интервал  $(v_*, v^*)$ . При этом следует учитывать, что уравнение (19) получается из

$$0 = \frac{d}{ds}(F, v - f_i G_{i, v}) = (F, v v - f_i G_{i, v v}) \frac{dv}{ds} + \\ + (F, j v - f_i G_{i, j v}) \frac{du_j}{ds} - G_{i, v} \frac{df_i}{ds}$$

вдоль характеристики с  $v = v^*$ , для которой

$$\frac{du_j}{ds} = G_j^*, \quad \frac{df_i}{ds} = F_{,i}^* - f_j G_{j, i}^*$$

где звездочка означает, что  $v$  полагается равным  $v^*$ . Итак, уравнение (19) после несложных преобразований примет следующий вид:

$$\frac{dv}{ds} = \frac{(F_{,j}^* G_{j, v} - G_j^* F_{,jv}) - f_i (G_{i, j}^* G_{j, v} - G_j^* G_{i, jv})}{F, v v - f_i G_{i, v v}}. \quad (19^*)$$

Подобное же уравнение  $(19_*)$  можно получить при  $v = v_*$ . Если характеристика выходит из той области начальной плоскости  $T = 0$ , где  $v = v^*$ , можно определить корень  $v_m$  уравнения (13) и использовать его как начальное значение в уравнении  $(19^*)$ . В случае если получаемое из этого уравнения значение  $v$  уменьшается до  $v^*$ , нужно использовать уравнения характеристик  $(14) - (19)$ .

Процесс может быть описан следующим образом. Обозначим три интервала  $(-\infty, v_*)$ ,  $(v_* v^*)$  и  $(v^*, \infty)$  через  $I_1$ ,  $I_2$  и  $I_3$  соответственно и три области начальной плоскости  $T = 0$ , для которых  $v_m$  лежит в  $I_1$ ,  $I_2$  или  $I_3$ , соответственно через  $D_1$ ,  $D_2$  и  $D_3$ . Под интегрированием методом  $M_2$  подразумевается интегрирование уравнений характеристик  $(14) - (19)$ . Интегрирование методами  $M_1$  и  $M_3$  означает, что в уравнениях  $(14) - (18)$  должно



быть вместо  $v$  подставлено  $v_*$  или  $v^*$  и уравнение (19) должно быть заменено (19<sub>\*</sub>) или (19<sup>\*</sup>). Тогда правило состоит в том, чтобы интегрировать методом  $M_j$ , соответствующим интервалу  $I_j$ , в котором лежит  $v$ , и переходить к интегрированию методом  $M_i$ , если характеристика доходит до  $D_i$ . Такая программа хорошо приспособлена для вычислительных машин.

Этот метод может быть распространен на случай  $m > 1$ , но в общем случае при нескольких переменных, характеризующих режим работы, возникают серьезные практические трудности с установлением монотонности функций  $F_{,v} - \dot{f}_i G_{i,v}$ . Однако для математика нетрудно построить пример, в котором эта функция, полученная во многих физических ситуациях, дает возможность продемонстрировать применение метода, что будет показано в дальнейшем.

Если мы ищем оптимальный режим для процесса длительностью  $T$  с заданным состоянием поступления  $p(T)$ , то необходимо использовать метод проб и ошибок, поскольку не существует способа начать решение уравнений с входных условий  $p(T)$ . Начальные условия для интегрирования даются лишь при  $T = 0$ , и мы должны выделить из характеристик, выходящих с этой плоскости, ту, которая пройдет через данную точку  $[p(T), T]$ . Имеется реальная возможность того, что точка не будет лежать в области, для которой  $df/\partial T$  положительно. В этом случае большее значение функции выгоды может быть получено с тем же начальным состоянием  $p$ , но с другим  $T$ . Если мы ищем также и оптимальное  $T$ , то нам нужна характеристика, проходящая через  $p, T$ , для которой  $\dot{f}_T = 0$ . Ее найти легче, поскольку величина  $\dot{f}_T$  постоянна вдоль характеристики, так что она выходит из точки начальной плоскости  $T = 0$ , для которой  $\dot{f}_T = \max F(u, v) = 0$ . Нечто подобное этому методу проб и ошибок необходимо и при других подходах к решению этой задачи. Так, Кац [42, 43] использовал классические методы вариационного исчисления и получил двухточечные граничные условия для характеристик, что снова требует решения методом проб и ошибок. Амундсен и Байлоус [4] интегрировали ту же систему уравнений, исходя из состояния поступления, но при этом не была

заранее известна оптимальная длина процесса. Этот случай, который имеет место только при  $n = 2$  и когда  $F$  не зависит от  $\nu$ , будет обсуждаться в разд. 3 и 4 гл. 7.

## 2.6. Использование и интерпретация множителей Лагранжа

Понятие неопределенных множителей было введено в классический анализ Лагранжем для решения вариационных задач со связями. Если находится безусловный максимум функции  $f(x_1, \dots, x_n)$ , то классический метод состоит в одновременном решении системы уравнений  $\partial f / \partial x_i = 0$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Если переменные связаны некоторым соотношением  $g(x_1, \dots, x_n) = 0$ , то в принципе  $x_n$  можно выразить в виде функции от  $x_1, \dots, x_{n-1}$ . Тогда  $f$  станет функцией только от  $(n - 1)$  переменных и максимум можно искать среди решений системы  $\partial f / \partial x_i = 0$ ,  $i = 1, \dots, (n - 1)$ . Однако часто легче отыскать безусловный максимум функции  $f - \lambda g$ , решая уравнения  $\partial(f - \lambda g) / \partial x_i = 0$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Разумеется, величины  $x_1, \dots, x_n$ , найденные таким способом, будут зависеть от  $\lambda$  и, следовательно,  $g(x_1, \dots, x_n)$  станет функцией  $G(\lambda)$ . Теперь достаточно определить  $\lambda$ , для которого  $G(\lambda) = 0$ , и условный максимум найден. Как покажут следующие примеры, теми же самыми понятиями можно с успехом воспользоваться в динамическом программировании.

Предположим, что мы имеем дискретный детерминированный процесс с одним переменным  $p$ , характеризующим состояние, и одним переменным  $q$ , характеризующим режим работы. Пусть

$$P(p_1) = p_1 - p_{R+1} = \sum_1^R (p_r - p_{r+1})$$

есть функция выгоды, которую надо максимизировать при ограничении  $\sum_1^R q_r = Q$ . Аналогично уравнению (2.2.1),  $p_{r+1}$  связано с  $p_r$  соотношением  $p_r = \mathfrak{F}(p_{r+1}; q_r)$ . Эту задачу можно сформулировать двояким образом. В первом случае мы ищем максимум функции выгоды,

который зависит и от  $p_{R+1}$  и от  $Q$ . В этом случае

$$f_R(p_{R+1}, Q) = \max \sum_1^R (p_r - p_{r+1}) \quad (1)$$

максимум берется по всем допустимым  $q_r$ ,  $r = 1, R$ , которые связаны соотношением

$$\sum_1^R q_r = Q. \quad (2)$$

Тогда принцип оптимальности дает следующее функциональное уравнение:

$$f_R(p_{R+1}, Q) = \max [(p_R - p_{R+1}) + f_{R-1}(p_R, Q - q_R)], \quad (3)$$

где максимизация происходит по всем допустимым  $q_R$ , для которых  $0 \leq q_R \leq Q$ . При этом подходе к решению задачи при переходе от стадии к стадии нужно вычислять и запоминать функцию выгоды от двух переменных.

Другой подход состоит в отыскании максимума функции  $P(p_i) - \lambda \sum_1^R q_r$ , который для любого фиксированного  $\lambda$  зависит только от  $p_{R+1}$ .

Пусть

$$g_{R,\lambda}(p_{R+1}) = \max \sum_1^R (p_r - p_{r+1} - \lambda q_r). \quad (4)$$

Тогда принцип оптимальности дает

$$g_{R,\lambda}(p_{R+1}) = \max [p_R - p_{R+1} - \lambda g_R + g_{R-1,\lambda}(p_R)], \quad (5)$$

где максимизация происходит по всем допустимым  $q_r$ . Здесь при любом фиксированном  $\lambda$  функция  $g_r$  зависит только от одного переменного при переходе от стадии к стадии. Это значительно снижает требующийся объем памяти и упрощает интерполяцию. Быстрее решить ряд таких задач для различных  $\lambda$ , чем решать задачу в ее

первой формулировке.  $Q_R(\lambda) = \sum_1^R q_r$  можно вычислить для любого  $\lambda$ , и для решения исходной задачи следует взять то значение  $\lambda$ , для которого  $Q_R(\lambda) = Q$ .

Этот же метод полезен и для непрерывных процессов. Если перед нами аналогичная задача отыскания максимума

$$\int_0^T F(p, q) dt, \quad (6)$$

где

$$\frac{dp}{dt} = G(p, q), \quad p(T) = u \quad (7)$$

и

$$\int_0^T H(q) dt = H, \quad (8)$$

то прямой подход заключается в составлении уравнения

$$f(u, T, H) = \max \int_0^T F(p, q) dt. \quad (9)$$

Это приводит к следующему уравнению в частных производных:

$$f_T = \max [F(u, v) - f_u G(u, v) - f_H H(v)], \quad (10)$$

максимум берется по всем допустимым  $q(T) = v$ . Здесь мы имеем уравнение с тремя независимыми переменными и должны выбрать такую точку в трехмерном пространстве  $(u, v, T)$ , чтобы соответствующее решение при продолжительности процесса  $T$  проходило через данное начальное состояние  $p(T) = u$  при постоянном  $H$ .

Такую же задачу можно сформулировать, используя множители Лагранжа, при этом нужно отыскать максимум выражения

$$g_\lambda(u, T) = \max \int_0^T [F(p, q) - \lambda H(q)] dt. \quad (11)$$

В этом случае мы получим уравнение в частных производных только с двумя независимыми переменными

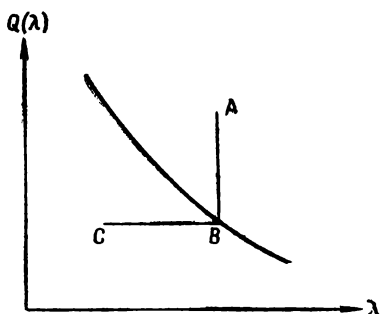
$$g_T = \max [F(u, v) - \lambda H(v) - g_u G(u, v)]. \quad (12)$$

При данном начальном состоянии и заданной продолжительности процесса выбор точки  $(u, T)$  двумерного

пространства существенно проще, чем в первом случае. Для этого решения интеграл

$$H(\lambda) = \int_0^T H(q) dt \quad (13)$$

будет определен при данном  $\lambda$  и для решения исходной задачи нужно взять то значение  $\lambda$ , для которого  $H(\lambda) = H$ . Это, возможно, потребует еще одного процесса проб и ошибок, но даже тогда такой путь может



Фиг. 3. Наглядная интерпретация множителей Лагранжа.

оказаться более легким для получения требуемого решения и при большом числе ограничений его преимущества станут, по-видимому, более заметными. Беллман [15] дал общий обзор таких методов.

Множители Лагранжа имеют простую интерпретацию: в приведенных выше примерах это определенная мера цены, учитывающая использование режима работы. Как легко заметить в первом примере, чем больше значение  $\lambda$ , тем меньше будет общая сумма  $Q_R(\lambda)$

(фиг. 3).  $p_1 - p_{R+1} - \lambda \sum_1^R q_r$  есть «доход» от преобразований продукта минус «расходы» на режим работы  $q_r$ . В некоторых случаях возможны ограничения, налагаемые как на  $Q$ , так и на  $\lambda$ . На фиг. 3 изображена кривая, характеризующая оптимальное соотношение

величин  $Q$  и  $\lambda$ . Если точка  $A (Q, \lambda)$  лежит выше этой кривой, то это означает, что нас лимитируют расходы на проведение режима, а не ограничения на  $Q$ , так как оптимум для этого значения  $\lambda$  лежит в точке  $B$  на кривой ниже точки  $A$ , где не все допустимые значения  $Q$  могут быть использованы. Напротив, если  $(\lambda, Q)$  расположено в точке  $C$ , то доминируют ограничения на  $Q$ , а это означает, что оптимум достигается при таком особом значении  $\lambda$ , как в точке  $B$ , которое больше реального значения  $\lambda$ .

## ГЛАВА 3

### МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ДЛЯ ПРОЕКТИРОВАНИЯ РЕАКТОРОВ

В этой главе мы выведем уравнения, которые необходимы для последующего описания задачи оптимального проектирования. Здесь удобно выделить основные типы реакторов и определяющие их уравнения перед тем, как сформулировать оптимальную задачу проектирования. Мы не будем детально описывать конкретные реакторы; достаточно и даже желательно иметь простейшую адекватную систему уравнений. В дальнейшем мы не будем стремиться к решению самых общих задач, так как основы лучше всего познаются, если изложение не перегружено деталями. Читателю станет ясно, что метод динамического программирования пригоден не только для простых моделей и задач. Могут быть использованы гораздо более детальные описания и точные оценки дохода; при этом успех зависит лишь от терпеливого программирования. Необходимо напомнить, однако, что некоторые величины, такие, как кинетические константы, никогда не могут быть известны с желаемой исследователям степенью точности. Эти константы служат фундаментом, определяющим допустимые погрешности, и не могут обеспечить получение более высокой точности.

Примем следующее условие. Если раздел или глава посвящены конкретному типу реактора, то под словом «реактор» в этом разделе подразумевается именно этот тип. Ссылки на другой тип реактора будут специально оговариваться.

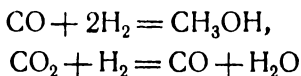
#### 3.1. Системы химических реакций

Обозначим через  $A_i$ ,  $i = 1, \dots, n$  химические вещества, которые участвуют в системе  $m$  реакций. Уравнения

этих реакций можно записать в виде

$$\sum_{i=1}^n \alpha_{ij} A_i = 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad (1)$$

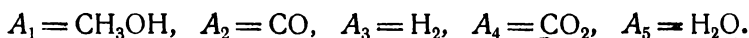
где  $\alpha_{ij}$  — стехиометрический коэффициент  $A_i$  в  $j$ -й реакции. Напомним, что те вещества, которые рассматриваются как результат некоторой реакции, должны иметь положительные стехиометрические коэффициенты. Так, например, две реакции, имеющие место в синтезе метилового спирта,



можно переписать в виде

$$\begin{aligned} A_1 - A_2 - 2A_3 &= 0, \\ A_2 - A_3 - A_4 + A_5 &= 0, \end{aligned}$$

где



Тогда матрица стехиометрических коэффициентов записывается так:

$$\alpha' = \begin{vmatrix} 1 & -1 & -2 & & \\ & & & 1 & -1 & -1 & 1 \end{vmatrix}.$$

Предположим, что реакции независимы, т. е. ни одна из них не может быть выражена в виде линейной комбинации других. Более точно это означает, что не существует такого множества из  $m$  чисел  $\lambda_1, \dots, \lambda_m$ , исключая тривиальное  $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_m = 0$ , так что

$$\sum_{j=1}^m \alpha_{ij} \lambda_j = 0. \quad (2)$$

Если дана любая система реакций, то ее всегда можно свести к эквивалентной линейно независимой системе; предположим, что это сделано. Существует два подхода к составлению дифференциальных уравнений, убеждающих нас в том, что для описания изменения концентраций  $n$  компонентов достаточно  $m$  уравнений. Опишем оба



эти подхода, так как каждый из них имеет свои преимущества.

При первом подходе мы связываем с каждой реакцией степень завершенности (меру) этой реакции. Предположим, что в начале реакции присутствует  $N_{i0}$  молей компонента  $A_i$ . Тогда, если  $N_{ij}$  молей  $A_i$  участвуют в  $j$ -й реакции, в реакции должны также участвовать  $N_{kj} = = \alpha_{kj}N_{ij}/\alpha_{ij}$  молей  $A_k$ , ибо в этом и состоит смысл уравнения  $\sum \alpha_{ij}A_i = 0$ .

Итак,

$$N^j = \frac{N_{kj}}{\alpha_{kj}} = \frac{N_{ij}}{\alpha_{ij}} \quad i, k = 1, \dots, n$$

не зависит от компонента, участвующего в  $j$ -й реакции. Это число может быть названо степенью завершенности  $j$ -й реакции, и, очевидно, что изменение числа молей  $A_i$  есть  $N_{ij} = \alpha_{ij}N^j$ . Если реакции имеют степени завершенности  $N^1, N^2, \dots, N^m$ , то общее изменение числа молей  $A_i$  есть  $\sum_{j=1}^m \alpha_{ij}N^j$ ;  $N_i$  — число молей  $A_i$ , определяется уравнением

$$N_i = N_{i0} + \sum_{j=1}^m \alpha_{ij}N^j. \quad (3)$$

Так как общая масса реагирующей смеси не изменяется, можно разделить на нее это уравнение.

Тогда получим

$$g_i = g_{i0} + \sum_{j=1}^m \alpha_{ij}g^j, \quad (4)$$

где  $g_i$  — концентрация  $A_i$  в молях на единицу массы смеси;  $g_{i0}$  — начальная концентрация  $A_i$ ;  $g^j$  — степень завершенности  $j$ -й реакции, *моль/масса*.

Если реакция протекает при постоянном объеме, то уравнение (3) можно разделить на этот объем, что дает

$$c_i = c_{i0} + \sum_{j=1}^m \alpha_{ij}c^j, \quad (5)$$

где концентрация и степень завершенности теперь измеряются в молях на единицу объема. Так как скорости

гомогенных реакций обычно выражаются в молях на единицу объема за единицу времени, эти единицы можно принять за стандартные единицы измерения. Если  $\rho$  — плотность реагирующей смеси, то

$$c_i = \rho g_i. \quad (6)$$

Это позволяет заменять единицы концентрации более удобными единицами. Так могут быть введены другие способы выражения концентрации, например мольная доля, парциальное давление или фугэтивность. Для исследования реакций в газовой фазе при изменяющемся объеме удобнее пользоваться величиной  $g$ , которая будет применяться при рассмотрении реакторов вытеснения. Иными словами, мы формулируем нашу задачу, используя значения  $c$  и имея в виду, что при этом не накладывается ограничений на наш метод.

Скорость  $j$ -й реакции можно определить как скорость изменения  $c^j$  при одной этой реакции, и будем считать ее известной функцией локального термодинамического состояния, т. е.

$$\left(\frac{dc^j}{dt}\right)_r = r^j(c^1, \dots, c^n, p, T). \quad (7)$$

С помощью соотношения (5) можно выразить концентрации через степень завершенности реакций. При этом получим

$$r^j = r^j(c^1, \dots, c^m, p, T; c_{10}, \dots, c_{n0}) = r^j(c^k, p, T). \quad (8)$$

Тогда скорость изменения концентрации вещества  $A_i$  в результате реакции равна

$$\left(\frac{dc_i}{dt}\right)_r = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} r^j. \quad (9)$$

Использование степени завершенности реакции является симметричным, так как при этом число реакций равно числу переменных. Если мы рассматриваем систему реакций, в которой одной или более реакциями можно пренебречь, то достаточно положить соответствующее  $r^j$  равным нулю. Однако если требуется выразить окончательный ответ через концентрации, то нужно

перейти к ним от степени завершенности реакции с помощью уравнения (5). Иногда лучше пользоваться концентрациями некоторых основных компонентов реагирующей смеси <sup>1)</sup>. Поскольку реакции независимы, всегда можно выбрать  $m$  компонентов так, что соответствующий главный минор порядка  $m \times m$  в матрице стехиометрических коэффициентов  $\alpha$  не равен нулю. Действительно, разделив каждый столбец  $\alpha$  на соответствующий коэффициент главной диагонали, получим главную диагональ из единиц. Таким образом, первые  $m$  компонентов  $A_1, \dots, A_m$  могут быть выбраны в качестве основных компонентов, а концентрации других выражаются через них.

Итак, уравнение (3) можно переписать следующим образом:

$$\alpha_{11}N^1 + \dots + \alpha_{1m}N^m = N_1 - N_{10},$$

$$\alpha_{m1}N^1 + \dots + \alpha_{mm}N^m = N_m - N_{m0},$$

$$\alpha_{m+1,1}N^1 + \dots + \alpha_{m+1,m}N^m = N_{m+1} - N_{m+1,0},$$

$$\alpha_{n1}N^1 + \dots + \alpha_{nm}N^m = N_n - N_{n0}.$$

Так как по условию матрица

$$\begin{matrix} \alpha_{11}\alpha_{12} & \alpha_{1m}, \\ \alpha_{21}\alpha_{22} & \alpha_{2m}, \end{matrix}$$

$$\dots$$

$$\alpha_{m1}\alpha_{m2} \dots \alpha_{mm}$$

неособенная, первые  $m$  из этих уравнений могут быть решены относительно  $N^j$

$$N^j = \sum_{i=1}^m \beta_{ji} (N_i - N_{i0}). \quad (10)$$

<sup>1)</sup> При каталитической реакции с одновременной диффузией такая формулировка имеет определенные преимущества. Но этот случай не будет рассматриваться.

Подставив уравнение (10) в последние  $(n - m)$  уравнений

$$N_k = N_{k0} + \sum_{j=1}^m \sum_{l=1}^m \alpha_{kj} \beta_{jl} (N_l - N_{l0}), \quad (11)$$

$$k = m + 1, \quad n,$$

получим выражение оставшихся  $N_k$  через первые  $m$  из них. Разделив на массу или объем, получим подобное выражение для  $g_i$  или  $c_i$ ; в частности,

$$c_k = c_{k0} + \sum_{j=1}^m \sum_{l=1}^m \alpha_{kj} \beta_{jl} (c_l - c_{l0}). \quad (12)$$

Теперь пусть  $f_i$  есть скорость изменения  $c_i$  в результате всех реакций. Она является функцией всех  $c_i$  ( $i = 1, n$ ),  $p$  и  $T$ , но с помощью уравнения (12) ее можно выразить как функцию только  $c_1, \dots, c_m, p, T$ . Таким образом,

$$\begin{aligned} f_i &= f_i(c_1, \dots, c_n, p, T) \\ &= f_i(c_1, \dots, c_m, p, T; c_{10}, \dots, c_{n0}) \\ &= \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} r^j, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned} \quad (13)$$

Тогда скорость образования других компонентов дается выражением

$$f_k = \sum_{j=1}^m \sum_{l=1}^m \alpha_{kj} \beta_{jl} f_l. \quad (14)$$

В обоих случаях одновременное протекание  $m$  реакций может быть описано только  $m$  функциями.

Число независимых реакций есть показатель стехиометрической сложности системы. Как указали Пайрет и Трэмбоуз [45], можно найти выражение для  $r_j$  или  $f_i$ , содержащее меньше чем  $m$  концентраций. В этом случае задачу можно свести к решению системы, в которую входит меньше  $m$  уравнений, но для определения других концентраций нужны уже не алгебраические операции, а интегрирование. Это замечание было сделано также

Хорном [36]. Если  $H_i$  есть парциальная молярная энтальпия вещества  $A_i$ , то уравнение

$$\Delta H_j = \sum_{i=1}^n \alpha_{ij} H_i \quad (15)$$

определяет энтальпию или теплосодержание  $j$ -й реакции. Это есть теплота, поглощаемая при единичном изменении степени завершенности реакции  $N^j$ , и она положительна для эндотермических реакций. Так как многие из представляющих интерес простых случаев соответствуют экзотермическим реакциям, мы часто будем писать  $(-\Delta H_j)$ . Полученная величина в этом случае считается положительной. Скорость образования теплоты в единичном объеме в результате всех реакций равна

$$\sum_{j=1}^m (-\Delta H_j) r^j. \quad (16)$$

Система реакций (1) считается равновесной, если все скорости реакции одновременно равны нулю:

$$r^1 = r^2 = \dots = r^m = 0. \quad (17)$$

Эти уравнения можно решить относительно степени завершенности реакции равновесного состояния  $c_e^j$ , используя начальный состав  $c_{i0}$ , давление  $p$  и температуру  $T$ , если якобиан

$$\frac{\partial (r^1, r^2, \dots, r^m)}{\partial (c^1, c^2, \dots, c^m)}$$

не обращается в нуль.

В окрестности равновесного состояния все системы реакций могут быть описаны уравнениями первого порядка, так как если предположить, что разности  $(c^j - c_e^j)$  достаточно малы, то можно пренебречь их квадратами и произведениями. При этом получим

$$\left( \frac{dc^j}{dt} \right)_r = \sum_{k=1}^m \left( \frac{\partial r^j}{\partial c^k} \right)_e (c^k - c_e^k).$$

Исходя из принципа микроскопической обратимости, обычно считают, что все собственные значения этой матрицы Якоби действительны и отрицательны. Однако обсуждение этого вопроса выходит за рамки данной темы.

### 3.2. Реактор непрерывного действия с мешалкой

Рассмотрим основные типы реакторов и получим систему уравнений, описывающую преобразование начального состояния в конечное. Реактор с мешалкой непрерывного действия — одна из простейших основных конструкций, широко используемых в химической промышленности. В основном он состоит из сосуда объемом  $V$  с одним или более входами и выходом, систем охлаждения и перемешивания, которые поддерживают равномерность состава и температуры в реакторе. Предположим, что имеет место полное перемешивание вплоть до молекулярного. Можно исследовать и случаи неполного перемешивания, следуя работам Денквертса [24] и Цвайтеринга [56], но соответствующие преобразования будут гораздо сложнее. Если поток реагирующих веществ входит и выходит с постоянной скоростью  $q$ , то среднее время пребывания  $V/q$  называется временем пребывания в реакторе.

Пусть  $c_{if}$  — концентрация  $A_i$  при поступлении в реактор,  $c_i$  — концентрация в реакторе и, следовательно, в выходящем потоке. Тогда материальный баланс приводит к уравнению

$$V \frac{dc_i}{dt} = q(c_{if} - c_i) + V \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} r^j, \quad i = 1, \dots, n. \quad (1)$$

Если мы воспользуемся вторым способом и выразим все концентрации через первые  $m$ , то для решения задачи нужно рассмотреть следующую систему уравнений:

$$\theta \frac{dc_i}{dt} = c_{if} - c_i + \theta f_i(c_1, \dots, c_m, T, p), \quad i = 1, \dots, m. \quad (2)$$

Здесь  $f_i$  записана в виде функции от  $m$  концентраций, давления и температуры. Необходимо напомнить, что  $f_i$  зависит также от начальной концентрации  $c_{i0}$ . Иногда ее можно отождествлять с концентрациями на входе.

Если используется степень завершенности реакции, то из уравнений (3.1.5)<sup>1)</sup> и (1) получим

$$\sum_1^m \alpha_{ij} \left( \theta \frac{dc^j}{dt} - c_f^j + c^j - \theta r^j \right) = 0, \quad (3)$$

где  $c_f^j$  — степень завершенности реакции на входе,

$$c_{if} = c_{i0} + \sum_1^m \alpha_{ij} c_f^j.$$

Но по предположению о независимости реакций [уравнение (3.1.2)] коэффициенты при  $\alpha_{ij}$  тождественно равны нулю, если справедливо уравнение (3). Итак,

$$\theta \frac{dc^j}{dt} = c_f^j - c^j + \theta r^j (c^1, \dots, c^m, T, p), \quad j=1, \dots, m, \quad (4)$$

что дает полную систему уравнений, выраженных через степень завершенности реакции. В случае каскада реакторов с мешалками, в которых поток проходит от стадии  $R$  до стадии 1, мы будем использовать индекс  $r$  для обозначения условий на стадии  $r$  и индекс  $(R+1)$  для начального состояния. Таким образом,

$$\theta_r \frac{dc_r^j}{dt} = c_{r+1}^j - c_r^j + \theta_r r^j (c_r^1, \dots, c_r^m, T_r) \quad (5)$$

или

$$\theta_r \frac{dc_{ir}}{dt} = c_{i, r+1} - c_{ir} + \theta_r f_i(c_{1r}, \dots, c_{nr}, T_r), \quad (6)$$

$$i, j=1, \dots, m; r=1, \dots, R.$$

В дальнейшем в большинстве случаев мы будем считать давление постоянным, поэтому будем писать кинетические уравнения в виде функции только температуры, как, например, уравнения (5) и (6). При постоянном давлении баланс энергии в реакторе превращается в тепловой баланс. Если обозначим через  $VQ(t)$  скорость

<sup>1)</sup> Уравнение 5, гл. 3, разд. 1. Ссылки на уравнения других разделов будут даваться подобным образом,

охлаждения реактора, то получим следующее уравнение:

$$V \frac{d}{dt} \left( \sum_1^n c_i H_i \right) = q \sum_1^n [c_{if} H_i(T_f) - c_i H_i(T)] - VQ.$$

Кроме того,

$$\begin{aligned} V \frac{d}{dt} \left( \sum_1^n c_i H_i \right) &= V \left( \sum_1^n c_i c_{pi} \right) \frac{dT}{dt} + V \sum_1^n H_i \frac{dc_i}{dt} = \\ &= VC_p \frac{dT}{dt} + q \sum (c_{if} - c_i) H_i(T) + V \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} H_i r^j, \end{aligned}$$

где  $c_{pi} = \partial H_i / \partial T$ ;  $C_p = \sum_1^n c_i c_{pi}$  есть теплоемкость на единицу объема реагирующей смеси. Подставляя это выражение в предыдущее уравнение и используя определение (3.1.15) для теплосодержания реакций, получим

$$\begin{aligned} VC_p \frac{dT}{dt} &= q \sum_1^n c_{if} [H(T_f) - H(T)] + \\ &+ V \sum_1^m (-\Delta H_j) r^j - VQ. \quad (7) \end{aligned}$$

Таким образом, мы получим энергетическое уравнение, которое совместно с уравнением (2) или (4) составит полную систему  $(m + 1)$  уравнений с  $(m + 1)$  неизвестными. Неизвестными будут концентрации или степени завершенности реакции и температура. Обычно предполагается, что для  $C_p$  можно взять среднее значение таким образом, что

$$\sum c_{if} [H(T_f) - H(T)] = C_p (T_f - T)$$

и, следовательно,

$$\theta \frac{dT}{dt} = T_f - T + \theta \sum_1^m \frac{(-\Delta H_j)}{C_p} r^j - \frac{\theta}{C_p} Q. \quad (8)$$



Рассматриваемая система уравнений не является системой дифференциальных уравнений<sup>1)</sup> и ее можно записать следующим образом:

$$c_{r+1}^j - c_r^j + \theta_r r^j (c_r^1, \dots, c_r^m, T_r) = 0, \quad (9)$$

$$T_{r+1} - T_r + \theta_r \sum_{j=1}^m H^j r_r^j - Q_r' = 0, \quad (10)$$

где

$$H^j = \frac{-\Delta H_j}{C_p}, \quad Q_r' = \frac{\theta_r Q}{C_p}$$

или

$$c_{i,r+1} - c_{ir} + \theta_r f_i(c_{1r}, \dots, c_{mr}, T_r) = 0, \quad (11)$$

$$T_{r+1} - T_r + \theta_r \sum_{i=1}^m H^i f_{ir} - Q_r' = 0, \quad (12)$$

где

$$H^i = \sum_{j=1}^m \beta_{ji} H^j = \sum_{j=1}^m \beta_{ji} (-\Delta H_j) / C_p. \quad (13)$$

При проектировании цепочки таких реакторов  $Q_r$  и  $\theta_r$  играют роль переменных, характеризующих режим работы, а состояние определяется величинами  $c_{ir}$  или  $c_r^j$  и температурой  $T_r$ . Итак, решение пар уравнений (9) и (10) или (11) и (12) дает преобразование продукта от начального к конечному состоянию на любой фиксированной стадии. Большой интерес представляет тот простой случай, в котором предполагается, что на данной стадии может быть достигнута в определенных пределах любая температура. Тогда за переменные, характеризующие режим работы, можно принять  $T_r$  и  $\theta_r$ . В этом случае для определения преобразования продукта нужно использовать лишь уравнение (9) или (11), а уравнение (10) или (12) используется для вычисления скорости охлаждения с целью поддержания оптимальной температуры. Довольно интересный случай возникает и тогда,

<sup>1)</sup> Считается, что внутри реактора поддерживается состояние динамического равновесия и поэтому

$$\frac{dT}{dt} = 0, \quad \frac{dc_i}{dt} = 0.$$

когда поток при переходе от стадии к стадии не остается неизменным, а смешивается с новым потоком веществ между стадиями. Аналогичная ситуация возникает в том случае, когда имеется не только поток, проходящий от стадии к стадии, но и посторонний приток к каждому реактору. Здесь смесь образуется внутри реактора. Если концентрации  $c_{i0}$  основного и побочного потоков различны, то положение усложняется, поскольку уже говорилось о том, что  $r^j$  или  $f_i$  зависят от  $c_{i0}$ . Значительно проще случай, когда эти составы идентичны; или аналогично тому, когда ответвление от основного потока используется как побочный поток. Предположим, что перед входом в реактор  $r$  поток в состоянии  $c_{r+1}^j, T_{r+1}$  или  $c_{i, r+1}, T_{r+1}$  смешивается с потоком в состоянии  $c_0^j, T_0$ . Тогда, если  $q_{r+1}$  есть скорость потока из реактора  $(r+1)$ , а  $q_r'$  — скорость побочного потока, скорость потока через реактор  $r$  равна

$$q_r = q_{r+1} + q_r'. \quad (14)$$

При этом в уравнениях (9)–(12)  $c_{r+1}^j, c_{i, r+1}$  и  $T_{r+1}$  должны быть заменены на

$$\bar{c}_{r+1}^j = \mu_{r+1} c_{r+1}^j + (1 - \mu_{r+1}) c_0^j, \quad (15)$$

$$\bar{c}_{i, r+1} = \mu_{r+1} c_{i, r+1} + (1 - \mu_{r+1}) c_{i0}, \quad (16)$$

$$\bar{T}_{r+1} = \mu_{r+1} T_{r+1} + (1 - \mu_{r+1}) T_0, \quad (17)$$

где

$$\mu_{r+1} = \frac{q_{r+1}}{q_r}. \quad (18)$$

### 3.3. Многослойный адиабатический реактор

Если данная ступень реактора по возможности теплоизолирована и нет теплообмена с внешней средой, она называется адиабатической. Так, цепочка реакторов с мешалками с  $Q_r = 0$  может быть названа адиабатической цепочкой реакторов. Рассмотрим простейшую модель многослойного адиабатического реактора с катализатором. Предположим, что через каждый слой катализатора проходит такой равномерный поток, в котором

можно пренебречь продольной диффузией, перепадом давлений или потерями тепла. Выражения  $r^j$  или  $f_i$  есть скорости реакций на единицу объема реактора и  $c_i^j$ - или  $c_i$ -концентрации в молях на единицу объема. Это означает, что для гетерогенного катализа различные явления (перенос массы, внутренняя диффузия, адсорбция и т. д.) уже проанализированы и их эффект включен в выражения для скорости реакции. Если  $A$  есть площадь поперечного сечения реактора,  $q$  — объемная скорость потока и  $x$  — расстояние до входа в слой, то баланс массы вещества  $A_i$  на элементе длины слоя дает

$$q \frac{dc_i}{dx} = Af_i(c_1, \dots, c_m, T).$$

Для простоты пусть

$$t = \frac{Ax}{q} \quad (1)$$

является мерой расстояния в слое; тогда

$$\frac{dc_i}{dt} = f_i(c_k, T). \quad (2)$$

Или же, подставляя сюда формулы (3.1.5) и (3.1.13) и вновь используя независимость реакций, получим

$$\frac{dc^j}{dt} = r^j(c^k T). \quad (3)$$

Поскольку перепадом давления можно пренебречь, условие адиабатичности слоя тогда запишется в виде

$$\frac{d}{dt} \left( \sum_1^n c_i H_i \right) = 0$$

или

$$\sum_1^n c_i H_i(T) = \sum_1^n c_{if} H_i(T_f). \quad (4)$$

Отсюда при известных условиях поступления  $c_{if}$ ,  $T_f$  можно выразить  $T$  через  $c_i$  в любой точке слоя. Уравнение (4) может быть переписано в виде

$$\sum_1^n c_{if} [H_i(T) - H_i(T_f)] = \sum_1^n (c_{if} - c_i) H_i(T).$$

Принимая предыдущее предположение о законности использования среднего значения удельной теплоемкости  $C_p$  и учитывая формулы (3.1.5), (3.1.15) и (3.2.13), получим

$$T - T_f = \sum_1^m H^j (c^j - c_f^j) = \sum_1^m H^{i'} (c_i - c_{if}). \quad (5)$$

Эта зависимость между температурой и степенью завершения реакции линейна, если  $H^j$  — постоянная величина. Такая аппроксимация часто бывает удовлетворительной. В других случаях мы должны вернуться к уравнению (4) и подставить  $T$  в уравнение (2) или (3). Мы получим систему  $m$  дифференциальных уравнений первого порядка, которую надо решить при начальных условиях:

$$c^j = c_f^j \quad \text{или} \quad c_i = c_{if} \quad \text{при} \quad t = 0. \quad (6)$$

Из решения этих уравнений находим состав и температуру как функции начального состояния и  $\theta$ , где  $\theta$  — значение  $t$  в конце слоя. В адиабатическом реакторе изменение температуры в процессе реакции неблагоприятно сказывается на ее ходе, так как с точки зрения результатов реакции экзотермическая реакция нуждается в понижении, а эндотермическая — в повышении температуры.

Отсюда очевидно преимущество реакторов с несколькими адиабатическими ступенями, между которыми осуществляется изменение температурного режима. Охлаждение в случае экзотермической реакции можно осуществить с помощью теплообменника или смешиванием с более холодным нереагирующим веществом (охлаждающим агентом). Итак, на каждой ступени есть две переменные, характеризующие режим работы: температура смеси перед поступлением на данную ступень  $T_f$  и время пребывания на этой ступени  $\theta$ .

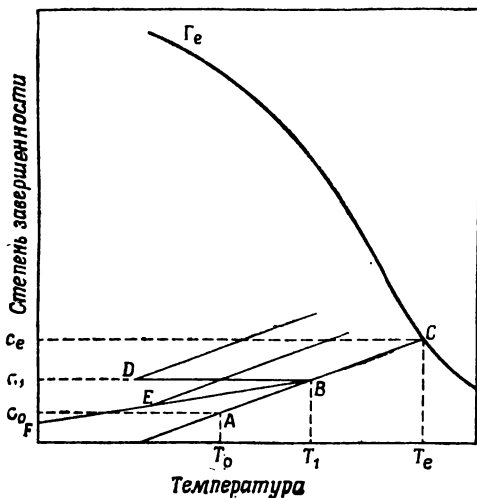
Конструкция теплообменника и количество добавляемого охлаждающего агента определяются выбранной входной температурой. В случае экзотермической реакции с состоянием, близким к равновесному, температурный режим следует выбирать тщательно, так как недостаточное охлаждение не увеличит скорость реакции, а

слишком сильное — погасит реакцию. В случае одной реакции процессу можно дать наглядную графическую интерпретацию. Рассмотрим экзотермическую реакцию как представляющую наибольший интерес. Положим индекс  $j = 1$ , тогда уравнения (3) и (5) примут вид

$$\frac{dc}{dt} = r(c, T), \quad (7)$$

$$T = T_f + H(c - c_f). \quad (8)$$

В плоскости с координатами  $c$  и  $T$  (фиг. 1) геометрическое место точек, для которых  $r(c, T) = 0$ , есть кривая  $\Gamma_e$ . Уравнение (8), выражающее связь между температурой и степенью завершенности реакции в любом



Фиг. 1. Адиабатический реактор.

адиабатическом слое; изображается на плоскости прямой линией (прямая  $ABC$  на фиг. 1). В любой точке этой прямой скорость реакции можно представить в виде

$$R(c; c_0, T_0) = r[c, T_0 + H(c - c_0)]; \quad (9)$$

она имеет максимум при

$$\frac{\partial r}{\partial c} + H \frac{\partial r}{\partial T} = 0. \quad (10)$$

В точке  $C$ , где  $AB$  пересекает  $\Gamma_e$ , имеем равновесное состояние и скорость реакции равна нулю. В окрестности точки  $C$  скорость реакции мала и, чтобы достичь небольшого изменения концентрации, необходимо удлинить слой на величину, пропорциональную логарифму скорости. Предположим, что в точке  $B$  реакция прекращается и смесь охлаждается перед поступлением на следующий слой. При охлаждении в теплообменнике точка, соответствующая состоянию смеси после охлаждения, будет лежать на прямой  $BD$ , так как степень завершенности реакции не меняется. Если же охлаждение осуществляется посредством смешивания с охлаждающим агентом, состоянию которого соответствует точке  $F$ , то результирующему состоянию будет соответствовать точка  $E$  прямой  $BF$ . Реакции в следующем слое будет соответствовать прямая с наклоном  $H$ , проходящая через точку  $D$  в случае теплообменника и через точку  $E$  при охлаждении охлаждающим агентом. Следует ожидать, что отрезки прямой, соответствующие реакции в слоях (отрезок  $AB$ ), должны лежать в окрестности кривой максимальной скорости реакции, описываемой уравнением (10). Очевидно, что при охлаждении в теплообменнике может быть получена любая степень завершенности реакции при достаточном числе длинных слоев. При использовании охлаждающего агента наибольшая степень завершенности реакции, которую можно достичь, соответствует степени завершенности равновесного состояния, которую можно получить с помощью одной адиабатической реакции из состояния, соответствующего состоянию охлаждающего агента (точка  $F$ ). Такой тип охлаждения целесообразно использовать вследствие его относительной простоты, если мы не стремимся к большим изменениям концентрации.

### 3.4. Реактор вытеснения

В дальнейших приложениях мы вернемся к единицам измерения концентрации в молях на единицу объема, но в этом разделе нам удобнее пользоваться единицами измерения в молях на единицу массы. В этом мы следуем Амундсену [2], работы которого поставили на солидную

аналитическую базу задачи проектирования химических реакторов. Предположим также, что поток однороден и отсутствует продольная диффузия. Примем, что скорость потока  $G$ , измеряемая в единицах массы на единицу площади в единицу времени, постоянна вдоль реактора при всех обстоятельствах. Линейная скорость  $v$  и плотность  $\rho$  могут меняться, но их произведение  $\rho v = G$  постоянно. Тогда баланс массы вещества  $A_i$  на бесконечно малом участке длины реактора дает дифференциальное уравнение

$$G \frac{dg_i}{dx} = \frac{d}{dx} (vc_i) = \sum_1^n a_{ij} r^j, \quad (1)$$

где  $r^j$  могут быть выражены как функции от  $g_1, \dots, g_n, \rho, p, T$ . С помощью соотношений (3.1.4) можно сделать  $r^j$  функциями от степени завершенности реакции  $g^1, g^m$  и от начального состава  $g_{i0}$  и, используя независимость реакций, получим

$$G \frac{dg^j}{dx} = \frac{d}{dx} (vc^j) = r^j. \quad (2)$$

Чтобы вывести баланс энергии, введем следующие обозначения:  $P$  — площадь охлаждаемой поверхности на единицу длины;  $T_c$  — температура охлаждающего агента;  $Q^*(T, T_c)$  — скорость теплоотвода на единицу площади охлаждаемой поверхности;  $J$  — механический эквивалент теплоты;  $z(x)$  — высота точки над выбранным уровнем.

Тогда изменение общей энергии (тепловая + кинетическая + потенциальная) приравнивается подводимому теплу и работе в данном элементарном объеме:

$$G \frac{d}{dx} \left[ \sum_1^n g_i H_i(T) + \frac{v^2}{2J} + \frac{z}{J} \right] + PQ^* = 0.$$

Это уравнение можно преобразовать, используя уравнения (2) и (3.1.15). По определению удельной теплоем-

кости смеси имеем

$$c_p = \sum_1^n g_i c_{pi} = \sum_1^n g_i (\partial H_i / \partial T), \quad (3)$$

$$G c_p \frac{dT}{dx} + \frac{Gv}{J} \frac{dv}{dx} = -\frac{G}{J} \frac{dz}{dx} + \sum_1^m (-\Delta H_j) r^j - PQ^*. \quad (4)$$

Член  $dz/dx$  есть известная функция положения и геометрии реактора и им можно пренебречь.

Баланс количества движения приводит к уравнению

$$\frac{dp}{dx} + G \frac{dv}{dx} + \frac{\mathfrak{F}}{A} = 0, \quad (5)$$

где  $\mathfrak{F}$  — сопротивление потоку, оказываемое трубой реактора и заполнением, если таковое имеется.  $\mathfrak{F}$  является функцией  $\rho$ ,  $v$  и характеристики заполнения реактора. Если охлаждение осуществляется потоком жидкости, направление которого одинаково или противоположно направлению основного потока, то температура  $T_c$  охлаждающего потока удовлетворяет уравнению

$$G_c A_c c_{pc} \frac{dT_c}{dx} = \pm PQ^*(T, T_c), \quad (6)$$

где  $G_c$  — скорость охлаждающего агента (в единицах веса на единицу площади в единицу времени);  $A_c$  — площадь поперечного сечения охлаждающего потока;  $c_{pc}$  — удельная теплоемкость охлаждающего агента.

Знак плюс или минус берется соответственно для сопадающего или противоточного охлаждения.

Наконец, мы имеем уравнение состояния

$$p = p(\rho, T) \quad (7)$$

и тождество

$$\rho v = G. \quad (8)$$

В самом общем случае это дает систему  $(m + 5)$  уравнений для  $g^1, \dots, g^m, p, \rho, v, T$  и  $T_c$ . Если можно придать охлаждающему агенту любую температуру, то уравнение (6) излишне. Фактически по нижеизложенным причинам мы будем рассматривать только такие задачи, в которых можно в каждой точке выбрать  $Q^*$  в опреде-



ленных пределах. Если пренебречь кинетической и потенциальной энергиями, то уравнения (2) и (4) могут быть записаны в виде

$$G \frac{dg^j}{dx} = r^j, \quad (9)$$

$$Gc_p \frac{dT}{dx} = \sum_1^m (-\Delta H_j) r^j - Q'. \quad (10)$$

Когда скорости реакции  $r^j$  не зависят от  $\rho$ , уравнения (9) и (10) образуют замкнутую систему, а уравнения (5), (7) и (8) в случае необходимости могут быть использованы для получения  $v$ ,  $\rho$  и  $p$ . Если же  $r^j$  зависит от  $\rho$ , то уравнения (2) и (4) надо решать совместно с уравнениями (5), (7) и (8).

В случае, когда плотность, а следовательно, и скорость потока постоянны, уравнения (9) и (10) можно написать так

$$G \frac{dg^j}{dx} = v \frac{dc^j}{dx} = \frac{dc^j}{dt} = r^j, \quad (11)$$

$$\frac{G}{\rho} \frac{dT}{dx} = v \frac{dT}{dx} = \frac{dT}{dt} = \sum_1^m H^j r^j - \frac{Q'}{C_p}, \quad (12)$$

где  $H^j = (-\Delta H_j/C_p)$  и  $C_p = \rho c_p$ . Как видно, те же уравнения были получены для адиабатических слоев в предыдущем разделе, за исключением того, что  $Q'$  было равно нулю. Заметим, что  $x$  будет измеряться от конца реактора вытеснения в соответствии с условием, принятым в разд. 2.4. Это означает, что знак у  $x$  или  $t$  надо изменить на обратный, тогда

$$\frac{dc^j}{dt} = -r^j, \quad j = 1, \dots, m, \quad (13)$$

$$\frac{dT}{dt} = -\sum_1^m H^j r^j + Q, \quad (14)$$

где  $Q = Q'/C_p = Q^*P/C_p$ . В этом случае, если общее время пребывания в реакторе  $\theta$ , то входные величины нужно обозначать через  $c^j(\theta)$ ,  $j = 1, \dots, m$ ;  $T(\theta)$ .

### 3.5. Цепочка реакторов с мешалками как модель реактора вытеснения

Если уравнения (3.2.9) напишем в виде

$$\frac{c_{r+1}^j - c_r^j}{\theta_r} = -r^j, \quad (1)$$

то очевидно, что при  $\theta_r \rightarrow 0$  они перейдут в уравнения (3.4.13)

$$\frac{dc^j}{dt} = -r^j, \quad (2)$$

которые описывают реактор вытеснения с непрерывной переменной  $t$ , отсчитываемой от конца. Следовательно, можно ожидать, что реактор вытеснения представляет собой предел бесконечного числа бесконечно малых реакторов с мешалками. Однако Амундсен, Кост и Радд [5] показали, что более интересная модель возникает, если взять большое число малых реакторов с мешалками, так как при подходящем выборе размеров может быть сконструирована модель реактора вытеснения с продольной диффузией. Посмотрим, как это делается в простейшем случае.

Рассмотрим последовательность идентичных реакторов с мешалками с одной и той же температурой, в которых происходит необратимая реакция  $A \rightarrow B$  первого порядка. Если начальная концентрация  $A$  равна 1, а степень завершенности реакции равна  $c^1$ , то концентрация  $A$  в любой момент времени есть  $c = 1 - c^1$ . Примем ее за новую переменную. Тогда

$$r^j = kc_r$$

и

$$c_{r+1} = c_r (1 + k\theta), \quad (3)$$

где  $\theta$  — общее время пребывания в реакторе. Если в цепочке имеется  $R$  стадий, то концентрация  $A$  потока на выходе равна

$$c_1 = (1 + k\theta)^{-R}, \quad (4)$$

так как  $c_{R+1} = 1$ .

Теперь рассмотрим реактор идеального вытеснения с однородным потоком, но с продольной диффузией. Пусть кажущийся коэффициент диффузии равен  $D$ , тогда получим уравнение

$$D \frac{d^2c}{dx^2} + v \frac{dc}{dx} - kc = 0. \quad (5)$$

Если общая длина реактора равна  $L$ , то уравнение (5) можно решить при начальных условиях

$$\begin{aligned} \frac{D}{v} \frac{dc}{dx} + c &= 1 \quad \text{при } x = L, \\ \frac{dc}{dx} &= 0 \quad \text{при } x = 0. \end{aligned}$$

Однако если считать, что значение  $L$  очень велико в сравнении с  $D/v$ , эти условия упрощаются, тогда можно решать уравнение (5) с условиями  $c = 1$  при  $x = L$ , где  $c$  становится малым при  $x \rightarrow 0$ . Решение этого уравнения есть

$$c = \exp[-m(L-x)], \quad (6)$$

где  $m$  положительный корень уравнения

$$Dm^2 + vm - k = 0, \quad (7)$$

Таким образом, при  $x = 0$

$$c(0) = \exp[-mL]. \quad (8)$$

Пусть цепочка малых реакторов с мешалками с числом ступеней  $R$  эквивалентна реактору идеального вытеснения длиной  $L$ . Условия эквивалентности — одинаковое время пребывания в реакторе в обоих случаях ( $L = R\theta v$ ) и равенство выходных концентраций. Тогда из уравнений (4) и (8) имеем

$$(1 + k\theta)^{-R} = \exp[-mv\theta R]$$

или

$$mv\theta = \ln(1 + k\theta). \quad (9)$$

Пусть

$$\bar{\omega} = \frac{v^2\theta}{2D} \quad \text{и} \quad \delta = \frac{2kD}{v^2}. \quad (10)$$

Здесь  $\omega$  есть число Пекле, определяемое по длине реактора вытеснения  $v\theta/2$ , что соответствует половине цепочки реакторов с мешалками. Тогда по уравнению (7)

$$m v \theta = \bar{\omega} [V \sqrt{1 + 2\delta} - 1]$$

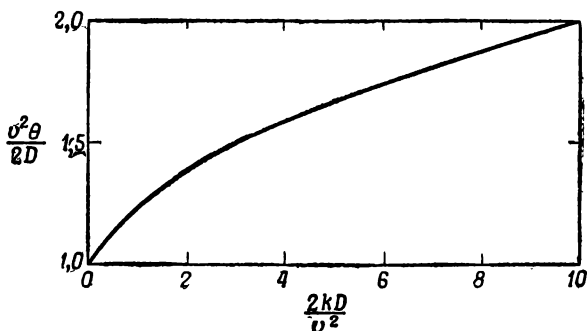
и

$$k\theta = \bar{\omega}\delta.$$

Таким образом, уравнение (9) есть уравнение для  $\bar{\omega}$  как функция от  $\delta$ :

$$\bar{\omega} [V \sqrt{1 + 2\delta} - 1] = \ln(1 + \bar{\omega}\delta). \quad (11)$$

При данном коэффициенте диффузии  $D$  можно найти размеры реакторов с мешалками, дающие точную модель реактора вытеснения для этой конкретной реакции.



Фиг. 2. Размер реактора с мешалками для модели реактора вытеснения с диффузией.

Зависимость  $\bar{\omega}$  от  $\delta$  представлена кривой на фиг. 2. Для низких скоростей реакций  $\bar{\omega}$  очень близко к 1, что соответствует модели с неподвижным слоем, предложенной Амундсенем и Арисом [3]. Разумеется, гораздо более рискованным является предположение, что эта модель может применяться в более общем случае. Можно выдвинуть два аргумента для обоснования применения принятой нами аналогии. Во-первых, мы можем указать, что в неподвижных слоях так называемая продольная диффузия играет важную роль при раздроблении пото-

ков, при рекомбинации около частиц и при смешивании в промежутках между частицами слоя. Даже эффект внутренней диффузии с изменением потока, как показано Тейлором [52], эквивалентен возникновению продольной диффузии. Если, далее, диффузия имеет гидродинамическую природу, то это приведет к тому, что для всех компонентов и температур будет один и тот же коэффициент диффузии. Очевидно, что выполнение этих условий необходимо, если мы рассчитываем получить удачную модель. Во-вторых, мы можем рассматривать  $c_r^j$  как функции от непрерывного переменного  $x = r\theta/v$  и разложить  $c_{r+1}^j$  в уравнении (1) в ряд Тейлора. Тогда

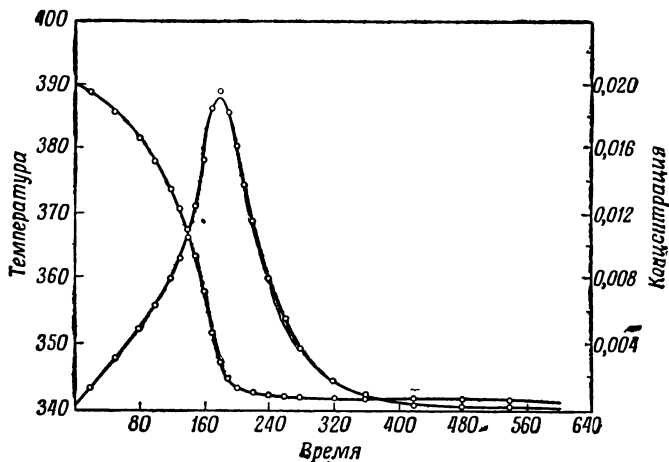
$$\frac{v^2\theta}{2} \frac{d^2 c^j}{dx^2} + v \frac{dc^j}{dx} + r^j = O(\theta^2).$$

Взяв конечную малую величину  $\theta$ , так что можно пренебречь членами порядка  $\theta^2$ , можем написать

$$D \frac{d^2 c^j}{dx^2} + v \frac{dc^j}{dx} + r^j = 0, \quad (12)$$

где  $D = v^2\theta/2$ . Мы пришли к уравнению реактора вытеснения с диффузией, и выбор  $\theta$  соответствует введению числа Пекле  $\omega = 1$ . Амундсен, Кост и Радд [5] предложили гораздо более удачную модель, чем можно было ожидать. Они сравнили в основных деталях решения уравнений (1) и (12) и связанные с ними уравнения для температуры. Это связано с определенными трудностями, поскольку уравнение (12) имеет два граничных условия: одно на входе  $x = L$  и другое на выходе  $x = 0$ . Поэтому для численного интегрирования уравнения (12) необходимо подобрать производную при  $x = L$  и проинтегрировать до  $x = 0$ . Если это не приведет к удовлетворению условия при  $x = 0$ , то нужно сделать другой выбор начальной производной. К сожалению, такой процесс решения обречен на неудачу, так как для отыскания решения требуется слишком много времени. Но если используется модель реактора с мешалками при  $\bar{\omega} = 1$ , то начальные условия известны точно и уравнения (3.2.9) и (3.2.10) можно решать, не пользуясь методом проб. Используя начальные значения функции и ее производ-

ной из модели реактора с мешалками, можно проинтегрировать уравнение (12) и связанное с ним уравнение температуры от  $x = 0$  до  $x = L$ . В этом направлении численное интегрирование устойчиво и с большой степенью точности подтверждает выбранную модель. Типичный результат расчета показан на фиг. 3, где блестяще



Фиг. 3. Сравнение профиля концентраций и температур для реактора вытеснения и для цепочки реакторов с мешалками.

- значения, относящиеся к модели реактора с мешалками; — результаты интегрирования назад уравнения диффузии реактора вытеснения.

проиллюстрированы преимущества обратного интегрирования и неустойчивость прямого интегрирования. Это убеждает нас в правильности принятой модели и показывает, насколько важна задача оптимального проектирования цепочки идентичных реакторов с мешалками.

### 3.6. Реактор периодического действия

В реакторе периодического действия в сосуд помещают данные количества веществ и оставляют их взаимодействовать. Реактор может быть снабжен охлаждаю-

щим или нагревающим змеевиком и оборудованием для размешивания; реакция управляется нагреванием или охлаждением и временем, в течение которого протекает реакция. В современной химической технологии наблюдается тенденция отхода от периодических процессов к использованию реакторов непрерывного действия. Однако периодические процессы еще используются как составная часть в цепи операций, повторяющихся с циклом, постоянным по времени. Экономичность таких операций в большой степени зависит от затрат, необходимых для выгрузки и загрузки реактора. Существует формальное сходство между временем от начала периодической реакции и временем, прошедшим с момента входа в реактор вытеснения. Поэтому для реактора периодического действия материальный баланс и баланс энергии на элементарном участке приводит к тем же уравнениям, которые были получены в разд. 4. Следует заметить, однако, что для реактора периодического действия скорость теплоотвода  $Q$  — гораздо более гибкая величина. Это обусловлено тем, что легче изменять скорость охлаждающего потока во времени, чем по длине реактора вытеснения. При необходимости для реактора периодического действия можно также дополнительно ввести охлаждение змеевиком.

Формальное подобие, о котором говорилось выше, позволяет перенести сюда уравнения материального и теплового баланса (3.4.11—3.4.14) для реактора вытеснения. Уравнение моментов здесь не существенно. Надо, однако, четко различать периодический реактор, работающий при постоянном объеме, от реактора, работающего при постоянном давлении. Для последнего характерны уравнения (3.4.12) и (3.4.14), которые получены из теплового баланса. В первом случае также добавляется внутреннее изменение энергии. Итак, в этом случае  $c_p$  нужно заменить на  $c_v$  и внутренняя энергия реакции заменяет теплосодержание реакции. Эти изменения представляют собой лишь переинтерпретацию  $H^j$  и  $Q^1$ ), так что можно оставить уравнения в прежнем виде.

<sup>1)</sup> Под  $H^j$  понимается теперь внутренняя энергия, а под  $Q = Q^*/c_p$ . — Прим. ред.

В дальнейшем мы будем использовать их в виде

$$\frac{dc^j}{dt} = -r^j, \quad j = 1, \dots, m, \quad (1)$$

$$\frac{dT}{dt} = -\sum_1^m H^j r^j + Q, \quad (2)$$

где  $Q$  пропорционально скорости теплоотвода, а  $t$  — время до окончания процесса.

### 3.7. Охлаждение

Позднее нам понадобится уравнение для скорости теплоотвода, и здесь уместно кратко остановиться на нем. Предположим, что охлаждение происходит в теплообменнике, чаще всего имеющем форму трубы, через которую течет охлаждающий агент. Если локальная температура реагирующих веществ есть  $T$ , а температура охлаждающего агента  $T_c$ , то скорость теплопередачи на единицу площади равна  $k(T - T_c)$ . Величина, обратная коэффициенту  $k$ , есть сопротивление потоку тепла. Это сопротивление складывается из трех компонент. Первая — сопротивление, обусловленное реагирующими веществами, которое зависит от их свойств и состояния потока. Вторая — сопротивление стенок трубы, которое обычно очень мало. Третья — сопротивление охлаждающего агента, зависящее от свойств и состояния потока охлаждающего агента и размеров трубы. Для последнего сопротивления наиболее известным является следующее соотношение  $(d/U^4)^{1/4}$ , где  $d$  — диаметр трубы, а  $U$  — линейная скорость охлаждающего агента.

Если реактор с мешалкой, имеющий температуру  $T$ , охлаждается змеевиком, выполненным из трубы длиной  $l$  и диаметром  $d$ , то теплоотвод можно вычислить следующим образом. На протяжении длины  $\Delta x$ , отстоящим на расстоянии  $x$  от входа, количество тепла, переданного в единицу времени, равно

$$\Delta Q = k(T - T_c) \pi d \Delta x,$$

где  $T_c$  — температура охлаждающего агента в точке  $x$ . При этом температура охлаждающего агента возрастает



на  $\Delta T_c$  и

$$\Delta Q = U\pi d^2 \rho_c c_{pc} \Delta T_c / 4.$$

Здесь  $\rho_c$  и  $c_{pc}$  есть плотность и удельная теплоемкость охлаждающего агента. В пределе имеем

$$\frac{dQ}{dx} = \frac{U\pi d^2 \rho_c c_{pc}}{4} \frac{dT_c}{dx} = k\pi d (T - T_c). \quad (1)$$

Если охлаждающий агент входит с температурой  $T_{c1}$  и уходит с температурой  $T_{c2}$ , то

$$\ln \frac{T - T_{c1}}{T - T_{c2}} = \frac{4kl}{dU\rho_c c_{pc}} = \chi. \quad (2)$$

При этом полная скорость теплоотвода будет равна

$$Q = k(\pi dl)(T - T_{c1}) \frac{1 - e^{-\chi}}{\chi}. \quad (3)$$

Если бы охлаждающий агент всюду имел температуру  $T_{c1}$ , то последнее выражение превратилось бы в дробь  $(1 - e^{-\chi})/\chi$ .

## ГЛАВА 4

### ФУНКЦИЯ ВЫГОДЫ

Как уже отмечалось в введении, мы вынуждены рассматривать не столь общие задачи, как нам хотелось бы, и поэтому ограничимся лишь изучением химических реакторов. В настоящей главе дается краткое описание различных функций выгоды и их применения к оптимальным задачам. В дальнейшем мы не намереваемся выделять функции выгоды в совершенно самостоятельный класс; мы лишь постараемся показать, как они могут быть построены, исходя из разумных реальных норм. Наиболее простые задачи часто являются частными конкретными случаями более общей проблемы, но такие случаи также представляют интерес.

#### 4.1. Стехиометрические функции выгоды

Под стехиометрическими функциями выгоды мы понимаем такие функции, которые связаны лишь с изменением концентрации компонентов. Так, если концентрация  $A_i$  в поступающем потоке равна  $c_{if}$ , а в выходящем потоке —  $c_{ip}$ , то стехиометрическая функция выгоды имеет вид

$$P(c_{1p} - c_{1f}, \dots, c_{np} - c_{nf}). \quad (1)$$

В простейшем случае мы стремимся максимизировать производство одного конкретного вещества, скажем  $A_1$ . Если  $q$  — скорость потока через реактор, то прирост продукции  $A_1$  в единицу времени равен  $q(c_{1p} - c_{1f})$ . Заметим, что  $q$  играет несколько иную роль по сравнению с другими переменными, характеризующими режим работы, так как ее нельзя менять от стадии к стадии. Если нам нужно найти оптимальное значение  $q$  для много-

стадийного процесса, мы должны сначала найти оптимальный режим при данном  $q$  и соответствующий максимум функции выгоды. Далее, процесс оптимизации повторяется вплоть до нахождения такого  $q$ , которое дает наибольший максимум. Однако это совсем необязательно при стехиометрической функции выгоды, так как напомним, что в уравнения для различных типов реакторов входит лишь время пребывания в реакторе. (Исключение составляет полная система уравнений для реактора вытеснения.) Это время равно отношению объема стадии к скорости потока  $q$ , так что если известно оптимальное значение времени пребывания в реакторе, то известно и оптимальное значение объемов для любого значения  $q$ . Отсюда следует, что если максимизировать функцию выгоды  $(c_{1p} - c_{1f})$ , то мы получим оптимальный режим для максимизации производства  $A_1$ . Если производство  $A_1$  должно фиксироваться на определенном уровне, то этот режим минимизирует скорость потока, необходимую для достижения этого уровня.

Другой пример стехиометрической функции выгоды возникает, если перед нами стоит задача максимизировать производство одного вещества, скажем  $A_1$ , по отношению к использованию другого, например  $A_2$ . В этом случае надо составить следующую функцию выгоды:

$$P = \frac{c_{1p} - c_{1f}}{c_{2f} - c_{2p}}. \quad (2)$$

Другой подход к решению задачи состоит в использовании множителя Лагранжа. Если максимизировать функцию

$$P = (c_{1p} - c_{1f}) + \mu (c_{2p} - c_{2f}), \quad (3)$$

то отношение (2) будет зависеть от  $\mu$  и останется лишь максимизировать это отношение по  $\mu$ .

## 4.2. Материальные функции выгоды

Под материальной функцией выгоды мы будем понимать такую, которая связана с увеличением стоимости потока. Если пренебречь расходами на смешивание или

разделение веществ, то увеличение стоимости потока можно записать в виде

$$P = \sum_1^n v_i (c_{ip} - c_{if}), \quad (1)$$

где  $v_i$  — цена единичного количества вещества  $A_i$ . Эту функцию выгоды можно также выразить через разность степени превращения в выходящем и поступающем потоках (обозначим соответствующие степени превращения через  $c_p^j$  и  $c_f^j$ ).

При этом

$$c_{ip} - c_{if} = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} (c_p^j - c_f^j). \quad (2)$$

Тогда

$$P = \sum_1^m V_j (c_p^j - c_f^j), \quad (3)$$

где

$$V_j = \sum_{i=1}^n v_i \alpha_{ij}$$

есть увеличение стоимости, выраженное в единицах увеличение степени завершенности  $j$ -й реакции. Основная реакция, для которой проектируется процесс, будет иметь положительную стоимость, но возможны нежелательные побочные реакции. Если их результат имеет нулевую или отрицательную стоимость, то соответствующее  $V_j$  будет отрицательным, учитывая наше условие о знаке стехиометрических коэффициентов.

Не всегда возможно оценивать смесь стоимостью ее компонент: цена разделения их или удаление одной или двух из них могут быть нелинейными функциями от концентраций. Таким образом, материальная функция выгоды в общем случае должна иметь вид

$$P = v(c_{1p}, \dots, c_{np})$$

или

$$P = v(c_{1p}, \dots, c_{np}) - v(c_{1f}, \dots, c_{nf}), \quad (4)$$

где  $v$  — некая кусочно гладкая функция. Из постановки конкретной технической задачи мы можем получить

большую реальную информацию о такой функции. Если, например, необходимо, чтобы результирующая концентрация удовлетворяла определенным требованиям, а именно

$$c_{n*} \leq c_{np} \leq c_n^*$$

то можно положить  $v \equiv 0$  для  $c_n$  вне этого интервала. Это особенно полезно в том случае, когда мы не хотим допустить образование нежелательных побочных продуктов выше определенного допустимого уровня.

Если продукт из реактора идет в аппарат для разделения, например экстракционную или дистилляционную колонну, то в качестве  $v$  можно взять цену продукта после разделения за вычетом стоимости самого процесса разделения. Когда для аппарата для разделения используется оптимальный режим, то принцип оптимальности показывает, что такой режим по отношению к данной функции выгоды для всего реактора должен соответствовать оптимальному режиму и этого аппарата в отдельности.

### 4.3. Функции выгоды и расход на операцию

Чтобы построить более реалистическую функцию выгоды, из материальной функции выгоды в общем виде вычтем существенные расходы на операцию, о которых можно говорить лишь в общем, ибо компоненты этих расходов имеют специфическую природу, вероятно даже зависящую от данной частной компании. В следующем разделе будет дана оценка расходов. Расходы на операцию могут быть грубо разделены на четыре категории.

**1. Капитальные и эксплуатационные расходы.** Капитальные расходы на реактор зависят от числа стадий, их сложности и условий работы, а также от скорости и свойств реагирующего потока. Эти затраты на строительство реактора окупаются через определенный период из дохода установки. Из опыта известны некоторые соображения относительно видов эксплуатационных расходов, необходимых для различных типов реакторов, и времени выхода реакторов из строя. Все эти факторы должны рассматриваться вместе с установлением

полезной жизни всей установки и текущими экономическими предпосылками для получения числа  $C_1$  — комбинированной цены на единицу времени с учетом всех этих расходов.

**2. Расходы на поток.** Под ними подразумеваются расходы на поддержание необходимой скорости потока и давления в системе. Эти расходы зависят от скорости потока и требуемого давления, а также, что труднее учесть, от оснащенности установки. Естественно, некоторые общие принципы оснащенности и планировки влекут за собой (это будет предполагаться) установление расходов. Что касается таких деталей, как диаметр труб или установление промежуточной компрессии, их оптимальные значения часто точно известны и могут быть использованы. Всё это должно быть сведено к одной цифре  $C_2$  — расходы на поддержание потока за единицу времени.

**3. Тепловые расходы** включают расходы на нагревание или охлаждение потока, по подводу или отводу тепла из реактора. Цена изоляции и капитальные расходы на теплообменники должны быть включены в  $C_1$ , а сюда относится снабжение топливом или охлаждающей водой. Тепловые расходы на единицу времени  $C_3$  зависят в первую очередь от скорости потока и от рабочих температур.

**4. Расходы на управление.** Расходы на оснащение приборами и управление реактором оценить значительно труднее. Они зависят от числа и сложности стадий, но при этом может потребоваться также рассмотрение естественной устойчивости требуемого положения равновесия. Оптимальный режим, не включающий расходы на контроль, может привести к неустойчивому способу управления, при котором эти расходы могут стать настолько большими, что при их учете мы получим существенно другой оптимальный режим. В эти расходы  $C_4$  входит также зарплата рабочих, участвующих в производстве.

Суммируем теперь расходы для получения общей функции выгоды. Если  $\lambda$  есть время функционирования реактора (фактор, который был включен в установление

расходов  $C_1$ ), то чистый доход за единицу времени равен

$$P = \lambda q \{v(c_p) - v(c_f)\} - \{C_1 + C_2 + C_3 + C_4\}. \quad (1)$$

Можно сформулировать один общий принцип детальной оценки: в проекте мы должны добиваться минимальных расходов по всем пунктам.

#### 4.4. Пример оценки расходов

Чтобы показать некоторые компоненты расходов, приведем пример, рассмотренный Вестбруком [53]. Рассматривается один реактор с мешалкой, причем реагирующие вещества обладают физическими свойствами, похожими на бензол. Стоимость конструкции надо выразить через величины:  $q$  — скорость,  $м^3/час$  и  $T$  — температура,  $^{\circ}C$ . Если  $\theta$  — время пребывания в реакторе, измеряемое в часах, объем реактора будет равен

$$V = q\theta \text{ м}^3. \quad (1)$$

Реактор состоит из цилиндрической обечайки, длина которой в 1,75 раз больше диаметра, завершенной полуэллипсоидами. Следует также принять во внимание 5%-ную надбавку на внешний теплообменник. Итак, если  $d$  — диаметр цилиндрической части в метрах, то

$$V = 1,70d^3 \text{ м}^3. \quad (2)$$

Диаметр можно варьировать в пределах

$$0,38 \text{ м} < d < 2,95 \text{ м}. \quad (3)$$

Если диаметр превзойдет верхний предел, то процесс придется провести в параллельных аппаратах. Для оценки стоимости установки сосуда предполагается, что его следует поднять на трехметровую высоту и поддерживать фланцем того же диаметра и толщины. Это, разумеется, не точный проект поддерживающей конструкции, поскольку необходим учет размеров и веса сосуда. Для поддержания реагирующих веществ в жидком состоянии реактор должен работать под давлением, превышающим давление их паров. Давление паров дается формулой

$$P = 3,45 \times 10^6 \times 10^{-1750/(T+273)} \text{ кг/см}^2.$$

Однако значительно удобнее следующее выражение, которое хорошо подходит к нашим условиям:

$$P = 10^{-4} (1,8T + 32)^3 \text{ кг/см}^2. \quad (4)$$

В проекте рассчитано минимальное давление  $150 \text{ кг/см}^2$ , причем проектное давление на  $75 \text{ кг/см}^2$  больше, чем применяемое рабочее. Итак, проектное значение давления есть

$$p_d = \begin{cases} 150 \text{ кг/см}^2, & T \leq 93^\circ \text{C}, \\ 75 + 10^{-5} (1,8T + 32)^3 \text{ кг/см}^2, & T \geq 93^\circ \text{C}. \end{cases} \quad (5)$$

Стоимость конструкции сосуда под давлением можно установить, исходя из его веса. Для нахождения веса надо вычислить толщину стенок по формуле

$$t = \frac{p_d d}{2s} + 0,32 \text{ см} \quad (6)$$

для цилиндрических стенок и

$$t = \frac{p_d d}{4s} + 0,32 \text{ см} \quad (7)$$

для крышки и днища реактора. Здесь  $s$  — допустимая нагрузка в первом приближении, ее можно считать равной  $48\,000 \text{ кг/см}^2$ , если температура ниже  $260^\circ \text{C}$ . Принимаем допуск на коррозию равным  $0,32 \text{ см}$ .

Наконец, площадь поверхности равна  $4,70 \text{ д}^2 \text{ м}^2$  для цилиндра и  $2,46 \text{ д}^2 \text{ м}^2$  для крышки и днища реактора. Объединяя все эти данные, получим выражение общего веса конструкции

$$W = (0,0363d^3 + 0,053d^2) p_d + 4,47d^2 + 6,4d \text{ кг}. \quad (8)$$

Стоимость стальной конструкции сосуда связана с весом и в соответствии с ценами 1959 г. равна

$$C_r = 6,3W^{0,782} \text{ долл.} \quad (9)$$

Итак, мы выразили стоимость конструкции через  $d$  и  $T$ :

$$C_r = \begin{cases} 6,3 (54,5d^3 + 12,42d^2 + 6,4d^{0,782}), & T \leq 93^\circ \text{C}, \\ 6,3 \{ (0,0363d^3 + 0,053d^2) [75 + 10^{-5} (1,8T - 32)^3] + \\ \quad + 4,47d^2 + 6,4d \}^{0,782}, & T \geq 93^\circ \text{C}. \end{cases} \quad (10)$$



К этому следует добавить стоимость изоляции, которая аналогично вычисляется так:

$$C_i = \begin{cases} 0, & T \leq 93^\circ \text{C}, \\ (175 + 0,24T) d^2, & T \geq 93^\circ \text{C}. \end{cases} \quad (11)$$

Расходы на лестницы, платформу и соответствующий принятой конструкции фундамент составляют

$$C_m = 1000 + 300d \text{ долл.} \quad (12)$$

Оборудование для размешивания при среднем режиме работы оценивается в 2 л. с. на 1 м<sup>3</sup> смеси, что с учетом стоимости установки мотора мешалки дает

$$C_s = 750V^{0,3} \text{ долл.} \quad (13)$$

Итак, оценка стоимости реактора  $C_r + C_i + C_m + C_s$ , исключая внешний теплообменник, выражается через  $d$  и  $T$  комбинированием уравнений (10)—(13). Все это требует внимательного изучения литературы по вопросам торговли и установления самых последних изменений в ценах. Более детальное исследование этого вопроса выходит за рамки данной книги, но это необходимо для построения предлагаемых здесь функций выгоды. Такой анализ требует терпения и хватки. Эти качества были проявлены Вестбруком, результаты которого резюмировались в данном разделе. Даже если этот анализ приводит к очень громоздким выражениям, он не представляет особых затруднений для решения задач с помощью счетных машин. Поэтому можно успешно справляться с задачами любой сложности.

#### 4.5. Отношение функции выгоды к задаче оптимизации

Мы отмечали, что очерченные нами классы функций выгоды вполне могут быть изменены. Однако полезная классификация оптимальных задач получается лишь в том случае, когда на границы классификации функций выгоды не наложены слишком жесткие ограничения. В следующих главах будут рассмотрены различные типы реакторов и будет построен ряд полезных примеров. Эти

примеры выявят характерные черты систем реакторов и приведут к обсуждению более общих вопросов. Следует напомнить, однако, что метод решения задачи и принятая функция выгоды, используемые для одной конкретной системы реакция — реактор, не обязательно подходят для другой такой системы. Таким образом, всегда имеется возможность проявить изобретательность и проницательность при решении любой конкретной задачи.

В общем случае оптимальный режим  $R$ -стадийного процесса не требует оптимальных одностадийных условий на каждой стадии. Принцип оптимальности утверждает лишь, что каждый сочлененный  $r$ -стадийный режим должен быть оптимальным при  $r \leq R$ . Оптимальный режим, для которого на каждой стадии часть переменных, характеризующих режим работы, выбирается оптимальным образом в смысле одностадийного процесса, называется несвязным по отношению к этой части переменных. Несвязность режима зависит от используемой функции выгоды и может быть нарушена при применении более полной функции выгоды. Единственный найденный случай полной несвязности — это случай одной реакции с линейной (или монотонной) материальной функцией выгоды.

Мы обычно строили функцию выгоды как меру дохода. Она должна была быть максимизирована. Однако иногда важно считать функцию выгоды мерой расходов и минимизировать ее. В некоторых случаях одну и ту же задачу можно сформулировать двумя способами, дуальными по отношению друг к другу. Так, если мы ищем минимум времени пребывания в реакторе для получения данного превращения, мы решаем задачу, дуальную к задаче нахождения максимума превращения при данном времени пребывания в реакторе. Существование дуальности — полезный факт, но он нуждается в тщательной проверке, как, например, у Амундсена и Байлоуса [4].

**РЕАКТОР НЕПРЕРЫВНОГО ДЕЙСТВИЯ С МЕШАЛКОЙ**

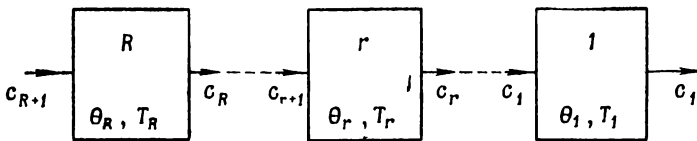
В этой главе рассматриваются задачи, связанные с цепочкой реакторов с мешалками. Оптимальный режим работы заключается в выборе времени пребывания в реакторе и температуры на каждой стадии таким образом, чтобы конечное превращение было наиболее выгодным. Можно было бы также рассматривать давление в качестве переменной, характеризующей режим работы, которое можно выбирать на каждой стадии. Во многих случаях температура является важнейшей переменной и оптимум относительно нечувствителен к изменению времени пребывания в реакторе. Сначала покажем несвязный характер оптимального температурного режима в случае, когда имеет место только одна реакция. Это может быть использовано для упрощения решения задач с одной реакцией. Далее, перед тем как дать общий метод решения, будут упомянуты две последовательные реакции и система четырех реакций, впервые предложенная Денбигом. Наконец, будет частично рассмотрена задача, где часть исходного продукта поступает непосредственно на последующие стадии, минуя предыдущие.

**5.1. Несвязный характер оптимального температурного режима при одной реакции**

Сначала покажем, что в случае одной реакции температура должна всегда выбираться так, чтобы скорость реакции была максимальной. Это было давно известно из эксперимента или предполагалось, исходя из «здравого смысла», но фактически это условие требует математического доказательства, которое нетрудно провести.

В гл. 3 было показано, что если  $c_i$  есть концентрация химического вещества  $A_i$ , которое участвует в реакции

$\sum_1^n \alpha_i A_i = 0$ , то  $c_i = c_{i0} + \alpha_i c$ , где  $c_{i0}$  — начальная концентрация, а  $c$  — степень завершенности реакции. Скорость реакции  $r(c, T)$  определяется как производная по времени от  $c$  и является функцией  $c$  и  $T$ . (Предполагаем, что давление и начальный состав постоянны.) Цепочка из  $R$  реакторов пронумерована от конца к началу (см. фиг. 1), и индекс  $r$  обозначает величину, относящуюся к реактору  $r$  от конца (см. фиг. 1).



Фиг. 1. Цепочка реакторов с мешалками.

Так же, как и в разд. 3.2, имеем уравнения

$$c_{r+1} = c_r - \theta_r r(c_r, T_r), \quad r=1, \quad R, \quad (1)$$

где  $\theta_r$  — время пребывания в реакторе  $r$ . Для температуры имеются некоторые ограничения

$$T_* \leq T_r \leq T^*. \quad (2)$$

Мы будем рассматривать функцию выгоды простейшего типа либо стехиометрическую, либо материальную. В первом случае надо максимизировать конечную степень завершенности реакции  $c_1$ , то же самое требуется и во втором случае, если функция выгоды монотонно возрастает по  $c_1$ . Представляет интерес задача нахождения оптимального режима при некотором ограничении на общее время пребывания в реакторе, скажем

$$\sum_1^R \theta_r = \Theta, \quad (3)$$

ибо если нет никаких ограничений на время пребывания в реакторе, то можно как угодно близко подойти к равновесному состоянию при самой благоприятной температуре, используя достаточно долгое время пребывания

в последнем реакторе. Если для каких-либо целей мы хотим получить фиксированное значение степени превращения в конечном продукте, то можно поставить задачу минимизации общего времени пребывания в реакторе. Окажется, что эти две задачи эквивалентны.

Рассмотрим сначала такой выбор температуры и времени пребывания в реакторе, при котором данное превращение  $c_1$  достигается, исходя из данного состояния поступления  $c_{R+1}$  за минимальное время. Это общее время пребывания в цепочке равно

$$\Theta_R = \sum_1^R \theta_r = \sum_1^R \frac{c_r - c_{r+1}}{r(c_r, T_r)}, \quad (4)$$

а оптимальный режим заключается в выборе  $(2R - 1)$  величин  $T_1, \dots, T_R, \theta_2, \dots, \theta_R$ . Величина  $\theta_1$  не может быть выбрана произвольно, но должна быть такой, чтобы достигалось требуемое превращение  $c_1$ . Если выбор сделан, то значение  $\Theta_R$  зависит только от состояния поступающего продукта  $c_{R+1}$ . Пусть

$$f_R(c_{R+1}) = \min \Theta_R. \quad (5)$$

Тогда по принципу оптимальности

$$f_R(c_{R+1}) = \min \left[ \frac{c_R - c_{R+1}}{r(c_R, T_R)} + f_{R-1}(c_R) \right], \quad (6)$$

где минимум достигается при правильном выборе  $\theta_R$  и  $T_R$  или эквивалентно при выборе  $T_R$  и  $c_R$ .

Из выражения (6) видно, что величина  $T_R$  всегда должна выбираться так, чтобы скорость реакции  $r(c_R, T_R)$  была наибольшей, так как  $T_R$  входит только в первое слагаемое. Обозначим это максимальное значение скорости через  $R(c_R)$ .

Тогда

$$f_R(c_{R+1}) = \min \left[ \frac{c_R - c_{R+1}}{R(c_R)} + f_{R-1}(c_R) \right] \quad (7)$$

и минимизация производится только по  $c_R$ . К этой задаче мы вернемся несколько позже.

Возможны две формулировки задачи максимизации  $c_1$  при ограничении (3). В первой мы используем то

обстоятельство, что максимальная величина  $c_1$  будет зависеть от состояния поступающего продукта  $c_{R+1}$  и общего времени пребывания в реакторе. Пусть

$$g_R(c_{R+1}, \Theta) = \max (c_1 - c_{R+1}). \quad (8)$$

Тогда, учитывая, что

$$c_1 - c_{R+1} = \sum_1^R (c_r - c_{r+1})$$

и используя принцип оптимальности, найдем

$$g_R(c_{R+1}, \Theta) = \max [c_R - c_{R+1} + g_{R-1}(c_R, \Theta - \theta_R)] = \\ = \max [\theta_R r(c_R, T_R) + g_{R-1}(c_R, \Theta - \theta_R)]. \quad (9)$$

Здесь максимум берется по  $\theta_R$  и  $T_R$ , причем  $T_R$ , очевидно, должно максимизировать скорость реакции. При второй формулировке используется множитель Лагранжа и отыскивается максимум выражения

$$(c_1 - c_{R+1}) - \lambda \Theta_R = \sum_1^R [c_r - c_{r+1} - \lambda \theta_r],$$

не принимая во внимание условие (3). Пусть

$$g_{R,\lambda}(c_{R+1}) = \max \sum_1^R [c_r - c_{r+1} - \lambda \theta_r] = \\ = \max \sum_1^R (c_r - c_{r+1}) \left[ 1 - \frac{\lambda}{r(c_r, T_r)} \right]. \quad (10)$$

Тогда, используя принцип оптимальности, получим <sup>1)</sup>

$$g_{R,\lambda}(c_{R+1}) = \max \left\{ (c_R - c_{R+1}) \left[ 1 - \frac{\lambda}{r(c_R, T_R)} \right] + g_{R-1,\lambda}(c_R) \right\}, \quad (11)$$

где  $T_R$ , как и в первом случае, должно максимизировать  $r(c_R, T_R)$ .

Сформулируем другую задачу минимизации времени пребывания в реакторе при заданных  $c_1$ ,  $c_{R+1}$ , используя

<sup>1)</sup>  $\Theta_R$ , удовлетворяющее уравнению (11), будет зависеть от  $\lambda$ . Значение  $\lambda$  определяется из условия (3). — Прим. ред.

множитель Лагранжа. Найдём минимум выражения  $\Theta_R - \mu(c_1 - c_{R+1})$  без ограничения на величину  $c_1$ . Для данного  $\mu$  этот минимум будет функцией только от  $c_{R+1}$ , тогда можно написать

$$\begin{aligned} h_{R, \mu}(c_{R+1}) &= \min \sum_1^R [\theta_r - \mu(c_r - c_{r+1})] = \\ &= \min \sum_1^R (c_r - c_{r+1}) \left[ \frac{1}{r(c_r, T_r)} - \mu \right]. \quad (12) \end{aligned}$$

Но теперь очевидно, что

$$g_{R, \lambda}(c_{R+1}) = -\lambda h_{R, 1/\lambda}(c_{R+1}),$$

и, следовательно, обе задачи эквивалентны.

Несколько более общая задача с несвязным температурным режимом возникает, если считать, что общие расходы, которые надо минимизировать на каждой стадии, зависят только от времени пребывания в реакторе. Если бы рассматривались расходы, зависящие также и от температуры, то режим больше нельзя рассматривать как несвязанный.

## 5.2. Цепочка реакторов одинакового размера

Рассмотрим простейший случай реакторов равного (или заранее заданного) размера, хотя он и не требует использования метода динамического программирования. Важность этого частного случая заключается в том, что иногда необходимо использовать идентичные реакторы, а также в том, что такая цепочка является моделью реактора вытеснения с диффузией.

Пусть снова  $R(c)$  обозначает максимальное значение  $r(c, T)$ , достигаемое при  $T = T_m(c)$ , причём

$$T_* \leq T_m \leq T^*.$$

Стоит заметить, что иногда можно получить явное выражение для  $R(c)$ . Особенно важен тот частный случай, когда  $r(c, T)$ , как это обычно предполагается для

гомогенных реакций, имеет вид

$$r(c, T) = k_1(T) \prod_1^n c_i^{\beta_i} - k_2(T) \prod_1^n c_i^{\gamma_i}, \quad (1)$$

где  $\beta_1, \beta_n$  и  $\gamma_1, \dots, \gamma_n$  — показатели, обозначающие порядок прямой и обратной реакций по отношению к каждому веществу. Величины  $\beta_i, \gamma_i$  удовлетворяют соотношениям  $\gamma_i - \beta_i = \alpha_i$ , откуда следует, что в состоянии равновесия

$$\prod_1^n c_i^{\alpha_i} = \frac{k_1}{k_2} = K(T).$$

Величины  $k_1$  и  $k_2$  являются функциями только от  $T$  и имеют вид

$$k_i = k_i^* \exp[-E_i/RT], \quad i = 1, 2. \quad (2)$$

Так как мы ищем максимум при постоянном  $c$ , то все  $c_i$  нужно считать константами. Если максимум лежит в интервале  $(T_*, T^*)$ , то будет выполнено соотношение

$$\frac{\partial r}{\partial T} = \frac{1}{RT^2} \left( E_1 k_1 \prod_1^n c_i^{\beta_i} - E_2 k_2 \prod_1^n c_i^{\gamma_i} \right) = 0. \quad (3)$$

Поскольку  $r$  положительно, первое слагаемое в уравнении (1) больше второго. Следовательно, уравнение (3) не имеет корней при  $E_1 > E_2$ , ибо в этом случае первое слагаемое в уравнении (3) было бы заведомо больше второго и  $\partial r/\partial T$  было бы положительно. Теплота реакции  $\Delta H = E_1 - E_2$  положительна для эндотермических реакций, и, следовательно, для таких реакций максимум скорости всегда достигается при наивысшей возможной температуре  $T^*$ . Однако при экзотермической реакции, для которой  $(-\Delta H) = E_2 - E_1$  положительно, уравнение (3) имеет решение для  $T_m$  в форме

$$\frac{k_1(T_m)}{k_2(T_m)} = K(T_m) = \frac{E_2}{E_1} \prod_1^n c_i^{\alpha_i}. \quad (4)$$

Так как  $E_2 > E_1$  и  $K(T)$  — убывающая функция, уравнение (4) показывает, что  $T_m < T_e$ , где  $T_e$  — температура



равновесного состояния, при которой  $K(T_e) = \prod_1^n c_i^{\alpha_i}$ .

Кроме того, заметим, что в этой точке  $\partial^2 r / \partial T^2$  пропорционально величине

$$E_1^2 k_1 \prod_1^n c_i^{\beta_i} - E_2^2 k_2 \prod_1^n c_i^{\gamma_i}$$

и, следовательно,  $\partial^2 r / \partial T^2$  отрицательно. Итак, здесь экстремум является максимумом. Разрешая уравнение (4) относительно  $T_m$ , получим

$$T_m(c) = \frac{(-\Delta H)}{R} \left[ \ln \frac{k_2^* E_2}{k_1^* E_1} \prod_1^n (c_{i0} + \alpha_i c)^{\alpha_i} \right]^{-1} \quad (5)$$

Если полученное из уравнения (5) значение  $T_m$  меньше  $T_*$ , тогда надо взять  $T_m = T_*$ ; если же оно больше  $T^*$ , то надо взять  $T_m = T^*$ . Введем обозначение

$$p = \frac{E_1}{E_2 - E_1}; \quad (6)$$

тогда при  $T_m(c)$ , лежащем в интервале  $(T_*, T^*)$ , после несложных алгебраических преобразований получим

$$R(c) = \frac{p^p}{(p+1)^{p+1}} \frac{k_1^{*p+1}}{k_2^{*p}} \prod_1^n (c_{i0} + \alpha_i c)^{\beta_i - p\alpha_i}. \quad (7)$$

Если же  $T_m$  лежит вне этого интервала, то  $R(c) = r(c, T_*)$  или  $R(c) = r(c, T^*)$ .

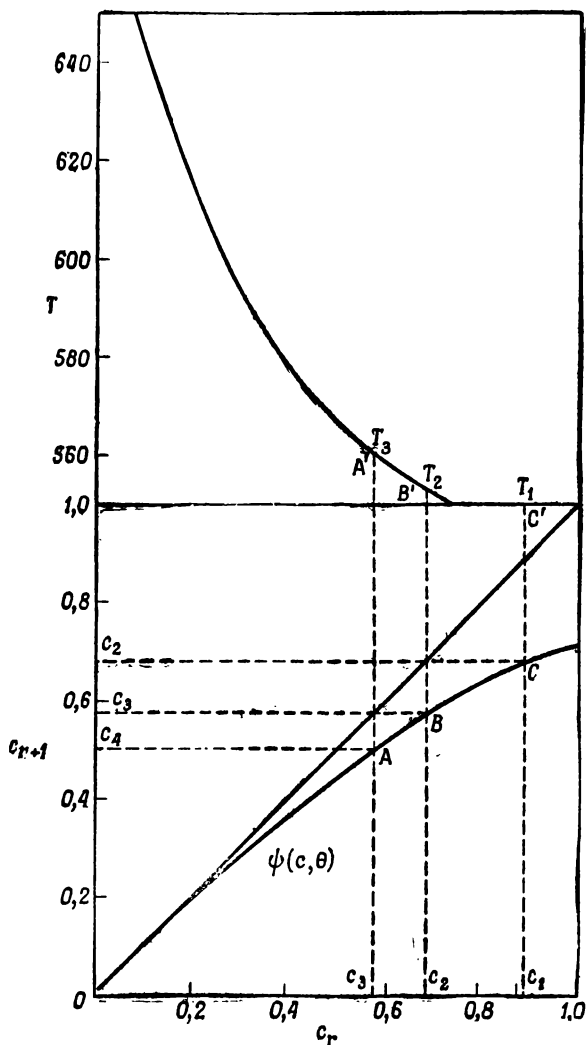
Явное выражение для  $R(c)$  не всегда можно получить, но его всегда можно вычислить либо по формуле, либо из таблиц для  $r(c, T)$ . Так как  $\theta_r$  задано или  $\theta_r = \theta$ , то уравнение (5.1.1) дает выражение  $c_r$  через  $c_{r+1}$ :

$$c_r - \theta R(c_r) = c_{r+1}. \quad (8)$$

Выражая из этого уравнения  $c_r$ , как функцию от состояния питания  $c_{r+1}$ , получим

$$c_r = \psi(c_{r+1}, \theta). \quad (9)$$

Тогда для нахождения  $c_r$  в цепочке реакторов при оптимальном режиме нужно несколько раз применить эту



Фиг. 2. Графический расчет для реакторов с одинаковым временем пребывания в реакторе.

формулу:

$$\begin{aligned} c_R &= \psi(c_{R+1}, \theta_R) \\ c_{R-1} &= \psi(c_R, \theta_{R-1}) \end{aligned} \quad (10)$$

$$c_1 = \psi(c_2, \theta_1).$$

Соответствующие температуры на каждой стадии равны  $T_m(c_r)$ ,  $r = 1, \dots, R$ . На фиг. 2 показан графический метод нахождения этих итераций при трех реакторах одинаковых размеров. В нижней части фигуры дан график кривой  $\psi(c, \theta)$ . Начиная с ординаты  $c_4$ , находим  $c_3$  — абсциссу точки  $A$ . Температура в третьем реакторе соответствует значению  $T_3$  на кривой температур. Продвигаясь по вертикали от  $A$  до прямой  $c_{R+1} = c_R$  и от нее по горизонтали до точки  $B$ , находим  $c_2$  как ординату точки  $B$  и  $T_2$  как ординату соответствующей точки  $B'$ . Следующий этап дает конечный продукт  $c_1$  на выходе и температуру  $T_1$  в последнем реакторе.

Графики на фиг. 2 и 3 основаны на вычислениях для обратимой реакции первого порядка  $A_1 \rightarrow A_2 = 0$ . Для нее можно положить  $c_1 = c$  и  $c_2 = 1 - c$ , взяв  $c_{10} + c_{20}$  за единицу концентрации. Для вычислений взяты значения  $\beta_1 = \gamma_2 = 0$ ,  $\beta_2 = \gamma_1 = 1$  и  $E_1 = 24\,000$ ,  $E_2 = 50\,000$ ,  $\ln k_1^* = 19$ ,  $\ln k_2^* = 41$ . Требуемая температура лежит в интервале значений от  $550$  до  $650^\circ \text{K}$ . Фиг. 3 показывает, как в одну диаграмму можно вложить наибольшую информацию. На ней даны графики нескольких кривых  $\psi$  для различных значений  $\theta$ .

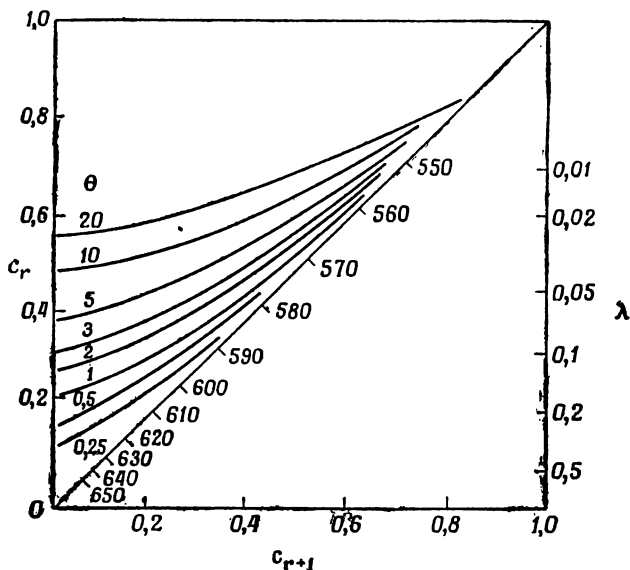
Здесь снова следует начертить ступенчатую линию из горизонтальных и вертикальных отрезков между прямой  $c_r = c_{r+1}$  и кривой, соответствующей данному значению  $\theta$  на этой стадии. Не обязательно иметь отдельный график для  $T_m$ , так как можно нанести соответствующую шкалу на прямую  $c_r = c_{r+1}$  и для любого  $c_r$  по этой шкале находить значение  $T_m$ . Если  $\theta_r$  заданы, но не равны между собой, то на каждом этапе расчета надо использовать кривую именно с этим значением  $\theta$ .

Если расходы на каждой стадии пропорциональны времени пребывания в реакторе, то отыскивается

максимум выражения

$$c_1 - c_{R+1} - \lambda \theta_R = \sum_1^R (c_r - c_{r+1} - \lambda \theta_r).$$

Здесь, очевидно, бесполезно добавлять к этой сумме отрицательные слагаемые, т. е. те, для которых



Фиг. 3. Графический расчет для реакторов с заданным временем пребывания в реакторе.

$(c_r - c_{r+1})/\theta_r = R(c_r) < \lambda$ . Шкала  $\lambda$  или  $R(c_r)$  на фиг. 3 показывает, где следует прервать цепочку реакторов.

### 5.3. Оптимальный выбор температуры и времени пребывания в реакторе при одной реакции

Рассматривая более общую задачу для одной реакции, найдем минимум общего времени пребывания в реакторе, обеспечивающего данную степень превращения. В разд. 5.1 уже было показано, что это эквивалентно нахождению максимума превращения при

данном общем времени пребывания в цепочке реакторов. Следовательно, обе эти задачи целесообразно будет решать одновременно.

Как и прежде, пусть  $f_R(c_{R+1})$  обозначает минимальное общее время пребывания в цепочке реакторов:

$$\Theta_R = \sum_1^R \theta_r = \sum_1^R \frac{(c_r - c_{r+1})}{r(c_r, T_r)},$$

которое требуется для достижения степени превращения  $c_1$  при исходном состоянии  $c_{R+1}$ . Тогда, как мы видели, температурный режим несвязный и принцип оптимальности приводит к уравнению

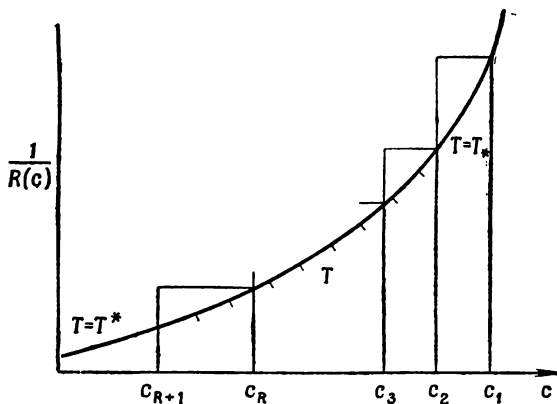
$$f_R(c_{R+1}) = \min \left[ \frac{c_R - c_{R+1}}{R(c_R)} + f_{R-1}(c_R) \right], \quad (1)$$

где минимизация достигается выбором  $c_R$ ,  $c_{R+1} \leq c_R \leq c_1$ . Таким образом, для цепочки из  $R$  реакторов надо сделать  $(R-1)$  выбор  $c_R, c_{R-1}, \dots, c_2$ . Это связано с тем, что не все  $\theta_r$  могут быть выбраны произвольно, если требуется достичь заданной степени превращения  $c_1$ . Последовательность уравнений (1) начинается с определенного выражения для  $\theta_1$ , и при  $R=1$  произвольный выбор невозможен:

$$f_1(c_2) = \frac{c_1 - c_2}{R(c_1)}. \quad (2)$$

Об этой задаче можно сказать несколько больше. Несмотря на то что алгоритм таких итераций очень легко программируется для вычислительных машин, интересно представить результаты решения этой задачи графически. Это графическое представление основано на том факте, что каждый член в выражении для  $\Theta_R$ ,  $(c_r - c_{r+1})/R(c_r)$  есть площадь прямоугольника с основанием  $(c_{r+1}, c_r)$  и высотой, равной ординате кривой  $1/R(c)$  в верхнем конце этого отрезка. Из фиг. 4 видно, что при данных  $c_1, c_{R+1}$  задача состоит в таком выборе промежуточных значений  $c_R, \dots, c_2$ , который минимизирует сумму площадей прямоугольников. В другой форме при максимизации степени превращения задача может быть сведена к вопросу максимизации площади

подобного множества прямоугольников. По существу это и есть тот путь, который был предложен Денбигом [29]. Кроме того, заметим, что так как оптимальная температура зависит только от  $c$ , на кривую  $1/R(c)$  можно нанести шкалу  $T_m(c)$ . Это позволяет сразу же определять оптимальную температуру на том же графике, после

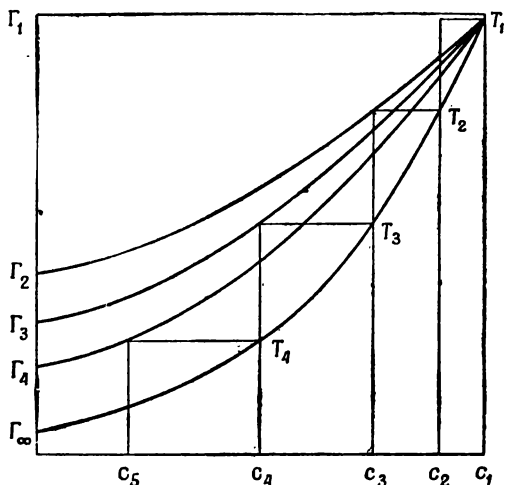


Фиг. 4. Определение времени пребывания в цепочке реакторов.

того как сделан выбор  $c_r$ . В гл. 7 мы увидим, что площадь под кривой представляет минимум времени пребывания в реакторе для реактора вытеснения. Теперь уже совершенно очевидно, что при неограниченном увеличении числа стадий  $R$  реактор вытеснения можно аппроксимировать цепочкой реакторов с мешалками. По этой причине можно совершенно последовательно обозначить кривую  $1/R(c)$  через  $\Gamma_\infty$ , как это сделано на фиг. 5.

Полезно проследить построение оптимального режима по фиг. 5. В случае одного реактора уравнение (2) показывает, что невозможен произвольный выбор времени пребывания в реакторе. В этом случае  $\theta_1$  должно быть площадью прямоугольника с основанием  $(c_2, c_1)$  и высотой  $1/R(c_1)$ . Другими словами, вершина угла  $[c_2, 1/R(c_1)]$  должна лежать на горизонтальной прямой

линии  $\Gamma_1$ , проведенной через точку  $[c_1, 1/R(c_1)]$ . Теперь предположим, что дано  $c_3$  и что тем или иным способом, который будет рассмотрен позднее, сделан оптимальный выбор  $c_2$ ; начертим  $\Gamma_2$  — геометрическое место точек вершин  $[c_3, 1/R(c_2)]$  при различных значениях  $c_3$ . Если кривая  $\Gamma_2$  получена, то  $f_2(c_3)$  можно быстро подсчитать



Фиг. 5. Определение оптимальных времен пребывания в реакторе для цепочки реакторов.

для любого  $c_3$  в интервале  $(0, c_1)$ . (Эту кривую можно начертить, интерполируя по сравнительно небольшому числу точек.) Нужно лишь провести ординату через точку  $(c_3, 0)$  до кривой  $\Gamma_2$ , далее провести горизонтальный отрезок до  $\Gamma_\infty$  и вертикальный до  $\Gamma_1$ . Тогда  $f_2$  есть сумма площадей двух прямоугольников, а  $T_2$  можно найти по шкале, нанесенной на  $\Gamma_\infty$ . Измерения площадей прямоугольников можно избежать, градуировав  $\Gamma_2$  масштабом  $f_2(c_3)$ . Тогда значение  $f_2$  можно определить по этой шкале после нахождения вершины, лежащей на  $\Gamma_2$ . Разумеется,  $\Gamma_1$  можно градуировать подобным же образом. Продолжая тем же способом решать уравнение (1) для  $R = 3, 4, \dots$ , построим последовательность кривых  $\Gamma_3, \Gamma_4, \dots$ , на которых должны лежать левые

верхние углы прямоугольников на 3-й, 4-й, ..., ступенях. Кривая  $\Gamma_r$  — есть геометрическое место точек  $[c_{r+1}, 1/R(c_r)]$ , где  $c_r$  выбирается согласно уравнению (1). Нанесем на кривую  $\Gamma_r$  масштаб  $f_r(c_{r+1})$ .

После этого очень легко найти оптимальный режим с помощью графических построений, как это сделано для  $R = 4$  на фиг. 5. Из точки  $(c_5, 0)$  двигаемся вертикально до  $\Gamma_4$ , горизонтально до  $\Gamma_\infty$ , вертикально до  $\Gamma_3$  и так далее до  $\Gamma_1$ . Значение  $f_4$  находим по шкале на  $\Gamma_4$ , а время пребывания в реакторе на каждой отдельной ступени из разности  $\theta_r = f_r - f_{r-1}$ . Соответствующий температурный режим находится по шкале на  $\Gamma_\infty$ .

До сих пор ничего не было сказано по поводу нахождения  $c_R$  с помощью уравнения (1). Это можно сделать методом проб и ошибок или прямыми численными методами. Неудобство этих методов заключается в том, что минимум здесь довольно неглубокий и его трудно найти точно. Поэтому лучше использовать свойство дифференцируемости всех наших функций и тот факт, что оптимальное значение  $c_R$  должно лежать строго в интервале  $(c_{R+1}, c_1)$ , так как если  $c_R = c_{R+1}$ , то это означает, что имеется лишь  $(R - 1)$  реакторов, а  $c_R = c_1$  означает, что имеется только один реактор. Подходя к задаче с этой точки зрения, мы избавимся и от другой трудности, а именно от того, что кривая  $\Gamma_1$  связана со значением  $c_1$  и должна заново строиться при изменении этого значения.

Заметим сначала, что оптимальный выбор  $c_r$  таков, что

$$\frac{\partial}{\partial c_r} \left( \sum_{s=1}^k \theta_s \right) = 0 \quad \text{при } 2 \leq r \leq k. \quad (3)$$

Это соотношение справедливо при всех  $k \leq R$ . Следовательно,

$$\begin{aligned} \frac{df_R}{dc_{R+1}} &= \frac{\partial}{\partial c_{R+1}} \left( \sum_{s=1}^R \theta_s \right) + \sum_{r=2}^R \frac{\partial}{\partial c_r} \left( \sum_{s=1}^R \theta_s \right) \frac{dc_r}{dc_{R+1}} = \\ &= \frac{\partial}{\partial c_{R+1}} \left( \sum_{s=1}^R \theta_s \right), \end{aligned}$$



так как второй член обращается в нуль согласно уравнению (3), поэтому

$$\frac{df_R}{dc_{R+1}} = -\frac{1}{R(c_R)}. \quad (4)$$

Итак, для минимизации правой части уравнения (1) должно быть выполнено соотношение

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dc_R} \left[ \frac{c_R - c_{R+1}}{R(c_R)} + f_{R-1}(c_R) \right] = \\ & = \frac{1}{R(c_R)} \left[ 1 - c_R \frac{R'(c_R)}{R(c_R)} \right] + c_{R+1} \frac{R'(c_R)}{R^2(c_R)} - \frac{1}{R(c_{R-1})} = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Рассмотрим семейство кривых

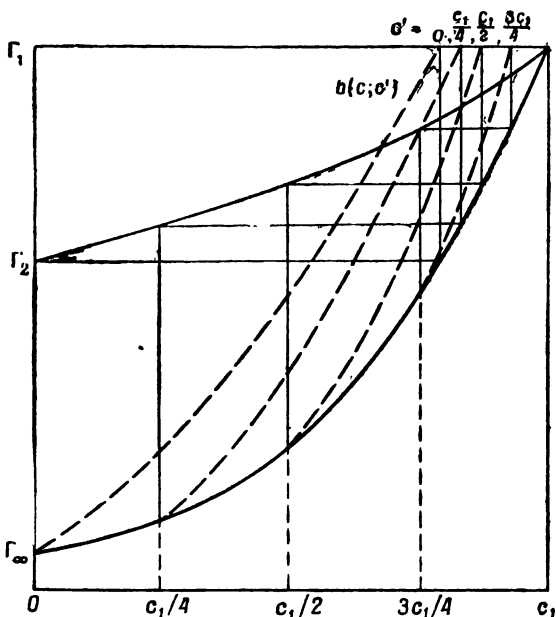
$$h(c; c') = \frac{1}{R(c)} \left[ 1 - c \frac{R'(c)}{R(c)} \right] + c' \frac{R'(c)}{R^2(c)}. \quad (6)$$

Тогда условие минимизации (5) следующее:

$$h(c_R; c_{R+1}) = \frac{1}{R(c_{R-1})}. \quad (7)$$

Но точка  $[c_R, 1/R(c_{R-1})]$  лежит на кривой  $\Gamma_{R-1}$ , следовательно, при данном  $c_{R+1}$  оптимальное значение  $c_R$  есть абсцисса точки пересечения  $\Gamma_{R-1}$  с той кривой из семейства  $h$ , которая соответствует данному  $c_{R+1}$ . На фиг. 6 показаны четыре кривые этого семейства, соответствующие значениям  $c' = 0, c_1/4, c_1/2, 3c_1/4$ . Далее,  $\Gamma_1$  есть горизонтальная прямая линия. Она пересекает  $h(c_1, c')$  в точках  $c_2$ , оптимальных для значений  $c' = c_3$ . Так как  $\Gamma_2$  есть кривая  $[c_3, 1/R(c_2)]$ , то для нахождения точки на этой кривой нужно лишь спуститься из точек пересечения кривой  $\Gamma_1$  с  $h(c, c')$  до кривой  $\Gamma_\infty$  и далее пройти горизонтально до ординаты, проходящей через точку  $c = c'$ . Из  $\Gamma_2$  мы получаем  $\Gamma_3$  и т. д. Так как кривые семейства  $h$  могут быть начерчены независимо от значения  $c_1$ , то построение с равным успехом осуществляется при любой величине  $c_1$ .

Здесь, видимо, стоит отметить, что согласно уравнению (5.2.5) для экзотермических реакций необходима



Фиг. 6. Построение кривых  $\Gamma_r$ .

убывающая последовательность температур, так как, продифференцировав это уравнение, получим

$$\frac{dT_m}{dc} = -\frac{RT_m^2}{(-\Delta H)} \sum_{i=1}^n \frac{\alpha_i^2}{c_{i0} + \alpha_i c}$$

Отсюда видно, что  $T_m$  убывает при возрастании  $c$ .

#### 5.4. Исследование оптимального режима при изменении параметров

Часто при изучении данной реакции представляется интересным проварьировать некоторые параметры. Такие вариации могут, естественно, возникнуть, например,

при изменении качеств катализатора, и важно знать, насколько чувствителен оптимальный режим по отношению к этим изменениям. Для случая простых кинетических выражений можно провести полное параметрическое изучение.

Для более сложных систем можно качественно исследовать эту задачу, даже не проделывая детальных вычислений; прекрасным примером этому служит изучение Хорном системы Денбига [35]. Мы ограничимся определением наименьшего числа безразмерных параметров и сделаем несколько замечаний, необходимых для полного изучения обратимой реакции первого порядка.

Пусть,  $c_0 = \sum_1^n c_{i0}$  — общая концентрация всех компонентов и  $\mu_i = c_{i0}/c_0$  — относительная концентрация  $A_i$  в смеси до реакции. Тогда меру реакции  $c$  можно сделать безразмерной, разделив на  $c_0$ ,

$$x = \frac{c}{c_0}. \quad (1)$$

Уравнение (5.2.7) перепишется так:

$$R(c) = c_0 A \prod_1^n (\mu_i + \alpha_i x)^{-\delta_i} = c_0 A P(x), \quad (2)$$

где

$$\delta_i = p\alpha_i - \beta_i = \frac{E_1 \gamma_i - E_2 \beta_i}{E_2 - E_1} \quad (3)$$

и

$$A = \frac{p^p}{(p+1)^{p+1}} \frac{k_1^{*p+1}}{k_2^{*p}} c_0^{(p+1)\beta - p\gamma - 1}, \quad (4)$$

$$\alpha = \sum_1^n \alpha_i, \quad \beta = \sum_1^n \beta_i, \quad \gamma = \sum_1^n \gamma_i. \quad (5)$$

Величина  $A$  имеет размерность  $\text{сек}^{-1}$ , так что  $P(x)$  есть безразмерная скорость реакции. Время пребывания в реакторе можно сделать безразмерным, положив

$$\zeta = A\theta, \quad (6)$$

Температуру также можно сделать безразмерной, разделив на  $-\Delta H/R$ , так как интерес представляют только экзотермические реакции. Тогда

$$\tau = \frac{RT}{-\Delta H} = \left[ \ln x \prod_1^n (\mu_i + \alpha_i x)^{\beta_i} \right]^{-1} \quad (7)$$

где

$$x = \frac{p+1}{p} \frac{k_2^*}{k_1^*} c_0^{\alpha}. \quad (8)$$

Итак, в общем случае имеются  $(2n + 3)$  параметров, которые распадаются на следующие группы:  $p$  — эксponents, относящаяся только к энергии активации;  $x$  включает кинетические константы и  $c_0$ ;  $\mu_i$  — начальный или исходный состав смеси;  $\beta_i$  показывает порядок реакции, а  $(\tau_*, \tau^*)$  — границы изменения температуры. При  $\tau_* \leq \tau \leq \tau^*$  система описывается следующими уравнениями:

$$\zeta_r = \frac{x_r - x_{r+1}}{P(x_r)}, \quad (9)$$

$$\varphi_R(x_{R+1}) = \min \sum_1^R \zeta_r = \min \left[ \frac{x_R - x_{R+1}}{P(x_R)} + \varphi_{R-1}(x_R) \right] \quad (10)$$

и

$$\varphi_1(x_2) = \frac{x_1 - x_2}{P(x_1)}. \quad (11)$$

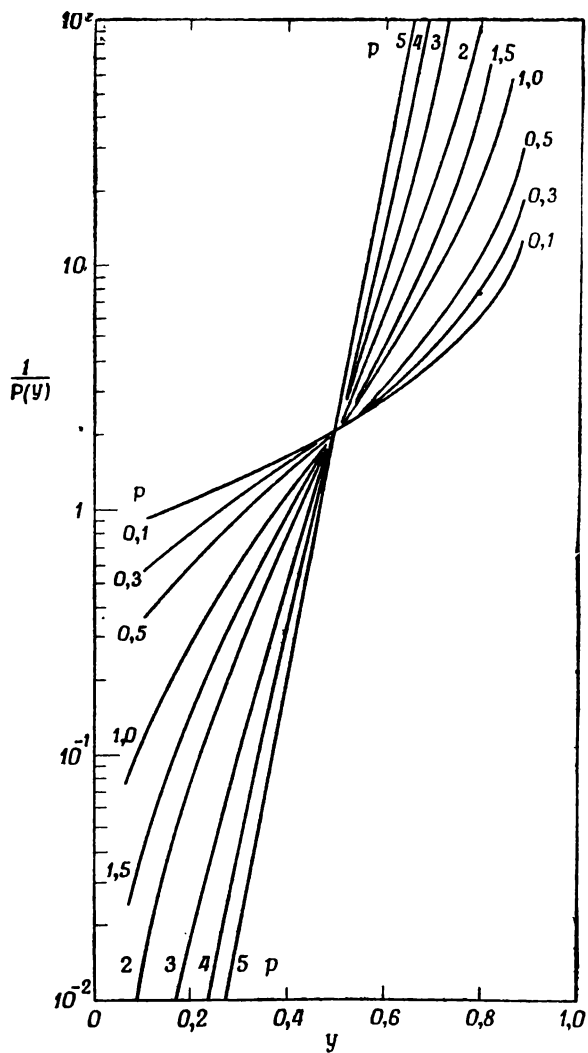
Решив эти уравнения, найдем оптимальный режим для  $\theta$  и  $T$ :

$$\theta_r = \frac{\zeta_r}{A}, \quad T_r = \frac{\tau_r (-\Delta H)}{R}. \quad (12)$$

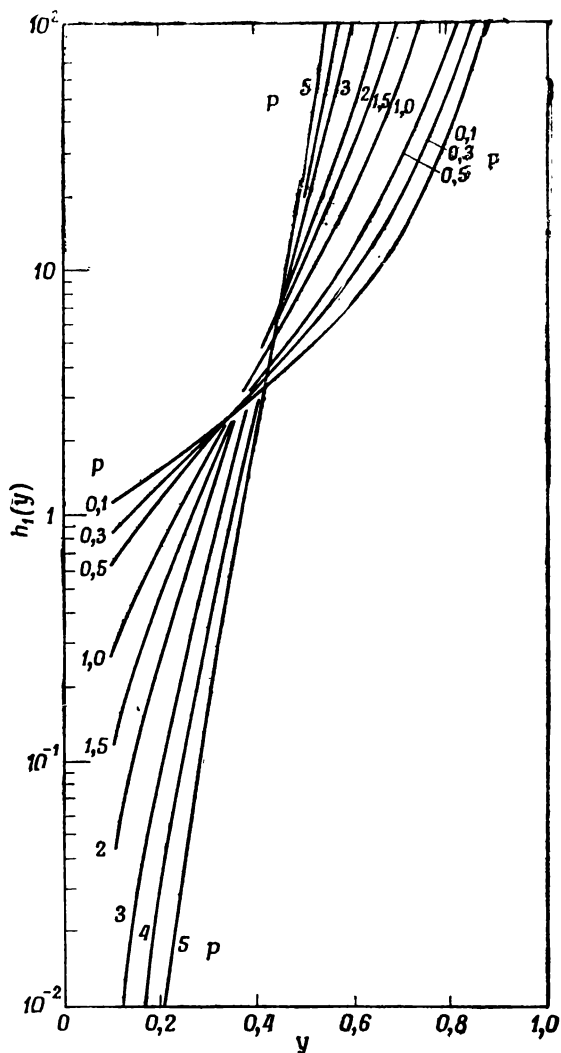
Применяя это к обратимой реакции первого порядка  $A_1 - A_2 = 0$ , имеем  $c_0 = c_{10} + c_{20} = c_1 + c_2$  на всем протяжении реакции. Тогда  $c_1/c_0 = x_1$ ,  $c_2/c_0 = x_2$  и для простоты можно написать  $x_1 = y$ ,  $x_2 = 1 - y$ . При этом

$$P(y) = y^{-p} (1 - y)^{p+1} \quad (13)$$

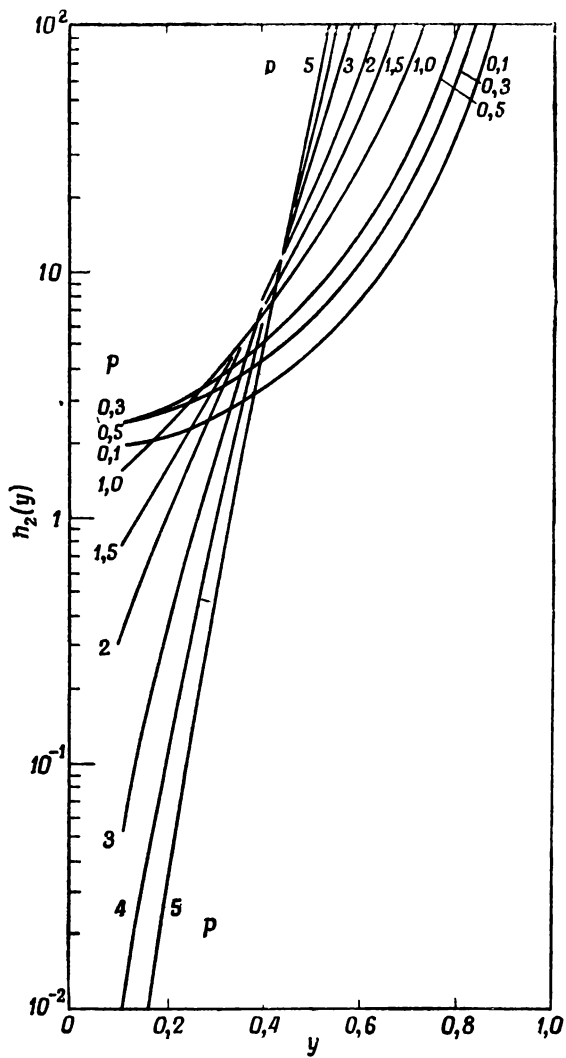
есть безразмерный максимум скорости реакции, включающий лишь один параметр  $p$ . На фиг. 7 показаны



Фиг. 7. Максимум скорости реакции для реакции первого порядка.



Ф и г. 8. Зависимость  $h_1(y)$ .



Ф и г. 9. Зависимость  $h_2(y)$ .

графики  $1/p(y)$  для нескольких значений  $p$ , которые необходимы для нахождения оптимального режима. Другое, необходимое для этого построения множество функций есть семейство  $h$ , которое в безразмерной форме записывается так:

$$h(y; \eta) = h_1(y) + \eta h_2(y) = \frac{1}{P(y)} \left[ 1 - y \frac{P'(y)}{P(y)} \right] + \eta \frac{P'(y)}{P^2(y)}. \quad (14)$$

Эти функции можно получить из фиг. 8 и 9, где они представлены для тех же самых значений  $p$ . Оптимальная температура дается функцией

$$\tau = \left[ \frac{\ln xy}{(1-y)} \right]^{-1} \quad (15)$$

график которой для нескольких значений  $x$  приведен на фиг. 2 в гл. 7. Итак, мы имеем все данные, необходимые для полного изучения обратимой реакции первого порядка.

Очевидно также, что эти данные применимы и к реакциям любого другого порядка между двумя реагентами.

### 5.5. Две последовательные реакции

Продолжим изучение оптимальных задач со стехиометрической функцией выгоды, так как некоторые специфические приемы легче всего продемонстрировать на этом примере. Как уже подчеркивалось, динамическое программирование не является сводкой механических правил, которые можно, не думая, применять к любой задаче. Одной из характерных черт динамического программирования является та свобода, которую оно оставляет для изобретательного упрощения сложной ситуации. Теперь нам будет удобно рассматривать систему последовательных реакций первого порядка  $A \rightarrow B \rightarrow C$ , изучавшуюся Амундсеном и Байлоусом [4]. Температурный режим не является здесь несвязным. Вместо одной мы рассмотрим теперь две реакции, но здесь можно сделать важные упрощения, предположив, что реакции имеют первый порядок. В качестве переменных выберем концентрации веществ  $A$  и  $B$ , обозначая их через  $x$  и  $y$



соответственно. Тогда, если реакция  $A \rightarrow B$  протекает со скоростью  $k_1x$ , а  $B \rightarrow C$  со скоростью  $k_2y$ , получим

$$x_{r+1} = [1 + \theta_r k_1(T_r)] x_r, \quad (1)$$

$$y_{r+1} = -\theta_r k_1(T_r) x_r + y_r [1 + \theta_r k_2(T_r)], \quad (2)$$

$$k_i(T) = k_i^* \exp(-E_i/RT). \quad (3)$$

Для краткости положим

$$a_r = \theta_r k_1(T_r), \quad (4)$$

тогда

$$b_r = \theta_r k_2(T_r) = \rho_r a_r^{1/p}, \quad (5)$$

где

$$p = \frac{E_1}{E_2}, \quad \rho_r = \theta_r^{(p-1)/p} k_1^{*-1/p} k_2^*. \quad (6)$$

(В гл. 7, где рассматривается та же система реакций, вместо символа  $p$  используется  $r$ . Но так как здесь через  $r$  обозначен номер реактора, то во избежание недоразумений обозначим эту величину через  $p$ .) За исключением частного случая, когда  $p = 1$ , будет удобно использовать  $a$  и  $\rho$  вместо переменных  $\theta$  и  $T$ . Это возможно, потому что якобиан  $\partial(a, \rho)/\partial(\theta, T)$  не обращается в нуль.

Заметим теперь, что уравнения (1) и (2) однородны по  $x, y$ , поэтому, разделив одно на другое, получим \*

$$z_{r+1} = z_r \frac{1 + b_r}{1 + a_r} = \frac{a_r}{1 + a_r}, \quad (7)$$

где

$$z_r = \frac{y_r}{x_r}. \quad (8)$$

Итак,

$$z_r = \frac{[(1 + a_r) z_{r+1} + a_r]}{(1 + b_r)} \quad (9)$$

есть уравнение для определения отношения  $z_r$  на выходе любой стадии, если известно отношение  $z_{r+1}$  на входе. Фактическое образование  $B$  в  $r$ -м реакторе находим по

формуле

$$\begin{aligned} \frac{y_r - y_{r+1}}{x_{r+1}} &= \frac{a_r}{1 + a_r} - \frac{b_r}{1 + a_r} z_r = \\ &= \frac{a_r}{(1 + a_r)(1 + b_r)} - \frac{b_r}{1 + b_r} z_{r+1}. \end{aligned} \quad (10)$$

Мы ищем оптимальные условия образования  $B$  и, следовательно, берем в качестве функции выгоды выражение

$$y_1 - y_{R+1} = \sum_1^R (y_r - y_{r+1}).$$

Пусть максимум этой функции обозначается через  $f_R$ :

$$f_R(x_{R+1}, y_{R+1}) = \max \sum_1^R (y_r - y_{r+1}). \quad (11)$$

Тогда вследствие однородности уравнений он должен быть пропорционален  $x_{R+1}$ , причем коэффициент пропорциональности зависит лишь от отношения  $y_{R+1}/x_{R+1} = z_{R+1}$ . По этой причине можно положить

$$f_R(x_{R+1}, y_{R+1}) = x_{R+1} g_R(z_{R+1}). \quad (12)$$

Применив теперь принцип оптимальности к функции  $f_R$ , очевидно, получим

$$f_R(x_{R+1}, y_{R+1}) = \max [(y_R - y_{R+1}) + f_{R-1}(x_R, y_R)], \quad (13)$$

где максимизация достигается выбором  $\theta_R$  и  $T_R$ , т. е.  $a_R$  и  $b_R$  или  $a_R$  и  $b_R$ . Если теперь подставить уравнение (12) в уравнение (13), разделить на  $x_{R+1}$  и использовать уравнение (10), то получим

$$\begin{aligned} g_R(z_{R+1}) = \max \left[ \frac{a_R}{(1 + a_R)(1 + b_R)} - \frac{b_R}{(1 + b_R)} z_{R+1} + \right. \\ \left. + \frac{1}{(1 + a_R)} g_{R-1}(z_R) \right]. \end{aligned} \quad (14)$$

Это уравнение уже не включает  $x$  и  $y$  в отдельности и зависит лишь от их отношения  $z$ . Его нужно решать совместно с уравнением (9).

Для определенности рассмотрим случай постоянного времени пребывания в реакторе  $\theta_r$ , для которого  $\rho$  также

является величиной, не зависящей от  $r$ . Рассмотрим сначала один реактор.

$$g_1(z_2) = \max \left[ \frac{a_1}{(1+a_1)(1+\rho a_1^{1/p})} - \frac{\rho a_1^{1/p}}{1+\rho a_1^{1/p}} z^2 \right]. \quad (15)$$

Если в какой-то момент считать интервал допустимых температур достаточно большим, то выражение в правой части равенства достигает экстремума при

$$z_2 = \frac{p + (p-1)\rho a_1^{1/p} - \rho a_1^{(p+1)/p}}{\rho a_1^{(1-p)/p} (1+a_1)^2}. \quad (16)$$

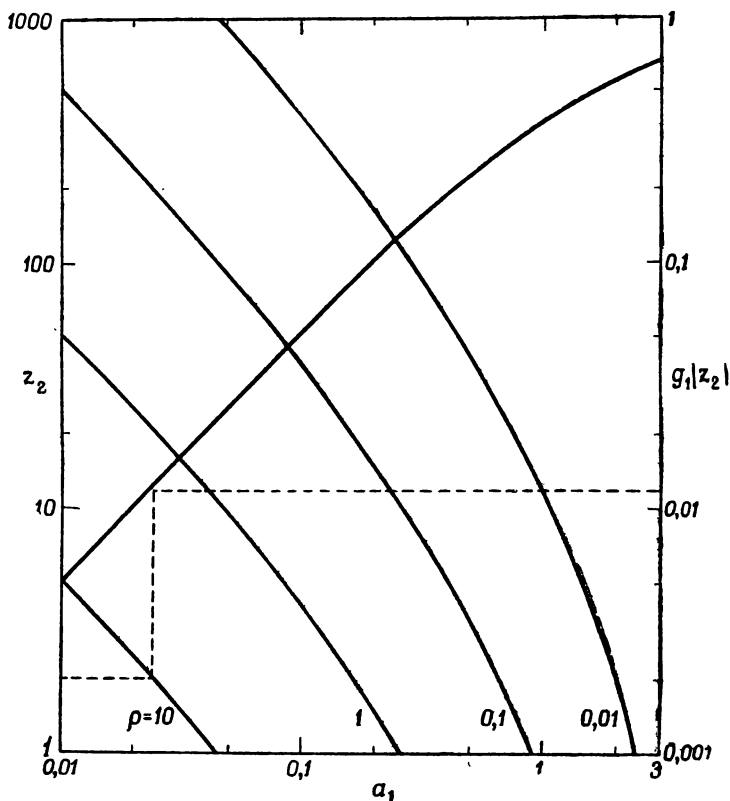
В случае  $0 < p < 1$  это есть максимум, равный по величине

$$g_1(z_2) = \frac{a_1(1-p+a_1)}{(1+a_1)^2}, \quad (17)$$

где  $a$  определяется как функция от  $z_2$  по уравнению (16). Процесс нахождения этого максимума показан на фиг. 10 для значения  $p = 0,5$ . Кривая, поднимающаяся слева направо, есть  $g_1$ , соответствующая уравнению (17), в то время как кривые, опускающиеся слева направо, определяются уравнением (16). Для любого  $z_2$  (шкала слева) можно определить  $a_1$  по кривой с соответствующим значением  $\rho$ , после чего, поднимаясь вверх до кривой  $g_1$ , находим по шкале справа значение  $g_1(z_2)$ . Приближенный графический метод решения уравнения (14) изображен на фиг. 11. Этот метод не дает большой точности, но оказывается полезным во многих интересных случаях. На положительной горизонтальной и отрицательной вертикальной шкалах отложено  $z$ , а на других двух —  $g$ . В первом квадранте будут последовательно построены кривые  $g_1(z_2)$ ,  $g_2(z_3)$ . Начнем с уже известной  $g_1(z_2)$  и построим величину, которая должна максимизировать правую часть уравнения (14) при  $z_3 = 2$  и  $a = 1$ . Точка  $A$  имеет ординату  $z = 2$ . В третьем квадранте начертим прямую  $a = 1$  из семейства уравнения (10):

$$\frac{a}{(1+a)(1+b)} - \frac{b}{(1+b)} z.$$

Начертить все семейство таких прямых невозможно, поэтому мы проведем лишь линию связи — геометрическое



Ф и г. 10. Одностадийные оптимальные условия для двух последовательных реакций.

место точек, координатами которых являются координаты пересечения с осями прямых данного семейства. На эту линию связи наносим масштаб  $a$  и, опустив перпендикуляры на обе оси, сразу же можно начертить прямую семейства с соответствующим значением  $a$ . Абсцис-



чения с вертикалью  $z = 5$ . Такие линии связи можно на-  
чертить для различных значений  $\rho$ . На этой фигуре они  
соответствуют значению  $\rho = 0,1$ . Если температура огра-  
ничена значениями  $T_*$ ,  $T^*$ , тогда понадобится лишь  
часть линии связи между  $a_* = a(T_*)$  и  $a^* = a(T^*)$ .  
Точка  $D$  в таком случае имеет абсциссу  $z_2$  и, следова-  
тельно, ордината  $E$  есть  $g_1(z_2)$ . Во втором квадранте  
использовано семейство прямых с наклоном  $-(1+a)^{-1}$   
для построения второго члена равенства (14), а именно  
 $g_1(z_2)/(1+a_1)$ . Его находим по абсциссе точки  $G$ . Та-  
ким образом, мы можем оценить оба члена в равен-  
стве (14), а следовательно, и их сумму для любого зна-  
чения  $a$ . Непродолжительный счет методом проб и оши-  
бок локализует максимизирующее значение.

При  $\rho > 1$  правая часть равенства (14) начинает  
убывать от нулевого значения, и, поскольку для боль-  
ших  $a$  ее значение стремится к  $-z_{R+1}$ , она всегда  
остается отрицательной. В случае одной реакции экстре-  
мум, как и прежде, удовлетворяет уравнению (16), но  
теперь правая часть этого уравнения имеет максимум<sup>1)</sup>.  
Этот максимум равен

$$z_c = \frac{(p-1)^2}{4\rho} \left[ 1 + \frac{1}{\rho} \left( \frac{p-1}{p+1} \right)^{-(p+1)/\rho} \right] \quad (18)$$

и достигается при  $a = (p-1)/(p+1)$ . Итак, если  
 $z_2 > z_c$ , реакция становится невыгодной, так как ведет  
к чистой потере  $B$ . Если  $z_2 < z_c$ , то найдутся два значе-  
ния  $a$ , удовлетворяющие уравнение (16), большее из ко-  
торых дает максимум. Но этот максимум приведет к по-  
ложительному значению  $g_1$  [уравнение (17)] лишь при  
 $a_1 > (p-1)$  и, следовательно,

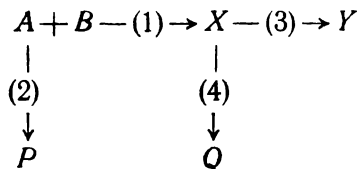
$$z_2 < \rho^{-1} p^{-1} (p-1)^{(p-1)/\rho}$$

Расчет надо проводить так же, как и в случае  $\rho > 1$ , но  
тут, очевидно, необходимы более строгие ограничения  
на  $z_2$ .

<sup>1</sup> Смысл уравнения (16) состоит в том, что по данному  $z_2$  из  
него следует определить  $a$  (следовательно, и  $T$ ) как неявную функ-  
цию от  $z_2$ . Для того чтобы это можно было сделать, необходимо,  
чтобы величина  $z_2$  лежала в области значений функции (16). —  
*Прим. ред.*

### 5.6. Система реакций Денбига

В своем докладе на Первом европейском симпозиуме по химической кинетике промышленных процессов Денбиг [28] предложил на обсуждение очень интересную систему реакций, продемонстрировавшую существенные преимущества оптимального режима. Он рассматривал производство  $Y$  из ценного исходного продукта  $A$  по следующей схеме:



Здесь  $X$  — промежуточный продукт;  $P$ ,  $Q$  — отходы, образование которых важно минимизировать. Считаем, что данные реакции имеют первый порядок по отношению к концентрациям  $A$  и  $X$ , так что эта система кинетически проще, чем можно было бы предположить по ее стехиометрии. Постоянные скорости реакций для этих четырех реакций имеют обычный вид:

$$k_i = k_i^* \exp(-E_i/RT), \quad i = 1, 2, 3, 4$$

и оптимальный режим зависит от относительных величин энергий активации.

Все постоянные скорости  $k_i$  возрастают при увеличении температуры. Но  $k_i$  растет при этом быстрее  $k_j$ ; тогда и только тогда, когда  $E_i > E_j$ . В связи с этим будем различать следующие случаи:

I.  $E_1 > E_2$ ,  $E_3 > E_4$ . Увеличение температуры будет стимулировать реакции (1) и (3), противодействуя побочным реакциям (2) и (4); можно, следовательно, ожидать, что почти все  $A$  превратятся в  $Y$  при режиме с достаточно высокой температурой.

II.  $E_1 < E_2$ ,  $E_3 < E_4$ . Наинизшие возможные температуры дадут наилучший выход продукции.

III.  $E_1 > E_2$ ,  $E_3 < E_4$ . На ранней стадии реакции перед тем, как получено большое количество  $X$ , важно, чтобы реакция (1) доминировала над реакцией (2); для

этого необходима высокая температура. Позднее, во время реакции следует стимулировать реакцию (3) за счет реакции (4), для чего требуется низкая температура. Следовательно, желательна убывающая последовательность температур.

IV.  $E_1 < E_2$ ,  $E_3 > E_4$ . В этом случае та же аргументация приводит к возрастающей последовательности температур.

Первые два случая не очень интересны; внимание привлекают III и IV случаи. Следуя Денбигу, рассмотрим IV случай, используя его соотношения  $E_2 = E_1 + 6000$ ;  $E_3 = E_1$ ;  $E_4 = E_1 - 6000$ . (Хорн [35] полностью изучил этот случай для реактора вытеснения, включая зависимость оптимального режима от параметров.) Денбиг показал, что при одном реакторе наибольший выход (25% от исходного продукта A) получался при температуре 326° К. Для двух реакторов (первый при 280° К, а второй при наивысшей возможной температуре) выход превышает 57%. Мы перекроем результаты Денбига с помощью динамического программирования и обсудим случай трех реакторов; после чего рассмотрим результаты ограничений на температуру и время пребывания в реакторе.

В качестве переменных вновь используются концентрации, а не степень завершенности реакций. Обозначим через  $a$ ,  $x$ ,  $y$  концентрации A, X и Y соответственно. Индекс  $r$  отвечает  $r$ -му реактору с температурой  $T_r$  и временем пребывания на этой стадии  $\theta_r$ . Тогда материальный баланс A; X и Y приводит к уравнениям

$$a_{r+1} = a_r [1 + \theta_r (k_{1r} + k_{2r})], \quad (1)$$

$$x_{r+1} = -a_r \theta_r k_{1r} + x_r [1 + \theta_r (k_{1r} + k_{2r})], \quad (2)$$

$$y_{r+1} = -x_r \theta_r k_{3r} + y_r. \quad (3)$$

Уравнения упростятся, если введем переменные

$$\rho = \frac{k_2}{k_1}, \quad \sigma = \theta k_1. \quad (4)$$

Другие постоянные скорости всегда можно выразить в виде  $\rho\rho^q$ , но мы примем значения, используемые



Денбигом,

$$\frac{k_3}{k_1} = 10^{-2}, \quad \frac{k_4}{k_3} = \rho^{-1}. \quad (5)$$

Температуру и время пребывания в реакторе можно получить, исходя из  $\rho$  и  $\sigma$ , в виде

$$T = \frac{E_2 - E_1}{R \ln(k_2^*/\rho k_1^*)}, \quad (6)$$

$$\theta = \sigma [\rho^{-E_1} k_1^* k_2^* E_1]^{1/(E_2 - E_1)}. \quad (7)$$

После замены уравнения (1) — (3) примут следующий вид:

$$a_{r+1} = [1 + \sigma_r (1 + \rho_r)] a_r, \quad (8)$$

$$x_{r+1} = -\sigma_r a_r + [1 + 10^{-2} \sigma_r \rho_r^{-1} (1 + \rho_r)] x_r, \quad (9)$$

$$y_{r+1} = -10^{-2} \sigma_r x_r + y_r. \quad (10)$$

Вновь заметим, что эти уравнения однородны относительно концентраций, так что мы можем иметь дело лишь с их отношениями. Пусть

$$\frac{a_r}{a_{r+1}} = \frac{1}{1 + \alpha_r}, \quad (11)$$

$$\frac{x_r}{a_r} = \xi_r = \zeta_r^{-1}, \quad (12)$$

$$\frac{y_r - y_{r+1}}{a_{r+1}} = \eta_r. \quad (13)$$

Тогда основные уравнения запишутся так:

$$\alpha_r = \sigma_r (1 + \rho_r), \quad (14)$$

$$\xi_r = L_r + \xi_{r+1} M_r, \quad (15)$$

$$\eta_r = Y_r + \xi_{r+1} Z_r, \quad (16)$$

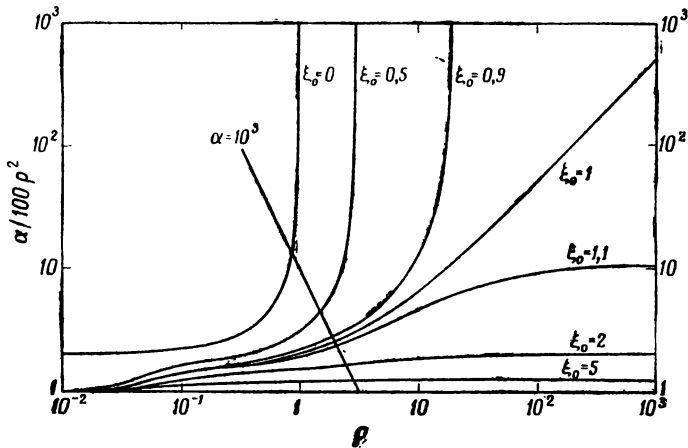
где

$$L_r = 100 Z_r = \frac{\alpha_r}{1 + \rho_r} [1 + (\alpha_r/100\rho_r)]^{-1}, \quad (17)$$

$$M_r = (1 + \alpha_r) [1 + (\alpha_r/100\rho_r)]^{-1}, \quad (18)$$

$$Y_r = 10^{-2} \frac{\alpha_r^2}{(1 + \alpha_r)(1 + \rho_r)^2} [1 + (\alpha_r/100\rho_r)]^{-1}. \quad (19)$$

Перед формулировкой динамической программы изучим одну стадию и посмотрим, как максимизировать  $\eta_1$  и выход  $Y$ . Прежде всего  $\eta_1$  есть монотонно возрастающая функция  $\alpha$  и, следовательно,  $\alpha$  следует сделать возможно больше. Это означает, что  $a_1$  должно быть как можно меньше, т. е. реакция должна прийти к своему



Фиг. 12. Оптимальный одностадийный режим для системы Денбига.

завершению. Так же, как Денбиг и Хорн, предположим, что этого можно достичь. Для любого данного  $\alpha_1, \eta_1$  будет максимальным, если  $\rho_1$  выбрана таким образом, что

$$\xi_2 = \frac{\alpha_1}{1 + \alpha_1} \frac{200\rho_1^2 - \alpha_1(1 - \rho_1)}{(\alpha_1 - 100\rho_1^2)(1 + \rho_1)}. \quad (20)$$

Кривые, графически представляющие это соотношение при постоянных  $\xi_2$ , образуют очень узкий пучок на плоскости  $\alpha, \rho$ , они лежат между кривыми  $\alpha = 200 \rho^2 / (1 - \rho)$  ( $\xi = 0$ ) и  $\alpha = 100 \rho^2$  ( $\xi = \infty$ ). Графическое определение оптимального режима будет, пожалуй, более точным, если за ось ординат взять  $\alpha / 100 \rho^2$ , а за ось абсцисс  $\rho$  при  $\xi = \text{const}$  (фиг. 12). Для любого данного  $\alpha$  определим оптимальную температуру по точке пересечения

кривой с постоянным значением  $\xi$  и прямой  $\alpha/100 \rho^2$ <sup>1)</sup>. При  $\alpha \rightarrow \infty$  эта прямая отодвигается в отдаленную часть плоскости и тогда вместо точек пересечения с кривой  $\xi = \text{const}$  можно взять асимптотическое значение  $\rho$ . Следовательно, в этом случае мы имеем

$$\begin{aligned} \xi_2 \leq 1, \quad \rho_1 &= \left( \frac{1 + \xi_2}{1 - \xi_2} \right), \quad \eta_1 = \frac{1}{4} (1 + \xi_2)^2, \\ \xi_2 > 1, \quad \rho_1 &= \infty, \quad \eta_1 = \xi_2, \end{aligned} \quad (21)$$

Фактически  $\rho_1$  никогда не становится бесконечным, но если ее предельное значение, равное  $k_2^*/k_1^*$ , очень велико, мы будем предполагать, что эти простые формулы носят приближенный характер.

Так как мы заинтересованы в наибольшем выходе  $Y$ , то примем за функцию выгоды  $y_1 - y_{R+1} = \sum_1^R (y_r - y_{r+1})$ . Пусть

$$f_R(a_{R+1}, x_{R+1}) = \max \sum_1^R (y_r - y_{r+1}). \quad (22)$$

Тогда по принципу оптимальности имеем

$$f_R(a_{R+1}, x_{R+1}) = \max [y_R - y_{R+1} + f_{R-1}(a_R, x_R)]. \quad (23)$$

Здесь нужно сделать оптимальный выбор  $a_R$  или  $\sigma_R$  и  $\rho_R$ . Если использовать однородность, то, как и в предыдущем разделе, можно написать

$$f_R(a_{R+1}, x_{R+1}) = a_{R+1} g_R(\xi_{R+1}), \quad (24)$$

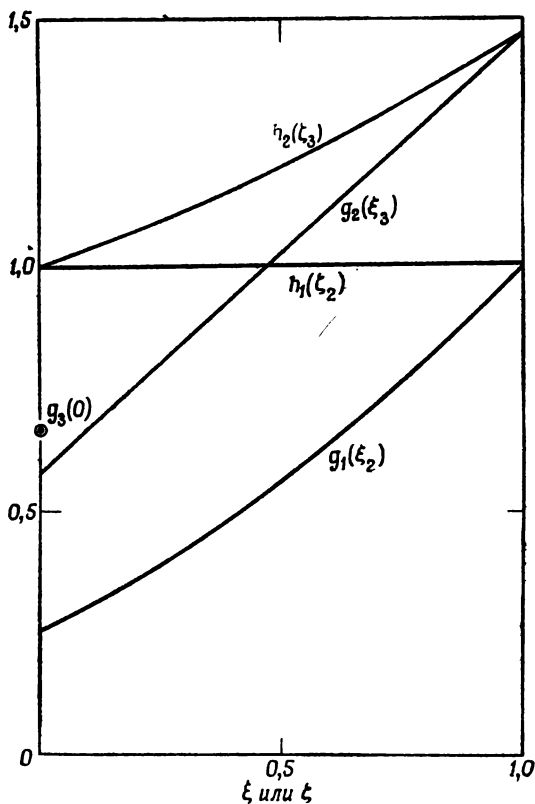
тогда уравнение примет вид

$$\begin{aligned} g_R(\xi_{R+1}) &= \max \left[ \frac{y_R - y_{R+1}}{a_{R+1}} + \frac{a_R}{a_{R+1}} g_{R-1}(\xi_R) \right] = \\ &= \max [\eta_R + g_{R-1}(\xi_R)/(1 + \alpha_R)]. \end{aligned} \quad (25)$$

Однако при решении этих уравнений встречается существенное практическое затруднение. Величина  $\xi_R$  может принимать очень большие значения, если на первой

<sup>1)</sup> Этот график оказывается прямой линией, так как на осях координат взят логарифмический масштаб. — *Прим. ред.*

стадии  $X$  переходит в  $A$  почти полностью (с небольшими отходами  $P$ ). Это означает, что для вычисления  $g_R$  по данному  $\xi_{R+1}$  нам понадобятся значения  $\xi_R$ , намного превосходящие данное  $\xi_{R+1}$ , что приводит к трудностям



Фиг. 13. Оптимальный выход без ограничений.

в интерполяции, а следовательно, к неточности. Эту трудность можно преодолеть методом, предложенным Беллманом. Введем еще одну переменную  $\zeta = \xi^{-1}$  [см. уравнение (12)] и условимся использовать ту из них, которая лежит между нулем и единицей. Это позволит при

больших значениях  $\xi$  избавляться от расчетных затруднений, используя малые значения  $\zeta$ . Вместе с  $\zeta$  введем другую однородную форму функции выгоды в виде

$$f_R(a_{R+1}, x_{R+1}) = a_{R+1} g_R(\xi_{R+1}) = x_{R+1} h_R(\zeta_{R+1}). \quad (26)$$

Теперь вместо уравнения (23) имеем четыре уравнения. Выбор одного из этих четырех уравнений определяется значениями  $\xi_R$  и  $\xi_{R+1}$ :

$$\begin{aligned} \xi_{R+1} \leq 1, \xi_R \leq 1: g_R(\xi_{R+1}) &= \max \left[ \eta_R + \frac{1}{1 + \alpha_R} g_{R-1}(\xi_R) \right], \\ \xi_{R+1} \leq 1, \xi_R \geq 1: g_R(\xi_{R+1}) &= \max \left[ \eta_R + \frac{\xi_R}{1 + \alpha_R} h_{R-1}(\zeta_R) \right], \end{aligned} \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \xi_{R+1} \geq 1, \xi_R \leq 1: h_R(\zeta_{R+1}) &= \max \left[ \eta_R \zeta_{R+1} + \frac{\zeta_{R+1}}{1 + \alpha_R} g_{R-1}(\xi_R) \right], \\ \xi_{R+1} \geq 1, \xi_R \geq 1: h_R(\zeta_{R+1}) &= \max \left[ \eta_R \zeta_{R+1} + \frac{\xi_R \zeta_{R+1}}{1 + \alpha_R} h_{R-1}(\zeta_R) \right]. \end{aligned}$$

Во всех этих уравнениях  $\eta_R$  и  $\xi_R$  вычисляются по уравнениям (15) и (16), а максимизация достигается вариациями  $\alpha_R$  и  $\rho_R$ , по которым можно вычислить  $T_R$  и  $\theta_R$ . Для одного реактора при условии завершения реакции  $\alpha_1 \rightarrow \infty$  и уравнение (21) можно переписать так:

$$g_1(\xi_2) = \frac{1}{4} (1 + \xi_2)^2, \quad h_1(\zeta_2) = 1. \quad (28)$$

Графически это представлено на фиг. 13.

Решение уравнений (27) проведено для трех ступеней при питании чистыми  $A + B$  ( $\xi_k = 0$ ), это решение суммировано в табл. 1. и на фиг. 13 и 14. Первые две строки в табл. 1 согласуются с результатами Денбига, состоящими в том, что максимальный 25%-ный выход одного реактора увеличивается до 57% для двух реакторов, первый из которых работает при 280° К, а второй — при значительно более высокой температуре. Третья строка показывает, что выход 3-х ступеней составляет 66% при соответствующем подборе возрастающей последовательности температур. Времена пребывания в реакторе даются в значениях  $\sigma$ , и действительное

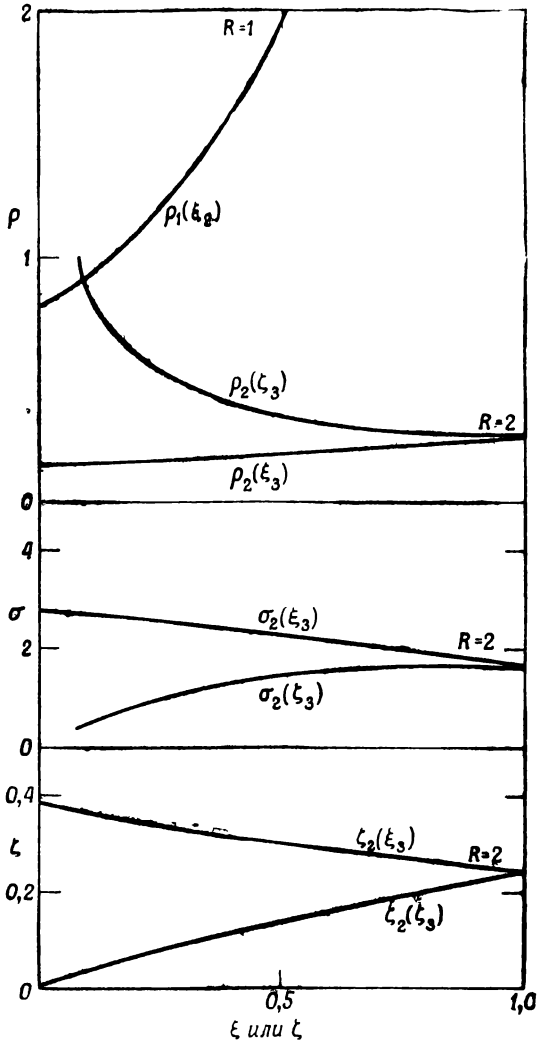
Таблица 1

## Оптимальные режимы для системы Денбига

| Число реакторов<br>$R$                                       | Температуры |       |          | Время пребывания в реакторах |            |            | Выход,<br>% |
|--|-------------|-------|----------|------------------------------|------------|------------|-------------|
|  | $T_3$       | $T_2$ | $T_1$    | $\sigma_3$                   | $\sigma_2$ | $\sigma_1$ |             |
| Без ограничений  |             |       |          |                              |            |            |             |
| 1  | —           | —     | 326      | —                            | —          | $\infty$   | 25          |
| 2  | —           | 280   | $\infty$ | —                            | 4,0        | $\infty$   | 57,4        |
| 3  | 270         | 320   | $\infty$ | 1,6                          | 0,8        | $\infty$   | 66,3        |
| С ограничениями на температуру и время пребывания в реакторе |             |       |          |                              |            |            |             |
| 1  | —           | —     | 318      | —                            | —          | 340        | 22,1        |
| 2  | —           | 276   | 394      | —                            | 2,82       | 2100       | 45,1        |
| 3  | 260         | 288   | 394      | 1,4                          | 1,3        | 2100       | 49,5        |

время пребывания в реакторе можно найти по ним, лишь зная  $k_1^*$  и  $E_1$ . Табл. 1 содержит значения, соответствующие случаю  $\xi_{R+1} = 0$ , а на фиг. 13 показан оптимальный выход одного и двух реакторов для всех значений  $\xi$ . На фиг. 14 изображен график оптимального режима. Пользоваться им надо так: решая уравнения (27) при  $\xi_4 = 0$ ,  $R = 3$ , получим оптимальные значения  $\alpha_3$  и  $\rho_3$ , а следовательно, и величину  $\xi_3$  или  $\zeta_3$ . Этот процесс не показан на графике, но в этом случае  $\zeta_3 = 0,84$ , таким же образом из фиг. 14 находятся все остальные условия. Здесь  $\rho_2 = 0,51$  представлено точкой  $A$  с абсциссой  $\zeta = 0,84$ , а  $\sigma_2 = 3,4$  — точкой  $B$ . В точке  $C$  значение  $\zeta_2 = 0,1$ . Следовательно, оптимальные условия на последней ступени заключаются в том, чтобы брать возможно больший сосуд ( $\alpha_1$  велико) и возможно более высокую температуру ( $\rho_1$  большое).

Предположение о том, что последний реактор можно сделать бесконечно большим с бесконечно высокой рабочей температурой, конечно, нереально. Поэтому интересно посмотреть, как некоторые естественные ограничения будут влиять на оптимальный режим и выход продукции. Предположим, что температура должна лежать между двумя предельными значениями  $T_*$  и  $T^*$ ,



Фиг. 14. Оптимальный режим без ограничений.

а время пребывания в реакторе не превосходит  $\theta^*$ . В этом случае  $\rho$  должно лежать между значениями  $\rho_*$  и  $\rho^*$ , соответствующими  $T_*$  и  $T^*$ , а  $\sigma$  не должно превосходить по величине функции от  $\rho$ , заданной уравнением (4),

$$\rho_* \leq \rho \leq \rho^*, \quad (29)$$

$$\sigma \leq \theta^* k_1 = \sigma^* \rho^q, \quad (30)$$

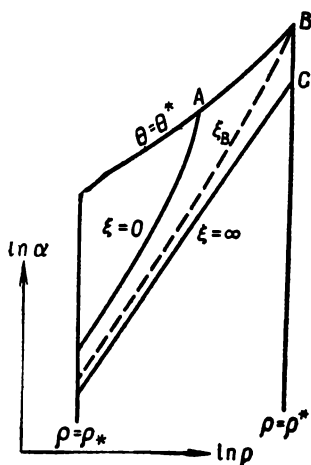
где  $q = E_1/(E_2 - E_1)$  и

$$\sigma^* = \theta^* [k_1^{E_2} k_2^{E_1 - E_2}]^{1/(E_2 - E_1)}$$

Уравнение (29) и (30) вместе означают, что

$$\alpha \leq \sigma^* \rho^q (1 + \rho). \quad (31)$$

Из уравнений (29) и (30) следует, что эти неравенства ограничивают область допустимых значений  $\alpha$  и  $\rho$  на

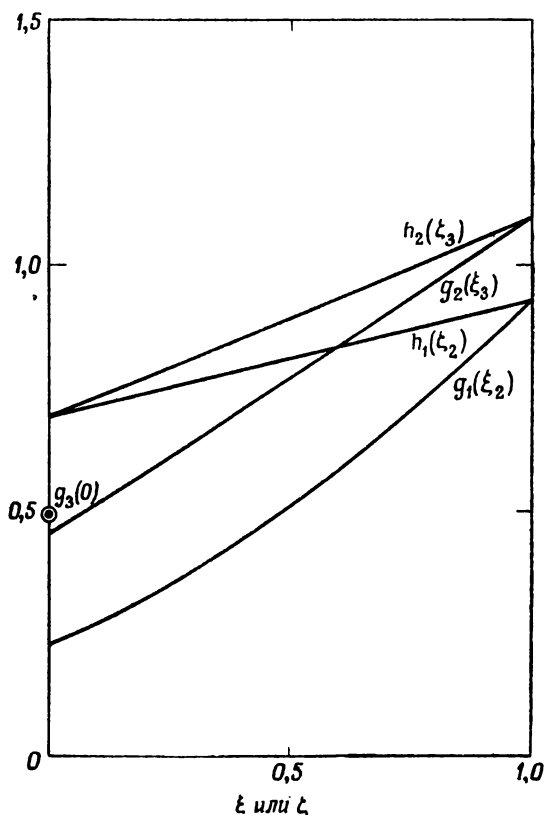


Фиг. 15. Вид ограничений на  $T$  и  $\theta$  в плоскости  $(\alpha, \rho)$ .

плоскости  $(\alpha\rho)$ , как это показано на фиг. 15. В этой области проведены граничные кривые  $\xi_2 = 0$  и  $\xi_2 = \infty$ , соответствующие уравнению (20). Так как мы знаем, что при одном реакторе  $\alpha_1$  следует брать возможно большим, то оптимальные условия для одной стадии лежат в части  $ABC$  границы этой области. В части  $AB$  имеем

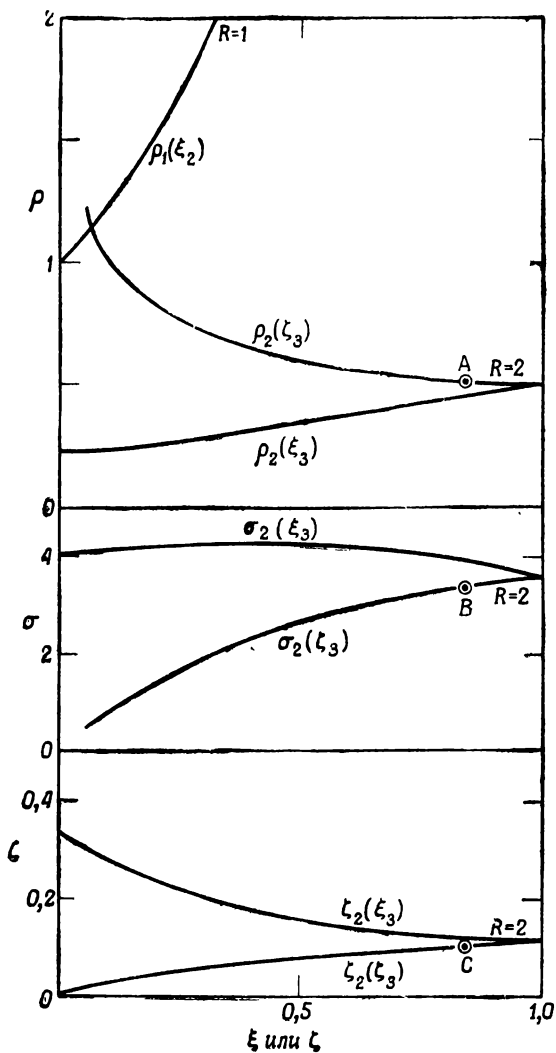


предельное значение времени пребывания в реакторе, в то время как в части *BC* — наивысшее допустимое значение температуры. Разделяющая прямая для постоянных



Фиг. 16. Оптимальный выход продукции при наличии ограничений.

Денбига  $q = 1$ ,  $\rho_* = 0$ ,  $\rho^* = 5$ ,  $\sigma^* = 420$  соответствует  $\xi = 0,914$ . По любой точке кривой *ABC* значения  $g_1$  и  $h_1$  можно получить из соотношений (16) и (20) (см. фиг. 16).



Ф и г. 17. Оптимальный режим при наличии ограничений.

Сравнивая фиг. 16 и 13, замечаем, что ограничения ведут к заметному изменению оптимального выхода. На фиг. 17 показан оптимальный режим при наличии ограничений и его можно сравнить с фиг. 14. В нижней части табл. 1 помещаются данные оптимального режима при наличии ограничений. Очевидно, что введение ограничений ведет к существенному изменению как режима, так и выхода продукта, но целесообразнее использовать несколько стадий для получения лучших результатов.

### 5.7. Общие задачи для цепочки реакторов с мешалками

На разобранных выше частных примерах мы теперь можем сформулировать общий алгоритм для оптимального проектирования цепочки реакторов с мешалками. Основные уравнения приведены в разд. 3.2 и выводить их еще раз не имеет смысла. Эти уравнения следующие:

$$c_{r+1}^j - c_r^j + \theta_r r^j (c_r^k, T_r) = 0, \quad j=1, \dots, m, \quad (1)$$

$$T_{r+1} - T_r + \theta_r \sum_{j=1}^m H^j r^j (c_r^k, T_r) - Q_r' = 0, \quad (2)$$

где  $c_r^j$  — степень завершенности  $m$  реакций в реакторе  $r$ ;  $H^j$  — пропорционально теплосодержанию  $j$ -й реакции, а  $Q_r'$  — скорость охлаждения реактора  $r$ . Приняв за переменные концентрации  $m$  компонентов, можно написать альтернативную систему уравнений (3.2.11) и (3.2.12). Эту систему  $(m+1)$  уравнений можно решать двумя способами. Если  $\theta_r$  и  $T_r$  выбраны, то из  $m$  уравнений (1) можно выразить  $c_r^j$  через  $c_{r+1}^j$  и тогда из уравнения (2) получим скорость охлаждения, необходимую для поддержания данной температуры. Решая эту систему другим, более прямым способом, учтем, что при практическом проектировании надо фиксировать значения  $\theta_r$  и  $Q_r'$ . Следовательно, можно рассматривать уравнения (1), (2) как совместную систему  $(m+1)$  уравнений, решение которой при данных  $\theta_r$  и  $Q_r'$  дает зависимость  $c_r^j, T_r$  от  $c_{r+1}^j, T_{r+1}$ . Этот путь более труден не

столько из-за того, что приходится иметь дело не с  $m$ , а с  $(m + 1)$  уравнениями, сколько из-за существенно нелинейной зависимости этих уравнений от  $T$ . Поэтому лучше использовать первый подход, хотя он и кажется менее прямым, и рассматривать  $\theta_r$  и  $T_r$  на каждой стадии как переменные, характеризующие режим работы. Заданные ограничения на  $Q_r'$  приводят к некоторым ограничениям на  $\theta_r$  и  $T_r$ .

Пусть  $q$  есть скорость потока реагентов в системе, а  $v(c^i, c^m)$  — стоимость единицы объема смеси. Тогда

$$q[v(c_1^i, c_1^m) - v(c_{R+1}^i, c_{R+1}^m)]$$

есть увеличение стоимости смеси в результате процесса. Расходы, рассмотренные в разд. 3, могут быть вычислены для каждого реактора при данном выборе  $\theta_r$  и  $T_r$ . Обозначим общую стоимость реактора через  $C_r(q, \theta_r, T_r)$ . Тогда чистый доход в целом равен

$$P_R = \sum_1^R p_r = \sum_1^R \{q[v(c_r^i, c_r^m) - v(c_{r+1}^i, c_{r+1}^m)] - C_r(q, \theta_r, T_r)\}. \quad (3)$$

Таким образом,  $P_R$  зависит от состояния поступающего продукта  $c_{R+1}^i, c_{R+1}^m, T_{R+1}$ , скорости потока  $q$  и переменных, характеризующих режим работы  $\theta_1, \dots, \theta_R, T_1, \dots, T_R$ . Нашей целью является максимизация этого дохода за счет выбора последних двух групп переменных. Как указывалось раньше, скорость потока  $q$  отличается от других переменных тем, что она выбирается сразу для всех стадий, а также может считаться фиксированной при других рассмотрениях. Пусть

$$f_R(c_{R+1}^k, T_{R+1}; q) = \max P_R, \quad (4)$$

где максимизация происходит по  $2R$  величинам  $\theta_r$  и  $T_r$ . По принципу оптимальности

$$f_R(c_{R+1}^k, T_{R+1}; q) = \max [p_R + f_{R-1}(c_R^k, T_R; q)]. \quad (5)$$

В уравнении (5) нужно выбрать лишь  $\theta_R$  и  $T_R$ , а последовательность уравнений начинается с очевидного

начального уравнения, утверждающего, что, не имея реакторов ( $R = 0$ ), не получим прибыли, т. е.

$$f_0(c_1^k, T_1; q) = 0. \quad (6)$$

Если эта функция найдена, то можно выбрать  $q$  из условия

$$F_R(c_{R+1}^k, T_{R+1}) = \max_q f_R(c_{R+1}^k, T_{R+1}; q). \quad (7)$$

Во многих случаях оказывается очень выгодным предварительный подогрев потока перед входом в первый реактор. Если  $T_0$  — температура подаваемого сырья, то можно предположить, что стоимость подогрева будет функцией от  $q$  и  $T_{R+1} - T_0$ , т. е.  $H(T_{R+1} - T_0, q)$ . Найдем теперь максимум выражения

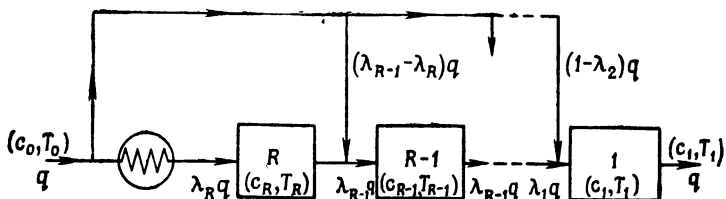
$$G_R(c_{R+1}^k, T_0) = \max_q \max_{T_{R+1}} [f_R(c_{R+1}^k, T_{R+1}; q) - H(T_{R+1} - T_0, q)]. \quad (8)$$

В конкретных случаях оценка дохода может оказаться довольно длинной операцией, как это показано в разд. 4.4, но применение цифровых вычислительных машин существенно облегчает эту задачу. Основная трудность задачи такого вида состоит в том, что надо вычислить, запомнить и интерполировать функцию от  $(m + 1)$  переменного. Прием, используемый иногда для преодоления этой трудности, состоит в том, что данную функцию аппроксимируют полиномом. Этот метод требует запоминания только нескольких коэффициентов. Однако его можно уверенно применять лишь тогда, когда достигнуто полное представление о форме поверхности, которая соответствует этой функции.

### 5.8. Цепочка реакторов с мешалками при байпасировании потока питания

Заслуживает некоторого внимания модификация цепочки реакторов с мешалками, в которой часть подающегося питания до реакции сразу же отводится к последующим ступеням. Ясно, что пропорция байпасирования должна выбираться довольно тщательно, если

вообще можно надеяться на какие-либо преимущества. Существуют, однако, соображения, заставляющие предполагать, что такие преимущества имеются во всяком случае для одной экзотермической реакции. Эта реакция требует убывающего температурного градиента и может оказаться, что простое байпасирование холодного питания будет очень экономичным путем для достижения этого убывания.



Фиг. 18. Цепочка реакторов с мешалками при байпасировании.

Положение, которое имеется в виду, иллюстрируется фиг. 18. Из потока питания, протекающего со скоростью  $q$  при температуре  $T_0$ , лишь часть  $\lambda_R q$  попадает в первый реактор. Перед входом эта часть питания подогревается до температуры  $T_{R+1}$  и, выходя из реактора  $R$ , смешивается с частью  $(\lambda_{R-1} - \lambda_R)q$  исходного продукта перед входом в реактор  $(R - 1)$  или, поскольку внутри реактора есть мешалка, поток исходного продукта может направляться прямо в реактор  $(R - 1)$ . Это смешивание происходит перед каждой стадией. Здесь  $\lambda_r q$  есть поток через реактор  $r$ ;  $\lambda_1 = 1$ .

Необходимые видоизменения в уравнениях равновесного состояния были проведены в разд. 3.2.

Выраженные через степени завершенности  $m$  реакций, эти уравнения имеют вид:

$$\lambda_{r+1} c_{r+1}^j - \lambda_r c_r^j + (\lambda_r - \lambda_{r+1}) c_0^j + \theta_r r^j (c_r^k, T_r) = 0 \quad (1)$$

и

$$\lambda_{r+1} T_{r+1} - \lambda_r T_r + (\lambda_r - \lambda_{r+1}) T_0 + \theta_r \sum_1^m H^j r^j - Q_r' = 0, \quad (2)$$

где

$$\theta_r = \frac{V_r}{q}. \quad (3)$$

Величина  $\theta_r$  есть номинальное время пребывания в реакторе  $r$ , фактическое время пребывания реагентов в этом реакторе равно  $\theta_r/\lambda_r$ .

Для общей оптимальной задачи мы должны выбрать  $3R$  величин: объемы  $V_R, \dots, V_1$ , температуры  $T_{R+1}, \dots, T_1$  и отношения байпасирования  $\lambda_R, \dots, \lambda_2$ . Если  $v(c^1, \dots, c^m)$  есть стоимость смеси, то чистый доход на стадии  $r$  равен

$$q [\lambda_r v(c_r^1, \dots, c_r^m) - \lambda_{r+1} v(c_{r+1}^1, \dots, c_{r+1}^m) - (\lambda_r - \lambda_{r+1}) v(c_0^1, \dots, c_0^m)].$$

Стоимость реактора устанавливается, как и в предыдущем разделе,  $C_r(\theta_r, T_r, \lambda_r q)$ ; таким образом, чистый доход от реактора  $r$  запишется в виде

$$p_r = q [\lambda_r \bar{v}(c_r^1, \dots, c_r^m) - \lambda_{r+1} \bar{v}(c_{r+1}^1, \dots, c_{r+1}^m)] - C_r(\theta_r, T_r, \lambda_r q), \quad (4)$$

где

$$\bar{v}(c^1, \dots, c^m) = v(c^1, \dots, c^m) - v(c_0^1, \dots, c_0^m). \quad (5)$$

Снова положим, что

$$f_R(c_{R+1}^k, T_{R+1}, q) = \max \sum_1^R p_r \quad (6)$$

является максимальным доходом от цепочки реакторов без подогревателя. Применяя принцип оптимальности, получим уравнение

$$f_R(c_{R+1}^k, T_{R+1}, q) = \max [p_R + f_{R-1}(c_R^k, T_R, q)]. \quad (7)$$

Здесь максимизация достигается правильным выбором  $\theta_R, T_R$  (или  $Q'_R$ ) и  $\lambda_{R+1}$ . Выбор  $\lambda_{R+1}$ , разумеется, ограничен условиями  $\lambda_{R+1} \leq \lambda_R$  и  $\lambda_1 = 1$ . Часто удобнее иметь дело с отношением  $\mu_{R+1} = \lambda_{R+1}/\lambda_R$ , тогда ограничение будет следующее:  $\mu_r \leq 1, r = 2, \dots, R$ . При любом таком выборе  $c_R^k, Q'_R$  (или  $T_R$ ) и, следовательно,  $p_R$  могут быть вычислены. В том случае, когда  $c_{R+1}^k = c_0^k$ , коэффи-

циент  $\lambda_{R+1}$  теряет смысл; это соответствует тому, что, не успев нагреть часть питания, мы сразу же смешиваем его с холодной дозой.

Если снова  $H(T_{R+1} - T_0, \lambda_R q)$  есть стоимость предварительного подогрева питания, то полный оптимум получаем из соотношения

$$G_R(c_0^k, T_0) = \max_q \max_{T_{R+1}} [f_R(c_0^k, T_{R+1}, q) - H(T_{R+1} - T_0, \lambda_R q)]. \quad (8)$$

Если  $Q'_r = 0$ ,  $r = 1, \dots, R$ , т. е. не существует прямого теплообмена в реакторе  $r$ , мы будем говорить, что цепочка реакторов адиабатическая. Тогда можно выбрать только  $2R$  переменных, характеризующих режим работы,  $\theta_r, \lambda_r, T_{R+1}$ . Это следует из того, что при  $Q'_r = 0$  уравнения (1) и (2) могут быть решены относительно  $c_r^k$  и  $T_r$  при данных  $c_{r+1}^k, T_{r+1}$  только в том случае, когда заданы значения  $\lambda_{R+1}$  и  $\theta_r$ . Случаю адиабатической цепочки при одной реакции можно дать элементарное описание, что и будет сделано в следующем разделе.

### 5.9. Адиабатическая цепочка реакторов при одной реакции

Рассмотрим одну экзотермическую реакцию

$$\sum_1^n \alpha_i A_i = 0$$

в адиабатической цепочке реакторов равного объема. Поскольку такая реакция требует убывающего температурного градиента, можно надеяться, что байпасирование холодного питания существенно увеличит выход продукции. Так или иначе преимущество такой системы заключается в ее простоте. Не теряя общности, можно принять степень превращения в поступающем питании равной нулю,  $c_0 = 0$ . Тогда уравнения (5.8.1) и (5.8.2) в предположении  $\theta_r = \theta$ ,  $r = 1, \dots, R$  принимают вид

$$\lambda_{r+1} c_{r+1} - \lambda_r c_r + \theta r (c_r, T_r) = 0 \quad (1)$$

и

$$\lambda_{r+1} T_{r+1} - \lambda_r T_r + (\lambda_r - \lambda_{r+1}) T_0 + \theta H r (c_r, T_r) = 0. \quad (2)$$



Вместо температуры удобно ввести новую переменную той же размерности, что и  $c$ :

$$t = \frac{T - T_0}{H}. \quad (3)$$

Тогда уравнения запишутся так:

$$\lambda_r c_r - \lambda_{r+1} c_{r+1} = \lambda_r t_r - \lambda_{r+1} t_{r+1} = \theta r(c_r, t_r) \quad (4)$$

или

$$c_r - \mu_{r+1} c_{r+1} = t_r - \mu_{r+1} t_{r+1} = \frac{\theta r(c_r, t_r)}{\lambda_r}, \quad (5)$$

где

$$\mu_{r+1} = \frac{\lambda_{r+1}}{\lambda_r}. \quad (6)$$

Если представим  $t$  и  $c$  как координаты на плоскости, то состояние потока на любой стадии есть точка на этой плоскости, причем начало координат соответствует состоянию питания  $c = 0$ ,  $T = T_0$ . Точка с координатами  $(\mu t, \mu c)$  лежит на прямой, проходящей через начало координат и точку  $(t, c)$ . Эту прямую назовем лучом через точку  $(t, c)$ . Любая точка на этом луче представляет состояние смеси двух доз реагентов с состояниями  $(t, c)$  и  $(0, 0)$ , смешанных в отношении  $\mu : (1 - \mu)$ . Пусть  $\bar{c}_r = \mu_{r+1} c_{r+1}$  и  $\bar{t}_r = \mu_{r+1} t_{r+1}$ . Тогда уравнение (5) примет вид

$$c_r - \bar{c}_r = t_r - \bar{t}_r = \frac{\theta r(c_r, t_r)}{\lambda_r}. \quad (7)$$

Это уравнение выражает состояние выхода продукции  $(t_r, c_r)$  реактора  $r$  через состояние  $(\bar{t}_r, \bar{c}_r)$  поступающей на него продукции. Мы видим, что эти две точки на плоскости  $(t, c)$  лежат на прямой с единичным наклоном на расстоянии, пропорциональном скорости реакции  $r$ . Для одного реактора это показано на фиг. 19. Точка  $(t_2, c_2)$  характеризует состояние потока перед смешиванием в отношении  $\mu_2 : (1 - \mu_2)$  с исходным продуктом;  $\bar{c}_1 = \mu_2 c_2$ ,  $\bar{t}_1 = \mu_2 t_2$  есть состояние поступающего продукта в первый реактор, а  $c_1, t_1$  — состояние на его выходе.

Поставим задачу максимизации степени завершенности реакции  $c_1$  на выходе из последнего реактора.

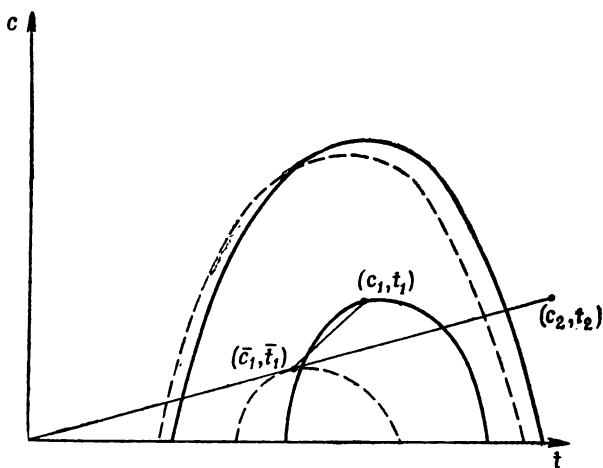
Далее следует отдельно рассматривать подогреватель и адиабатическую часть цепочки. Положим

$$f_R(c_{R+1}, t_{R+1}) = \max c_1. \quad (8)$$

Так как  $\lambda_1 = 1$  и  $c_{R+1}$  нужно будет положить равным нулю, то, вместо  $c_1$  можно подставить  $\sum_1^R (\lambda_r c_r - \lambda_{r+1} c_{r+1})$ , что по уравнению (4) равно  $\theta \sum_1^R r(c_r, t_r)$ . Применяя принцип оптимальности, имеем

$$f_R(c_{R+1}, t_{R+1}) = \max [\lambda_R c_R - \lambda_{R+1} c_{R+1} + f_{R-1}(c_R, t_R)] = \\ = \max [\theta r(c_R, t_R) + f_{R-1}(c_R, t_R)]. \quad (9)$$

На фиг. 19 показан способ непосредственного подсчета  $f_1(c_2, t_2)$ . Сплошными линиями даются графики



Фиг. 19. Оптимум одной стадии.

кривых, отвечающих постоянным значениям  $r(c, t)$ ; нижней кривой соответствует большее значение  $r$ , чем верхней. Пунктиром изображаются геометрические места точек  $\bar{t}$ ,  $\bar{c}$ , соответствующих входным условиям, для которых при времени пребывания в реакторе  $\theta$  скорость

реакции равна данной величине. Точка на пунктирной кривой, соответствующая состоянию поступающего в реактор питания, лежит ниже и левее точки, соответствующей его выходу, на расстоянии  $\theta r_1$ . При этом, поскольку  $\lambda_1 = 1$ , имеем

$$f_1(c_2, t_2) = \max(\lambda_1 c_1 - \lambda_2 c_2) = \max \theta r(c_1, t_1) \quad (10)$$

и

$$c_1 - \mu_2 c_2 = t_1 - \mu_2 t_2 = \theta r(c_1, t_1).$$

Итак, имея точку  $(t_2, c_2)$ , мы отыскиваем точку  $(\bar{t}_1, \bar{c}_1)$  на луче, проходящем через исходную точку, которая максимизирует  $r(c_1, t_1)$ . Так как более низкие кривые соответствуют более высоким скоростям реакции, то самое выгодное положение  $(\bar{t}_1, \bar{c}_1)$  будет, разумеется, в точке касания луча с одной из пунктирных кривых. Это показывает также, что  $f_1(c_2, t_2)$  на самом деле зависит лишь от отношения  $c_2/t_2$  и, следовательно, постоянна вдоль луча. Проведя эту операцию для ряда лучей, мы сможем начертить кривые:  $\bar{\Gamma}_1$  — геометрическое место оптимальных входных условий и  $\Gamma_1$  — геометрическое место соответствующих условий на выходе. Если теперь дано любое состояние  $(t_2, c_2)$ , то необходимо лишь соединить эту точку с началом координат и по точке пересечения этого луча с  $\bar{\Gamma}_1$  определить наилучшие входные условия. Проведя через эту точку прямую с единичным наклоном до кривой  $\Gamma_1$ , получим соответствующие условия на выходе. Значение  $\mu_2$  получим, разделив расстояние от начала координат до точки пересечения луча с  $\bar{\Gamma}_1$  на расстояние до точки  $(t_2, c_2)$ . Кривые  $\Gamma_1$  и  $\bar{\Gamma}_1$  изображены на фиг. 20. Для любой точки левее  $\bar{\Gamma}_1$   $f_1(c_2, t_2) \equiv 0$ .

Для  $f_2$  имеем следующее уравнение:

$$f_2(c_3, t_3) = \max[\theta r(c_2, t_2) + f_1(c_2, t_2)] \quad (11)$$

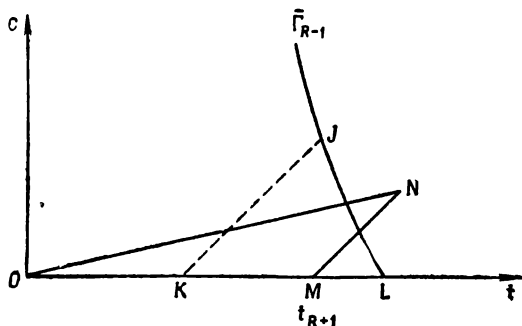
где

$$c_2 - \mu_3 c_3 = t_2 - \mu_3 t_3 = \theta r(c_2, t_2)/\lambda_2. \quad (12)$$

Для отыскания этого максимума выберем возможно более легкий путь, а именно вдоль луча. Так как  $f_1$  постоянно вдоль луча, максимум будет находиться в точке касания луча с кривой постоянной скорости реакции



прямую с наклоном, равным единице, до точки пересечения  $C$  с кривой  $\bar{\Gamma}_3 = \Gamma_2$ . Точно так же  $D$  лежит на пересечении  $OC$  и  $\bar{\Gamma}_2$  и  $\mu_3 = OD/OC$ .  $DE$  — прямая с единичным наклоном и  $E$  лежит на  $\Gamma_2$ ;  $F$  лежит на  $OE$  и  $\bar{\Gamma}_1$  и  $\mu_2 = OF/OE$ . Наконец, состоянию выхода соответствует



Фиг. 21. Оптимальная температура подогрева.

точка  $G$  на кривой  $\Gamma_1$ . По величинам  $\mu$  можно вычислить значения  $\lambda$

$$\lambda_1 = 1, \quad \lambda_2 = \mu_2, \quad \lambda_3 = \mu_3\mu_2, \quad \lambda_4 = \mu_4\mu_3\mu_2.$$

Такую диаграмму можно использовать вплоть до предпоследнего реактора ( $R - 1$ ); на последней стадии мы должны учитывать расходы на подогрев. Иными словами, для последнего реактора нужно выбрать наиболее экономичным образом температуру  $t_{R+1}$ . Так как  $c_{R+1} = 0$ , имеем

$$c_R = t_R - t_{R+1} = \frac{\theta r(c_R, t_R)}{\lambda_R}, \quad (13)$$

т. е. точка  $(t_R, c_R)$  лежит правее и выше точки  $(t_{R+1}, 0)$  на величину  $\theta r/\lambda_R$ . Чтобы найти точку  $(t_R, c_R)$ , начнем с любой точки оси  $t$  (см. фиг. 21, точка  $M$ ) и проведем через нее прямую с наклоном, равным 1.  $(t_R, c_R)$  есть точка  $N$ , удовлетворяющая уравнению (13) при значении  $\lambda_R$ , соответствующем оптимальному  $(R - 1)$  стадийному режиму. Итак, можно начертить геометрическое

место точек  $N$ , соответствующих значениям  $t_{R+1}$  в интервале  $KL$ .  $L$  есть точка пересечения  $\bar{\Gamma}_{R-1}$  с осью  $t$  и, очевидно, не имеет смысла двигаться дальше этой точки.  $K$  есть точка с координатами  $(t_{R+1}, 0)$ , соответствующая точке  $J$  с координатами  $(t_R, c_R)$ , для которой  $\lambda_R = 1$ . Если  $h(t_{R+1})$  есть расходы на подогрев до температуры  $t_{R+1}$ , разделенные на стоимость продукции с единичной мерой реакции, то оптимальный режим задается значением  $t_{R+1}$ , для которого  $f_{R-1}(c_R, t_R) - h(t_{R+1})$  максимальна, а  $c_R, t_R$  связано с  $t_{R+1}$  соотношением (13). Если  $h(t_{R+1})$  пропорционально  $t_{R+1}$ , то, разделив интервал  $KL$  на равные части, мы можем нанести на него шкалу  $h$ .

Построения, подобные этому, полезны лишь в случае стехиометрической функции выгоды, но зато они позволяют полностью представить оптимальный режим. Такое представление потребуется нам в следующей главе.

## ГЛАВА 6

### МНОГОСЛОЙНЫЙ АДИАБАТИЧЕСКИЙ РЕАКТОР

В настоящей главе рассматривается несколько задач проектирования конвертеров, состоящих из адиабатических слоев с охлаждением между слоями. Такое охлаждение производится либо с помощью теплообменника, либо с помощью байпасирования холодного нереагировавшего потока. В первом случае окажется возможным продвинуть аналитические выкладки несколько дальше, чем можно было бы ожидать; во втором случае успех зависит от численных оценок на ранней стадии. Если имеет место лишь одна реакция, то проектирование можно проводить с помощью графических представлений, подобных тем, которые были намечены в разд. 3.3 и 5.9. Позднее в этой главе будут рассмотрены одновременные реакции и охлаждение дозой холодной реагирующей смеси, отличной от исходного потока. Так или иначе, расчет  $R$ -слойного реактора требует выбора  $2R$  переменных. В случае охлаждения с помощью промежуточного теплообменника в качестве этих переменных можно взять размеры  $R$  слоев и  $R$  входных температур. Сюда включается наивыгоднейший подогрев холодного потока перед первой стадией и наивыгоднейшее его охлаждение между последующими стадиями. При этом стоимость промежуточного теплообменника будет зависеть от количества снимаемого тепла. В случае реактора с охлаждением холодной дозой питания нужно выбрать размеры  $R$  слоев,  $(R - 1)$  скоростей байпасирования и температуру первого слоя. В случае нескольких слоев при реалистических оценках расходов эта задача оказывается исключительно сложной при использовании любого метода, кроме метода динамического программирования. При простых оценках

расходов, которые здесь будут использованы, можно легко понять последовательность оптимального расчета. Хотя эти оценки и являются простыми, их можно будет далее интерпретировать как множители Лагранжа для решения ряда других задач. Вопрос о числе слоев, которые надо использовать в реакторе, тоже может быть оптимально решен на основе последующих рассуждений.

В данной главе рассмотрен случай экзотермической реакции, для которой необходимо охлаждение смеси между стадиями. Если реакция эндотермична, то она потребует нагревания между стадиями, и необходим тот же анализ расчета. Сомнительно, однако, что в этом случае лучше всего использовать адиабатические конвертеры, так как потребуются возможно более высокая температура и поэтому лучше использовать тепло, поддерживая эту температуру на протяжении всей реакции.

### 6.1. Охлаждение с помощью теплообменника при одной реакции

Для одной реакции, при упрощающем предположении о возможности использования средней удельной теплоемкости, имеем уравнения, выведенные в разд. 3.3:

$$\frac{dc}{dt} = r(c, T), \quad (1)$$

$$T = T_i + H(c - c_i). \quad (2)$$

Здесь  $c$  — степень завершенности реакции,  $T$  — температура,  $t$  — время с момента входа в аппарат,  $H = (-\Delta H)/C_p$ ; индексом  $i$  отмечены входные величины. Как упоминалось в гл. 3, этот случай можно интерпретировать графически на плоскости  $(c, T)$ , и на фиг. 1 это сделано для простой реакции первого порядка:

$$r = k_1 - (k_1 + k_2)c$$

при

$$k_1 = \exp\left(19 - \frac{12000}{T}\right), \quad k_2 = \exp\left(41 - \frac{25000}{T}\right) \quad (3)$$

и

$$H = 10^3.$$



Пунктирные линии — это адиабатические траектории, заданные уравнением (2).  $\Gamma_e$  — линия равновесия, на которой  $r = 0$ ,  $\Gamma_m$  — геометрическое место точек максимальной скорости реакции в адиабатическом слое. Если  $(c_m, T_m)$  есть точка на этой кривой, то ее естественно принять за начало координат на адиабатической траектории. Эту траекторию градуируем в масштабе времени пребывания в реакторе

$$\theta = \int_{c_m}^c \frac{dc}{r[c, T_m + H(c - c_m)]}, \quad (4)$$

требуемого для изменения степени завершенности реакции от  $c_m$  до  $c$ . На фиг. 1 показаны также кривые постоянного  $\theta$  для  $\pm \theta = 10, 50, 100, 200, 500$  и геометрические места точек постоянной скорости реакции ( $r = 1, 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}$ ). По этой диаграмме можно довольно быстро найти оптимальное решение методом проб и ошибок, так как интуитивно очевидно, что адиабатические траектории должны пересекать линию  $\Gamma_m$ . Однако покажем, что можно обойтись без этого метода.

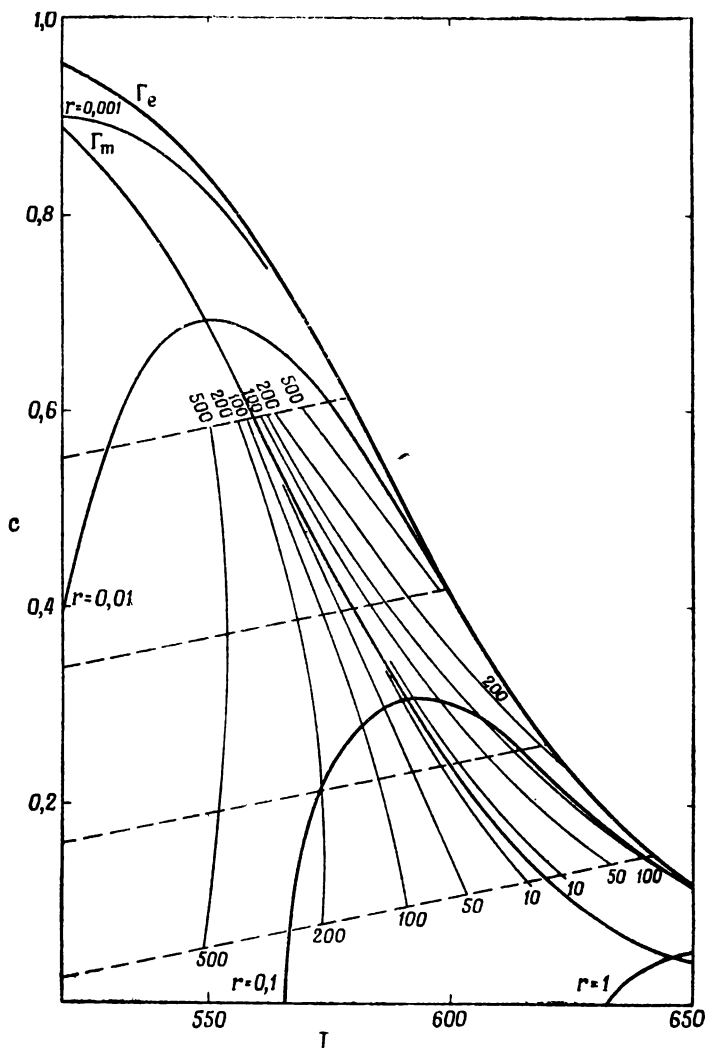
$R$  слоев реактора нумеруются от последнего к первому, выходные условия отмечаются штрихом. Тогда  $c_r, T_r$  есть состояние питания слоя  $r$ , а  $c'_r, T'_r$  — состояние на выходе этого слоя. Время пребывания  $\theta_r$  в этом слое дается в реакторе величиной

$$\theta_r = \int_{c_r}^{c'_r} \frac{dc}{r[c, T_r + H(c - c_r)]} = \int_{c_r}^{c'_r} \frac{dc}{r_r(c)}. \quad (5)$$

Так как в теплообменнике реакции не происходит, то

$$c_r = c'_{r+1}. \quad (6)$$

В соответствии с этими обозначениями условимся под  $c'_{R+1}, T'_{R+1}$  понимать исходное состояние питания, так что общее увеличение степени завершенности реакции будет равно  $c'_1 - c'_{R+1}$ . Если использовать материальную



Фиг. 1. (с, T)-плоскость для обратимой реакции первого порядка.

функцию выгоды и приписать каждому компоненту  $A_i$  его стоимость  $v_i$ , то увеличение стоимости смеси будет равно  $v(c'_1 - c'_{R+1})$ , где  $v = \sum_{i=1}^n v_i \alpha_i$  и  $\alpha_i$  — стехиометрические коэффициенты. Если  $q$  — скорость потока через реактор, то  $qv(c'_1 - c'_{R+1})$  — скорость увеличения стоимости потока. Предположим, что расходы на реактор пропорциональны его объему  $q\theta_r$ , причем коэффициент пропорциональности обозначим через  $\lambda v$  при соответствующем подборе  $\lambda$ . Подобным же образом для теплообменника расходы пропорциональны количеству подводимого или отводимого тепла, т. е.  $qC_p |T'_{r+1} - T_r|$ , а коэффициент пропорциональности будет  $\mu v/C_p$ .

Итак, функция выгоды (общий доход минус все расходы) будет равна

$$P_R = qv(c'_1 - c'_{R+1}) - \lambda qv \sum_1^R \theta_r - \mu qv \sum_1^R |T'_{r+1} - T_r| = qv \sum_1^R p_r, \quad (7)$$

где

$$p_r = c'_r - c_r - \lambda \theta_r - \mu |T'_{r+1} - T_r|. \quad (8)$$

Для получения последнего выражения для дохода от каждой стадии использовалось соотношение (6). Ясно, что при желании можно учесть различие в затратах на подогрев и на охлаждение.

Итак, задача состоит в следующем: при данных  $c'_{R+1}$ ,  $T'_{R+1}$  нужно максимизировать  $\sum_1^R p_r$  путем правильного выбора  $\theta_1$ ,  $\theta_R$  и  $T_1$ ,  $T_R$ . Так как  $\theta_r$  явно выражены через  $c'_r$  и найти обратное выражение довольно трудно, то, выбрав в качестве переменных  $c'_1$ ,  $c'_R$  и  $T_1$ ,  $T_R$ , получим эквивалентную, несколько более простую формулировку нашей задачи.

Пусть

$$f_R(c'_{R+1}, T'_{R+1}) = \max \sum_R^1 p_r = \\ = \max \sum_1^R \left\{ \int_{c_r}^{c'_r} \left[ 1 - \frac{\lambda}{r_r(c)} \right] dc - \mu |T'_{r+1} - T_r| \right\} \quad (9)$$

Далее, применяя принцип оптимальности, получим

$$f_R(c'_{R+1}, T'_{R+1}) = \\ = \max \left\{ \int_{c_R}^{c'_R} \left[ 1 - \frac{\lambda}{r_R(c)} \right] dc - \mu |T'_{R+1} - T_R| + f_{R-1}(c'_R, T'_R) \right\}. \quad (10)$$

В этом уравнении нужно максимизировать по  $c'_R$  и  $T_R$ , и мы покажем, что эту задачу об одновременном выборе двух переменных можно свести к задаче их последовательного выбора.

Начнем с одного слоя, для которого

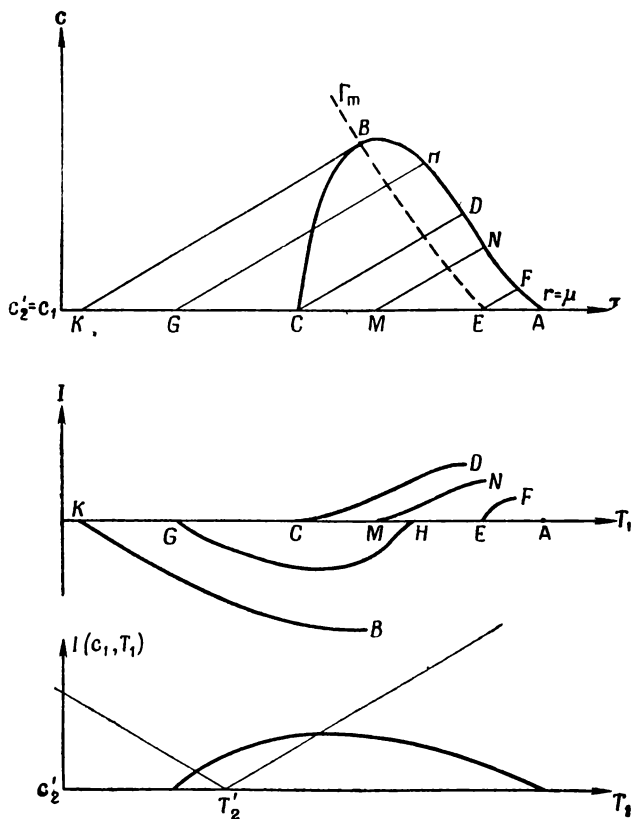
$$f_1(c'_2, T'_2) = \max \left\{ \int_{c_1}^{c'_1} \left[ 1 - \frac{\lambda}{r_1(c)} \right] dc - \mu |T'_2 - T_1| \right\}. \quad (11)$$

Предположим, что  $T_1$  уже выбрано, так что, поскольку  $c_1 = c'_2$ ,  $r_1(c) = r[c, T_1 + H(c - c_1)]$  — известная функция. Тогда  $c'_1$  нужно, очевидно, выбирать так, чтобы удовлетворялось соотношение

$$\frac{\partial p_1}{\partial c'_1} = 1 - \frac{\lambda}{r_1(c'_1)} = 0;$$

следовательно, входные условия должны лежать на кривой  $r(c, T) = \lambda$ . Эта кривая  $ABC$  показана в верхней части фиг. 2. Нам, разумеется, невыгодно брать точку  $c_1, T_1$ , соответствующую состоянию на выходе из

аппарата, на отрезке  $BC$  этой кривой, так как в этом случае вся реакция протекает в области, где скорость



Фиг. 2. Вычисление  $I(c, T)$ .

ее меньше  $\lambda$  и, следовательно, оказывается нерентабельной. Отрезок  $AB$  этой кривой обозначим  $\Gamma'_1$ .

Рассмотрим интеграл

$$I(c_1, T_1) = \int_{c_1}^{c'_1} \left[ 1 - \frac{\lambda}{r_1(c)} \right] dc, \quad (12)$$

где  $c'_1$  лежит на кривой  $\Gamma'_1$ . Изучим зависимость  $I$  от  $T_1$  при фиксированном  $c_1 = c'_1$ . Графики этой зависимости при адиабатическом процессе для различных значений  $c'_1$  изображены в средней части фиг. 2.

Если взять  $T_1$  равным абсциссе точки  $A$  (пересечение  $\Gamma'_1$  с прямой  $c = c_1$ ), то интеграл обращается в нуль. Если же взять  $T_1$  в точке  $K$ , так что адиабатическая траектория проходит через точку  $B$  (пересечение  $\Gamma_m$  и  $\Gamma_1$ ), то  $I$  становится отрицательным. При этом, разумеется, существуют траектории, такие, как  $EF$ ,  $MN$  или  $CD$ , на которых  $I$  положительно, и, следовательно, в силу непрерывности будет существовать некоторая траектория  $GH$ , для которой  $I = 0$ . Зависимость  $I$  от значения  $T_1$  после реакции изображена в нижней части фиг. 2. Горб этой кривой лежит между значениями  $T_1$ , соответствующими точкам  $A$  и  $G$ . На этой же части фигуры показан график функции  $\mu |T_1 - T'_2|$  в виде клина с вершиной в точке  $T_1 = T'_2$ .

Далее,

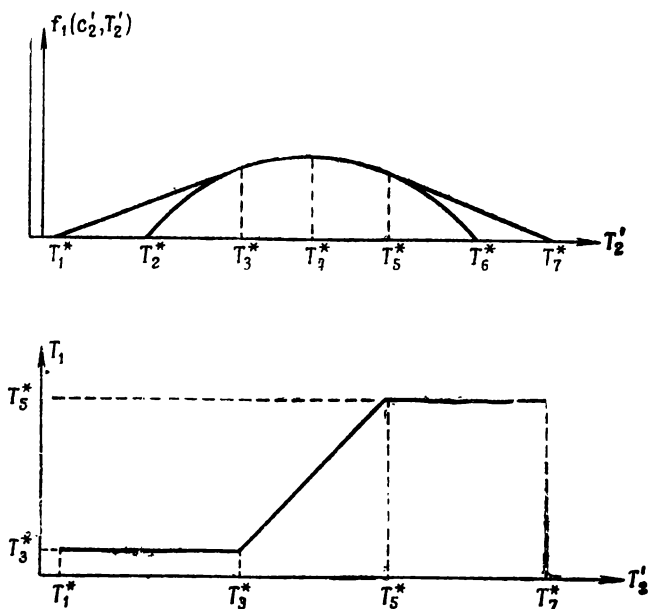
$$p_1 = I(c_1, T_1) - \mu |T_1 - T'_2|$$

и  $T_1$  нужно выбрать так, чтобы максимизировать это выражение. Теперь это можно сделать средствами элементарной геометрии. Выделим семь наиболее важных значений  $T_1$  (фиг. 3):

$T_1^*$  — точка, в которой касательная к кривой в точке  $T_3^*$  пересекается с осью;  $T_2^*$  — точка, где  $I = 0$  первый раз;  $T_3^*$  — точка, в которой касательная к кривой имеет наклон, равный  $\mu$ ;  $T_4^*$  — точка максимума  $I$ ;  $T_5^*$  — точка, в которой касательная к кривой имеет наклон, равный  $-\mu$ ;  $T_6^*$  — точка, где  $I = 0$  вторично;  $T_7^*$  — точка, в которой касательная к кривой в точке  $T_5^*$  пересекает ось.

Если  $T'_2$  лежит вне интервала  $(T_1^*, T_7^*)$ , то кривая  $I$  лежит целиком ниже угла  $\mu |T_1 - T'_2|$  и, следовательно,  $p_1 < 0$  при любом выборе  $T_1$ . Физически это означает, что температура в начальном состоянии так высока или так низка, что затраты  $\mu$  на охлаждение или подогрев

не окупаются при реакции. Если  $T'_2$  лежит внутри интервала  $(T_1^*, T_3^*)$ , то  $T_1$  нужно брать равным  $T_3^*$ . Если  $T_3^* \leq T'_2 \leq T_5^*$ , то наилучшее значение  $p_1$  есть  $T_1 = T'_2$ , т. е.



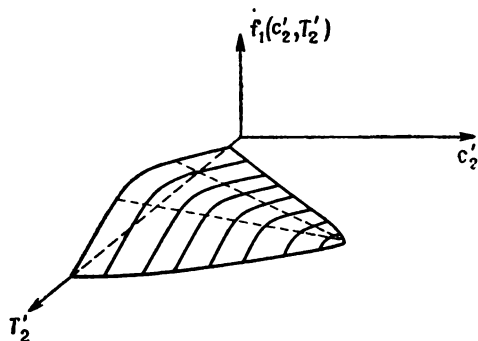
Фиг. 3. Оптимальный выход и входной температурный режим при фиксированном  $c'_2$ .

не требуется ни охлаждения, ни подогрева. Если  $T'_2$  лежит внутри интервала  $(T_5^*, T_7^*)$ , то смесь надо охладить и  $T_1$  выбирается равным  $T_5^*$ .  $T_4^*$  есть предел, к которому стремятся  $T_3^*$  и  $T_5^*$  при  $\mu \rightarrow 0$ . Это — оптимальный выбор температуры на входе при исчезающе малых расходах на охлаждение или подогрев.  $T_2^*$  и  $T_6^*$  представляют интерес с той точки зрения, что если  $\mu$  превосходит производные в этих точках, то при любом начальном значении невыгодно ни охлаждение, ни нагрев.

Оптимальный выбор температуры  $T_1$  показан в нижней части фиг. 3. Он ведет к следующим значениям функции выгоды:

$$f_1(c'_2, T'_2) = \begin{cases} I(c'_2, T_3^*) - \mu(T_3^* - T'_2), & T_1^* \leq T'_2 \leq T_3^*, \\ I(c'_2, T'_2), & T_3^* \leq T'_2 \leq T_5^*, \\ I(c'_2, T_5^*) - \mu(T'_2 - T_5^*), & T_5^* \leq T'_2 \leq T_7^*, \\ 0, & T < T_1^*, T > T_7^*. \end{cases} \quad (13)$$

Но это означает, что график  $f_1$  получается из кривой  $I$  отбрасыванием крутых ее частей  $(T_2^*, T_3^*)$  и  $(T_5^*, T_6^*)$  и заменой их на касательные с наклоном  $\pm \mu$ . Это построение было проведено при фиксированном  $c_1 = c'_2$ , но его, очевидно, можно повторить при любом  $c'_2$  в результате чего образуется поверхность, показанная на

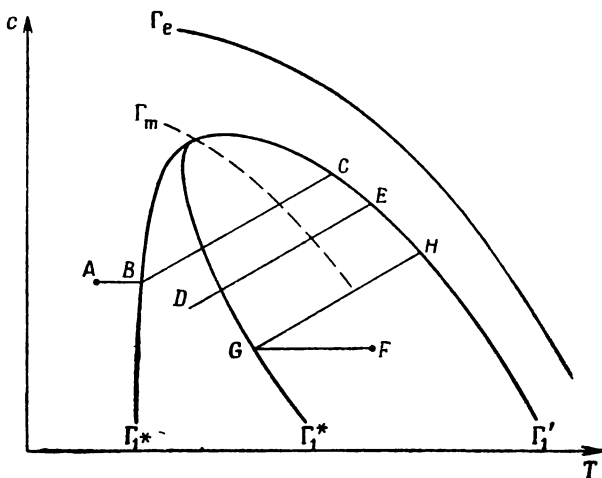


Фиг. 4. Поверхность оптимального выхода.

фиг. 4. Таким же путем можно найти геометрическое место точек  $T_3^*$ ,  $T_5^*$  при изменении  $c'_2$  и начертить кривые  $\Gamma_{1*}$  и  $\Gamma_1^*$ , как показано на фиг. 5. Это исследование позволяет очень быстро построить полный оптимальный режим. Если состоянию  $(c'_2, T'_2)$  соответствует точка  $A$  слева от кривой  $\Gamma_{1*}$ , то необходимо сначала подогреть смесь до состояния  $B$ , а затем дать ей прореагировать до состояния  $C$ . Если начальному состоянию соответствует точка  $D$  между двумя ветвями  $\Gamma_1$ , то без подогрева или охлаждения нужно дать ей прореагировать до состояния  $E$ . Если состояние представлено точкой  $F$ ,



то сначала необходимо охладить смесь до состояния  $G$  и затем реакция идет до точки  $H$ . На кривой  $\Gamma'_1$  можно нанести масштаб значений  $I$  для траекторий, проходящих от  $\Gamma_1^*$  или  $\Gamma_{1*}$  до  $\Gamma'_1$ . Поскольку  $|T'_2 - T_1|$  есть длина отрезка  $AB$  или  $FG$ , то можно легко вычислить  $f_1$  из уравнения (13).



Фиг. 5. Оптимальный режим для одного слоя.

Это построение было осуществлено полностью, как видно из структуры оптимального режима. Однако при практических расчетах построение обычно начинают в обратном порядке от  $\Gamma'_1$ . Если продифференцировать  $p_1$  по  $T_1$ , считая, что  $(c'_1, T'_1)$  лежит на  $\Gamma'_1$ , получим

$$\frac{\partial p_1}{\partial T_1} = \lambda \int_{c_1}^{c'_1} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial r}{\partial T} \right) dc \pm \mu.$$

Производная обращается в нуль при

$$J(c_1, T_1) = \int_{c_1}^{c'_1} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial r}{\partial T} \right) dc = \mp \frac{\mu}{\lambda}, \quad (14)$$

и интеграл можно вычислить, двигаясь в обратном направлении по адиабатической траектории от точки ее пересечения с  $\Gamma'_1$ . Хорн и Кюхлер [37] проделали это для случая  $\mu = 0$ .

Подготовим несколько формул для перехода к следующей стадии. Заметим, что нетрудно вычислить производные от функции  $f_1$ . Предположим, что  $(c'_2, T'_2)$  лежит между двумя ветвями кривой  $\Gamma_1$ .

Тогда

$$f_1(c'_2, T'_2) = I_1(c'_2, T'_2) = \int_{c_1}^{c'_1} \left\{ 1 - \frac{\lambda}{r[c, T'_2 + H(c - c'_2)]} \right\} dc. \quad (15)$$

Таким образом,

$$\frac{\partial f_1}{\partial T'_2} = \lambda J(c'_2, T'_2). \quad (16)$$

и

$$\frac{\partial f_1}{\partial c'_2} = -H\lambda J(c'_2, T'_2) - \left[ 1 - \frac{\lambda}{r(c'_2, T'_2)} \right]. \quad (17)$$

Если  $(c'_2, T'_2)$  лежит слева от  $\Gamma_{1*}$ , то по уравнению (13)

$$f_1(c'_2, T'_2) = \int_{c_1}^{c'_1} \left\{ 1 - \frac{\lambda}{r[c, T_1 + H(c - c_1)]} \right\} dc - \mu(T_1 - T'_2),$$

где  $c_1 = c'_2$  и  $T_1 = T_3^*(c_1)$  зависит лишь от  $c'_2$ . В этом случае

$$\frac{\partial f_1}{\partial T'_2} = \mu, \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial c'_2} &= [\lambda J(c_1, T_1) - \mu] \frac{dT_1}{dc_2} - H\lambda J(c_1, T_1) - \\ &- \left[ 1 - \frac{\lambda}{r(c_1, T_1)} \right] = -H\mu - \left[ 1 - \frac{\lambda}{r(c_1, T_1)} \right], \quad (19) \end{aligned}$$

так как  $J(c_1, T_1) = \mu/\lambda$ .

Тот же результат, но с заменой  $\mu$  на  $-\mu$  получается в том случае, когда  $(c'_2, T'_2)$  лежит правее  $\Gamma_1^*$ . Все эти

формулы [(16) — (19)] можно свести к следующим двум:

$$\frac{\partial f_1}{\partial T_2'} = \lambda J(c_1, T_1) \quad (20)$$

и

$$\frac{\partial f_1}{\partial c_2'} = -H\lambda J(c_1, T_1) \left[ 1 - \frac{\lambda}{r(c_1, T_1)} \right] \quad (21)$$

так как в этом случае, согласно (16) и (17),  $c_1 = c_2'$ ,  $T_1 = T_2'$ , в то время как в других случаях  $\lambda J$  есть  $\mu$  или  $-\mu$ . Во всех случаях

$$\frac{\partial f_1}{\partial c_2'} + H \frac{\partial f_1}{\partial T_2'} = - \left[ 1 - \frac{\lambda}{r(c_1, T_1)} \right], \quad (22)$$

что представляет собой производную по  $c_2'$  вдоль адиабатической траектории.

Переходя к рассмотрению двух адиабатических слоев, мы должны решить уравнение

$$f_2(c_3', T_3') = \max_{c_2'} \left\{ \int_{c_2'}^{c_2'} \left[ 1 - \frac{\lambda}{r_2(c)} \right] dc - \mu |T_2 - T_3'| + f_1(c_2', T_2') \right\}. \quad (23)$$

Вновь предположим, что  $T_2$  выбрано так, что адиабатическая траектория фиксирована. Дифференцируя далее по  $c_2'$  вдоль адиабатической траектории, получим

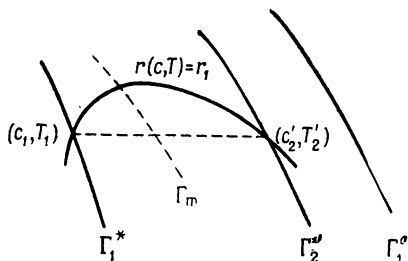
$$\frac{\partial}{\partial c_2'} [p_2 + f_1(c_2', T_2')] = \left[ 1 - \frac{\lambda}{r(c_2', T_2')} \right] - \left[ 1 - \frac{\lambda}{r(c_1, T_1)} \right]. \quad (24)$$

Эта производная обращается в нуль при

$$r(c_2', T_2') = r(c_1, T_1), \quad (25)$$

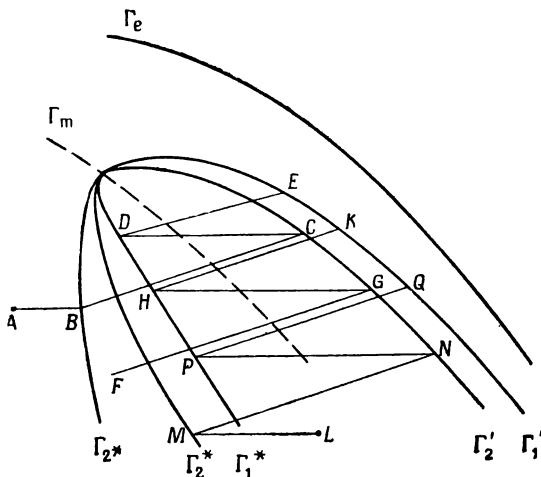
так что скорость реакции на выходе из второго аппарата должна быть такой же, как на выходе из первого. Это явление было впервые объяснено Хорном и Кюхлером [37]. Разумеется, точку  $(c_2', T_2')$  нельзя отождествлять с точкой  $(c_1, T_1)$ , так как это означало бы, что оба слоя соединены в один; выходные условия могут

быть найдены по характеру кривых постоянной скорости реакции  $r(c, T)$ . Возьмем любую точку на  $\Gamma_1^*$  (фиг. 6)



Фиг. 6. Вычисление входных условий во второй слой.

и продолжим кривую  $r(c, T) = r(c_1, T_1) = r_1$  до тех пор, пока  $c$  снова не обратится в  $c_1$ . Это даст точку  $(c'_2, T'_2)$  на кривой  $\Gamma_2'$  — геометрическом месте точек оптимальных условий на выходе второго слоя.



Фиг. 7. Оптимальный режим для двух слоев.

Перейдем теперь к вычислению  $I(c_2, T_2)$  для различных значений  $T_2$  и  $c_2 = c'_3$ . Как и прежде, это, очевидно, будет кривая, подобная той, которая изображена в нижней части фиг. 2. Следовательно,  $I_2(c_2, T_2) + f_1(c'_2, T'_2)$

получится наложением этих графиков и на  $f_1$  возникает дополнительный горб. Так как  $f_2$  задается уравнением (23), то, как и прежде, ее графиком будет служить эта кривая, дополненная касательными с наклоном  $\pm \mu$ . Точки касания получают ту же самую интерпретацию: их геометрические места образуют те кривые  $\Gamma_2^*$  и  $\Gamma_{2*}$ , на которых должны лежать входные условия для первого слоя. Графическое построение оптимального режима показано на фиг. 7, где точки  $A$  и  $L$  представляют начальные состояния, требующие нагрева или охлаждения соответственно перед реакцией, а  $F$  соответствует условиям, при которых самым выгодным оказывается немедленно начать реакцию.

Можно следующим образом вычислить положение ветвей кривой  $\Gamma_2$  аналитически:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T_2} [J(c_2, T_2) + f_1(c'_2, T'_2)] &= \\ &= \lambda J(c_2, T_2) + \left[ 1 - \frac{\lambda}{r(c'_2, T'_2)} \right] \frac{\partial c'_2}{\partial T_2} + \frac{\partial f_1}{\partial c'_2} \frac{\partial c'_2}{\partial T_2} + \frac{\partial f_1}{\partial T'_2} \frac{\partial T'_2}{\partial T_2} = \\ &= \lambda J(c_2, T_2) + \left\{ \left[ 1 - \frac{\lambda}{r(c'_2, T'_2)} \right] - \left[ 1 - \frac{\lambda}{r(c_1, T_1)} \right] \right\} \frac{\partial c'_2}{\partial T_2} + \\ &+ \lambda J(c_1, T_1) \left( \frac{\partial T'_2}{\partial T_2} - H \frac{\partial c'_2}{\partial T_2} \right) = \lambda J(c_2, T_2) + \lambda J(c_1, T_1) = \\ &= \lambda J(c_2, T_2) - \mu. \end{aligned} \quad (26)$$

Так как выполнено уравнение (24),  $T'_2 - Hc'_2 = T_2 - Hc_2$  и при охлаждении между стадиями  $\lambda J(c_1, T_1) = -\mu$ . Итак, дифференцируя максимизируемую величину в уравнении (23) и подставляя производную, равную нулю, найдем, что  $\Gamma_2^*$  есть геометрическое место точек  $J(c_2, T_2) = 0$ ,  $\Gamma_{2*}$  — геометрическое место точек  $J(c_2, T_2) = 2\mu/\lambda$  при  $(c'_2, T'_2)$ , лежащих на  $\Gamma_2$ .

Замечательно то, что производные от  $f_2$  тоже можно найти аналитически. После преобразований получим

$$\frac{\partial f_2}{\partial c'_3} = - \left[ 1 - \frac{\lambda}{r(c_2, T_2)} \right] - H[\lambda J(c_2, T_2) - \mu], \quad (27)$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial T'_3} = \lambda J(c_2, T_2) - \mu \quad (28)$$

и, следовательно, по адиабатическому направлению

$$\frac{df_2}{dc'_3} + H \frac{df_2}{dT'_3} = - \left[ 1 - \frac{\lambda}{r(c_2, T_2)} \right]. \quad (29)$$

Отсюда следует, что кривая  $\Gamma'_3$ , на которой должны лежать условия на выходе первого из трех слоев, может быть построена по  $\Gamma_2^*$  точно так же, как строилась  $\Gamma'_2$  по  $\Gamma_1^*$ . Исходя из кривой  $\Gamma'_3$ , можно найти обе ветви  $\Gamma_3$  геометрического места входных условий, интегрируя назад вдоль адиабатических траекторий до тех пор, пока  $J(c_3, T_3)$  не станет равным нулю или  $2\mu/\lambda$ . Следуя по этому пути, можно начертить семейство кривых  $\Gamma_1, \dots, \Gamma_R$  и  $\Gamma_1^*, \dots, \Gamma_R^*$  (с двумя ветвями каждая). Обычно для проекта с  $R$  стадиями из второго семейства используется только ветвь  $\Gamma_{R*}$  кривой  $\Gamma_R$  и ветви  $\Gamma_r^*$  кривых  $\Gamma_r$ ,  $r = (R - 1), \dots, 1$ . Оптимальный проект дается лесенкой из горизонтальных линий и линий с наклоном  $H$ , проходящей от состояния исходного продукта ( $c'_{R+1}, T'_{R+1}$ ) к  $\Gamma_{R*}$  и далее последовательно к  $\Gamma'_R, \Gamma_{R-1}^*, \Gamma'_{R-1}, \Gamma_{R-2}^*, \dots, \Gamma_1^*, \Gamma'_1$  (фиг. 7).

В изложении этого случая мы по возможности старались придерживаться графических построений по той причине, что они ведут к быстрому и достаточно точному решению задачи предварительного проектирования. Действительные подробные вычисления, разумеется, быстрее всего осуществлять на счетных машинах. При этом функции  $\Gamma$  следует запоминать и использовать в виде таблиц и для любых данных значений  $\lambda$  и  $\mu$  весь процесс займет несколько минут. Покажем теперь, как простой вид решения этой модели позволит решать другие важные задачи проектирования.

## 6.2. Обобщение результатов простой модели

Константы  $\lambda$  и  $\mu$  можно рассматривать как множители Лагранжа и записать

$$\text{Max } P_R = qvf_R(c'_{R+1}, T'_{R+1}; \lambda, \mu). \quad (1)$$

Предположим теперь, что мы ищем оптимальное решение, при котором общий объем всего реактора равен  $V$ . Так как  $V = q \sum_1^R \theta_r$ , то этот объем можно подсчитать, зная оптимальный режим для любых данных  $\lambda$  и  $q$ . Далее,  $\Theta_R(\lambda) = \sum_1^R \theta_r$  есть функция от  $\lambda$ , не зависящая от  $q$ , так что если  $q$  зафиксирована по каким-либо иным соображениям, то задача решается по уравнению (1), причем значение  $\lambda$  берется из соотношения  $\Theta_R(\lambda) = V/q$ . Существуют случаи, для которых такое рассмотрение играет первостепенное значение, как, например, в технологии высоких давлений, где существующие аппараты могут оказаться слишком дорогостоящими и от них нельзя отказаться, но тогда необходимо переконструировать конвекторы внутри них. Подобным же образом можно использовать и  $\mu$ , если требуется ограничить общий теплообмен.

К интересному рассмотрению приводит случай, когда необходимо зафиксировать производство одного из химических веществ, например  $A_1$ . Скорость образования  $A_1$  равна  $q\alpha_1(c'_1 - c'_{R+1})$ , следовательно, при любом данном  $q$  степень превращения на выходе  $c'_1$  фиксирована. Предположим, что  $\mu$  известно и даны либо  $\lambda$ , либо  $V$ ; в последнем случае  $\lambda$  определяется для любого данного  $q$  способом, описанным выше. Начинаем двигаться от конца в обратном направлении, так как условия на выходе должны лежать на кривой  $\Gamma'_1$ , где  $c = c'_1$ . Продвигаясь последовательно к  $\Gamma_1^*$ ,  $\Gamma'_2$ ,  $\Gamma_2^*$  и т. д. по адиабатическим или горизонтальным прямым, мы в конце концов достигнем прямой  $c = c'_{R+1}$ . Точка на этой прямой, однако, не обязательно дает оптимальное значение входной температуры, но по ней можно вычислить общий доход  $P_R$ . Этот доход зависит от  $q$ , которую можно определить, несколько раз повторив вычисления. Если  $h(q)$  есть расходы на поддержание скорости потока  $q$ , то наилучший проект должен максимизировать  $P_R - h(q)$ . При таком подходе мы определим также число слоев, и если используются ограничения на  $V$ , то

их общий объем будет постоянным. Следует заметить, что этот расчет проводится непосредственно: для данного  $c'_1$  фиксируем также  $T'_1$  как наивысшую температуру, при которой  $r(c'_1, T'_1) = \lambda$ . Далее, интеграл  $J$  вычисляется вдоль адиабатической прямой от этой точки до тех пор, пока он не станет равным  $-\mu/\lambda$ ; это дает точку  $c_1, T_1$ . Теперь  $c$  фиксируется, а  $T$  изменяем до тех пор, пока  $r(c_1, T)$  снова не станет равным  $r(c_1, T_1)$ . Затем интеграл  $J$  вычисляется вдоль адиабатической прямой, пока он не обратится в нуль, и так далее, пока не дойдем до  $c = c'_{R-1}$ .

Этот же метод пригоден и в том случае, когда используются более общие оценки стоимости потока, например

$$v(c) = v(c_{10} + \alpha_1 c, \quad c_{n0} + \alpha_n c),$$

где  $v$  — дифференцируемая функция.

Заменяем  $J$  интегралом

$$\int_c^{c'} \left[ v'(c) - \frac{\lambda}{r(c, T)} \right] dc.$$

Кривая  $\Gamma'_1$  представляет теперь геометрическое место точек, для которых

$$v'(c) r(c, T) = \lambda.$$

Начиная с этого момента, все построения проходят, как прежде.

### 6.3. Охлаждение с помощью теплообменника при нескольких одновременно протекающих реакциях

Если вновь обозначить через  $t$  время пребывания, начиная от момента входа в слой, то уравнения для  $m$  одновременно протекающих реакций получаются из уравнений (3.4.11) и (3.4.12), если положить

$$\frac{dc^j}{dt} = r^j(c^1, \dots, c^m, T) \quad (j=1, \quad m), \quad (1)$$

$$\frac{dT}{dt} = \sum_{j=1}^m H^j r^j(c^1, \dots, c^m, T). \quad (2)$$



Исключая  $r^j$  из уравнений (1) и (2), получим

$$T = T_i + \sum_{j=1}^m H^j (c^j - c_i^j), \quad (3)$$

где  $c_i^1, \dots, c_i^m, T_i$  есть состояние в какой-либо точке слоя в любой момент времени. Уравнение (3) можно подставить в уравнение (1) и получить замкнутую систему  $m$  уравнений с  $m$  неизвестными. Однако для расчетов на быстродействующих вычислительных машинах это, по-видимому, не самый лучший способ.

Как и прежде, штрих обозначает условия на выходе из слоя, а индекс  $r$  относится к величинам, характеризующим слой  $r$ . Впоследствии окажется возможным, проинтегрировав уравнения (1) и (2), определить условия на выходе через входные условия и  $\theta_r$ . Этот процесс обычно осуществляют с помощью численного интегрирования, но мы будем выражать принципиальную возможность такого решения тем, что запишем

$$c_r^{j'} = c_r^j + h_j(c_r^1, \dots, c_r^m, T_r, \theta_r) \quad (j=1, \dots, m), \quad (4)$$

$$T_r' = T_r + \sum_1^m H^j h_j(c_r^1, \dots, c_r^m, T_r, \theta_r). \quad (5)$$

Так как в теплообменнике реакций не происходит, то

$$c_{r+1}^{j'} = c_r^j. \quad (6)$$

Пусть  $v(c^1, \dots, c^m)$  обозначает стоимость единицы объема потока, если степени превращений для различных реакций равны  $c^1, \dots, c^m$ ; тогда общий доход на всем реакторе равен

$$\begin{aligned} q[v(c_1^1, \dots, c_1^m) - v(c_{R+1}^1, \dots, c_{R+1}^m)] = \\ = q \sum_1^R [v(c_r^1, \dots, c_r^m) - v(c_r^1, \dots, c_r^m)]. \end{aligned} \quad (7)$$

Затраты, связанные с реактором, включают:

$C_1(\theta_r, q)$  — капитальные и эксплуатационные расходы на работу слоя со временем пребывания в нем  $\theta_r$  при скорости потока  $q$ ;

$C_2(T'_{r+1}, T_r, q)$  — капитальные и эксплуатационные расходы на теплообменник, который должен изменять температуру потока, поступающего со скоростью  $q$  от  $T'_{r+1}$  до  $T_r$ <sup>1)</sup>;

$C_3(q)$  — расходы на поддержание скорости потока  $q$ . Этот член может зависеть не только от  $q$ , но и от всей установки в целом. Однако следует принять во внимание, что  $q$  выбирается постоянным для всех стадий и не изменяется от стадии к стадии.

Итак, функцию выгоды, выражающую чистый доход от реактора, можно записать

$$P_R = q \sum_1^R [v(c_r^{k'}) - v(c_r^k)] - \sum_1^R C_1(\theta_r, q) - \sum_1^R C_2(T'_{r+1}, T_r, q) - C_3(q). \quad (8)$$

Так как  $q$  не меняется от стадии к стадии, то в процессе динамического программирования мы должны считать ее постоянной величиной. Пусть

$$\frac{P_R + C_3(q)}{q} = \sum_1^R p_r, \quad (9)$$

где

$$p_r = v(c_r^{k'}) - v(c_r^k) - \gamma_1(\theta_r) - \gamma_2(T'_{r+1}, T_r) \quad (10)$$

и

$$\begin{aligned} \gamma_1(\theta_r) &= \frac{C_1(\theta_r, q)}{q}, \\ \gamma_2(T'_{r+1}, T_r) &= \frac{C_2(T'_{r+1}, T_r, q)}{q}. \end{aligned} \quad (11)$$

Теперь пусть

$$f_R(c_{R+1}^{k'}, T'_{R+1}) = \text{Max} \sum_1^R p_r. \quad (12)$$

<sup>1)</sup> Для охлаждения можно использовать теплообменник, а подогрев осуществлять в печи или электронагревателем. Тогда  $C_2$  может оказаться существенно разной для двух случаев:  $T'_{r+1} < T_r$  и  $T_r < T'_{r+1}$ .

Тогда по принципу оптимальности

$$f_R(c_{R+1}^{k'}, T'_{R+1}) = \text{Max} [p_R + f_{R-1}(c_R^{k'}, T'_R)]. \quad (13)$$

В этой последней формуле мы должны лишь выбрать  $T_R$  и  $\theta_R$ , так как после этого все выражение вычисляется с помощью уравнений (4) и (5).

Трудность решения этих уравнений состоит лишь в том, что нужно запоминать и интерполировать функцию от  $m + 1$  переменных. Если это возможно, то максимизацию можно осуществить непосредственно. Для любых пробных значений  $T_R$  выполняется интегрирование уравнений (1) и (2) до тех пор, пока не достигается максимум  $p_R + f_{R-1}$ . Он достигается при

$$\sum_{j=1}^m \left( \frac{\partial v}{\partial c^{j'}} + \frac{\partial f_{R-1}}{\partial c^{j'}} + H^j \frac{\partial f_{R-1}}{\partial T'} \right) r^j(c_r^{k'}, T'_r) = \gamma'_1(\theta_r), \quad (14)$$

и только в особом случае  $\gamma'_1 = \text{const}$  это соотношение определяет единственную точку на адиабатической траектории. Получающийся максимум  $p_R + f_{R-1}$  регистрируется, и вычисления повторяются для нового значения  $T_R$  до тех пор, пока не будет найдено оптимальное значение.

Весь этот процесс проводится при постоянном  $q$  и для этого значения  $q$ :

$$\text{Max } P_R = qf_R - C_3(q).$$

Здесь также может оказаться, что существует оптимальное значение  $q$ , и оно может быть найдено при дальнейшей максимизации по отношению к вариациям  $q$ .

При  $m > 2$  весь метод наталкивается на обычные затруднения, связанные с решением многомерных задач, и, кажется, нет никакого способа этого избежать. Однако во многих случаях оказывается возможным рассматривать одну доминирующую и одну побочную реакцию. Это может, во всяком случае, привести к некоторым идеям о том, где лежит оптимальный режим, и в случае необходимости может быть использовано для определения сравнительно малой области, внутри которой нужно будет далее интерполировать  $f_1, f_2, \dots, f_{R-1}$ .

#### 6.4. Применение части холодного потока в качестве хладагента при одной реакции

В этом разделе введем простую замену переменной величины. Эту замену можно было бы ввести раньше или вообще обойтись без нее, но может быть для некоторых читателей представят интерес те несколько более удобные соотношения, к которым она приводит.

Обозначим через  $c_0$ ,  $T_0$  состояние неореагировавшего исходного потока, который должен использоваться как для охлаждения смеси между стадиями, так и после нагрева для питания первого слоя. Не теряя общности, мы можем положить  $c_0 = 0$  и вместо  $T$  введем

$$t = \frac{T - T_0}{H}. \quad (1)$$

Тогда основной поток продукта питания представляется началом координат в плоскости  $(c, t)$ , а уравнение (6.1.2) для траектории переходит в следующее:

$$t = t_i + c - c_i. \quad (2)$$

Следовательно, преобразование плоскости  $(c, T)$  состоит в перенесении начала координат в точку, соответствующую состоянию исходного потока, и в превращении адиабатических траекторий в прямые с наклоном, равным единице.

Система слоев совершенно аналогична системе реакторов с мешалками на фиг. 18 в гл. 5. Часть  $\lambda_{Rq}$  начального потока подогревается и проходит в реактор  $R$ , а остаток распределяется между остальными слоями;  $\lambda_r q$  есть поток через реактор  $r$ , условия на входе и выходе которого обозначаются через  $c_r$ ,  $t_r$  и  $c'_r$ ,  $t'_r$  соответственно. При смешивании получаем

$$\lambda_r c_r = \lambda_{r+1} c'_{r+1} \quad \text{и} \quad \lambda_r t_r = \lambda_{r+1} t'_{r+1}. \quad (3)$$

Теперь удобно ввести, как и прежде,

$$\mu_{r+1} = \frac{\lambda_{r+1}}{\lambda_r}, \quad (4)$$

так что

$$c_r = \mu_{r+1} c'_{r+1}, \quad t_r = \mu_{r+1} t'_{r+1}. \quad (5)$$

Для слоя объема  $V_r$

$$\frac{V_r}{q\lambda_r} = \int_{c_r}^{c'_r} \frac{dc}{r(c, c + t_r - c_r)} \quad (6)$$

и удобно ввести  $\theta_r = V_r/q$  — среднее время пребывания в реакторе, если бы весь поток проходил через слой  $r$ . Как и прежде, рассмотрим максимизацию конечной степени превращения  $c'_1$ , и так как  $\lambda_1 = 1$ ,  $c_R = c_0 = 0$ , то, учитывая уравнение (3), можно написать

$$c'_1 = \sum_{r=1}^R \lambda_r (c'_r - c_r). \quad (7)$$

Если вновь расходы на слой пропорциональны его объему, то функция выгоды будет иметь вид

$$P_R = \sum_1^R p_r = \sum_1^R \lambda_r (c'_r - c_r) - \nu \theta_r = \sum_1^R \lambda_r \int_{c_r}^{c'_r} \left[ 1 - \frac{\nu}{r_r(c)} \right] dc. \quad (8)$$

Максимизация ее достигается за счет выбора размеров  $R$  слоев  $\theta_R, \dots, \theta_1$ ,  $(R - 1)$  отношений байпасирования  $\lambda_R, \dots, \lambda_2$  и входной температуры  $t_R$ . Эквивалентная система переменных  $t_R, \lambda_R, \dots, \lambda_2, c'_R, \dots, c'_1$  при водит к более удобному виду уравнения. Функция выгоды (8) учитывает чистый доход лишь от адиабатической части системы, но, выбирая  $t_R$ , мы должны считаться и с расходами на подогрев. Однако последние  $(R - 1)$  слоев необходимо исследовать отдельно, точно так же, как это было сделано для цепочки реакторов с мешалками. Причина этого заключается в том, что слой  $R$  поставлен в несколько иные условия; его следует рассматривать вместе с подогревателем, точно так же, как другие должны изучаться вместе с устройством для смешивания на их входе.

Пусть

$$f_{R-1}(c'_R, t'_R)$$

равно максимальному значению  $P_{R-1}$ , когда условия на выходе из реактора  $R$  есть  $c'_R, t'_R$ . Тогда по принципу оптимальности

$$f_{R-1}(c'_R, t'_R) = \text{Max} \left\{ \lambda_{R-1} \int_{c'_{R-1}}^{c'_{R-1}} \left[ 1 - \frac{\nu}{r_{R-1}(c)} \right] dc + f_{R-2}(c'_{R-1}, t'_{R-1}) \right\}, \quad (9)$$

где

$$c_{R-1} = \mu_R c'_R$$

и максимум достигается выбором  $\mu_R$  и  $c'_{R-1}$ .

Вновь рассмотрим случай одного адиабатического слоя ( $R = 2$ ):

$$f_1(c'_2, t'_2) = \text{Max} \int_{c_1}^{c'_1} \left[ 1 - \frac{\nu}{r_1(c)} \right] dc \quad (10)$$

и

$$c_1 = \mu_2 c'_2, \quad t_1 = \mu_2 t'_2.$$

Как и прежде, выбираем  $c'_1$  из того условия, что при заданном  $\mu_2$  производная от правой части равенства (10) обращается в нуль при

$$r(c'_1, t'_1) = \nu. \quad (11)$$

Следовательно, вновь получим кривую  $\Gamma'_1$ , на которой должны лежать условия на выходе. Оптимальное значение  $\mu_2$  лучше всего искать с помощью прямых вычислений, так как в этом случае аналитические соотношения не упрощаются так, как прежде. Точка  $(c_1, t_1)$  всегда лежит на луче, проходящем через начало координат и данную точку  $(c'_2, t'_2)$ . Следовательно, для вычисления  $p_1$  выберем любую точку на этой прямой и проинтегрируем вдоль адиабатической траектории до  $\Gamma'_1$ . Выбрав такую начальную точку, которая дает наибольшее значение  $p_2$ , получим значение  $\mu_2$  из отношения  $c_1/c'_2$ . Очевидно, что входное условие будет оптимальным для всех

точек  $(c'_2, t'_2)$ , лежащих на том же луче. Повторив эти вычисления для различных лучей, т. е. для различных значений  $t'_2/c'_2$ , получим кривую  $\Gamma_1$  оптимальных входных условий. Тогда  $f_1(c'_2, t'_2)$  будет тождественно равна нулю слева от  $\Gamma_1$ , а справа от нее будет зависеть лишь от отношения  $\tau_2 = c'_2/t'_2$ . Это подтверждается аналитическими условиями для  $\Gamma_1$ :

$$\frac{\nu(1-\tau_2)}{\tau_2} = 1 - \frac{\nu/r(c_1, t_1)}{J_1(c_1, t_1)} \quad (12)$$

при

$$f_1(c'_2, t'_2) = \varphi_1(\tau_2) = \int_{c_1}^{c'_1} \left\{ 1 - \frac{\nu}{r[c, c+t_1(1-\tau_2)]} \right\} dc. \quad (13)$$

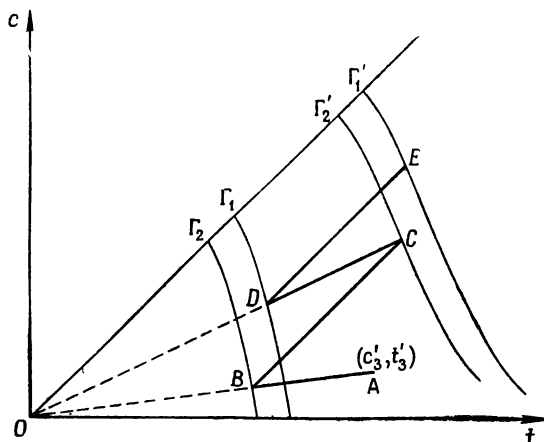
Тот факт, что  $f_1$  на самом деле является функцией лишь одной переменной, изменяющейся на отрезке  $(0,1)$ , ведет к тому, что запоминание и интерполяция оказываются очень простыми. На следующей ступени также лучше всего применить прямой метод:

$$f_2(c'_3, t'_3) = \text{Max} \left\{ \lambda_2 \int_{c_2}^{c'_2} \left[ 1 - \frac{\nu}{r_2(c)} \right] dc + \varphi_1\left(\frac{c'_2}{t'_2}\right) \right\}. \quad (14)$$

Возьмем любую точку на прямой  $c = \tau_3 t$ ,  $\tau_3 = c'_3/t'_3$  и будем вычислять выражение, которое нужно максимизировать вдоль адиабатической траектории, проходящей через эту точку до тех пор, пока не дойдем до максимального значения этого выражения. Это возможно, поскольку  $\lambda_2 = \mu_2$  известна из одностадийного режима. Запомнив это максимальное значение и сравнив с результатами для других начальных точек, лежащих на луче, мы сможем найти оптимальные входные условия  $(c_2, t_2)$  а, следовательно, и условия на выходе  $(c'_2, t'_2)$ . Повторяя это для различных  $\tau_3$ , построим кривые  $\Gamma_2$  и  $\Gamma'_2$ . Эти кривые приведены на фиг. 8 и показано также, как можно построить оптимальный режим для любой  $(c'_3, t'_3)$ . Значения  $\lambda_2$  и  $\lambda_3$  находим из соотношений  $\mu_2 = OD/OC$ ,  $\mu_3 = OB/OA$ , откуда  $\lambda_2 = \mu_2$ ,  $\lambda_3 = \mu_3\mu_2$ . Кривые  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$

можно легко градуировать в масштабе  $f_1$  и  $f_2$ , а  $\Gamma'_1$ ,  $\Gamma'_2$  — в масштабе  $\theta_1$  и  $\theta_2$ . После этого полное отыскание оптимального режима не представляет никаких затруднений. Эти построения продолжаютя до  $\Gamma_{R-1}$  и  $\Gamma'_{R-1}$ .

Для первой стадии и ее подогревателя необходимо учесть расходы  $h(t_R)$  на подогрев исходного продукта



Фиг. 8. Оптимальное охлаждение байпасированием для двух слоев.

до температуры  $t_R$ . Подбирая  $c'_R$  и  $t_R$ , будем максимизировать величину

$$\lambda_R \int_0^{c'_R} \left[ 1 - \frac{\nu}{r(c, c+t_R)} \right] dc - h(t_R) + f_{R-1}(c'_R, t'_R). \quad (15)$$

Если  $h(t)$  — фиксированная функция, то мы однозначно определим оптимальный режим. Если же  $h(t, \alpha)$  — семейство функций, зависящих от параметра  $\alpha$ , то  $t_R$  и  $c'_R$  будут функциями от  $\alpha$ . Ось  $t$  можно градуировать в масштабе  $\alpha$  и, построив кривую  $\Gamma'_R$  условий на выходе, сразу определить оптимальный режим для любого значения  $\alpha$ .



Тем же способом, как и прежде, можно обобщить эту модель для задач, требующих данного общего объема или данной продукции. Очевидно, что у реакторов с охлаждением частью холодного потока есть недостаток по сравнению с реакторами с промежуточным теплообменником, так как никакая адиабатическая траектория не может подняться выше прямой с наклоном, равным единице, проходящей через начало координат. Следовательно, мы достигнем наибольшего возможного превращения, если пропустим исходный поток через единственный адиабатический слой бесконечной длины.

### 6.5. Применение части холодного потока в качестве хладагента при нескольких одновременно протекающих реакциях

При обсуждении общего алгоритма для реактора с охлаждением частью холодного потока при  $m$  одновременно протекающих реакциях выберем в качестве переменных степень превращения  $c^j$  и температуру  $T$ . Пусть  $c_0^j$  и  $T_0$  обозначают состояние холодного непрореагировавшего потока, а  $q_r$  — скорость потока реагентов через слой  $r$  объемом  $V_r$ . Скорость побочного потока при смешивании между  $(r+1)$  и  $r$  слоями равна  $(q_r - q_{r-1})$ ; следовательно, материальный и тепловой балансы дадут

$$q_r c_r^j = q_{r+1} c_{r+1}^j + (q_r - q_{r+1}) c_0^j \quad (j=1, \dots, m), \quad (1)$$

$$q_r T_r = q_{r+1} T_{r+1} + (q_r - q_{r+1}) T_0. \quad (2)$$

Как и прежде, решение уравнений (6.3.1) и (6.3.2) можно выразить в виде

$$c_r^j = c_r^j + h_j \left( c_r^1, \dots, c_r^m, T_r, \frac{V_r}{q_r} \right), \quad (3)$$

$$T_r = T_r + \sum_1^R H^j h_j \left( c_r^1, \dots, c_r^m, T_r, \frac{V_r}{q_r} \right). \quad (4)$$

Функция выгоды строится опять с учетом увеличения стоимости потока в терминах степени завершенности реакций и следующих затрат:

$C_1(V_r, q_r)$  — капитальные и эксплуатационные расходы на слой объемом  $V_r$  при скорости потока  $q_r$ ;

$C_2(q_r, q_{r+1})$  — стоимость конструкции и эксплуатационные расходы на смесительную камеру, в которой достаточно хорошо перемешиваются потоки со скоростями  $q_{r+1}$  и  $(q_r - q_{r+1})$ . В этот пункт затрат входят также расходы на нагнетание при данных скоростях байпасирования;

$C_3(T_R, T_0, q_R)$  — расходы на нагнетание потока со скоростью  $q_R$  и подогрев его от температуры  $T_0$  до  $T_R$ .

Тогда полная функция выгоды

$$P_R = q_1 [v(c'_1) - v(c_0^k)] - \sum_1^R C_1(V_r, q_r) - \sum_1^{R-1} C_2(q_r, q_{r+1}) - C_3(T_R, T_0, q_R). \quad (5)$$

Ее можно записать в виде

$$P_R = \sum_1^{R-1} p_r + [q_r \bar{v}(c'_R) - C_1(V_R, q_R) - C_3(T_R, T_0, q_R)], \quad (6)$$

где

$$p_r = q_r \bar{v}(c'_r) - q_{r+1} \bar{v}(c'_{r+1}) - C_1(V_r, q_r) - C_2(q_r, q_{r+1}) \quad (7)$$

и

$$\bar{v}(c') = v(c^1, \dots, c^m) - v(c_0^1, \dots, c_0^m). \quad (8)$$

Вновь непосредственно применим динамическое программирование к члену  $\sum p_r$ , а второй член рассмотрим позже. Пусть

$$f_{R-1}(c'_R, T'_R) = \text{Max} \sum_1^{R-1} p_r, \quad (9)$$

где максимум достигается при соответствующем выборе переменных  $q_R, q_{R-1}, \dots, q_2$  и  $V_{R-1}, \dots, V_1$ .  $q_1$  — общая скорость фиксируется, а  $q_r$  удовлетворяет ограничениям  $q_R \leq q_{R-1} \leq \dots \leq q_2 \leq q_1$ . Если  $C_2(q_r, q_{r+1})$  есть однородная функция первой степени по переменным

$q_r$  и  $q_{r+1}$  и  $C_1$  пропорционально  $q$ , то можно уменьшить число переменных, рассматривая лишь отношение  $q_{r+1}/q_r = \mu_{r+1} < 1$ ; но и без этого предположения задача решается тем же способом. Применение принципа оптимальности сразу же дает

$$f_{R-1}(c_R^k, T'_R) = \text{Max} [p_{R-1} + f_{R-2}(c_{R-1}^k, T'_{R-1})], \quad (10)$$

где мы максимизируем по  $V_{R-1}$  и  $q_R$ . Так как  $q_{R-1}$  известно из решения предыдущего уравнения, то  $p_{R-1}$  можно вычислить для любых значений  $q_R$  и  $V_{R-1}$ . Лучше всего действовать последовательно: выбираем значение  $q_R$  и, фиксируя его, находим наилучшее  $V_{R-1}$ ; после этого операция повторяется до тех пор, пока не найдем лучшее значение  $q_R$ .

На последней ступени выбираем  $T_R$  и  $V_R$  так, чтобы максимизировать

$$f_{R-1}(c_R^k, T'_R) + q_R \bar{v}(c'_R) - C_1(V_R, q_R) - C_3(T_R, T_0, q_R). \quad (11)$$

Это дает полный расчет адиабатического реактора с  $R$  слоями, и, как и прежде, единственная действительная трудность состоит в необходимости иметь дело с функцией  $(m+1)$  переменных. При простом типе функции издержек можно свести дело к задаче с  $m$  переменными, как в предыдущем разделе, но общего способа обойти эту трудность, по-видимому, нет.

### 6.6. Охлаждение частью холодного потока, отличного от исходного потока

Две смеси с составами  $c_i^1$  и  $c_i^2$ ,  $i = 1, \dots, n$  будем называть различными, если обе они не могут быть получены из некоторого исходного состояния  $c_{i0}$  с помощью реакции определенной степени завершенности. Так, два состава при одной реакции являются различными, если  $(c_i^1 - c_i^2)/\alpha_i$  разные для разных  $i$ ; для одновременно протекающих реакций выполняется некоторое более сложное соотношение. Рассмотрим случай, когда охлаждающий агент имеет иной состав. Этот случай встречается в практике, например при использовании воздуха в качестве охлаждающего агента при окислении двуокиси серы.

Пусть  $c_{i0}$  — состав исходного продукта и  $\gamma_i$  — состав охлаждающего агента. Предположим, что некоторое количество реагирующей смеси с составом  $c_i = c_{i0} + \alpha_i c$  смешивается с охлаждающим агентом в отношении  $\lambda$  ( $1 - \lambda$ ). Результирующий состав будет

$$\lambda c_i + (1 - \lambda) \gamma_i = [\lambda c_{i0} + (1 - \lambda) \gamma_i] + \alpha_i \lambda c; \quad (1)$$

его можно интерпретировать как прореагировавшую смесь с начальным составом  $\lambda c_{i0} + (1 - \lambda) \gamma_i$  и степенью завершенности реакции  $\lambda c$ . Далее число переменных в функции  $r(c_1, \dots, c_n, T)$  сводится от  $(n + 1)$  к двум подстановкой  $c_i = c_{i0} + \alpha_i c$ . Тем самым мы учитываем зависимость от начального состава  $c_{i0}$ . Так как теперь он не является фиксированным, то  $r$  не будет функцией лишь от двух переменных. Однако начальный состав входит в однопараметрическое семейство  $\lambda c_{i0} + (1 - \lambda) \gamma_i$ , где векторы  $c_{i0}$  и  $\gamma_i$  теперь фиксированы. Итак, мы можем написать

$$\begin{aligned} r(c_1, \dots, c_n, T) &= r[\lambda c_{i0} + (1 - \lambda) \gamma_1 + \alpha_1 \lambda c, \dots, \lambda c_{n0} + \\ &\quad + (1 - \lambda) \gamma_n + \alpha_n \lambda c, T] = \\ &= r(c, T, \lambda; c_{10}, \dots, c_{n0}; \gamma_1, \dots, \gamma_n) = \\ &= r(c, T, \lambda), \end{aligned} \quad (2)$$

и оказывается что, теперь мы можем обойтись функцией трех переменных. Чтобы увидеть, как нужно выбирать  $\lambda$ , смешиваем реагенты с составом (1) с частью иного потока в отношении  $\mu : (1 - \mu)$ . Результирующий состав есть

$$\mu [\lambda c_i + (1 - \lambda) \gamma_i] + (1 - \mu) \gamma_i = [\mu \lambda c_{i0} + (1 - \mu \lambda) \gamma_i] + \alpha_i \mu \lambda c; \quad (3)$$

это означает, что  $\lambda$  заменяется на пропорцию  $\mu \lambda$  двойного смешивания. С другой стороны, предположим, что перед смешиванием состав (1) претерпевает реакцию с дальнейшей степенью превращения  $c'$ ; тогда получим состав

$$[\mu \lambda c_{i0} + (1 - \mu \lambda) \gamma_i] + \alpha_i (\mu \lambda c + \mu c'). \quad (4)$$

Он сводится к тому же начальному составу, что и (3), но со степенью завершенности реакции  $\mu \lambda c + \mu c'$ . Следовательно, оказывается, что начальный состав меняется лишь при смешивании. Степень завершенности реакции

меняется пропорционально доле основного потока, которую мы берем при смешивании.

Итак, изучение этого случая проходит в точности по той же схеме, как и предыдущая, но потребует для одной реакции функции трех переменных вместо функции двух переменных, которую мы использовали выше. Для  $m$  одновременно протекающих реакций для получения таких же точно результатов необходимо будет рассмотреть функцию  $(m + 2)$  переменных.

### 6.7. Устранение принятых допущений

Укажем теперь, как освободиться от некоторых сделанных ранее упрощающих предположений. Это потребует некоторой дополнительной работы, и необходимо решить, является ли истинной та большая точность, которую мы при этом получим. Было бы совершенно бесполезной попыткой высчитывать отношение двух чисел, известных с точностью 0,01, вплоть до двадцатого знака после запятой, так как последние восемнадцать знаков не будут иметь никакого смысла. Точно так же, рассмотрение тонкостей термодинамики смешивания при наличии существенной неопределенности для кинетических констант могут означать крайнюю степень педантизма. Последующие замечания предназначены лишь для того, чтобы показать, как можно ослабить сделанные предположения; они вовсе не являются призывом к усложнениям.

Ранее предполагалось, что отношение теплоты реакции к удельной теплоемкости приблизительно постоянно. Этого предположения можно не делать, так как если  $-\Delta H$  и  $C_p$  зависят от концентрации и температуры, то можно записать

$$-\frac{\Delta H}{C_p} = H(c_1, \dots, c_n, T) = H(c, T).$$

Теперь мы должны решить уравнения

$$\begin{aligned}\frac{dc}{dt} &= r(c, T), \\ \frac{dT}{dt} &= H(c, T) r(c, T),\end{aligned}$$

что не представляет никаких вычислительных трудностей. Если потребуется, адиабатические траектории можно находить сначала как решения уравнения

$$\frac{dT}{dc} = H(c, T)$$

и они будут заменять прямые линии. В случае когда  $H(c, T) = H(T)$  зависит только от температуры, то новая переменная  $t = \int^T d\tau/H(\tau)$  обладает теми же свойствами, что и в разд. 6.4., и переводит адиабатические траектории в прямые с наклоном, равным единице. Тот же результат, разумеется, справедлив и для одновременно протекающих реакций, где в любом случае уравнения не могут быть решены в квадратурах.

В случае когда давление играет важную роль, его можно ввести как новую переменную. Вычисления проходят с использованием полной системы уравнений для реактора вытеснения вместо упрощенной системы, которую мы брали; эта система приведена в разд. 3.4.

Иногда при проектировании реактора рассматривается теплота смещения, хотя о ней имеется мало данных [46]. При этом усложняются такие уравнения, как (6.4.3) и (6.5.2). Но даже при замене их на более громоздкие формулы, применение метода динамического программирования сохранит свою силу. Итак, если в нашем распоряжении имеются сведения об этом явлении и мы полагаем, что нельзя пренебречь им, то его можно учесть. Если таких сведений нет и получение их связано с трудностями, то это представляет уклонившемуся от их учета проектировщику неуязвимое алиби.

## РЕАКТОР ВЫТЕСНЕНИЯ

В этой главе мы перейдем от дискретных к рассмотрению непрерывных детерминированных процессов. Разностные уравнения, появившиеся из-за наличия стадий, заменятся дифференциальными уравнениями. Не удивительно, что многие черты дискретных процессов сохраняются и для непрерывных процессов. В частности, как известно из работы Денбига [25], и это здесь будет доказано, оптимальный температурный режим является несвязным при наличии одной реакции. Однако эта простота теряется, если имеет место более чем одна реакция. Мы тщательно изучим простую последовательную систему реакций  $A \rightarrow B \rightarrow C$ , так как она раскрывает принципиальные черты общего случая.

Не следует забывать, что все примеры в этой главе можно толковать двумя способами, так как одни и те же уравнения применимы как к реактору вытеснения, так и к реактору периодического действия. Действительно, как будет видно в последней главе, принимая во внимание контроль, по-видимому, легче добиться оптимальных условий в реакторе периодического действия. Для определенности, однако, нам будет удобно использовать терминологию для реакторов вытеснения.

### 7.1. Оптимальный температурный режим при одной реакции

Для одной реакции, завершенность которой измеряется степенью  $c$ , простейшими уравнениями реактора вытеснения являются (3.4.13) и (3.4.14)

$$\frac{dc}{dt} = -r(c, T), \quad (1)$$

$$\frac{dT}{dt} = -Hr(c, T) + Q. \quad (2)$$

Здесь  $t$  — время реакции, измеряемое от момента выхода из реактора (или время окончания периодического процесса), а  $Q$  пропорционально скорости теплоотвода на единицу длины (или единицу времени). Обратимся сначала к задаче определения оптимального температурного градиента, без учета расходов на поддержание этого оптимума. Для нахождения оптимального режима  $T(t)$  или  $T(c)$  потребуется лишь изучение уравнения (1). Величина  $Q$ , необходимая для осуществления этого режима, дается тогда уравнением (2)

$$Q = \frac{d}{dt} (T - Hc). \quad (3)$$

Покажем, что температурный режим является несвязным в том смысле, что он выбирается таким образом, чтобы по возможности максимизировать скорость реакции в каждой точке.

Рассмотрим сначала задачу, когда составы исходного и конечного продуктов фиксируются и требуется получить это превращение за наименьшее время. Так как состояние на выходе фиксировано  $c(0) = c_e$ , то при использовании оптимального режима требуемое время будет зависеть лишь от состояния на входе  $c(\theta) = c_f$ . Запишем

$$f(c_f) = \min \theta = \min_{c_e} \int_{c_e}^{c_f} \frac{dc}{-r(c, T)} = \min_{c_f} \int_{c_f}^{c_e} \frac{dc}{r(c, T)}, \quad (4)$$

где максимизация достигается выбором  $T$  как функции от  $c$ ,  $c_f \leq c \leq c_e$  в интервале

$$T_* \leq T \leq T^*. \quad (5)$$

Пусть теперь  $\gamma$  есть малая положительная величина, меньшая, чем  $c_e - c_f$ , тогда

$$\int_{c_f}^{c_e} \frac{dc}{r(c, T)} = \int_{c_f}^{c_f + \gamma} \frac{dc}{r(c, T)} + \int_{c_f + \gamma}^{c_e} \frac{dc}{r(c, T)},$$

где второй член есть время, необходимое для достижения требуемого состояния на выходе при исходном,



состоянии  $c_f + \gamma$ . Так как по принципу оптимальности на этом участке должен быть использован оптимальный режим, то

$$f(c_f) = \min \left[ \int_{c_f}^{c_f + \gamma} \frac{dc}{r(c, T)} + f(c_f + \gamma) \right], \quad (6)$$

где максимизация производится выбором  $T(c)$  для  $c_f \leq c \leq c_f + \gamma$ . Так как это верно для всех  $\gamma$ , мы можем положить  $\gamma \rightarrow 0$ , получив для малых  $\gamma$

$$f(c_f) = \min \left[ \frac{\gamma}{r(c, T)} + f(c_f) + \gamma f'(c_f) + 0(\gamma^2) \right],$$

и, следовательно,

$$-f'(c_f) = \min \frac{1}{r(c_f, T_f)}, \quad (7)$$

где  $T_f = T(c_f) = T(\theta)$ . Но из уравнения (7) сразу же получаем, что  $T$  нужно выбрать так, чтобы максимизировать  $r$ . Пусть

$$R(c) = \max r(c, T), \quad T_* \leq T \leq T^*, \quad (8)$$

тогда

$$-f'(c_f) = \frac{1}{R(c_f)}$$

или

$$f(c_f) = \int_{c_f}^{c_e} \frac{dc}{R(c)}. \quad (9)$$

Мы уже видели в гл. 5, что можно найти явное выражение  $R(c)$ , если скорость реакции  $\sum \alpha_i A_i = 0$  выражается законом гомогенной кинетики

$$r(c, T) = k_1(T) \prod_1^n (c_{i0} + \alpha_i c)^{\beta_i} - k_2(T) \prod_1^n (c_{i0} + \alpha_i c)^{\gamma_i}. \quad (10)$$

Это выражение равно

$$R(c) = \frac{p^p}{(p+1)^{p+1}} \frac{k_1^{*p+1}}{k_2^{*p}} \prod_1^n (c_{i0} + \alpha_i c)^{\beta_i - p\alpha_i}, \quad (11)$$

где

$$p = \frac{E_1}{E_2 - E_1}$$

и

$$k_i = k_i^* \exp(-E_i/RT), \quad i = 1, 2.$$

Соответствующее значение оптимальной температуры равно

$$T = \frac{E_2 - E_1}{R} \left[ \ln \frac{k_2^* E_2}{k_1^* E_1} \prod_1^n (c_{i0} + \alpha_i c)^{\alpha_i} \right]^{-1} \quad (12)$$

что можно привести к безразмерной форме, применяя следующие сокращения:

$$\begin{aligned} c_0 &= \sum_1^n c_{i0}, & \mu_i &= \frac{c_{i0}}{c_0}, & x &= \frac{c}{c_0}, \\ \alpha &= \sum_1^n \alpha_i, & \beta &= \sum_1^n \beta_i, & \gamma &= \sum_1^n \gamma_i, \\ \delta_i &= p\alpha_i - \beta_i = \frac{E_1 \gamma_i - E_2 \beta_i}{E_2 - E_1}, \\ A &= \frac{p^p}{(p+1)^{p+1}} \frac{k_1^{*p+1}}{k_2^{*p}} c_0^{(p+1)\beta - p\gamma}. \end{aligned} \quad (13)$$

Тогда

$$\begin{aligned} R(c) &= c_0 A P(x), \\ P(x) &= \prod_1^n (\mu_i + \alpha_i x)^{-\delta_i} \end{aligned} \quad (14)$$

и  $P$  безразмерно, так как  $A$  имеет размерность  $\text{сек}^{-1}$ . Безразмерная температура  $\tau$  есть

$$\tau = \frac{RT}{E_2 - E_1} = \left[ \ln x \prod_1^n (\mu_i + \alpha_i x)^{\alpha_i} \right]^{-1} \quad (15)$$

где

$$x = \frac{p+1}{p} \frac{k_2^*}{k_1^*} c_0^\alpha. \quad (16)$$

Если уравнение (9) привести к этим переменным, мы получим

$$Af(c_f) = \int_{x_f}^{x_e} \prod_1^n (\mu_i + \alpha_i x)^{\delta_i} dx, \quad (17)$$

где  $x_f = c_f / \sum c_{i0}$ ,  $x_e = c_e / \sum c_{i0}$ . Заметим, что  $\delta_i < 0$  для веществ, используемых в реакции, и  $\delta_i > 0$  для веществ, образующихся в результате реакции. Следовательно, интеграл расходится, когда  $x$  стремится к наименьшему из положительных отношений  $-\mu_i/\alpha_i$ , т. е. когда одно из веществ окажется полностью использованным. Для вычисления интеграла (17) введем функцию

$$F(x) = \int_0^x \prod_1^n (\mu_i + \alpha_i x)^{\delta_i} dx. \quad (18)$$

Тогда безразмерное минимальное время пребывания  $Af(c_f)$  будет равно

$$Af(c_f) = F(x_e) - F(x_f). \quad (19)$$

В этом виде оказывается возможным решить задачу одновременно для всех  $x_e$ , что является удачным следствием несвязности режима.

Следует добавить два замечания. Во-первых, вышеприведенный анализ справедлив лишь для экзотермических реакций  $E_2 > E_1$ , так как максимальная скорость эндотермической реакции всегда достигается при наивысшей допустимой температуре. Это ясно видно из уравнения (10), так как (используя очевидные сокращения) имеем

$$r = k_1 \Pi_1 - k_2 \Pi_2,$$

откуда

$$\frac{\partial r}{\partial T} = \frac{1}{RT^2} (k_1 E_1 \Pi_1 - k_2 E_2 \Pi_2).$$

Если  $r > 0$ ,  $k_1 \Pi_1 > k_2 \Pi_2$  и, следовательно,  $\partial g / \partial T$  также положительно при  $E_1 > E_2$ . То же самое соотношение показывает, что экстремум  $\partial r / \partial T = 0$  для экзотермических реакций ( $E_2 > E_1$ ) является максимумом, так как

при  $r > 0$  и  $\partial r / \partial T = 0$  выражение

$$\frac{\partial^2 r}{\partial T^2} = \frac{1}{R^2 T^4} (k_1 E_1^2 \Pi_1 - k_2 E_2^2 \Pi_2),$$

безусловно, отрицательно. Во-вторых, заметим, что для экзотермической реакции оптимальная температура является монотонно убывающей функцией от степени завершенности реакции, так как, продифференцировав (15), получим

$$\frac{d\tau}{dx} = -\tau^2 \sum_1^n \frac{\alpha_i^2}{(\mu_i + \alpha_i x)}.$$

Отсюда следует, что существует интервал  $(x_*, x^*)$ , внутри которого оптимальная температура задается уравнением (15). Вне этого интервала имеем  $\tau = \tau^* = RT^*/(E_2 - E_1)$  при  $x < x_*$ ,  $\tau = \tau_* = RT_*/(E_2 - E_1)$  при  $x > x^*$ ,  $x_*$  и  $x^*$  являются теми значениями  $x$ , которые в уравнении (15) приводят значения  $\tau$  к  $\tau = \tau^*$  и  $\tau = \tau_*$  соответственно. Итак, вне этого интервала безразмерная скорость реакции должна быть заменена на  $P_*(x)$  или  $P^*(x)$  в областях  $x < x_*$  и  $x > x^*$  соответственно, где

$$P_*(x) = \frac{k_1 (T^*) c_0^{\beta-1}}{A} \prod_1^n (\mu_i + \alpha_i x)^{\beta_i} - \frac{k_2 (T^*) c_0^{\gamma-1}}{A} \prod_1^n (\mu_i + \alpha_i x)^{\gamma_i} \quad (20)$$

и  $P^*(x)$  — такое же выражение, но со значениями  $k_1$  и  $k_2$ , вычисленными в точке  $T_*$ . Интегрирование обратных к ним по величине функций вновь осуществимо прямым методом, вводя

$$F_*(x) = \int_0^x \frac{dx}{P_*(x)}, \quad F^*(x) = \int_0^x \frac{dx}{P^*(x)} \quad (21)$$

и

$$\mathfrak{F}(x) = \begin{cases} F_*(x), & x < x_*, \\ F_*(x_*) - F(x_*) + F(x), & x_* \leq x \leq x^*, \\ F_*(x_*) - F(x_*) + F(x^*) - F^*(x^*) + F^*(x), & x \geq x^*. \end{cases} \quad (22)$$

Тогда уравнение (19) запишется так:

$$Af(c_f) = \mathfrak{F}(x_e) - \mathfrak{F}(x_f), \quad (23)$$

Этот анализ показывает, что в случае одной реакции  $\sum \alpha_i A_i = 0$  с  $n$  реагентами, скорость которой задается уравнением (10), мы должны изучить зависимость оптимального режима от  $(2n + 3)$  параметров. Эти параметры следующие:

1) значения постоянных  $\beta_i$ , так как  $\gamma_i$  соответствуют условиям равновесия ( $\gamma_i = \alpha_i + \beta_i$ ); 2) отношение энергий активации  $(p + 1)/p$ ; 3)  $x$  — постоянная, фиксирующая оптимальную температуру; 4)  $(n - 1)$  постоянных  $\mu_i$ , фиксирующих пропорции исходного состава; 5) границы температуры  $\tau_*$  и  $\tau^*$ .

Постоянная  $A$  используется для того, чтобы сделать время безразмерным. Если кинетические константы  $\beta_i$  фиксированы и рассматривается лишь начальный состав, то остается два параметра  $p$  и  $x$ , которые оказываются независимыми в том смысле, что  $p$  связано только со значением интеграла  $F$ , в то время как  $x$  связано с режимом температуры.

В случае обратимой реакции первого порядка  $A_1 - A_2 = 0$  по условию имеем  $\beta_2 = \gamma_1 = 1$ ,  $\beta_1 = \gamma_2 = 0$ , и поскольку любой состав может быть получен из чистого вещества  $A_2$ , мы можем, не теряя общности, принять  $\mu_1 = 0$ ,  $\mu_2 = 1$ . Таким образом, имеем  $x = c/c_{20}$ ,

$$r(c, T) = k_1(T)(1 - x) - k_2(T)x \quad (24)$$

и

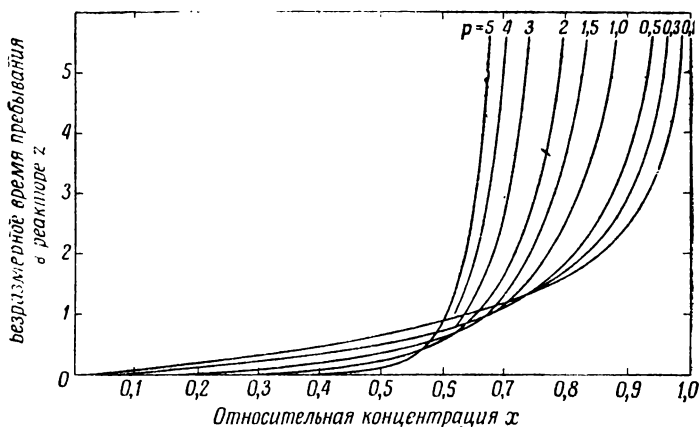
$$P(x) = x^{-p}(1 - x)^{p+1}, \quad (25)$$

$$\tau = [\ln xx/(1 - x)]^{-1}. \quad (26)$$

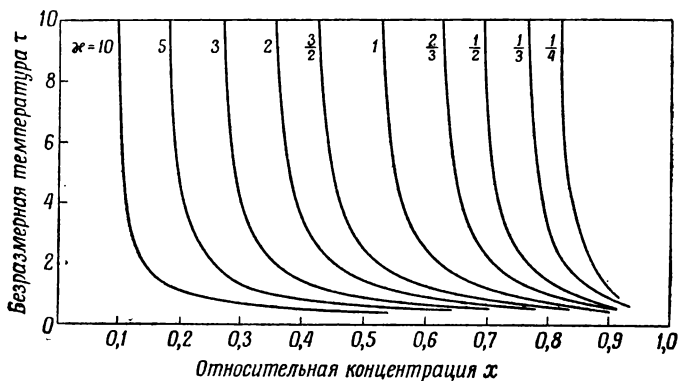
Функция

$$z(x) = \int_0^x x^p (1 - x)^{-p-1} dx \quad (27)$$

изображена на фиг. 1 для нескольких значений  $p$ , а на фиг. 2 показано поведение  $\tau$  для различных данных значений  $x$ . В нижней части фиг. 3 изображен график  $\tau - x$  при некотором значении  $x$ . Если  $\tau_*$  и  $\tau^*$  есть границы безразмерной температуры, то нам понадобится лишь



Фиг. 1. Зависимость оптимальной длины реактора от состава для обратимой реакции первого порядка.



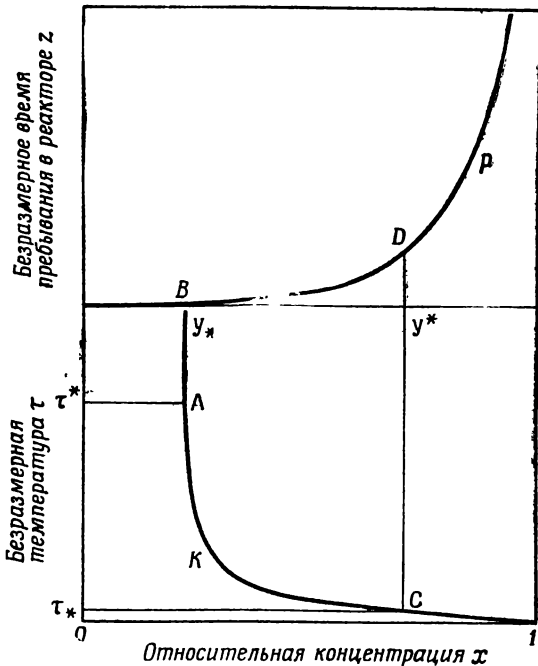
Фиг. 2. Оптимальная температура для реакции первого порядка.

отрезок  $AC$  этой кривой, тем самым определяем значения  $x_*$  и  $x^*$ . В верхней части фигуры помещена соответствующая кривая  $z(x)$ ; нам потребуется лишь ее участок  $BD$ . По этим участкам мы определяем  $z$  как функцию от  $x$  и  $\tau$  — как функцию от  $z$ . Если значение  $x$ ,

меньше, чем  $x_*$ , то  $z$  можно вычислить из интеграла (24)

$$A\theta - z(x) = \frac{1}{k_1 + k_2} \ln \frac{k_1 - (k_1 + k_2)x_f}{k_1 - (k_1 + k_2)x}, \quad (28)$$

где  $k_1$  и  $k_2$  вычислены в точке  $T = T^*$   $z = A\theta$  при



Фиг. 3. Определение оптимального температурного градиента.

$x = x_f$ . Итак,  $z^*$  — точка, начиная с которой температурный градиент убывает, находится из уравнения

$$A\theta - z^* = \frac{1}{k_1 + k_2} \ln \frac{k_1 - (k_1 + k_2)x_f}{k_1 - (k_1 + k_2)x_*}. \quad (29)$$

С этого момента используется участок кривой  $BD$  до тех пор, пока значение  $x$  не превзойдет  $x^*$ , если, конечно, заданное  $x_e > x^*$ . В этом случае начинаем использовать

интеграл

$$z = \frac{1}{k_1 + k_2} \ln \frac{k_1 - (k_1 + k_2)x}{k_1 - (k_1 + k_2)x_e}, \quad (30)$$

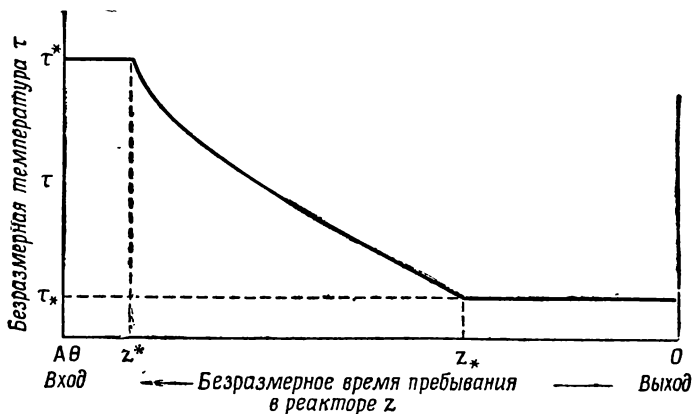
где  $k_1$  и  $k_2$  вычислены при  $T = T_*$ ,  $x = x_e$  при  $z = 0$ . Из уравнения (30) находим точку, начиная с которой используется конечный режим  $T = T_*$ :

$$z_* = \frac{1}{k_1 + k_2} \ln \frac{k_1 - (k_1 + k_2)x^*}{k_1 - (k_1 + k_2)x_e}. \quad (31)$$

Значение  $\theta$  находим из следующего соотношения:

$$z^* - z_* = \int_{x_*}^{x^*} x^p (1-x)^{-p-1} dx. \quad (32)$$

На фиг. 4 показана результирующая температурная кривая.



Фиг. 4. Оптимальный температурный градиент.

Практическое приложение такого параметрического анализа позволяет детерминировать оптимальные условия для конкретного состояния катализатора. Например, уравнение Темкина, по форме аналогичное уравнению (10), используется с некоторой достоверностью для реакции синтеза аммиака [6]. Однако значения постоян-



ных  $k_1^*$ ,  $k_2^*$ ,  $E_1$ ,  $E_2$  изменяются при использовании различных катализаторов, поэтому меняются  $\rho$ ,  $\kappa$  и  $A$ , а следовательно, и оптимальный режим. Покажем теперь, что результаты, приведенные в этом разделе, можно использовать для определения максимального превращения в конвертере фиксированной длины при использовании обычных катализаторов.

## 7.2. Различные формы постановки задачи оптимизации при одной реакции

Имеет смысл рассмотреть ту же задачу с другой точки зрения и искать оптимальный температурный режим, при котором достигается наибольшая степень превращения при данном времени пребывания в реакторе.

Тогда, если  $c(\theta) = c_f$  и  $\theta$  задано, надо найти  $T(t)$  при  $0 \leq t \leq \theta$  так, чтобы  $c(0)$  было как можно больше. Пусть

$$\begin{aligned} f(c_f, \theta) &= \max [c(0) - c(\theta)] = \max \int_0^\theta \frac{dc}{dt} dt = \\ &= \max \int_0^\theta r(c, T) dT \quad (1) \end{aligned}$$

Вновь выделим из области интегрирования короткий начальный отрезок  $(0, \theta - \tau)$ , тогда на оставшемся участке по принципу оптимальности нужно использовать оптимальный режим. Так как поступающий на этот участок продукт имеет состав, определяемый мерой  $c(\theta - \tau)$ , то наибольшее значение интеграла равно  $f[c(\theta - \tau), \theta - \tau]$ . Итак,

$$f(c_f, \theta) = \max \left\{ \int_{\theta - \tau}^\theta r(c, T) dt + f[c(\theta - \tau), \theta - \tau] \right\}. \quad (2)$$

Но если  $\tau$  мало, то

$$\begin{aligned} f[c(\theta - \tau), \theta - \tau] &= f[c(\theta), \theta] + \\ &+ [c(\theta - \tau) - c_f] \frac{\partial f}{\partial c_f} - \tau \frac{\partial f}{\partial \theta} + O(\tau^2) \end{aligned}$$

и

$$c(\theta - \tau) - c_f = \tau r(c_f, T_f) + O(\tau^2).$$

Используя сокращения  $f_c = \partial f / \partial c_f$  и  $f_\theta = \partial f / \partial \theta$ , получим при  $\tau \rightarrow 0$

$$f_\theta = \max_{T_f} r(c_f, T_f) (1 + f_c). \quad (3)$$

Здесь максимизация достигается выбором  $T_f$  при ограничениях (7.1.5) и, следовательно,

$$f_\theta = R(c_f) (1 + f_c). \quad (4)$$

Решить это уравнение довольно просто, но здесь представляется случай ввести метод характеристик, который мы будем широко использовать далее. Уравнение (4) решается с граничным условием  $f \equiv 0$  при  $\theta = 0$ . Следовательно, для любого значения  $c_f$ , например для  $c_e$ , получим

$$c_f = c_e, \quad \theta = f = f_c = 0, \quad f_\theta = R(c_e), \quad T_f = T_m(c_e), \quad (5)$$

где  $T_m(u)$  есть значение  $T$ , которое максимизирует  $r(u, T)$ . Напишем уравнения характеристик для уравнения (4):

$$\begin{aligned} \frac{dc_f}{ds} &= -R(c_f), & \frac{d\theta}{ds} &= 1, & \frac{df}{ds} &= R(c_f), \\ \frac{df_c}{ds} &= R'(c_f)(1 + f_c), & \frac{df_\theta}{ds} &= 0. \end{aligned} \quad (6)$$

В этой простой задаче понадобятся не все эти уравнения. Разделив первое уравнение на второе, получим  $dc_f/d\theta = -R(c_f)$ , что дает уравнение (7.1.1) при использовании оптимального режима  $T = T_m$ . Это важно потому, что характеристики уравнения в частных производных уравнения (3) в действительности являются траекториями реакции. Таким образом, принцип оптимальности показывает, что оптимальный температурный режим определяется выбором температуры и интегрированием уравнений (6) вдоль характеристики. Разде-

ляя переменные, получим

$$\theta = \int_{c_f}^{c_e} \frac{dc}{R(c)}, \quad (7)$$

что совпадает с уравнением (7.1.9) и показывает, что задача нахождения минимума времени пребывания в реакторе при данном превращении эквивалентна задаче отыскания максимального превращения при данном времени пребывания в реакторе. Последнее из уравнений (6) имеет важный смысл, так как оно означает, что  $f_{\theta}$  не изменяется вдоль характеристики. Нам, разумеется, интересуют лишь те траектории, для которых  $f_{\theta} > 0$ , так как если увеличение времени пребывания в реакторе уменьшает выход продукции, то процесс нужно остановить. Но область начальных значений  $\theta = 0$ , для которой  $f_{\theta} > 0$ , может быть без труда определена, после чего может быть уверенность в том, что характеристики, выходящие из этой области, полностью определяют всю интересующую нас часть решения. В простом случае, рассматриваемом здесь,  $f_{\theta} = R(c_e)$  будет положительна до тех пор, пока  $c_e$  не достигнет равновесного значения  $c$  для температуры  $T = T$ .

Если  $T_f$  лежит строго внутри интервала  $T_*, T^*$ , то для нахождения  $T_f$  надо решить следующее уравнение:

$$r_T(c_f, T_f) = \frac{\partial}{\partial T_f} r(c_f, T_f) = 0. \quad (8)$$

В нашем случае можно решать уравнение (8) одновременно с

$$f_{\theta} = r(c_f, T_f)(1 + f_c). \quad (9)$$

Характеристические уравнения при этом следующие:

$$\begin{aligned} \frac{dc_f}{ds} &= -r(c_f, T_f), \\ \frac{d\theta}{ds} &= 1, \\ \frac{df}{ds} &= r(c_f, T_f). \end{aligned} \quad (10)$$

Можно решать уравнения для  $T_f$ , дифференцируя уравнение (8) вдоль характеристики:

$$\frac{dT_f}{ds} = \frac{r_{Tc}}{r_{TT}} r(c_f, T_f). \quad (11)$$

Теперь первое из уравнений (10) и уравнение (11) можно решать совместно, при этом получим оптимальный режим параллельно с нахождением соответствующей степени завершенности реакции. Этот метод действителен лишь тогда, когда  $T_f$  станет больше  $T_*$ , но если  $T_f$  достигнет значения  $T^*$ , то следует брать  $T_f = T^*$  и уравнения (10) интегрировать отдельно. Хотя эти замечания для такого простого случая и могут показаться банальными, но они на самом деле определяют метод, который будет обобщен для решения более трудных задач.

Вышеприведенный анализ фактически указывает на решение двух других задач. Первая — задача с множителями Лагранжа, в которой ищется максимум  $c_e - c_f - \lambda\theta$ . Здесь процесс должен прерваться, как только значение скорости реакции на выходе становится равным  $\lambda$ , иными словами,  $c_e$  находится из уравнения

$$R(c_e) = \lambda. \quad (12)$$

Таким образом,

$$f_\lambda(c_f) = \max(c_e - c_f - \lambda\theta) = \int_{c_f}^{c_e} \left[ 1 - \frac{\lambda}{R(c)} \right] dc, \quad (13)$$

где  $c_e$  удовлетворяет уравнению (12). Вторая, явно решенная задача, есть задача с общей материальной функцией выгоды  $v(c_1, \dots, c_n)$ . Если функция  $v(c) = v(c_{10} + \alpha_1 c, \dots, c_{n0} + \alpha_n c)$  монотонна, то надо максимизировать  $c$ , если же у нее имеется максимум при некотором значении  $c = c_e$ , то необходимо, чтобы реакция прошла до этой степени.

### 7.3. Две последовательные реакции

Рассмотрим систему реакций  $A \rightarrow B \rightarrow C$ , которая использовалась Амундсенем и Байлоусом [4] в качестве общего примера. Поставим основную цель — вывести

уравнения методом динамического программирования и выяснить два вопроса, - которые они оставили нерешенными. Примем их предположения, что  $B$  есть продукт, выход которого следует максимизировать, и что кинетика реакции ведет к уравнениям

$$\frac{dx}{dt} = a(T) F(x), \quad (1)$$

$$\frac{dy}{dt} = -na(T) F(x) + b(T) G(y). \quad (2)$$

Здесь  $x$  и  $y$  — концентрации  $A$  и  $B$  соответственно,  $a(T)$  и  $b(T)$  — константы скорости в уравнении Аррениуса и  $t$  — время пребывания в реакторе, отсчитываемое от конца реактора. Функции  $F$ ,  $G$  и постоянная  $n$  позволяют различные реакции такого типа сводить к этому общему виду [4]. Функция выгоды есть выход продукта  $B$ :

$$y(0) - y(\theta) = \int_0^{\theta} [na(T) F(x) - b(T) G(y)] dt. \quad (3)$$

Ее нужно максимизировать с помощью выбора  $T(t)$ ,  $0 \leq t \leq \theta$ . Если это достигнуто, то результирующий максимум будет функцией только от  $x(\theta)$ ,  $y(\theta)$ ,  $\theta$ . Обозначим  $x(\theta)$  и  $y(\theta)$  через  $\xi$  и  $\eta$  соответственно и запишем

$$f(\xi, \eta, \theta) = \max \int_0^{\theta} (naF - bG) dt. \quad (4)$$

Производя обычное разбиение интеграла на два по отрезкам  $(\theta, \theta - \tau)$  и  $(\theta - \tau, 0)$  и применяя к последнему принцип оптимальности, получим

$$f(\xi, \eta, \theta) = \text{Max} \left\{ \int_{\theta-\tau}^{\theta} (naF - bG) dt + f[x(\theta-\tau), y(\theta-\tau), \theta-\tau] \right\}. \quad (5)$$

При  $\tau \rightarrow 0$ , придем, как обычно, к уравнению в частных производных:

$$f_{\theta} = \text{Max} \{ [na(T) F(\xi) - b(T) G(\eta)] (1 + f_{\eta}) - a(T) F(\xi) f_{\xi} \}, \quad (6)$$

где максимизация достигается выбором  $T = T(\tau)$  при обычных ограничениях:

$$T_* \leq T \leq T^*. \quad (7)$$

Метод характеристик может быть успешно применен к уравнению (6), так как его следует решать при граничных условиях  $f = 0$  на плоскости  $\theta = 0$ . Так как  $a$  и  $b$  являются функциями  $T$ , то одна из них является функцией от другой; представим  $b$  как функцию от  $a$  и примем  $a$  за переменную, характеризующую режим работы. Обозначим  $db/da = (db/dT)/(da/dT)$  через  $A(a)$  и границы  $a$  — через  $a_*$ ,  $a^*$ , где  $a_* = a(T_*)$  и  $a^* = a(T^*)$ . Тогда если  $a$  лежит внутри интервала  $(a_*, a^*)$ , то оно удовлетворяет уравнению

$$0 = [nF(\xi) - A(a)G(\eta)](1 + f_\eta) - F(\xi)f_\xi, \quad (8)$$

и чтобы придать уравнению в частных производных обычный вид, надо исключить  $a$  из уравнения (8) и из

$$f_\theta = [naF(\xi) - b(a)G(\eta)](1 + f_\eta) - aF(\xi)f_\xi. \quad (9)$$

Позднее мы рассмотрим случай, когда это исключение определенно можно сделать, но не следует ожидать, что оно возможно всегда. Даже в том случае, когда прямое исключение невозможно, следуя методу, изложенному в разд. 2.5, получим следующие уравнения характеристик:

$$\begin{aligned} \frac{d\xi}{ds} &= aF(\xi), \\ \frac{d\eta}{ds} &= -naF(\xi) + b(a)G(\eta), \\ \frac{d\theta}{ds} &= 1, \\ \frac{df_\xi}{ds} &= -aF'(\xi)f_\xi + naF'(\xi)(1 + f_\eta), \\ \frac{df_\eta}{ds} &= -b(a)G'(\eta)(1 + f_\eta), \\ \frac{df_\theta}{ds} &= 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Если теперь продифференцировать соотношение (8) вдоль характеристики, используя уравнения (10), получим

$$\frac{da}{ds} = -nB(a) \frac{F(\xi) G'(\eta)}{G(\eta)}, \quad (11)$$

где

$$B(a) = \frac{b(a) - aA(a)}{A'(a)} \quad (12)$$

Уравнение (11) замечательно своей простотой, так как в него вопреки ожиданиям не вошли величины  $f_{\xi}$  и  $f_{\eta}$ . Позднее будет показано, что эта простота получается лишь при двух одновременных реакциях. Для кинетических констант  $a$  и  $b$  вида  $k^* \exp(-E/RT)$  функция  $B$  всегда отрицательна, поэтому  $da/ds > 0$ . Это ведет к предположению, что оптимальный температурный режим состоит в постоянном уменьшении температуры по мере протекания реакции. Но это заключение зависит от использования уравнения (8), что, как мы убедимся позднее, следует делать довольно осторожно. Уравнения (10) и (11) полностью совпадают (исключая обозначение  $s$ ) с уравнениями (25), (26) и (32) Амундсена и Байлоуса (4) и интересно было вывести их совершенно другим методом. Мы будем решать наши уравнения интегрированием назад от условий на выходе, так что если задаются условия на входе и время пребывания в реакторе, то для нахождения требуемой траектории нужно использовать метод проб и ошибок. В той форме, в какой эти уравнения получены Амундсеном и Байлоусом, их надо интегрировать по направлению потока реагентов и, следовательно, зная входной состав. Однако у них не было способа определения оптимальной входной температуры при данном общем времени реакции, поэтому они выбирали входную температуру и определяли длину процесса, на которой она оказывалась оптимальной, из условия обращения в нуль, так называемой нуль функции ( $nF - AG$ ). Это и есть условие (8) на начальной плоскости  $\theta = 0$ , так как там  $f = f_{\eta} = 0$ . Несколько позже Кац [42, 43] применил к этой задаче метод Вейершрасса. Он получил аналогичную систему уравнений, но с граничными условиями

в двух точках и, следовательно, тоже вынужден был использовать метод проб и ошибок. По всей вероятности, это является следствием того, что режим здесь не является несвязным. Основным преимуществом динамического программирования является то, что он по сравнению с другими методами более естественно включает в себя ограничения (7). Эти ограничения являются существенными, так как при  $G(\eta) = 0$ , т. е. в случае питания чистым  $A$ , требуется бесконечная температура.

Вернемся теперь к примеру реакций первого порядка для получения некоторых конкретных результатов. В этом случае  $n = 1$ ,  $F(\xi) = \xi$  и  $G(\eta) = \eta$ ; будем считать, что

$$a(T) = k_1^* \exp(-E_1/RT), \quad b(T) = k_2^* \exp(-E_2/RT).$$

Тогда

$$b(a) = \rho a^{1/r}, \quad r = \frac{E_1}{E_2}, \quad \rho = k_2^* k_1^{*-1/r} \quad (13)$$

На начальной плоскости  $\theta = 0$  оптимальным значением  $a$  будет такое значение, которое максимизирует  $(a\xi - b\eta)$ . В этой точке производная от  $(a\xi - b\eta)$  обращается в нуль, когда

$$a^{(1-r)/r} = \frac{r\xi}{\rho\eta}. \quad (14)$$

Вторая производная  $(a\xi - b\eta)$  при этом равна  $(r-1)b\eta/r^2a^2$ , и, следовательно, при  $r < 1$  ( $E_2 > E_1$ ) в этой точке достигается максимум. Если  $r > 1$ , то стационарная точка есть относительный минимум, а максимум скорости реакции достигается при  $T = T^*$ , если в этой точке  $(a\xi - b\eta) > 0$ .

Так как известно, что  $a$  не убывает вдоль характеристики и в начальный момент уже приняло свое максимально допустимое значение, то оптимальный режим состоит в поддержании  $T = T^*$ . Этот довольно однообразный режим отвечает случаю одной эндотермической реакции и подтверждает сомнение Амундсена в применимости его метода к этому случаю.

При  $r < 1$  существуют три важных области на начальной плоскости. Пусть  $R = r/(1-r)$ ; тогда этими



областями являются:

$$I. \left(\frac{1}{\rho}\right) a_*^{-1/R} \geq \frac{\eta}{\xi} \geq \left(\frac{r}{\rho}\right) a_*^{-1/R}, \quad \text{где } a = a_*,$$

$$II. \left(\frac{r}{\rho}\right) a_*^{-1/R} \geq \frac{\eta}{\xi} \geq \left(\frac{r}{\rho}\right) a^{*-1/R}, \quad \text{где } a^* \geq a \geq a_*,$$

$$III. \left(\frac{r}{\rho}\right) a^{*-1/R} \geq \frac{\eta}{\xi} \geq 0, \quad \text{где } a = a^*.$$

Для характеристик, выходящих из третьей области, следует брать  $a = a^*$  на всем их протяжении, и, следовательно их можно получить, интегрируя первые два из уравнений (10) до тех пор, пока либо  $\xi$ , либо  $\eta$  не станет равным нулю. Если характеристика выходит из области II, то начальное значение  $a$  задается уравнением (14), и уравнения (10) и (11) интегрируются до тех пор, пока значение  $a$  не достигнет  $a^*$ , после чего значение  $a$  считается постоянным. Для области III начальное значение  $a = a_*$  и считается постоянным до тех пор, пока решение уравнения (8), а именно

$$(r\xi - \rho a^{1/R}\eta)(1 + f_\eta) - r\xi f_\xi = 0,$$

достигает значения  $a_*$ . Начиная с этого момента, интегрирование происходит, как и в области II. Таким способом вся интересующая нас часть пространства  $\xi, \eta, \theta$  заполняется траекториями и можно начертить поверхность постоянного режима.

Однако трудно ясно представить себе эту поверхность в трехмерном пространстве, и мы поэтому используем гомогенность, присущую реакциям первого порядка, чтобы понизить размерность. Пусть  $z = y/x$ ; тогда из уравнений (1) и (2) найдем

$$\frac{dz}{dt} = -a + (b - a)z. \quad (15)$$

Итак, максимальный выход  $B$  будет пропорционален входной концентрации  $A$ ,  $x(\theta) = \xi$ . Поэтому положим

$$f(\xi, \eta, \theta) = \xi g(\zeta, \theta), \quad (16)$$

где

$$\zeta = \frac{\eta}{\xi}. \quad (17)$$

Так как

$$f_{\theta} = \xi g_{\theta}, \quad f_{\xi} = g - \zeta g_{\zeta}, \quad f_{\eta} = g_{\zeta},$$

получим вместо уравнения (6)

$$g_{\theta} = \max [(a - b\zeta)(1 + g_{\zeta}) - a(g - \zeta g_{\zeta})]. \quad (18)$$

Далее, так как  $b = \rho a^{1/r}$ , то можно найти максимизирующее значение  $a$  явно и исключить его из уравнения (18). Тогда

$$a = \left[ \frac{r}{\rho} \frac{1 + (1 + \zeta) g_{\zeta} - g}{\zeta(1 + g_{\zeta})} \right]^{1/R} \quad (19)$$

и

$$g_{\theta} = (1 - r) \left( \frac{r}{\rho} \right)^R \frac{[1 + (1 + \zeta) g_{\zeta} - g]^{R+1}}{\zeta^R (1 + g_{\zeta})^R}. \quad (20)$$

Теперь это обычное дифференциальное уравнение в частных производных первого порядка, хотя и существенно нелинейное. Напишем для него уравнения характеристик:

$$\frac{d\zeta}{ds} = -a + (b - a)\zeta, \quad (21)$$

$$\frac{d\theta}{ds} = 1, \quad (22)$$

$$\frac{dg}{ds} = a(1 - g) - b\zeta g_{\zeta}, \quad (23)$$

$$\frac{dg_{\zeta}}{ds} = b(1 + g_{\zeta}), \quad (24)$$

$$\frac{dg_{\theta}}{ds} = ag_{\theta}, \quad (25)$$

откуда

$$\frac{da}{ds} = -\frac{ra^2}{\zeta}. \quad (26)$$

Хотя это и может показаться громоздким, но эту систему можно проинтегрировать в конечном виде.

Разделив уравнение (21) на (26), получим уравнение Риккати для  $\zeta$  как функции от  $a$ . Если через  $\beta(a)$

обозначить  $(b - a)/ra^2$ , то

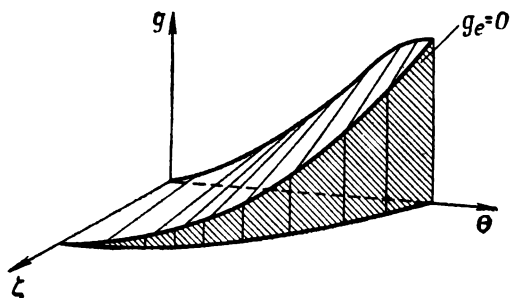
$$\zeta = \zeta_0 \frac{\exp[\beta(a)]/a^{1+r} \beta(a)}{\exp[\beta(a_0)]/a_0^{1+r} \beta(a_0) + \zeta_0 \int_{a_0}^a a^{-1+r} \exp[\beta(a)] da} \quad (27)$$

есть решение, для которого  $\zeta = \zeta_0$  при  $a = a_0$ . Однако считать таким способом далее было бы довольно трудно, так как следующий шаг состоит в том, чтобы подставить уравнение (27) снова в уравнение (26) и определить  $s$  как функцию  $a$ . При использовании счетных машин более удобно решать эту систему в том виде, в каком она написана.

Уравнения (21)–(26) применимы, если  $a$  лежит в интервале  $(a_*, a^*)$ ; если же  $a$  постоянно, то, отбросив последнее уравнение, мы легко проинтегрируем систему и получим

$$g(\zeta, \theta) = \frac{e^{-a\theta} - e^{-b\theta}}{(b/a) - 1} - \zeta(1 - e^{-b\theta}), \quad (28)$$

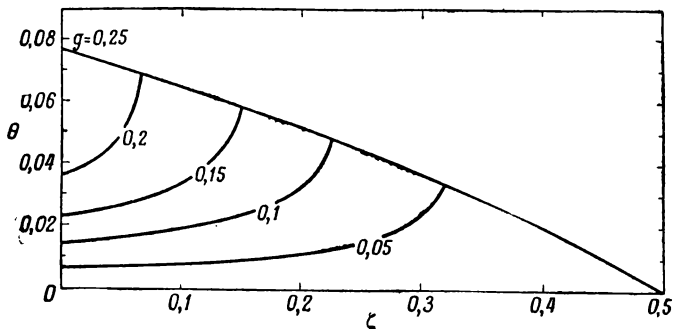
где  $a$  и  $b$  вычислены при постоянной температуре  $T_*$  или  $T^*$ . Общий вид этого решения для интересующей нас



Ф и г. 5. Поверхность выхода для постоянной температуры.

области  $g_b > 0$  показан на фиг. 6. Это решение позволяет разобраться и со случаем  $r = 1$ , для которого температура не влияет на относительные скорости двух реакций. Мы видим, что если концентрации  $A$  и  $B$  стимулируют образование  $B$ , то скорость реакции должна

быть максимальной, т. е.  $T = T^*$ , и используется решение (28) для фиксированной температуры. Если же концентрации прекращают стимулировать образование  $B$ , то реакцию следует прекратить. Аналогично, мы видели, что  $T = T^*$  есть оптимальный режим в случае  $r > 1$ , так что решение (28) применимо и здесь.



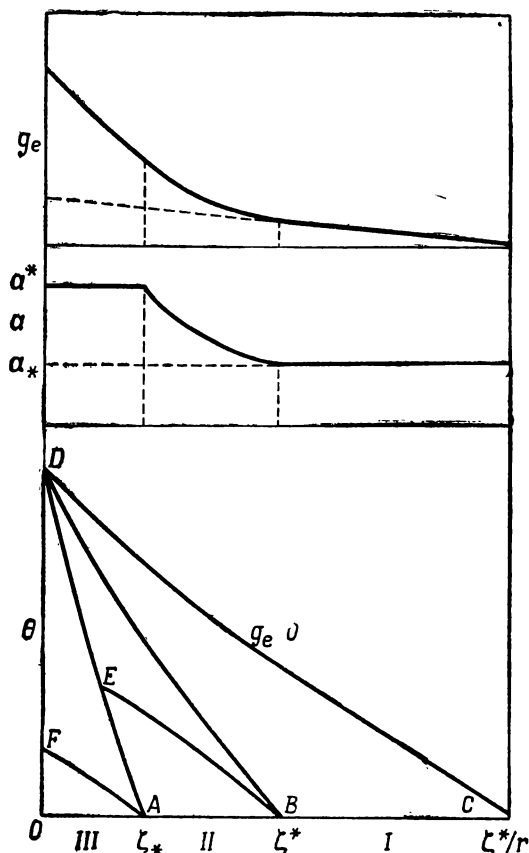
Фиг. 6. Оптимальный выход для  $r > 1$  ( $r = 2$ ,  $\rho = 6$ ,  $a^* = 9$ ).

На фиг. 6 показано типичное решение для случая  $r > 1$ . Решение для случая  $r < 1$  показано на фиг. 7—10.  $\zeta_*$  и  $\zeta^*$  обозначают значения  $(r/\rho)a^{-1/R}$  при  $a = a^*$  и  $a = a_*$  соответственно, так что три вышеописанные области и соответствующие начальные значения  $a$  и  $g_0$  в этих обозначениях выглядят так:

- I.  $\zeta^*/r \geq \zeta \geq \zeta^*$ ,  $a = a_*$ ,  $g_0 = a_* - b_*\zeta$ ,
- II.  $\zeta^* \geq \zeta \geq \zeta_*$ ,  $a_* \leq a \leq a^*$ ,  $g_0 = (1-r)(r/\rho\zeta)^R$ ,
- III.  $\zeta_* \geq \zeta \geq 0$ ,  $a = a^*$ ,  $g_0 = a^* - b^*\zeta$ .

В верхней части фиг. 7 показан выбор начальных данных для  $a$  и соответствующего  $g_0$ ; можно показать, что  $g_0$  имеет непрерывные производные; это является достаточным условием существования решения уравнения в частных производных (20). Любая характеристика, выходящая из области I, начинается с  $a = a_*$ , и это значение  $a$  поддерживается до тех пор, пока правая часть уравнения (19) не достигнет значения  $a_*$ . Так как

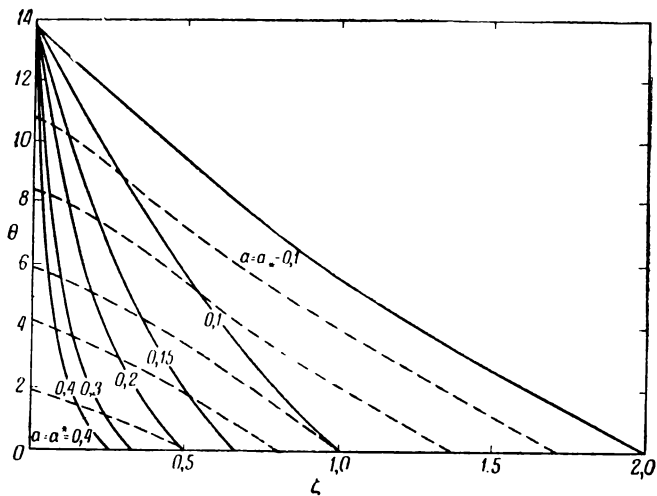
эта часть характеристики лежит в области постоянной температуры, то применимо решение (28) и можно



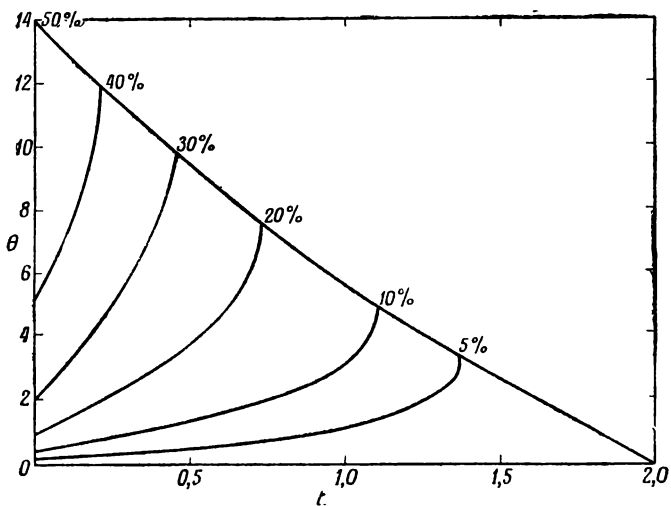
Ф и г. 7. Построение поверхности оптимального выхода ( $r < 1$ ).

аналитически определить кривую  $BD$ , при пересечении с которой  $a$  становится больше  $a_*$ , ее уравнение имеет вид

$$\zeta = \zeta^* \frac{(b_*/a_*) - \exp(b_* - a_*)\theta}{(b_*/a_*) - 1} = \zeta^* B(\theta). \quad (29)$$

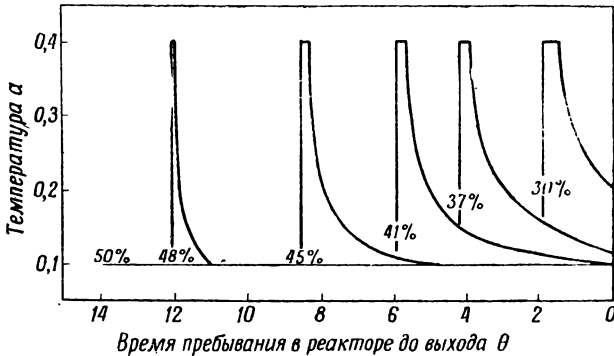


Фиг. 8. Оптимальный температурный режим ( $r < 1$ ).



Фиг. 9. Поверхность оптимального выхода ( $r < 1$ ).

Она пересекает ось  $\zeta = 0$  в той же точке, что и кривая  $g_0 = 0$ , уравнение которой есть  $\zeta = \zeta^* B(\theta)/r$ . Ниже кривой  $BD$  применяется полная система уравнений характеристик до тех пор, пока  $a$  не станет равным  $a^*$  на кривой  $ED$ , после этого  $a$  поддерживается постоянной. На характеристиках, выходящих из области  $II$  (отрезок  $AB$ ),



Ф и г. 10. Температурные профили для реакторов различной длины при питании чистым А.

берем  $a$  из отрезка  $(a_*, a^*)$  до тех пор, пока они не дойдут до дуги  $AE$ , после чего  $a = a^*$ . Характеристики, начинающиеся на отрезке  $OA$ , лежат целиком ниже  $AE$ , и всегда  $a = a^*$ .

Результаты этого интегрирования представлены на фиг. 8 для  $r = 0,5$ ,  $\rho = 5$ ,  $a_* = 0,1$ ,  $a^* = 0,4$ .

Пунктирными линиями изображены характеристики, а сплошными линиями — режим постоянной температуры; поверхность результирующего оптимального выхода показана на фиг. 9.

Различие между несвязным и связным режимами ясно выявляется при сравнении фиг. 4 и 10. При несвязном режиме данные входные условия требуют одной и той же входной температуры независимо от общего времени поддержания процесса. Изменение времени поддержания процесса приводит лишь к изменению конечной точки на той же кривой. Однако при режиме, который не является несвязным, одни и те же входные

условия требуют различного поведения для различных длительностей. Например, при питании чистым  $A$  наибольший достижимый выход  $B$  составляет 50%. Он достигается при времени поддержания процесса  $\theta = 13,8$  и минимальной допустимой температуре  $a = a_*$ ; соответствующая характеристика есть граница  $g_0 = 0$  на фиг. 8. Если время пребывания в реакторе равно лишь 12, оптимальный режим состоит из очень короткого отрезка максимальной температуры, после чего происходит крутое падение кривой и на длинном конечном отрезке поддерживается минимальная температура; выход в этом случае составляет 48%. При уменьшении времени пребывания в реакторе выход убывает, начальный отрезок максимальной температуры становится длиннее и падение кривой становится менее крутым.

Кстати заметим, что наши рассуждения решают парадокс, предложенный Амундсенем, что бесконечно длинный реактор с нулевой температурой должен давать полное превращение  $A$  в  $B$ . На самом же деле, как видно из фиг. 9, для любого входного состава  $\zeta$  наилучший выход получается в реакторе, длина которого удовлетворяет соотношению

$$r\zeta = \zeta^* B(\theta)$$

[см. уравнение (29)]. При этом используется оптимальный режим  $T = T_*$ . Если  $T_*$  убывает, то это значение  $\theta$  безгранично растет. Для  $\zeta = 0$  имеем

$$\theta = \frac{\ln(b_*/a_*)}{b_* - a_*} \quad (30)$$

и максимальный выход равен

$$g = \left(\frac{b_*}{a_*}\right)^{b_*/(a_* - b_*)} \quad (31)$$

Аналогичные формулы могут быть написаны для любого значения  $\zeta$ , но они чрезмерно громоздки.

#### 7.4. Две одновременно протекающие реакции

Прежде чем исследовать наиболее общий случай любого числа одновременно протекающих реакций, заметим, что для случая двух реакций сохраняются некото-



рые черты упрощенного рассмотрения, данного в предыдущем разделе. Если  $c^1$  и  $c^2$  — степени завершенности двух реакций, то, согласно гл. 3, можно записать уравнения для проточного реактора в виде

$$\frac{dc^1}{dt} = -r^1(c^1, c^2, T), \quad (1)$$

$$\frac{dc^2}{dt} = -r^2(c^1, c^2, T), \quad (2)$$

$$c_i = c_{i0} + \alpha_{i1}c^1 + \alpha_{i2}c^2, \quad i = 1, \dots, n. \quad (3)$$

Пусть

$$v(c_1, \dots, c_n) = v(c^1, c^2; c_{10}, \dots, c_{n0}) = v(c^1, c^2)$$

есть цена единичного объема смеси при концентрациях  $A_i$ , равных  $c_i$ ; тогда общую материальную функцию выгоды, которую мы хотим рассмотреть, можно записать

$$v[c^1(0), c^2(0)] - v[c^1(\theta), c^2(\theta)]. \quad (4)$$

Если  $v$  — непрерывная и кусочно-дифференцируемая функция, то выражение (4) можно переписать так:

$$\int_0^\theta \left( \frac{\partial v}{\partial c^1} r^1 + \frac{\partial v}{\partial c^2} r^2 \right) dt.$$

Теперь видно, что если оптимальный режим выбран, то результирующий максимум будет функцией от  $c^1(\theta)$ ,  $c^2(\theta)$  и  $\theta$ . Тогда можно записать

$$f(u_1, u_2, \theta) = \text{Max} \left[ \int_0^\theta (v_1 r^1 + v_2 r^2) dt \right], \quad (5)$$

где  $u_1$  и  $u_2$  означают  $c^1(\theta)$  и  $c^2(\theta)$  соответственно,  $v_i$  означает  $\partial v / \partial c^i$ . Процесс разбиения этого интеграла на две части, применение принципа оптимальности к одной из них и устремление другой к нулю, по-видимому, уже привычный для читателя, приводит непосредственно к уравнению в частных производных:

$$f_\theta = \text{max} [(v_1 + f_1) r^1(u_1, u_2, \omega) + (v_2 + f_2) r^2(u_1, u_2, \omega)], \quad (6)$$

где  $f_i$  обозначает  $\partial f / \partial u_i$  и  $\omega = T(\theta)$ . Это уравнение нужно решать при граничных условиях  $f \equiv 0$  при  $\theta = 0$ ,

т. е. в любой точке  $u_1, u_2, \theta = 0, f = f_1 = f_2 = 0, f_\theta = \max(v_1 r^1 + v_2 r^2)$  и  $\omega$  равно тому значению, при котором достигается этот максимум.

Далее,  $\omega = T(\theta)$ , как обычно, ограничено сверху и снизу величинами  $(T_*, T^*)$  и там, где максимум достигается внутри этого интервала, он удовлетворяет уравнению

$$0 = (v_1 + f_1) r_w^1 + (v_2 + f_2) r_w^2 \quad (7)$$

( $r_w$  обозначает  $\partial r / \partial \omega$ ). Как обычно, напомним уравнения характеристик

$$\frac{du_i}{ds} = -r^i, \quad i = 1, 2, \quad (8)$$

$$\frac{d\theta}{ds} = 1, \quad (9)$$

$$\frac{df}{ds} = v_1 r^1 + v_2 r^2, \quad (10)$$

$$\frac{df_i}{ds} = \sum_{j=1}^2 [v_{ij} r^j + (v_j + f_j) r_i^j], \quad (11)$$

$$\frac{df_\theta}{ds} = 0. \quad (12)$$

(Здесь индекс означает дифференцирование по соответствующему значению  $u$ .) Дифференцируя уравнения (7) вдоль характеристик, получим

$$\frac{d\omega}{ds} = \frac{\sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 (f_j + v_j) (r_w^i r_i^j - r^i r_{wi}^j)}{\sum_{j=1}^2 (f_j + v_j) r_{ww}^j}. \quad (13)$$

Это соотношение однородно относительно  $(f_1 + v_1)$  и  $(f_2 + v_2)$ , поэтому их отношение можно исключить из уравнений (13) и (7):

$$\frac{d\omega}{ds} = \frac{\sum_{i=1}^2 [r_w^2 (r_w^i r_i^1 - r^i r_{wi}^1) - r_w^1 (r_w^i r_i^2 - r^i r_{wi}^2)]}{r_w^2 r_{ww}^1 - r_w^1 r_{ww}^2}. \quad (14)$$

Уравнение содержит только переменные  $u_1$ ,  $u_2$  и  $w$  и, следовательно, может быть решено вместе с двумя уравнениями (8). Такое упрощение уравнений для температурного режима возможно только в случае двух реакций; при большем числе реакций исключить частные производные  $f$  уже не удастся. Уравнение (14), по существу, совпадает с уравнением (28) в статье Хорна [35].

Уравнения (8) и (14) дают решение задачи, если  $w$  (температура) не ограничена и если

$$\sum_{i=1}^2 (v_i + f_i) r_{w}^i < 0,$$

т. е. уравнение (7) дает максимум. Даже в том случае, когда ограничения играют существенную роль, уравнение (14) представляет интерес хотя бы потому, что показывает, как и в предыдущем разделе, что температурная кривая монотонна. Монотонность режима в интервале  $T_*$ ,  $T^*$  означает, что режим при наличии ограничений состоит самое большое из трех частей: граничные значения температуры и монотонное изменение ее между этими значениями.

В любом случае уравнение (6) можно решать одновременным интегрированием уравнения (8) и (10), выбирая такое  $w$  в каждый момент времени, которое максимизирует правую часть уравнения (6). Даже если мало известна структура оптимального режима, прямой числовой поиск этого значения  $w$  не представляет никаких затруднений для цифровых машин.

## 7.5. Общая задача

До сих пор мы рассматривали функцию выгоды, равную разности между концентрациями или стоимостью входящего и выходящего продуктов.

В этом разделе нам будет удобно принять за функцию выгоды только стоимость продукта на выходе. Позднее может быть построено более естественное выражение для дохода вычитанием стоимости входного продукта, умножением на скорость потока и вычитанием расходов на реактор.

Для разнообразия (а также для того, чтобы впоследствии легче было установить связь с другими работами) будем использовать уравнение (3.4.1) для концентраций на единицу массы смеси. Если имеют место  $m$  одновременно протекающих реакций, то можно выразить концентрации всех веществ через концентрации первых  $g_1, \dots, g_m$  из них по формулам (3.1.12):

$$g_k = g_{k0} + \sum_{i,j=1}^m \alpha_{kj} \beta_{ji} (g_i - g_{i0}), \quad k = m+1, \dots, n. \quad (1)$$

При подстановке их в выражение для скорости реакций  $r^j$  получим  $m$  функций

$$f_i = f_i(g_1, \dots, g_m, T, p) = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} r^j, \quad (2)$$

дающих скорости образования  $A_i$ , выраженные через эти концентрации, температуру и давление. Тогда, подставив  $\theta - t$  вместо  $x/G$  в уравнения (3.4.1), получим

$$\frac{dg_i}{dt} = -f_i(g_1, \dots, g_m, T, p), \quad i = 1, \dots, m. \quad (3)$$

Предположим, что обе величины  $T$  и  $p$  поддаются управлению, как это обычно бывает в реакторах периодического действия, в реакторе вытеснения это не так. Температура и давление, как обычно, ограничены:

$$T_* \leq T \leq T^*, \quad (4)$$

$$p_* \leq p \leq p^*. \quad (5)$$

Функция выгоды

$$V[g_1(0), \dots, g_m(0)] \quad (6)$$

предполагается кусочно-непрерывной и кусочно-дифференцируемой<sup>1)</sup>. Это достаточно общее предположение включает в себя тот частный случай, когда  $V = 0$  в некоторой определенной области.

<sup>1)</sup> В точках разрыва функции  $V$ , а следовательно, и функции  $\varphi$  уравнение (9) теряет смысл, но уравнения характеристик (11)–(15), с помощью которых автор фактически решает задачу, можно получить без использования уравнения (9) с помощью принципа максимума Л. С. Понтрягина (ссылку см. [10] в литературе к предисловию редактора). — *Прим. ред.*

Заметим теперь, что для каждой точки, лежащей на данной оптимальной траектории, мы получим одно и то же значение функции выгоды.

Пусть

$$\varphi(u_1, \dots, u_m, \theta) = \text{Max } V[g_1(0), \dots, g_m(0)], \quad (7)$$

где  $u_i = g_i(\theta)$  — начальное состояние,  $\theta$  — общее время пребывания в реакторе. Тогда по принципу оптимальности

$$\varphi(u_1, \dots, u_m, \theta) = \text{Max } \varphi[g_1(\theta - \tau), \dots, g_m(\theta - \tau), \theta - \tau] \quad (8)$$

для любых  $\tau$ ,  $0 \leq \tau \leq \theta$ ; максимизация достигается выбором режима  $T(t)$ ,  $p(t)$  на интервале  $\theta - \tau \leq t \leq \theta$ , и  $g_i(\theta - \tau)$  есть результат интегрирования уравнений (3) при этом режиме. Полагая  $\tau \rightarrow 0$ , имеем, используя обычное обозначение,

$$\varphi_\theta = \text{Max } \sum_{i=1}^m \varphi_i f_i. \quad (9)$$

Это уравнение нужно решить при граничных условиях

$$\varphi(u_1, \dots, u_m, \theta) = V(u_1, \dots, u_m). \quad (10)$$

Запишем характеристические уравнения

$$\frac{du_i}{ds} = -f_i, \quad i = 1, \dots, m, \quad (11)$$

$$\frac{d\theta}{ds} = 1, \quad (12)$$

$$\frac{d\varphi}{ds} = 0, \quad (13)$$

$$\frac{d\varphi_i}{ds} = \sum_{j=1}^m \varphi_j f_{j,i}, \quad i = 1, \dots, m, \quad (14)$$

$$\frac{d\varphi_\theta}{ds} = 0, \quad (15)$$

где  $f_{j,i}$  обозначает  $\partial f_j / \partial u_i$ . Для любой точки  $(u_1, \dots, u_m)$  границы, на которой  $V$  дифференцируемо, имеем началь-

ные значения для уравнений (12)—(15):

$$\theta = 0, \quad \varphi = V, \quad \varphi_i = \frac{\partial V}{\partial u_i},$$

$$\varphi_0 = \text{Max} \sum_{i=1}^m f_i \left( \frac{dV}{du_i} \right) \quad (16)$$

и значения  $T$  и  $p$ , при которых достигается максимум последнего из этих выражений. Интегрирование характеристических дифференциальных уравнений проводится, исходя из этих начальных данных. На каждом этапе  $T$  и  $p$  выбираются так, чтобы выражение в правой части уравнения (9) было максимальным. При интегрировании фактически используется только  $2m$  уравнений (11) и (14), так как уравнения (12), (13) и (15) тривиальны. Начальное условие для  $\varphi_0$  служит для определения области  $\varphi_0 > 0$ , где характеристики соответствуют траекториям доходных реакций. Эта область подразделяется на девять подобластей в соответствии с неравенствами (4) и (5). Для двух переменных  $T$  и  $p$  эти подобласти могут быть сведены в табл. 1.

Таблица

|                       |                       |                       |
|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| $T = T_*$             | $T_* \leq T \leq T^*$ | $T = T^*$             |
| $p = p^*$             | $p = p^*$             | $p = p^*$             |
| $T = T_*$             | $T_* \leq T \leq T^*$ | $T = T^*$             |
| $p_* \leq p \leq p^*$ | $p_* \leq p \leq p^*$ | $p_* \leq p \leq p^*$ |
| $T = T_*$             | $T_* \leq T \leq T^*$ | $T = T^*$             |
| $p = p_*$             | $p = p_*$             | $p = p_*$             |

Характеристики, начинающиеся из этих областей начальной плоскости, могут при интегрировании переходить из одной области в другую. Разумеется, что даже для двух переменных  $p$  и  $T$  процесс нахождения максимума (9) не слишком прост, даже если функция унимодальна. При некоторых обстоятельствах может быть использован метод, упомянутый ранее в разд. 2, 4, в тех случаях, когда имеет место монотонность. Однако на этот метод нельзя полагаться без существенного понимания физических свойств систем.

Характеристические уравнения, очевидно, тождественны уравнениям, выведенным Кацем [42] методами вариационного исчисления. В его обозначениях  $\varphi_i = v_i$ ,  $s = -t$ , и основная задача, которую он решает, заключается в максимизации выхода  $A_2$ . Для решения этой задачи достаточно положить  $V(u_i, \dots, u_m) = u_2$ , откуда начальные значения  $\varphi_i = v_i$  будут равны нулю при всех  $i \neq 2$  и 1 при  $i = 2$ . Уравнения (11), (14) и (16) тождественны с его уравнением (6) (42), а его условие максимизации (7) эквивалентно нашему уравнению (9). Другие рассмотренные Кацем модификации основной задачи также сводятся к нашим уравнениям при соответствующем выборе  $V$ . В другой статье Кац [43] обращается к задаче управления давлением и температурой и приходит к уравнениям, совпадающим с приведенными здесь. Нетрудно усмотреть также тождественность наших уравнений уравнениям Хорна [35]. В нашем рассмотрении функции Хорна  $v_i$  обозначены через  $-f_i$ , а  $\lambda_i$  — через  $\varphi_i$ . Следовательно, его уравнения [37a] и [38a] в точности соответствуют нашим уравнениям (14) и (16). В пользу метода динамического программирования можно сказать, что физический смысл величины  $\varphi_i$  гораздо легче понять, чем смысл величин  $v_i$  или  $\lambda_i$ , вводимых при использовании методов вариационного исчисления.

Если на выходящий продукт накладываются какие-либо ограничения, например

$$g_{i^*} \leq g_i(0) = u_i \leq g_i^*, \quad (17)$$

то наша задача оказывается даже проще, так как теперь надо, естественно, рассматривать только характеристики, выходящие из этой части начальной плоскости.

## ГЛАВА 8

### СТОХАСТИЧЕСКИЕ ЗАДАЧИ

В настоящей главе мы сделаем обзор трех уже изучавшихся стохастических задач. Многие еще нужно сделать в этой области и значение ее будет возрастать по мере того, как будет становиться доступнее путь к решению задач последовательного контроля<sup>1</sup>). Характерным для таких задач является то, что выход на некоторой стадии известен не точно, а лишь в вероятностном смысле. В некоторых случаях (например, во втором из рассматриваемых здесь) можно придти к детерминированным уравнениям, решение которых, однако, интерпретируется в стохастических терминах при возвращении к исходной физической задаче.

Первый пример предложен Раддом [49] и касается выбора оптимального числа дублирующих вспомогательных процессов для производства химикалий, которые необходимы в основном процессе. Если возможно, что эти вспомогательные процессы могут иметь нежелательный исход, и если крайне важно, чтобы получаемые при этом вещества оказывались бы в нашем распоряжении без отсрочек по отношению к основному процессу, то было бы целесообразно проводить более чем один вспомогательный процесс. Однако большое число таких процессов обошлось бы слишком дорого. Вторым примером может служить перефразировка в промышленных терминах беллмановского стохастического процесса золотодобычи ([16], гл. 2). В третьем примере рассмотрена одна из простых моделей оптимальной смены катализаторов, изучавшихся Робертсом [47, 48].

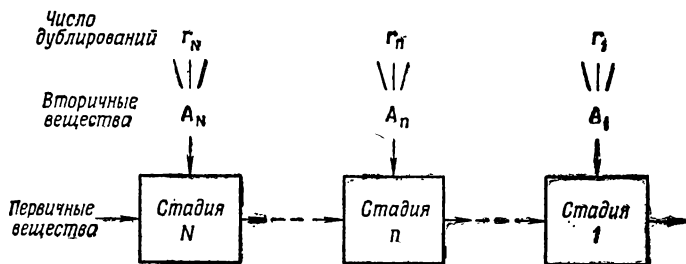
---

<sup>1</sup> Под последовательным контролем понимаются методы анализа поведения объекта при последовательном изменении режима работы и использования этих результатов для нахождения оптимального режима. — *Прим. ред.*



### 8.1. Оптимальное дублирование при возможных неудачах во вспомогательных процессах

Процесс, который мы будем рассматривать, состоит в том, что первичные химические вещества последовательно преобразуются в результате реакций с рядом вторичных химических веществ  $A_N, \dots, A_1$ . Эти вторичные вещества готовятся специально для соответствующей стадии процесса и должны быть в нужный момент в нашем распоряжении; в противном случае весь процесс обесценивается. Такое производство неустойчивых веществ вовсе



Фиг. 1. Процесс производства, рассмотренный в разд. 8.1.

не является необычным в биохимической промышленности. Если получение  $A_n$  ( $n = 1, \dots, N$ ) подвержено случайным ошибкам, то проведение более чем одного вспомогательного процесса увеличит вероятность того, что в нужный момент необходимый продукт будет в нашем распоряжении. Однако выгода от стабильности основного процесса должна быть тщательно уравновешена с увеличением расходов на эти дополнительные процессы. Возникает задача выбора оптимального числа вспомогательных процессов. Система изображена на фиг. 1;  $r_n$  означает число операций для получения  $A_n$ .

Пусть  $p_n$  — вероятность ошибки во вспомогательном процессе производства  $A_n$ . Предполагается, что ошибки во вспомогательных процессах независимы друг от друга, так что вероятность одновременной ошибки во всех процессах равна  $p_n^n$ . Отсюда следует, что вероятность успешного исхода хотя бы одного процесса равна

$1 - p_n^n = q_n$ . Пусть  $c_n(r_n)$  представляют расходы на проведение  $r_n$  вспомогательных процессов производства  $A_n$ . Эта функция не обязательно должна быть линейной. Пусть, далее,  $v$  есть стоимость окончательного продукта, а  $C$  — расходы на первичные вещества.  $Q_N$  есть вероятность того, что весь процесс закончится успешно; математическое ожидание прибыли равно  $vP_N$  при расходах, равных  $\sum_1^N c_n(r_n) + C$ . Следовательно, за функцию выгоды можно принять

$$\begin{aligned} P_N &= vQ_N - \sum c_n(r_n) - C, \\ &= v\Pi q_n - \sum c_n(r_n) - C, \end{aligned} \quad (1)$$

так как  $Q_N = \Pi q_n$ .  $P_N$  зависит не только от  $r_1, \dots, r_N$ , которые теперь должны быть оптимально выбраны, но и от вероятности, с которой первичные вещества окажутся в нашем распоряжении. В случае полного  $N$ -стадийного процесса эта вероятность равна единице. Но, согласно методике динамического программирования, мы рассматриваем продукт стадии  $N$  в качестве первичного вещества для последующего  $(N-1)$ -стадийного процесса. Итак, мы определим

$$f_N(b_{N+1}) = \max P_N \text{ при } r_1, \dots, r_N, \quad (2)$$

выбранных оптимально, и  $b_{N+1}$  есть вероятность того, что первичные вещества окажутся приемлемыми.

Из этого определения по принципу оптимальности можно вывести функциональное уравнение

$$f_N(b_{N+1}) = \max [f_{N-1}(b_N) - c_N(r_N)], \quad (3)$$

где максимизация обеспечивается правильным выбором  $r_N$ . Так как  $b_N$  есть вероятность того, что материал окажется приемлемым для проведения оставшегося  $(N-1)$ -стадийного процесса, то эта вероятность равна произведению  $q_n$  — вероятности поступления первичных веществ на стадию  $N$  на вероятность успеха на стадии  $N - b_{N+1}$ .

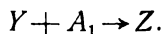
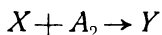
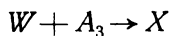
Таким образом,

$$b_N = q_N b_{N+1} = (1 - p_N^N) b_{N+1} \quad (4)$$

показывает связь между  $b_{N+1}$ ,  $b_N$  и  $r_N$ , необходимую для решения уравнений (3). Эта последовательность уравнений начинается с уравнения для одностадийной задачи

$$f_1(b_2) = \max [vq_1 b_2 - c_1(r_1) - C]. \quad (5)$$

Какие преимущества вытекают из такого варианта решения задачи перед строгом стехиометрическим, увидим из следующего примера. В этом примере использование вспомогательных процессов превращает убыточный процесс в доходный. Пусть  $W$  — исходный продукт, а  $Z$  — конечный продукт, получаемый в результате следующих реакций:



Предположим, что расходами на  $W$  можно пренебречь, а расходы на получение одной порции  $A_1$ ,  $A_2$  и  $A_3$  равны соответственно 1,0, 1,0 и 0,2 денежных единиц, причем стоимость  $Z$  составляет 10 единиц. Пусть также вероятности равны

$$p_1 = 1/4, \quad p_2 = 1/2, \quad p_3 = 2/3.$$

Стехиометрический расчет требует проведения лишь одной вспомогательной операции каждого из вторичных веществ при общих расходах 2,2 единицы. Вероятность одновременного успеха равна

$$(1 - 1/4)(1 - 1/2)(1 - 2/3) = 1/8,$$

так что математическое ожидание прибыли (без учета расходов) равно 1,25. Итак, в среднем теряется каждый раз по 0,95 единиц.

Решение уравнений (3) — (5) для этих констант суммировано в табл. 1. При  $n = 3$  приведена лишь одна строка, так как известно, что  $W$  определенно приемлем, и, следовательно,  $b_4 = 1$ . Решив эти уравнения, получим, что нужно провести семь вспомогательных процессов производства  $A_3$  с результирующей вероятностью успеш-

Таблица 1

|   | $b_{n+1}$ | $I_n(b_{n+1})$ |   | $b_n$ |
|---|-----------|----------------|---|-------|
| 1 | 0,2       | 0,50           | 1 | —     |
|   | 0,4       | 2,00           | 1 | —     |
|   | 0,6       | 3,63           | 2 | —     |
|   | 0,8       | 5,50           | 2 | —     |
|   | 1,0       | 7,38           | 2 | —     |
| 2 | 0,4       | 0,00           | 0 | 0,00  |
|   | 0,6       | 0,30           | 2 | 0,45  |
|   | 0,8       | 1,63           | 2 | 0,60  |
|   | 0,9       | 2,30           | 3 | 0,79  |
|   | 1,0       | 3,15           | 3 | 0,88  |
| 3 | 1,0       | 1,28           | 7 | 0,94  |

ного исхода 0,94 и ожидаемым чистым доходом 1,28 единиц. При  $n = 2$  путем интерполяции для  $b_3 = 0,94$  получим три вспомогательных процесса производства  $A_2$  и  $b_2 = 0,83$ . Далее при  $n = 1$  следует проводить два вспомогательных процесса для производства  $A_1$ . Таким образом, процесс, в среднем приносящий убыток 0,95 единиц, превратится в процесс с математическим ожиданием дохода 1,28 единиц. Этот результат является вполне удовлетворительным.

Ясно, что описанный процесс есть только один из многих, который может быть исследован тем же методом. Мы можем учесть также и вероятность нежелательного исхода реакции на любой основной стадии. Может оказаться, что  $X$  и  $Y$  не являются неустойчивыми, так что после успешного завершения стадии  $(n + 1)$  можно будет начать производство  $A_n$ . Если время на его производство ограничено, то вновь желательно проводить несколько вспомогательных операций одновременно. Аналогичные задачи, некоторые из которых не удается решить методом динамического программирования, изучались Раддом [49] и Вестбруком [54].

## 8.2. Стохастический процесс золотодобычи

Другой стохастический процесс, который мы рассмотрим, есть химико-технологическая интерпретация беллмановского процесса золотодобычи ([16], гл. 2). Предположим, что мы имеем два источника ресурсов с несколько различными характеристиками. Источник  $A$  содержит общее количество сырья  $x$ ,  $r$ -я доля которого может быть добыта с вероятностью  $p$ , а вероятность выхода реактора из строя есть  $(1 - p)$ . Для источника  $B$  соответствующие величины равны  $y$ ,  $s$ ,  $q$  и  $(1 - q)$ . Выбор режима работы состоит в указании использовать реактор на данной стадии либо для добычи сырья из источника  $A$ , либо из источника  $B$ . Мы ищем такой режим, который максимизирует общее количество сырья, добытого до того, как реактор выйдет из строя. Такие случаи практически возникают, если источники ресурсов содержат катализаторный яд.

Предположим сначала, что процесс продолжается в лучшем случае  $N$  стадий и пусть

$f_N(x, y)$  — ожидаемое количество сырья, которое будет добыто до выхода из строя реактора, если источник  $A$  имеет количество сырья  $x$ , а  $B$  — количество  $y$  (1)

Для одностадийного процесса

$$f_1(x, y) = \max(prx, qsy) \quad (2)$$

и режим состоит в использовании источника  $A$ , если первый член больше второго, и источника  $B$ , в случае, когда второй член больше первого. В двустадийном процессе мы либо можем сначала использовать сырье из  $A$ , в этом случае мы ожидаем использовать количество сырья  $rx$  с вероятностью  $p$  и оставить неиспользованным  $(1 - r)x$ ,  $y$ , либо, выбрав сначала  $B$ , использовать  $sy$ , оставив  $x$ ,  $(1 - s)y$  с вероятностью  $q$ .

В первом случае ожидаемое количество сырья, которое будет использовано, равно

$$p \{rx + f_1[(1 - r)x, y]\},$$

а во втором случае

$$q \{sy + f_1[x, (1 - s)y]\}.$$

Итак,

$$f_2(x, y) = \max \{ prx + pf_1[(1-r)x, y], \\ qsy + qf_1[x, (1-s)y] \}. \quad (3)$$

Из тех же соображений ясно, что

$$f_N(x, y) = \max \{ prx + pf_{N-1}[(1-r)x, y], \\ qsy + qf_{N-1}[x, (1-s)y] \}. \quad (4)$$

При  $N \rightarrow \infty$  функции  $f_N$  сходятся к единственной функции  $f$ , удовлетворяющей уравнению

$$f(x, y) = \max \{ prx + pf[(1-r)x, y], \\ qsy + qf[x, (1-s)y] \}. \quad (5)$$

Беллман [16, стр. 86] доказал, что функция, удовлетворяющая этому уравнению, существует и единственна и что  $f_N$  сходятся к ней. Нас интересует здесь довольно простая структура оптимума и оптимального режима.

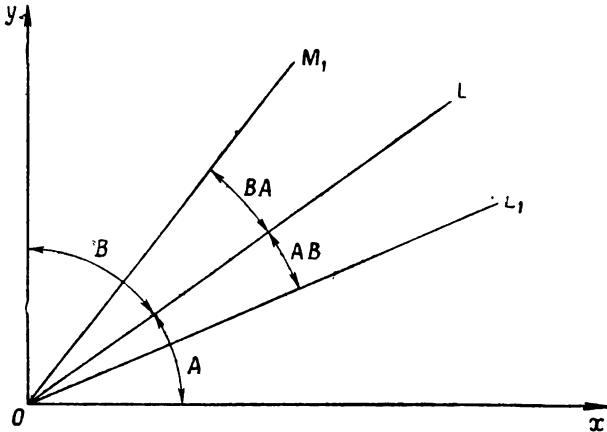
Функция  $f(x, y)$  однородна первой степени по  $x, y$ , так что  $f(kx, ky) = kf(x, y)$ . Это ясно из построения  $f$ , а также из уравнения (5). Другими словами, если в некоторой точке  $(x, y)$  плоскости  $x, y$  решение состоит в том, чтобы использовать сначала  $A$ , то это решение оказывается оптимальным и для всех точек луча, проходящего через начало координат и точку  $(x, y)$ . Если мы изобразим область на плоскости, в которой оптимальным решением является выбор  $A$ , то эта область должна состоять из одного или более секторов с вершиной в начале координат; и то же самое справедливо для  $B$ . Если  $x$  намного превосходит  $y$ , то мы определенно должны ожидать использования сырья из  $A$ , так что сектор, примыкающий к оси  $x$ , есть область  $A$ , а сектор, примыкающий к оси  $y$ , — область  $B$ . Предположим теперь, что существуют только две области, разделенные прямой  $L$ , как показано на фиг. 2. Попытаемся найти линию  $L$ , а после этого покажем, что наше предположение на самом деле верно.

Если оптимальным является использование  $B$  выше прямой  $L$ , а использование  $A$  ниже  $L$ , то на самой прямой исход не зависит от того, какой из двух источников

используется. Это приводит к уравнению

$$prx + pf[(1 - r)x, y] = qsy + qf[x, (1 - s)y],$$

которое, однако, трудно решить. Но ту же идею можно выразить другим способом; использование сначала *A* и



Фиг. 2. Нахождение режимов в плоскости  $(x, y)$ .

затем *B* эквивалентно использованию сначала *B*, а потом *A*. Используя сначала *A* и затем *B*, получим

$$prx + pqsy + pqf[(1 - r)x, (1 - s)y].$$

Используя *B* и затем *A*, имеем

$$qsy + pqr x + pqf[(1 - r)x, (1 - s)y].$$

Приравнявая их, получим

$$\frac{pr}{1-p} x = \frac{qs}{1-q} y. \tag{6}$$

Это и есть уравнение прямой *L*. Выше этой прямой режим *BA* лучше режима *AB*, но на ней самой они одинаково хороши. Уравнение (6) можно выразить следующими словами: отношение вероятности непосредственно ожидаемой прибыли ( $prx$  или  $qsy$ ) к вероятности убытка  $(1 - p)$  или  $(1 - q)$  не зависит от выбора *A* или *B*.

Несомненно, на оси  $x$ , где источник  $B$  не содержит сырья, нужно использовать  $A$ , следовательно,

$$f(x, 0) = prx + pf[(1-r)x, 0] > qf(x, 0). \quad (7)$$

В силу непрерывности  $f(x, y)$  должен существовать сектор, примыкающий к этой оси, для которого

$$f(x, y) > qsy + qf[x, (1-s)y],$$

и в этой области выбор  $A$  является оптимальным. Теперь рассмотрим точку  $P$ , лежащую ниже  $L$ , причем  $x, (1-s)y$  лежит в этой области. Если бы  $B$  было оптимальным выбором на первой стадии в точке  $P$ , то оптимальным двустадийным режимом было бы  $BA$ . Но мы знаем, что ниже  $L$  режим  $AB$  лучше, чем  $BA$ , так как  $prx/(1-p) > qsy/(1-q)$ . Отсюда следует, что оптимальным выбором в точке  $P$  является  $A$ , и по тем же причинам это верно для всех точек, лежащих ниже  $L$ . Таким образом, имеются только две области решений, и если состояние источников задается точкой  $(x, y)$ , то оптимальное решение состоит в использовании  $A$  или  $B$  в соответствии с тем, лежит ли точка ниже или выше  $L$ .

Но структура  $f(x, y)$  может быть исследована глубже. Очевидно, что если  $(x, y)$  лежит на прямой

$$(1-r) \frac{pr}{1-p} x = \frac{qs}{1-q} y, \quad (8)$$

то первый выбор состоит в использовании  $A$ , но после этого выбора точка  $[(1-r)x, y]$  попадает на прямую  $L$ .

Прямую (8) обозначим  $L_1$ ; тогда в сектора  $LOL_1$  первые два выбора должны быть  $A$  и затем  $B$ . Точно так же, если  $M_1$  лежит на прямой

$$\frac{pr}{1-p} x = \frac{qs}{1-q} y(1-s),$$

то точка  $(x, y)$  с этой линии попадает на прямую  $L$  после первого выбора  $B$ , и любая точка внутри сектора  $M_1OL$  требует выбора  $B$  и затем  $A$ . Можно построить последовательность прямых  $L_n, M_n$ , а именно

$$(1-r)^n \frac{pr}{1-p} x = \frac{qs}{1-q} y \quad \text{и} \quad \frac{pr}{1-p} x = \frac{qs}{1-q} y(1-s)^n.$$

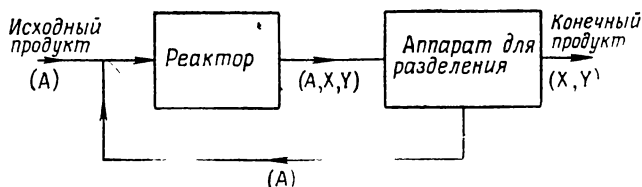


Эти последовательности таковы, что внутри сектора  $L_n O L_{n-1}$  первые  $n$  решений состоят в выборе  $A$  и  $(n + 1)$  решение — в выборе  $B$ ; в то время как в секторе  $M_n O M_{n-1}$   $n$  решений состоят в выборе  $B$ ,  $(n + 1)$  решение — в выборе  $A$ . Если  $r^\alpha = s^\beta$  и  $\alpha, \beta$  — целые числа, то можно найти аналитическое выражение для  $f$ ; оно линейно внутри любого сектора.

Беллман показал, что для любого  $N$  плоскость  $x, y$  разбивается на две области решений, так же, как и в случае бесконечного  $N$ . Найдено также, что при увеличении  $N$  области решений монотонно сходятся к областям  $N = \infty$  и существует такое  $N_0$ , что они совпадают для  $N > N_0$ .

### 8.3. Оптимальная смена катализатора

В двух очень интересных статьях Робертса [47, 48] рассмотрена задача о смене катализатора, сформулированная в терминах динамического программирования.



Фиг. 3. Схема установки.

Здесь мы не сможем рассмотреть всю его работу; так как это увело бы нас довольно далеко в область рассмотрения последовательного контроля, ограничимся лишь его простейшей моделью, которая покажет некоторые черты стохастического динамического программирования.

Рассматриваемый процесс является моделью эндотермической реакции газообразного вещества при использовании катализатора. Схематично это изображено на фиг. 3. Исходный продукт чистого вещества  $A$  проходит через реактор, в котором доля  $c$  продукта превращается в продукты  $X$  и  $Y$ . Поток затем входит в аппарат для

разделения, откуда продукты реакции отводятся, а непрореагировавшая часть  $A$  возвращается в исходный поток.

Если скорость исходного потока равна  $f$ , а скорость через реактор есть  $q$ , то

$$f = qc. \quad (1)$$

Превращение  $c$  есть функция рабочей температуры  $T$ , скорости потока  $q$  и общего потока  $s$ , прошедшего через реактор со времени последней регенерации катализатора. Предположим, что эта функция линейна, т. е.

$$c = c_1 T - c_2 q - c_3 s. \quad (2)$$

Если время процесса разделить на отрезки равной длительности, которые будем для удобства называть днями, и индекс  $n$  означает число дней после регенерации, то

$$s_N = \sum_1^N q_n. \quad (3)$$

Член  $c_3 s$  выражает уменьшение превращения вследствие старения катализатора.

Реакция эндотермична и требует подачи некоторого количества тепла  $Q$ . Если  $T_0$  — температура сырья,  $c_p$  — удельная теплоемкость реагентов и  $\Delta H$  — теплота реакции, то

$$Q = qc_p(T - T_0) + (\Delta H)fc. \quad (4)$$

Дневной доход будет составлять

$$P = v_1 f - v_2 Q - v_3(1 - c)q - v_4. \quad (5)$$

Первый член представляет чистое увеличение стоимости конечного продукта по сравнению со стоимостью исходного продукта, второй — расходы на подогрев, третий — расходы на разделение и возвращение непрореагировавшей части  $A$ , а четвертый — остальные фиксированные расходы.

Если из опыта установки известен доход за  $n$ -й день работы после смены катализатора  $P_n$  и если расходы на смену катализатора равны  $R$ , то средний доход за период  $N$  дней работы и  $M$  дней, затраченных на смену катализатора, равен

$$\frac{\sum_1^N P_n - R}{N + M}. \quad (6)$$

Теперь можно найти оптимальное значение  $N$ , вычисляя это выражение для различных значений  $N$  до тех пор, пока не будет достигнут максимум.

Это чисто детерминированная ситуация. Другой детерминированный случай, рассмотренный Робертсом, — это задача определения ежедневных значений рабочих температур  $T_n$  и скорости  $q_n$ , которые максимизируют общий доход за период  $N$  дней. К этой задаче можно применить метод динамического программирования, если считать, что состояние системы задается числом  $s$ . Пусть  $f_N(s)$  есть максимальный доход, который может быть получен за  $N$  дней, начиная с состояния  $s$ , и пусть  $g(s, T, q)$  есть доход за день с состоянием  $s$  при использовании условий  $T$  и  $q$  [его можно вычислить из уравнений (1) — (5)]. Тогда

$$f_N(s) = \max_{T, q} [q(s, T, q) + f_{N-1}(s + q), -R + f_{N-1}(0)]. \quad (7)$$

Первая из максимизируемых величин есть доход за один день плюс максимальный доход, получаемый за оставшиеся дни при непрерывной работе с тем же самым катализатором. Второй член есть расход на смену катализатора плюс максимальный доход, получаемый после этой замены. Нам нужно сделать наилучший выбор. Так может быть получен оптимальный режим работы.

Возвращаясь к нашей задаче, предположим, что  $P_n$  известно или из подобного анализа, или из опыта установки, но при регенерации катализатора имеется элемент случайности. Регенерация может привести к хорошему катализатору, который сохранит свои хорошие

качества на последующем цикле работы, или она может привести к плохому катализатору, который и останется плохим. Пусть вероятность получения хорошего катализатора равна  $p$ , а вероятность получения плохого равна  $p' = 1 - p$ . Если  $P_n$  и  $P'_n$  — есть дневной доход от хорошего и плохого катализаторов, проработавших  $n$  дней, то

$$P_n > P'_n \text{ для всех } n. \quad (8)$$

Теперь пусть

$f_N(t)$  — ожидаемый доход от  $N$ -стадийного процесса, начавшегося с хорошего катализатора, работавшего  $t$  дней;  $g_N(t)$  — ожидаемый доход от  $N$ -стадийного процесса, начавшегося с плохого катализатора, работавшего  $t$  дней.

Тогда на любой стадии мы имеем выбор: либо продолжать работу, либо прекратить работу и провести регенерацию. Если принять последнее, то ожидаемый доход при возобновлении работы будет равен

$$pf_{N-1}(0) + p'g_{N-1}(0).$$

Тогда, применяя принцип оптимальности, получим

$$\begin{aligned} f_N(t) &= \max [P_t + f_{N-1}(t+1), -R + pf_{N-1}(0) + p'g_{N-1}(0)], \\ g_N(t) &= \max [P'_t + g_{N-1}(t+1), -R + pg_{N-1}(0) + p'f_{N-1}(0)], \end{aligned} \quad (9)$$

где

$$f_1(t) = P_t, \quad g_1(t) = P'_t, \quad p + p' = 1. \quad (11)$$

Эти функциональные уравнения следует решать совместно.

Мы сразу же можем обобщить это на случай регенерации, приводящей более чем к двум качествам катализатора. Пусть качество катализатора можно охарактеризовать параметром  $\gamma$  так, что  $P_n$  становится  $P_n(\gamma)$  и  $f_N(t)$  станет теперь  $f_N(t; \gamma)$ . Если регенерация приводит к катализатору, качество которого характеризуется значением  $\gamma$ , лежащем на отрезке  $\gamma \pm \frac{1}{2} d\gamma$  с вероят-

ностью  $p(\gamma) d\gamma$ , то

$$f_N(t, \gamma) = \\ = \max \left[ P_t(\gamma) + f_{N-1}(t+1, \gamma), -R + \int_0^{\infty} f_{N-1}(0, \gamma) p(\gamma) d\gamma \right]. \quad (12)$$

Робертс обобщил эту модель в других направлениях, рассматривая постоянные  $c_1, c_2, c_3$  как стохастические переменные, и изучил возможности оптимального управления в случае, если имеется лишь вероятностная информация о значениях этих коэффициентов.

## ГЛАВА 9

### ОПТИМАЛЬНОЕ УПРАВЛЕНИЕ РАБОТАЮЩИМИ РЕАКТОРАМИ

Как уже упоминалось в гл. 1, в настоящей книге не исследуются детально вопросы управления химическими реакторами. Здесь рассматривается только часть этих вопросов, некоторые задачи проектирования интерпретируются в терминах управления условиями работы. Оптимальный режим для переменных, характеризующих режим работы для уже сконструированных реакторов, может быть найден в процессе производства. Однако многие реакторы работают при таких условиях, когда сведения об их работе получают позднее, например на основе работы самого реактора [6]. Целесообразно проследить, как используется такой тип управления при ограничениях, которые накладывает уже существующая конструкция. Так, в адиабатическом реакторе с применением в качестве хладагента части холодного потока, трудно изменить размеры реакторов, но можно непосредственно управлять отношениями байпасирования. Предположим, что конструктивные данные допускают улучшения при устойчивых условиях работы, хотя эта новая информация может оказаться недостаточно полной. Повторное изменение условий работы с получением все большей информации есть один из видов последовательного контроля [50], но изучение его выходит за рамки этой книги, так же, как и изучение неустойчивого управления (исключение составляет реактор периодического действия, поведение которого во времени полностью сводится к поведению реактора вытеснения в пространстве).

### 9.1. Цепочка реакторов с мешалками

Проектирование цепочки реакторов с мешалками начинается с вычисления времени пребывания в реакторе и рабочей температуры на каждой стадии. Если эта цепочка уже построена, то объем каждой стадии фиксирован. Это фиксирует отношения времен пребывания в реакторах и позволяет выбирать только скорость потока и температуру. Известно, что в случае одной реакции со стехиометрической функцией выгоды оптимальный температурный режим является несвязным. Это ведет к очень простому способу управления цепочкой  $R$  реакторов, которая применяется даже тогда, когда кинетика реакции совершенно неизвестна. Так как

$$q(c_r - c_{r+1}) = V_r r(c_r, T_r)$$

и  $V_r$  фиксированы, то каждый член в сумме

$$\sum_1^R (c_r - c_{r+1}) = c_1 - c_{R+1}$$

должен быть максимизирован по отдельности. Так, если есть возможность измерять  $c$  между стадиями, то сначала следует установить  $T_R$  так, чтобы  $(c_R - c_{R+1})$  было максимально. После этого выбирается  $T_{R-1}$ , которое максимизирует  $(c_{R-1} - c_R)$  и т. д. вдоль цепочки. Несвязность режима гарантирует, что таким способом можно получить оптимальный режим для всего реактора. В действительности, этот процесс целиком относится к области последовательного контроля, так как корреляция флуктуацией  $(c_r - c_{r+1})$  и  $T_r$  позволяет сделать оценки  $\partial r / \partial T_r$ , после чего  $T_r$  может быть выбрана так, чтобы свести эту производную к нулю. Разумеется, следует учитывать ограничения на температуру, но это уже не представляет особых трудностей.

В случае нескольких одновременно протекающих реакций рабочий эксперимент может привести к оценкам преобразований состояния

$$c_r^k = \mathfrak{F}_r^k(c'_{r+1}, \dots, c^m_{r+1}; T_r),$$

происходящих в реакторе. Обычно такие оценки имеют весьма ограниченную область применимости, но, как мы видели, это не является препятствием для оптимизации методом динамического программирования. Если мы достигнем улучшения состояния, то сможем найти новые оценки на  $\mathfrak{S}_r^k$  и использовать их для дальнейших улучшений.

Если кинетика реакций известна, то можно применять методы разд. 5.7 с фиксированными  $V_r$ .

## 9.2. Многослойный адиабатический реактор

### 1. Охлаждение с помощью теплообменника

В этом случае можно предположить, что объемы слоев фиксированы, но остается некоторая свобода выбора температуры. Поскольку ничего нельзя сделать с расходами на слои, то можно использовать функцию выгоды вида [ср. (6.1.8)]

$$\sum_1^R p_r = \sum_1^R [(c'_r - c_r) - \mu |T'_{r+1} - T_r|]. \quad (1)$$

Тогда

$$c'_{r+1} = c_r \quad (2)$$

и величины

$$\theta_r = \int_{c_r}^{c'_r} \frac{dc}{r_r(c)} \quad (3)$$

фиксированы. Пусть

$$f_R(c'_{R+1}, T'_{R+1}) = \max \sum_1^R p_r; \quad (4)$$

тогда по принципу оптимальности

$$f_R(c'_{R+1}, T'_{R+1}) = \max [p_R + f_{R-1}(c'_R, T'_R)]. \quad (5)$$

При существующих теплообменниках, возможно, появятся некоторые ограничения на связь между  $T'_{r+1}$  и  $T_r$ . Пусть они имеют вид

$$|T_r - T'_{r+1}| = \varphi_r(T'_{r+1}). \quad (6)$$



Теперь решим рекуррентные уравнения (5), используя уравнения (1)—(3) и (6). Простейший способ состоит в непосредственном вычислении. При данных  $T_{R+1}'$  и  $c_{R+1}'$  можно взять любое пробное значение  $T_R$  и вычислять интеграл (3) с переменным верхним пределом до тех пор, пока он не достигнет значения  $\theta_R$ . Это приведет к определению верхнего предела  $c_R'$ , и мы сможем вычислить правую часть уравнения (5). Последовательные приближения в выборе значений  $T_R$  внутри допустимой области приведут к максимуму. Аналитические соотношения в этом случае не такие простые, как прежде; уже нельзя так легко провести исследование задачи, как в разд. 6.1. Однако метод нахождения оптимального режима здесь достаточно прост. Все это можно обобщить на случай нескольких одновременно протекающих реакций, но здесь приходится иметь дело с обычными трудностями многомерных задач.

### 2. Охлаждение с помощью части холодного потока

Если положить  $\theta_r = V_r/q$ , где  $q$  — скорость потока через последний слой, то  $\theta_r$  будет фиксировано и уравнение (6.4.6) приведет к уравнению

$$\theta_r = \lambda_r \int_{c_r}^{c_r'} \frac{dc}{r_r(c)}. \quad (7)$$

Используем обозначения разд. 6.4:

$$c_r = \mu_{r+1} c_{r+1}'; \quad t_r = \mu_{r+1} t_{r+1}'. \quad (8)$$

Так как  $V_r$  фиксированы, то можно написать функцию выгоды

$$P_R = \sum_1^R \lambda_r (c_r' - c_r). \quad (9)$$

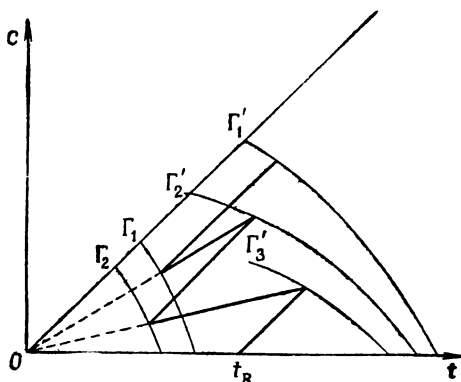
К этому случаю можно применить простые графические построения, которые делались прежде. Если

$$f_R(c_{R+1}', t_{R+1}') = \max P_R, \quad (10)$$

то по принципу оптимальности

$$f_R(c_{R+1}', t_{R+1}') = \max [\lambda_R (c_R' - c_R) + f_{R-1}(c_R', t_R')]. \quad (11)$$

Тогда, выбирая любую точку  $c_R, t_R$  на луче, проходящем через  $c'_{R+1}, t'_{R+1}$ , будем проводить интегрирование вдоль адиабатической траектории до тех пор, пока не удовлетворится уравнение (7), и, следовательно, сможем вычислить правую часть уравнения (11). Точка  $(c_R, t_R)$ ,



Фиг. 1. Вычисление оптимального управления при охлаждении байпассированием.

которая дает максимум, одна и та же для всех входных условий  $(c'_{R+1}, t'_{R+1})$ , которые лежат на этом луче. Изменяя наклон луча, построим, как и раньше, графики  $\Gamma_R$  и  $\Gamma'_R$ .

Такая диаграмма окажется крайне полезной в том случае, если подогреватель подвержен неконтролируемым изменениям; такое положение возникает, когда зависящие от него теплообменники расположены в другой части установки. В этом случае можно начертить последовательность кривых  $\Gamma'_1, \Gamma_1, \Gamma'_2, \dots, \Gamma_{R-1}$  и кривую  $\Gamma'_R$ , на которой должны лежать условия на выходе из слоя  $R$ . Последняя есть не что иное, как кривая  $(c'_R, t'_R)$ , для которой

$$\theta_R = \lambda_R \int_0^{c'_R} \frac{dc}{r_R(c)} \quad (12)$$

и

$$r_R(c) = r(c, c + t_R). \quad (13)$$

Имея эти кривые, мы должны лишь следить за входной температурой  $t_R$ , для того чтобы сразу же вычислять оптимальные отношения байпассирования. Это можно сделать, начертив прямую с наклоном, равным единице, из  $(0, t_R)$  до  $\Gamma'_R$ , луч до  $\Gamma_{R-1}$ , еще одну прямую с наклоном, равным единице, до  $\Gamma_{R-1}$  и так далее, вплоть до  $\Gamma'_1$ . Значения  $\mu_r$  можно затем найти из отношения расстояний от начала до точек  $(c_{r-1}, t_{r-1})$  и  $(c'_r, t'_r)$  и управлять в соответствии с этими значениями. Это показано для  $R = 3$  на фиг. 1.

Те же вычисления можно проводить с помощью счетной машины, которая может быть устроена даже так, чтобы устанавливать отношения байпассирования. Подобные вычисления, но с большими трудностями, можно провести и для  $m$  одновременно протекающих реакций.

### 9.3. Управление при старении катализатора

Производительность катализатора часто снижается, если катализатор покрывается слоем угля или отравляется вредными примесями в потоке веществ. Это отравление катализатора можно выразить введением параметра  $\tau$  в кинетическое выражение  $r(c, T; \tau)$ . Таким параметром может служить время с момента установки катализатора или общий объем реагентов, прошедших через него с момента регенерации. Этот вопрос изучался Хаугеном и Уотсоном [39], которые дали выражение для зависимости  $r$  от  $\tau$ . Конкретный вид этого выражения нас здесь не интересует; предположим, что получена удовлетворительная формула. Мы хотим знать, как управление адиабатическим реактором зависит от  $\tau$ .

Если выражение  $r(c, T; \tau)$  найдено достаточно точно, то можно дать строгую интерпретацию режима с учетом изменения  $\tau$ ; суть здесь достаточно проста. С помощью вычислительных машин вычисления по пунктам предыдущего раздела могут быть проведены при различных значениях  $\tau$ , и оптимальный режим может быть табулирован как функция от  $\tau$ . Рабочие инструкции при этом детализируют изменения, которые должны быть сделаны в различные моменты времени. Однако несмотря на то,

что выражение  $r(c, T; \tau)$  достаточно точно описывает процесс старения катализатора, может оказаться невозможным оценить значение  $\tau$  в любой конкретный момент времени иначе, как по результатам работы реактора. Так будет в том случае, когда непредсказываемые изменения качеств катализатора можно представить в виде выбора некоторого начального значения  $\tau$  и следующей за ним цепочки значений, не обязательно однообразной. Возникают два случая: в первом все слои могут быть представлены одним и тем же значением  $\tau$ ; во втором это не так. В первом случае нужно только вычислить  $T'_R$  как функцию от  $T_R$  при различных значениях  $\tau$ . Тогда измерение этих двух температур позволит оценить текущее значение  $\tau$ . Во втором случае вычисление  $\tau$  следует проводить для каждого слоя, а это требует измерения входных и выходных температур в каждом слое, так же, как и входного (или выходного) составов. Можно подготовить таблицы, показывающие  $T'_r$  как функцию от  $T_r$  и  $c_r$  для различных значений  $\tau$ , и по ним проводить оценки  $\tau$  для каждого слоя. Эти расчеты закладываются в счетную машину, которая делает вычисление оптимального управления  $c$

$$r_r(c) = r[c, T_r + H(c - c_r); \tau_r]$$

в качестве скорости реакции в слое  $r$ .

#### 9.4. Оптимальное управление реактором периодического действия

Если  $t$  — время от завершения периодического процесса, протекание одной реакции описывается уравнениями (см. разд. 3.6)

$$\frac{dc}{dt} = -r(c, T), \quad (1)$$

$$\frac{dT}{dt} = -Hr(c, T) + Q; \quad (2)$$

$Q$  пропорционально скорости охлаждения. Рассмотрим задачу нахождения такого управления реакцией, которое обеспечивает данное превращение за кратчайшее время.

Если имеется возможность управлять температурой с желаемой степенью точности, то, как известно из гл. 7, ее всегда надо выбирать так, чтобы максимизировать скорость реакции. Пусть  $c_1 = c(0)$  есть фиксированное превращение, которого мы хотим достичь; тогда при начальном состоянии  $c_0$  время для достижения  $c_1$  дается выражением

$$\theta = \int_{c_0}^{c_1} \frac{dc}{r(c, T)}. \quad (3)$$

Если

$$f(c_0) = \min \theta, \quad (4)$$

то принцип оптимальности приводит к дифференциальному уравнению

$$-f'(c_0) = \min \frac{1}{r(c, T)} = \frac{1}{R(c)}, \quad (5)$$

как в разд. 7.1,  $R(c)$  — максимальное значение  $r(c, T)$ , достигаемое при  $T = T_m(c)$ . Если  $T$  ограничено значениями  $(T_*, T^*)$ , то  $R(c)$  есть значение скорости при  $T$ , лежащем в одном из этих граничных значений, если  $T_m$  выходит за этот интервал.

Такая оптимальная траектория показана на фиг. 2 как кривая  $ABC$  в плоскости  $(c, T)$ . Значение  $Q$ , необходимое для поддержания реактора на этой траектории, задается уравнением (2):

$$Q = Hr(c, T) + \frac{dT}{dt} = [H - T'_m(c)]R(c). \quad (6)$$

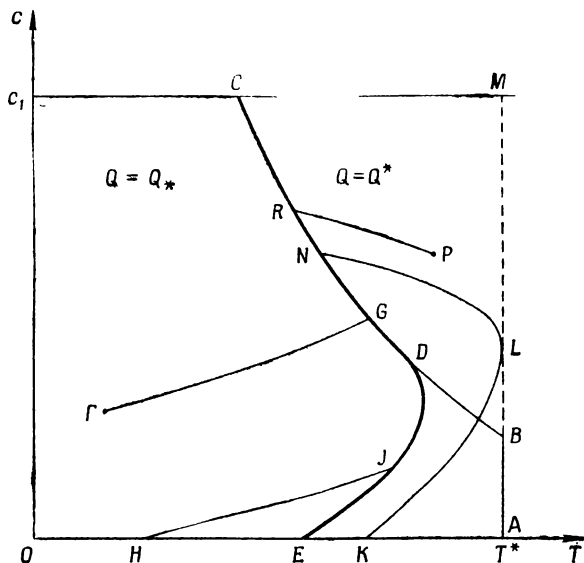
Однако непосредственно управлять температурой невозможно; на практике непосредственно управлять можно лишь величиной  $Q$ . Если начальная температура равна  $T_0$  и  $(c_0, T_0)$  не лежит на траектории  $ABC$  или если она лежит на этой траектории, но уравнение (6) требует недостижимых значений  $Q$ , то оптимальный подход не может быть использован для реакции в целом. Каково тогда будет оптимальное управление?

Чтобы ответить на этот вопрос, мы должны одновременно рассматривать уравнения (1) и (2) и считать  $Q$  управляющим переменным. Предположим, что

регулятором служит холодильник-нагреватель, который может работать в определенных пределах:

$$-Q_* \leq Q \leq Q^* \quad (7)$$

Если регулятор не обеспечивает подогрева, то его можно по крайней мере выключить, так что  $Q_*$  может быть равным нулю. Пусть



Фиг. 2. Оптимальное управление реактором периодического действия.

$g(c_0, T_0)$  — минимальное время, необходимое для достижения  $c = c_1$  из начального состояния  $c_0, T_0$ .

Тогда если мы сдвинемся в точку  $c_0 + \delta c_0, T_0 + \delta T_0$ , то на это потребуется время

$$\int_{c_0}^{c_0 + \delta c_0} \frac{dc}{r(c, T)},$$

а последующая часть траектории займет время по крайней мере  $g(c_0 + \delta c_0, T_0 + \delta T_0)$ . Следовательно, по прин-

ципу оптимальности

$$g(c_0, T_0) = \min \left[ \int_{c_0}^{c_0 + \delta c_0} \frac{dc}{r(c, T)} + g(c_0 + \delta c_0, T_0 + \delta T_0) \right]. \quad (8)$$

Этот минимум должен достигаться соответствующим выбором значения  $Q$  на интервале, где  $c$  увеличивается от  $c_0$  до  $c_0 + \delta c_0$ . Так как

$$\frac{\delta T_0}{\delta c_0} = H - \frac{Q}{r(c_0, T_0)},$$

то получим в пределе при  $\delta c_0 \rightarrow 0$

$$0 = \min \left\{ \frac{1}{r(c_0, T_0)} + g_c + g_T \left[ H - \frac{Q}{r(c_0, T_0)} \right] \right\},$$

где  $g_c = \partial g / \partial c_0$ ,  $g_T = \partial g / \partial T_0$ . Так как  $r(c_0, T_0)$  всегда положительно, то можно умножить на него это равенство. В результате получим

$$\text{Min} \{ 1 + g_c r(c_0, T_0) + g_T [Hr(c_0, T_0) - Q] \} = 0. \quad (9)$$

Оптимальный режим для  $Q$  теперь очевиден, так как если  $g_T > 0$ , то  $Q$  должно принять свое минимальное значение. Это согласуется с соображениями здравого смысла, так как означает, что если минимум времени возрастает при увеличении температуры, то реактор следует охладить, насколько это возможно, в то время как если этот минимум убывает при увеличении температуры, то необходимо нагревание (или по крайней мере отсутствие охлаждения). Такое управление обычно называют релейным, и оно подробно изучалось в связи с линейными системами. Основная задача состоит в определении границы переключения, при пересечении которой значение  $Q$  скачкообразно меняется от своего минимального до максимального значения. Ясно, что на этой кривой  $g_T = 0$ . Интуитивно можно сказать, что это — кривая  $ABC$ , являющаяся решением предыдущей задачи, так как на этой кривой  $g$ , по-видимому, достигает своего минимального значения по отношению к изменениям  $T$  и, следовательно,  $g_T = 0$ . Заметим также, что если  $g_T = 0$ , то уравнение (9) сводится к уравнению (5). Для доказательства этого рассмотрим характеристические

уравнения для уравнения в частных производных (9):

$$\frac{dc_0}{ds} = r(c_0, T_0), \quad (10)$$

$$\frac{dT_0}{ds} = Hr(c_0, T_0) - Q, \quad (11)$$

$$\frac{dg}{ds} = -1, \quad (12)$$

$$\frac{dg_c}{ds} = -g_c \frac{\partial r}{\partial c} - g_T H \frac{\partial r}{\partial T}, \quad (13)$$

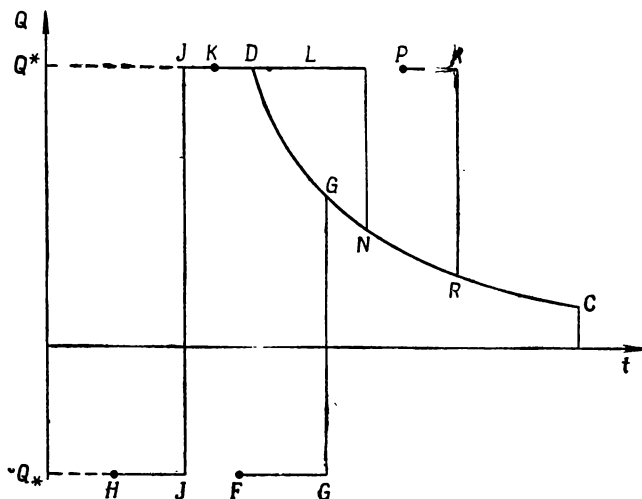
$$\frac{dg_T}{ds} = -g_c \frac{\partial r}{\partial T} - g_T H \frac{\partial r}{\partial T}. \quad (14)$$

Уравнения (10) и (11) можно разделить на (12), чтобы получить основные уравнения (1) и (2). Из уравнения (14) мы видим, что если кривая  $\partial r / \partial T = 0$  является характеристикой, то  $g_T$  вдоль нее постоянно. Но мы видели, что этого можно добиться, удовлетворив первым трем уравнениям, и что в точке  $C$   $g_T$  наверняка равно нулю, так как  $g = 0$  при  $c = c_1$  и, следовательно, на этой прямой  $g_T = 0$ . Отсюда следует, что  $g_T$  обращается в нуль вдоль  $BC$  и что это и есть граница переключения.

Оптимальный режим управления очень прост. Если состояние реактора изображается точкой, лежащей левее  $BC$ , то нужно использовать нагрев до тех пор, пока не приблизимся к границе, после чего  $Q$  должно регулироваться, согласно уравнению (6), вплоть до достижения желаемого превращения. Если реактор находится в состоянии справа от границы, то применяется максимальное охлаждение до достижения границы и последующего движения вдоль нее. Остается рассмотреть только, что происходит, если значение  $Q$ , требуемое уравнением (6), превышает максимальное  $Q^*$ . Пусть  $D$  есть точка на  $BC$ , где уравнение (6) впервые приводит к значению  $Q^*$ . Тогда ясно, что никаких трудностей не возникает для таких траекторий, как  $FGC$  или  $PRC$ , которые впервые встречают  $BC$  выше  $D$ . Если кривая  $DE$  есть решение уравнений (1) и (2) для  $Q = Q^*$ , то мы



должны взять в качестве границы переключения кривую  $CDE$ . Тогда, например, начальное состояние  $H$  требует  $Q = -Q_*$  и ведет к траектории  $HJDC$ , так как эта траектория встречает  $DE$  в точке  $J$  и удерживается на траектории  $JD$  переключением на  $Q = Q_*$  в точке  $J$ .



Фиг. 3. Оптимальное управление как функция времени. (Кривые изображены так, что они кончаются в одной и той же точке оси времени, начало траектории отмечено пунктиром.)

После точки  $D$  она проходит по кривой  $DC$  с помощью изменений  $Q$  в соответствии с уравнением (6). Оптимальный режим в зависимости от времени для различных траекторий показан на фиг. 3.

Ограничение  $T \leq T^*$  ведет к ограничению области допустимых начальных значений. Если  $KLN$  (см. фиг. 2) есть траектория с  $Q = Q_*$ , касающаяся вертикальной линии  $T = T^*$ , то любая траектория, начинающаяся из треугольной области  $KAL$ , наверняка приведет к температурам, большим, чем  $T^*$ . Итак, если  $M$  есть точка  $(c_1 T^*)$ , то область допустимых начальных значений расположена справа от границы  $KLM$ .

### 9.5. Дальнейшие задачи управления реактором периодического действия

Много разнообразных задач рассмотренного типа удастся решить методом динамического программирования, и их можно интерпретировать как на реакторах периодического действия, так и на реакторах вытеснения. Нетрудно обобщить предыдущий пример на случай нескольких одновременно протекающих реакций. Граница переключения станет поверхностью, которая является решением задачи полного управления температурой; эта задача полностью обсуждалась в гл. 7. Другой способ управления реакцией в реакторе периодического действия состоит в постепенном добавлении одного или нескольких реагентов. По-видимому, это довольно экономичный путь, так как добавление реагентов, с одной стороны, управляет скоростью реакции, а с другой стороны, поглощает теплоту. Сделаем беглый обзор простого случая управления такого вида; подобный случай был рассмотрен Кацем [43].

Реакция есть  $\sum_1^n \alpha_i A_i = 0$  и общее время реакции —  $\theta$  (фиксированный период цикла работы). Пусть  $N_i(t)$  — число молей  $A_i$ , присутствующих в момент  $t$  после начала реакции;

$$N_{i0} = N_i(0);$$

$\dot{n}_i(t)$  — скорость добавления  $A_i$  (моль/сек);

$N(t)$  — степень завершенности реакции (моль).

Тогда

$$N_i(t) = N_{i0} + \int_0^t n_i(t) dt + \alpha_i N(t) \quad (1)$$

или

$$\frac{dN_i}{dt} = n_i + \alpha_i R(N_1, \dots, N_n, T), \quad (2)$$

где  $R = dN/dt$  — полная скорость реакции (моль/сек), выраженная как функция от числа присутствующих молей и температуры  $T$ .

Для образования теплового баланса положим:  
 $-\Delta H$  — теплота, выделяющаяся при единичном изменении  $N$ ;

$c_{pi}$  — удельная теплоемкость  $A_i$ ;

$Q(t)$  — скорость охлаждения;

$T_f$  — температура хладоагентов при добавлении.

Тогда

$$\begin{aligned} \left(\sum c_{pi} N_i\right) \frac{dT}{dt} = \\ = (-\Delta H) R(N_j, T) - \sum_1^n n_i(t) c_{pi} (T - T_f) - Q(t). \end{aligned} \quad (3)$$

Функции  $n_i(t)$  и  $Q(t)$ ,  $0 \leq t \leq \theta$  должны быть выбраны так, чтобы максимизировать функцию выгоды. В качестве этой функции выберем простую материальную функцию выгоды минус расходы, пропорциональные количеству отводимого тепла.

Если  $v_i$  есть стоимость одного моля  $A_i$ , то увеличение стоимости будет равно  $(\sum \alpha_i v_i) N(\theta)$ , так как оно может произойти только за счет реакции. Общее коли-

чество отводимого тепла равно  $\int_0^\theta Q(t) dt$ , и если счи-

тать, что стоимость единицы тепла равна  $\lambda(\sum \alpha_i v_i)$ , то можно рассматривать следующую функцию выгоды:

$$\int_0^\theta [R(N_j, T) - \lambda Q(t)] dt. \quad (4)$$

Пусть

$$f(N_{i0}, \bar{T}_0, \theta) = \max \int_0^\theta (R - \lambda Q) dt, \quad (5)$$

если  $N_i$  и  $T$  управляются уравнениями (2) и (3),

$$N_i(0) = N_{i0}, \quad T(0) = T_0 \quad (6)$$

и  $n_i(t)$ ,  $Q(t)$  выбраны оптимально. Разделив интервал

$(0, \theta)$  на  $(0, \tau)$  и  $(\tau, \theta)$ , получим по принципу оптимальности

$$f(N_{i0}, T_0, \theta) = \max \left\{ \int_0^\tau (R - \lambda Q) dt + f[N_i(\tau), T(\tau), \theta - \tau] \right\}. \quad (7)$$

Полагая  $\tau \rightarrow 0$  и разлагая соответствующие функции, приходим к уравнению в частных производных:

$$f_0 = \max \left\{ R_0 - \lambda Q_0 + \sum_1^n f_{N_i} (n_{i0} + \alpha_i R_0) + \frac{f_T \left[ (-\Delta H) R_c - \sum_1^n n_{i0} c_{pi} (T_0 - T_f) - Q_0 \right]}{\sum c_{pi} N_{i0}} \right\}, \quad (8)$$

где  $f_{N_i} = \partial f / \partial N_{i0}$ ,  $f_T = \partial f / \partial T_0$ ,  $R_0 = R(N_{i0}, T_0)$  и  $n_{i0}, Q_0$  — значения, которые должны принять управляющие переменные. Это уравнение можно преобразовать так:

$$f_0 = \max \left\{ R_0 \left[ 1 + \sum \alpha_i f_{N_i} + \frac{(-\Delta H) f_T}{\sum c_{pi} N_{i0}} \right] + \sum n_{i0} \left[ f_{N_i} - f_T c_{pi} \frac{(T_0 - T_f)}{\sum c_{pi} N_{i0}} \right] - Q_0 \left( \lambda + \frac{f_T}{\sum c_{pi} N_{i0}} \right) \right\} = \max A + \sum n_{i0} B_i - Q_0 C. \quad (9)$$

Вновь управление оказывается релейным.

Если

$$0 \leq n_{i0} \leq f_i, \quad -Q_* \leq Q_0 \leq Q^*, \quad (10)$$

то оптимальный режим

$$\begin{aligned} n_{i0} &= f_i, & B_i > 0; & & n_{i0} &= 0, & & B_i < 0; \\ Q_0 &= -Q_*, & C > 0; & & Q_0 &= Q^*, & & c < 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Поверхность переключения определяется условием  $B_i = 0$  и  $C = 0$ . В такой общей постановке задачи, разумеется, опять приходится сталкиваться с трудностями, связанными с многомерностью, и маловероятно, чтобы

кому-нибудь захотелось добавлять все реагенты одновременно. Если добавлять лишь один из реагентов, допустим  $A_1$ , а все остальные будут находиться в смеси с самого начала реакции, то число переменных уменьшается от  $n + 2$  до четырех. Так как  $n_i = 0$ ,  $i = 2, \dots, n$ ,  $dN_i = \alpha_i dN$  для этих  $i$ , то мы можем заменить все переменные под знаком функции  $f$  двумя, а именно  $N_1$  и  $N_n$ . Тогда все члены, кроме  $i = 1$ , исчезают из второй строки формулы (9) и

$$\sum \alpha_i f_{N_i} = f_N.$$

Мы только поверхностно коснулись задач регулирования, которые могут быть поставлены в связи с анализом работы химических реакторов. Очевидно, что динамическое программирование является ценным методом при их изучении, но даже более действенные методы, не используемые в настоящее время, без сомнения, скоро будут применены к этим задачам. От их сознательного использования зависит практический прогресс кибернетики химико-технологических процессов в течение ближайших нескольких лет.

#### БИБЛИОГРАФИЯ

1. Amundson N. R., Three problems in chemical reactor design, *Ingenieur (Utrecht)*, **67**, № 37, 1—6 (1955).
2. Amundson N. R., Class notes on reactor design, 1958 (не опубликовано).
3. Amundson N. R., Aris R., Note on longitudinal diffusion or mixing in beds, *A. I. Ch. E. Journal*, **3**, 280—282 (1957).
4. Amundson N. R., Bilous O., Optimum temperature gradients in tubular reactors, I. General theory and methods. II. Numerical study, *Chem. Eng. Sci.*, **5**, 81—92, 115—126 (1956).
5. Amundson N. R., Coste J., Rudd D. F., Taylor diffusion in tubular reactors, *Can. J. Chem. Eng.*, 1961 (в печати).
6. Annable D., Application of the Temkin kinetic equation to ammonia synthesis in large-scale reactors, *Chem. Eng. Sci.*, **1**, 145—154 (1952).
7. Aris R., On Denbigh's optimum temperature sequence, *Chem. Eng. Sci.*, **12**, 56—64 (1960).

8. Aris R., The optimal design stagewise adiabatic reactors. Conference on Optimization Techniques in Chemical Engineering, New York University, May 18, 1960, 125—160.
9. Aris R., The determination of optimal operating conditions by the methods of dynamic programming. Diskussionstagung der Bunsengesellschaft, October 20—21, 1960 [*Z. Electrochem.*, **65**, 229—244 (1961)].
10. Aris R., Studies in optimization I: The optimum design of adiabatic reactors with several beds., *Chem. Eng. Sci.*, **12**, 243—252 (1960).
11. Aris R., Studies in optimization II: Optimum temperature gradients in tubular reactors, *Chem. Eng. Sci.*, **13**, 18—29 (1960).
12. Aris R., Studies in optimization III: The optimum conditions in sequences of stirred tank reactors, *Chem. Eng. Sci.*, **13**, 75—81 (1960).
13. Aris R., Studies in optimization IV: The optimum conditions for a single reaction, *Chem. Eng. Sci.*, 1961 (в печати).
14. Aris R., Rudd D. F., Amundson N. R., On optimum cross-current extraction, *Chem. Eng. Sci.*, **12**, 88—97 (1960).
15. Bellman R., Dynamic programming and Lagrange multipliers. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S.*, **42**, 767—769 (1956).
16. Беллман Р., Динамическое программирование, ИЛ, М., 1960.
17. Bellman R., Dynamic programming and its application to variational problems in mathematical economics, *Proc. Symposia Appl. Math. Am. Math. Soc.*, **8**, 115—138 (1958).
18. Bellman R., Some new techniques in the dynamic programming solution of variational problems, *Quart. Appl. Math.*, **16**, 295—305 (1958).
19. Bellman R., Adaptive Control Processes: a Quided Tour. Princeton Univ. Press, Princeton, New Jersey, 1961.
20. Bellman R., Kalaba R., Aris R., Some optimum problems in chemical engineering, *Chem. Eng. Prog. Symposium Series*, **56**, 95—102 (1960).
21. Bilous O., Piret E. L., Continuous stirred tank reactors: A new graphical method for complex reactions and reflux designs. *A. I. Ch. E. Journal*, **1**, 480—487 (1955).
22. Calderbank P. H., Contact—process converter design, *Chem. Eng. Progr.*, **49**, 585—590 (1953).

23. Coste J., Chemical tubular reactor studies. Sensitivity and diffusion. Ph. D. Thesis. Department of Chemical Engineering University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota, 1959.
24. Danckwerts P. V. The effect of incomplete mixing on homogeneous reactions, *Chem. Eng. Sci.*, **8**, 93—102 (1958).
25. Denbigh K. G., Velocity and yield in continuous reaction systems, *Trans. Faraday Soc.*, **40**, 352—373 (1944).
26. Denbigh K. G., Continuous reactions. Part II. The kinetics of steady state polymerisation, *Trans. Faraday Soc.*, **43**, 648—660 (1947).
27. Denbigh K. G., The kinetics of continuous reaction processes, *J. Appl. Chem.* (London) **1**, 227—236 (1951).
28. Denbigh K. G., Optimum temperature sequences in reactors, *Chem. Eng. Sci.*, **8**, 125—131 (1958).
29. Denbigh K. G., Instantaneous and overall reaction yields. In «Second European Symposium on Chemical Reaction Engineering», *Chem. Eng. Sci.*, **14**, 25—38 (1961).
30. Denbigh K. G., Hicks M., Page F. M., The kinetics of open reaction systems., *Trans. Faraday Soc.*, **44**, 479—494 (1948).
31. Grütter W. F., Messikommer B. H., Systematische Ausbeuteberechnung für isotherme Reaktoren im Falle zusammengesetzter Reaktionen. In «Second European Symposium on Chemical Reaction Engineering», *Chem. Eng. Sci.*, **14**, 231—240 (1961).
32. Happel J., Chemical Process Economics, Wiley, New York, 1958.
33. Horn F., Optimalprobleme bei kontinuierlichen chemischen Prozessen. Dissertation Techn. Hochschule, Wien, 1958.
34. Horn F., Remarks in discussion of Denbigh's paper., *Chem. Eng. Sci.*, **8**, 131—132 (1958).
35. Horn F., Optimale Temperatur und Konzentrationsverläufe. In «Second European Symposium on Chemical Reaction Engineering», *Chem. Eng. Sci.*, **14**, 77—89 (1961).
36. Horn F., Über das Problem der optimalen Rührkesselkaskade für chemische Reaktionen, *Chem. Engr. Sci.*, 1961 (в печати).
37. Horn F., Kuchler L., Probleme bei reaktionstechnischen Berechnungen, *Chem. — Ingr. Tech.*, **31**, 1—11 (1959).
38. Horn F., Troltenier U., Über den optimalen Temperaturverlauf im Reaktionsrohr, *Chem. — Ingr. Tech.*, **32**, 382—393 (1960).

39. H o u g e n O., W a t s o n K. M., Chemical Process Principles, Vol. III: Kinetics and Catalysis. Wiley, New York, 1947.
40. K a l a b a R., Some mathematical aspects of optimization problems in engineering. Conference on Optimization Techniques in Chemical Engineering, New York University, May 18, 1960.
41. K a l m a n R. E., L a p i d u s Z., S h a p i r o E., The optimal control of chemical and petroleum processes. Proceedings of the Joint Symposium on Instrumentation and Computation in Process Development and Plant Design, May 11—13, 1959. Institution of Chemical Engineers, London.
42. K a t s S., Best control actions in batch or pipeline reactors. Conference on Optimization Techniques in Chemical Engineering, New York University, May 18, 1960, p. 57—78.
43. K a t s S., Best temperature profiles in plug flow reactors. Methods of the calculus of variations, *Annals N. Y. Acad. Sci.*, **84**, 441—478 (1960).
44. L e i t e n b e r g e r W., Thermische Beziehungen und Verlagerung der Kontaktmasse bei schwefelsäurekontaktkesseln, *Chem. Fabric*, **12**, 281—292 (1939).
45. P i r e t E. L., T r a m b o u z e P. J., Continuous stirred tank reactors: Designs for maximum conversions of raw material to desired product. Homogeneous reactions, *A. J. Ch. E. Journal*, **5**, 384—390 (1959).
46. P o t t e r S., Some Notes on Lifemanship, with a summary of Recent Researches in Gamesmanship. Holt, New York, 1951.
47. R o b e r t s S. M., Dynamic programming formulation of the catalyst replacement problem, *Chem. Eng. Progr. Symposium Series*, **56**, 103—110 (1960).
48. R o b e r t s S. M., Stochastic models for the dynamic programming formulation of the catalyst replacement problem. Conference on Optimization Techniques in Chemical Engineering, New York University, May 18, 1960, pp. 171—188.
49. R u d d D. F., A Study of iterative optimization and on the design of processes subject to random failures. Ph. D. Thesis. Department of Chemical Engineering, University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota, 1960.
50. R u d d D. F., A r i s R., A m u n d s o n N. R., A study of iterative optimization, *A. I. Ch. E. Journal*, **7**, 1961 (в печати).
51. S w i n n e r t o n - D y e r H. P. F., On an extremal problem, *Proc. London Math. Soc.* III, **7**, 568—583 (1957).



- 
52. Taylor G. I., The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe, *Proc. Roy. Soc.*, **A223**, 446—468 (1954).
  53. Westbrook G. T., The simulation, stabilization and optimization of stirred tank reactors on the digital computer, M. S. Thesis. Department of Chemical Engineering, University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota, 1960.
  54. Westbrook G. T., The occurrence, classification, and optimization of allocation decisions in the chemical industry. M. A. Thesis, Department of Economics, University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota, 1961.
  55. Westbrook G. T., Aris R., A new approach to chemical reactor design, *Ind. Eng. Chem.*, **53**, 181—186 (1961).
  56. Zwietering T. N., The degree of mixing in continuous flow systems, *Chem. Eng. Sci.*, **11**, 1—15 (1959).

## ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Байпасирование** 125—127, 218  
**Безразмерные переменные** 99
- Вариационное исчисление** 22, 35, 199  
**Время пребывания в реакторе** 54, 90, 137, 176
- Гомогенные реакции** 87—88, 169
- Динамическое программирование** 16, 19, 25, 112, 199, 216
- Кажущийся коэффициент диффузии** 67  
**Кинетическое уравнение Темкина** 176  
**Концентрация** 49
- Линия связи** 108
- Математическое ожидание** 32, 202  
**Метод проб и ошибок** 41, 45, 96, 110, 137  
— характеристик 37—41, 178  
**Множители Лагранжа** 23, 42, 180  
— — интерпретация 45
- Несвязность оптимального режима** 82, 83, 167
- Оптимальное дублирование вспомогательных процессов** 201  
**Оптимальный режим** 17, 29, 100, 223
- Оптимальный режим, графическое построение для адиабатических слоев** 148  
— — — — — цепочки реакторов с мешалками 94  
— — зависимость от параметров 98  
— — смены катализаторов 209  
**Относительная концентрация** 99  
**Охлаждающий агент** 60, 72, 161—165  
— — в адиабатических слоях 60—63  
— — — — — реакторах с мешалками 125  
— — оптимальный режим 127  
**Охлаждение реактора** 72
- Пекле число** 69  
**Переменные, характеризующие режим работы** 26  
— — состояние потока 26  
**Побочные продукты** 77  
**Последовательный контроль** 214  
**Принцип оптимальности** 15—18, 25—28, 86  
**Продольная диффузия** 59, 67—69  
**Процесс детерминированный дискретный** 28  
— — непрерывный 33  
— — дискретный случайный 32
- Равновесное состояние** 53  
**Расходы капитальные** 77—80  
— на нагревание 78  
— — поддержание режима работы 78  
— — поток 78  
— — — — — разделение 76

- Расходы на управление 78  
— эксплуатационные 77
- Реакции в адиабатических слоях 58—62, 135  
— — цепочке реакторов с мешалками 54, 66, 83, 123  
— — реакторе вытеснения 167—200  
— экзотермические 53, 60, 88, 128, 136  
— эндотермические 53, 60, 88, 136, 209
- Регенерация катализатора 210
- Режим работы 16, 26, 29
- Система реакций Денбига 19, 99, 111—123  
— химических реакций 47—54
- Скорость реакции 20, 49, 50, 226
- Старение катализатора 210
- Степень завершенности (превращения) 49, 126, 226
- Стехиометрические коэффициенты 48, 76
- Стохастические задачи 200
- Теплоемкость 56
- Теплосодержание, см. энтальпия
- Теплота смешения 166
- Функция выгоды 26, 74  
— — материальная 75  
— — отношение к задаче оптимизации 81  
— — стехиометрическая 74, 75  
— — с учетом расходов на работу реактора 77  
— — распределения 32
- Энергия активации 100, 111
- Энтальпия 53

## О Г Л А В Л Е Н И Е

|  |    |
|--|----|
| Предисловие редактора русского издания | 5  |
| Из предисловия автора .                | 11 |

### Г л а в а 1

|                                   |    |
|-----------------------------------|----|
| <b>ВВЕДЕНИЕ</b>                   | 13 |
| 1.1. Принцип оптимальности        | 15 |
| 1.2. Обзор родственных работ .    | 18 |
| 1.3. Содержание данной монографии | 23 |

### Г л а в а 2

|  |    |
|--|----|
| <b>ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ ДИНАМИЧЕСКОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ</b>                 | 25 |
| 2.1. Многостадийные процессы и принцип оптимальности                   | 25 |
| 2.2. Дискретный детерминированный процесс                              | 28 |
| 2.3. Дискретный случайный процесс                                      | 32 |
| 2.4. Непрерывный детерминированный процесс                             | 33 |
| 2.5. Динамическое программирование — подход к вариационному исчислению | 35 |
| 2.6. Использование и интерпретация множителей Лагранжа .               | 42 |

### Г л а в а 3

|   |    |
|---|----|
| <b>МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ДЛЯ ПРОЕКТИРОВАНИЯ РЕАКТОРОВ</b>         | 47 |
| 3.1. Системы химических реакций .                                 | 47 |
| 3.2. Реактор непрерывного действия с мешалкой .                   | 54 |
| 3.3. Многослойный адиабатический реактор .                        | 58 |
| 3.4. Реактор вытеснения .   | 62 |
| 3.5. Цепочка реакторов с мешалками как модель реактора вытеснения | 66 |
| 3.6. Реактор периодического действия                              | 70 |
| 3.7. Охлаждение   | 72 |

---

| <b>Глава 4</b>  |            |
|---|------------|
| <b>Функции выгоды</b>   | <b>74</b>  |
| 4.1. Стехиометрические функции выгоды   | 74         |
| 4.2. Материальные функции выгоды .  | 75         |
| 4.3. Функции выгоды и расходы на операцию .   | 77         |
| 4.4. Пример оценки расходов . . . . .   | 79         |
| 4.5. Отношение функции выгоды к задаче оптимизации  | 81         |
| <b>Глава 5</b>  |            |
| <b>РЕАКТОР НЕПРЕРЫВНОГО ДЕЙСТВИЯ С МЕШАЛКОЙ</b>   | <b>83</b>  |
| 5.1. Несвязный характер оптимального температурного режима при одной реакции                                    | 83         |
| 5.2. Цепочка реакторов одинакового размера  | 87         |
| 5.3. Оптимальный выбор температуры и времени пребывания в реакторе при одной реакции .                          | 92         |
| 5.4. Исследование оптимального режима при изменении параметров  | 98         |
| 5.5. Две последовательные реакции   | 104        |
| 5.6. Система реакции Денбига .  | 111        |
| 5.7. Общие задачи для цепочки реакторов с мешалками .   | 123        |
| 5.8. Цепочка реакторов с мешалками при байпасировании потока питания  | 125        |
| 5.9. Адиабатическая цепочка реакторов при одной реакции .   | 128        |
| <b>Глава 6</b>  |            |
| <b>МНОГОСЛОЙНЫЙ АДИАБАТИЧЕСКИЙ РЕАКТОР</b>  | <b>135</b> |
| 6.1. Охлаждение с помощью теплообменника при одной реакции  | 136        |
| 6.2. Обобщение результатов простой модели .   | 150        |
| 6.3. Охлаждение с помощью теплообменника при нескольких одновременно протекающих реакциях                       | 152        |
| 6.4. Применение части холодного потока в качестве хладагента при одной реакции                                  | 156        |
| 6.5. Применение части холодного потока в качестве хладагента при нескольких одновременно протекающих реакциях . | 161        |
| 6.6. Охлаждение частью холодного потока, отличного от исходного потока  | 163        |
| 6.7. Устранение принятых допущений  | 165        |
| <b>Глава 7</b>  |            |
| <b>РЕАКТОР ВЫТЕСНЕНИЯ</b>   | <b>167</b> |
| 7.1. Оптимальный температурный режим при одной реакции .  | 167        |

|  |       |
|--|-------|
| 7.2. Различные формы постановки задачи оптимизации при одной реакции | . 177 |
| 7.3 Две последовательные реакции                                     | . 180 |
| 7.4. Две одновременно протекающие реакции                            | . 192 |
| 7.5. Общая задача  | . 195 |

### Глава 8

|   |       |
|---|-------|
| <b>СТОХАСТИЧЕСКИЕ ЗАДАЧИ</b>  | . 200 |
| 8.1. Оптимальное дублирование при возможных неудачах во вспомогательных процессах | . 201 |
| 8.2. Стохастический процесс золотодобычи  | . 205 |
| 8.3. Оптимальная смена катализатора .   | . 209 |

### Глава 9

|   |         |
|---|---------|
| <b>ОПТИМАЛЬНОЕ УПРАВЛЕНИЕ РАБОТАЮЩИМИ РЕАКТОРАМИ</b>                | 214     |
| 9.1. Цепочка реакторов с мешалками .                                | . 215   |
| 9.2. Многослойный адиабатический реактор . .                        | . 216   |
| 9.3. Управление при старении катализатора . . .                     | . 219   |
| 9.4. Оптимальное управление реактором периодического действия       | 220     |
| 9.5. Дальнейшие задачи управления реактором периодического действия | . 226   |
| Библиография  | . 229   |
| Предметный указатель  | . . 234 |

### Р. Арис

#### ОПТИМАЛЬНОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ

Редактор *Н. В. Серегина*      Художник *И. И. Каледин*  
 Технические редакторы *Т. Л. Сухорукова, Л. П. Кондюкова, Т. А. Семейкина*  
 Корректор *И. М. Лебедева*

Сдано в производство 11/V 1963 г. Подписано к печати 31/X 1963 г.  
 Бумага 84×108<sup>1</sup>/<sub>32</sub> = 3,8 бум. л. 12,3 печ. л., 10,5 уч.-изд. л. Изд. № 20/1464.  
 Цена 94 к.      Зак. 1409.

ИЗДАТЕЛЬСТВО ИНОСТРАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

Москва, 1-й Рижский пер., 2

Типография № 2 им. Евг. Соколовой УЦБ и ПП Ленсовнархоза  
 Ленинград, Измайловский пр., 29

## ИЗДАТЕЛЬСТВО ИНОСТРАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

### Готовит к изданию

**Моля А. ТЕОРИЯ ИНФОРМАЦИИ И ЭСТЕТИЧЕСКОЕ ВОСПРИЯТИЕ.** Париж, 1958, перевод с французского, 18 изд. л., цена в переплете 1 р. 46 к.

*Темплан* 1964 г. № 167

Книга французского ученого А. Моля является интересной попыткой распространить методы теории информации на изучение вопросов эстетики. Теория информации применяется в книге к анализу структуры и особенностей художественных произведений и к разработке характеристик эстетического восприятия.

**Рузга Э. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ТЕНЗОМЕТРЫ СОПРОТИВЛЕНИЯ.** Прага, издается по рукописи, перевод с чешского, 20 изд. л., цена в переплете 1 р. 60 к.

*Темплан* 1964 г. № 168

Автор подробно осветил технологию изготовления тензометров, свойства и особенности исходных материалов, применяемых при их изготовлении, способы крепления тензометров к испытываемому предмету. Кроме того, представлены схемы включения тензометров и рассмотрены применяемые в случае необходимости усилители.

**САМООРГАНИЗУЮЩИЕСЯ СИСТЕМЫ.** Нью-Йорк, 1960, перевод с английского, 24 изд. л., цена в переплете 1 р. 88 к.

*Темплан* 1964 г. № 169

Книга содержит доклады видных американских ученых на межотраслевой конференции по самоорганизующимся системам, состоявшейся в США в 1959 г.

Тематика представленных в сборнике статей касается природы и общих принципов действия самоорганизующихся систем и затрагивает пограничные вопросы биологии, нейрофизиологии, психологии, математики, физики и техники.

**Субье-Ками Г. БИНАРНАЯ ТЕХНИКА И ОБРАБОТКА ИНФОРМАЦИИ.** Париж, 1961, перевод с французского, 23 изд. л., цена в переплете 1 р. 81 к.

*Темплан* 1964 г. № 170

Книга известного французского ученого и инженера Субье-Ками посвящена применению методов и средств современной вычислительной техники к системам телеизмерения и телеуправления.

С ПОДРОБНЫМИ АННОТАЦИЯМИ НА ЭТИ ИЗДАНИЯ  
ВЫ МОЖЕТЕ ОЗНАКОМИТЬСЯ  
В ТЕМАТИЧЕСКОМ ПЛАНЕ ИЗДАТЕЛЬСТВА  
НА 1964 ГОД.

## ***Уважаемый читатель!***

ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЕ ЗАКАЗЫ НА ПЕЧАТАЮЩИЕСЯ КНИГИ ПРИНИМАЮТ МАГАЗИНЫ И ОТДЕЛЫ «КНИГА — ПОЧТОЙ» РЕСПУБЛИКАНСКИХ, КРАЕВЫХ И ОБЛАСТНЫХ КНИГОТОРГОВ. ОНИ ОФОРМЛЯЮТСЯ НА ПОЧТОВОЙ ОТКРЫТКЕ В МАГАЗИНЕ. О ПОСТУПЛЕНИИ НУЖНОЙ КНИГИ В МАГАЗИН ПОКУПАТЕЛЬ ИЗВЕЩАЕТСЯ РАНЕЕ ЗАПОЛНЕННОЙ ОТКРЫТКОЙ.

ЗАКАЗАННЫЕ ИЗДАНИЯ ХРАНЯТСЯ В ТЕЧЕНИЕ НЕДЕЛЬНОГО СРОКА С МОМЕНТА ИЗВЕЩЕНИЯ.

СВОЕВРЕМЕННОЕ ПОСТУПЛЕНИЕ ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫХ ЗАКАЗОВ В МАГАЗИН НЕОБХОДИМО ДЛЯ БОЛЕЕ ПРАВИЛЬНОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТИРАЖЕЙ, КОТОРЫЕ УСТАНАВЛИВАЮТСЯ НА ОСНОВЕ СПРОСА ПОКУПАТЕЛЕЙ.

В СЛУЧАЕ ОТКАЗА В ПРИЕМЕ ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫХ ЗАКАЗОВ ПРОСИМ СООБЩАТЬ ПО АДРЕСУ: МОСКВА, В-71, ЛЕНИНСКИЙ ПРОСПЕКТ, 15, ОТДЕЛ ПРОПАГАНДЫ И РЕКЛАМЫ СОЮЗКНИГИ.



