

NHÀ TƯUBLISHING
PHẠM VĂN THIỆM

KỸ THUẬT HỆ THỐNG

Công nghệ
HÓA HỌC

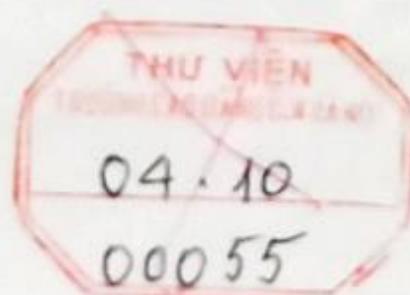
2

NHÀ XUẤT BẢN KHOA HỌC VÀ KỸ THUẬT

GS, TSKH NGUYỄN MINH TUYỀN
PGS, TS PHẠM VĂN THIỆM



KỸ THUẬT
HỆ THỐNG CÔNG NGHỆ HÓA HỌC
TẬP 2
TỐI ƯU HÓA
CÁC QUÁ TRÌNH CÔNG NGHỆ HÓA HỌC



NHÀ XUẤT KHOA HỌC VÀ KỸ THUẬT
HÀ NỘI, 2001

MỞ ĐẦU

Tối ưu hóa quá trình bất kỳ là để tìm điểm thích hợp nhất (điểm tối ưu) của hàm số được nghiên cứu hoặc để tìm các điều kiện tối ưu tương ứng để tiến hành quá trình đã cho. Để đánh giá điểm tối ưu, trước hết cần phải chọn các tiêu chuẩn tối ưu hóa. Tùy thuộc các điều kiện cụ thể mà tiêu chuẩn tối ưu hóa có thể là tiêu chuẩn công nghệ. Ví dụ, năng suất lớn nhất tính cho một đơn vị thể tích thiết bị (năng suất riêng lớn nhất) hoặc là tiêu chuẩn kinh tế như giá thành của một đơn vị sản phẩm là bé nhất, v.v.

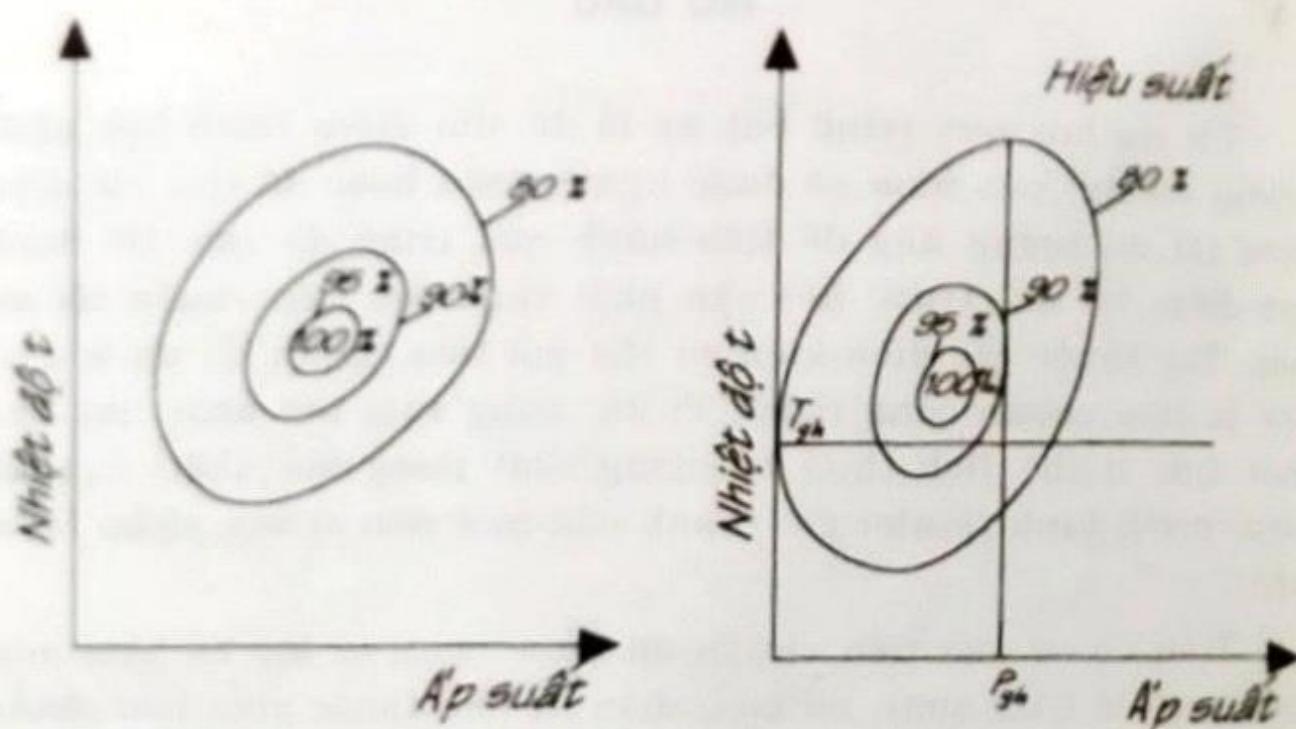
Trên cơ sở của tiêu chuẩn đã được chọn ta lập ra hàm mục tiêu hoặc là hàm xuất, nó biểu diễn sự phụ thuộc giữa tiêu chuẩn tối ưu hóa và các thông số ảnh hưởng đến giá trị của tiêu chuẩn tối ưu hóa này. Bài toán tối ưu hóa dẫn tới việc tìm các cực trị (cực đại hoặc cực tiểu) của hàm mục tiêu. Cần chú ý rằng bài toán tối ưu đặt ra khi cần tìm một giải pháp ưu việt nhất để dung hòa ảnh hưởng của tất cả các yếu tố tác dụng ngược nhau đến kết quả của quá trình, về các yếu tố đó có thể lấy ví dụ như năng suất và hiệu suất, số lượng và chất lượng.

Đối với các quá trình và các hệ thống được điều khiển tự động, người ta phân ra hai giai đoạn tối ưu hóa: tĩnh và động.

Tối ưu hóa tĩnh giải quyết vấn đề lập ra và hiện thực hóa chế độ ổn định tối ưu của quá trình, còn tối ưu động - lập ra và hiện thực hóa, điều khiển tối ưu quá trình.

Tuy theo đặc trưng của mô hình toán được nghiên cứu mà người ta dùng các phương pháp toán học tối ưu hóa khác nhau. Đa số các phương pháp đó dẫn đến tìm cực trị của hàm mục tiêu. Đường cong bao gồm những trị số như nhau của hàm mục tiêu

trong điều kiện các thông số ảnh hưởng tới nó thay đổi gọi là đường bao, hay đường đồng mức (hình 0.1 biểu diễn các hiệu suất phụ thuộc vào áp suất và vào nhiệt độ)



Hình 0.1: a- không giới hạn; b - có giới hạn (chế độ cho phép ở miền $t > t_{gh}$ và $p < p_{gh}$)

Các đường đồng mức ứng với các giá trị khác nhau của hàm mục tiêu và không cắt nhau. Bên trong đường đồng mức y_1 , sẽ tìm được tất cả các đường đồng mức y với $y > y_1$, nếu là trường hợp cực đại, với $y < y_1$ nếu là trường hợp cực tiểu. Hàm mục tiêu có thể có hoặc không có giới hạn. Trên hình 0.1 biểu diễn giới hạn của các thông số của hàm mục tiêu $t > t_{gh}$, $p < p_{gh}$.

Các phương pháp tối ưu đã được sử dụng trong các bài toán công nghệ được thống kê ở bảng 0.1

Khi chọn các phương pháp tối ưu hóa cần để ý tới khả năng này sinh các khó khăn trong tính toán: khối lượng tính toán, sự phức tạp của chính phương pháp, quy mô bài toán, v.v. Hợp lý hơn cả là có thể tiến hành đánh giá sơ bộ vị trí tối ưu của một bài toán cụ thể nào đó. Muốn thế phải xem xét các tương quan ban đầu và cơ sở giữa các thông số. Để rút gọn quy mô bài toán

thường dùng các biện pháp tách ra các biến số bản chất nhất. Việc dùng các sơ đồ tính toán cùng một loại là rất hợp lý. Nếu ta dùng máy tính nhờ các chương trình mẫu tiêu chuẩn thì có thể đơn giản hóa tính toán ngay cả đối với các hàm mục tiêu yêu cầu lập chương trình đặc biệt (ví dụ, khi dùng phương pháp quy hoạch động).

Bảng 0.1

Phương pháp tối ưu hóa	Đặc trưng của quá trình và các bài toán được giải
1	2
A) Phương pháp giải tích	
1) Tìm cực trị bằng giải tích cõi diễn 2) Phương pháp hàng số Lagrange 3) Phương pháp biến phân 4) Nguyên lý cực đại của Pontryagin	<ul style="list-style-type: none"> Các quá trình xác định được mô tả bởi các hàm số khả vi Các quá trình xác định được mô tả bằng các hàm số vi phân với các điều kiện có dạng đẳng thức Tiêu chuẩn tối ưu hóa ở dạng những phiếm hàm. Nghiêm phương trình Euler. Các thiết bị phản ứng đoạn nhiệt nhiều lớp Chế độ nhiệt độ tối ưu của các thiết bị phản ứng khi có các điều kiện biên ở khu vực biến đổi nhiệt độ, v.v. <p>Bài toán lớp mở rộng, đặc biệt là bài toán điều khiển tối ưu</p>
B) Quy hoạch toán học	
1) Quy hoạch hình học 2) Quy hoạch tuyến tính	<p>Tối ưu hóa các hàm số đại số</p> <p>Các bài toán đặc trưng: bài toán chế tạo sản phẩm khác nhau có lợi nhuận cực đại đối với các dạng nguyên liệu khác nhau; bài toán sử dụng tối ưu thiết bị bài toán vận tải</p>

Tiếp bảng 0.1

1	2
3) Quy hoạch động	Quá trình nhiều bước: quá trình tinh luyện, trích lý hấp thu. Dãy thiết bị phản ứng, các lớp đoạn nhiệt nhiều khu vực, các thiết bị tác dụng tương hỗ, v.v. Các quá trình Markov
C) Phương pháp gradient	
Tất cả các dạng khác nhau	Các phương pháp chung nhất tối ưu hóa các hàm số tuyến tính và phi tuyến không giới hạn và có các giới hạn. Đa số các quá trình phức tạp của công nghệ hóa học của các đối tượng riêng và các thiết bị nối (cắt) chéo
D) Các phương pháp tự động hóa với các mô hình tự thích nghi	
Tất cả các dạng	Các đối tượng phức tạp của công nghệ hóa học
E) Các phương pháp thống kê	
1) Phân tích hồi quy 2) Phương pháp phân tích tương quan phương pháp Brandon, Box-Whinson, v.v.	Các đối tượng mô tả khó xác định Tối ưu hóa và kế hoạch hóa thực nghiệm

Chúng ta không đưa ra các khả năng trình bày những quy tắc cũng nhắc đế đơn giản hóa các bài toán đối với tất cả các trường hợp có thể mà mỗi lần cần thiết chọn các phương pháp tối ưu và giải các bài toán phải xuất phát từ bản chất cụ thể của bản thân bài toán. Phản dưới sẽ trình bày các nguyên tắc chủ yếu của các phương pháp tối ưu hóa khác nhau được sử dụng rộng rãi nhất trong hóa học và trong công nghệ hóa học.

MỤC LỤC

	Trang
Mở đầu	3
Chương I. Các phương pháp giải tích	
1.1 Phương pháp tối ưu dựa trên giải tích toán học cổ điển	7
1.2 Phương pháp biến phân	34
1.3 Phương pháp thừa số không xác định Lagrange	78
1.4 Nguyên lý Pontryagin	121
Chương II. Quy hoạch toán học	
2.1 Quy hoạch hình học	171
2.2 Quy hoạch tuyến tính	173
2.3 Phương pháp quy hoạch động	174
Chương III. Các phương pháp gradient để tối ưu hóa	
3.1 Khái niệm chung	212
3.2 Phương pháp lên (hoặc xuống) theo đường dốc nhất và phương pháp gradient	214
3.3 Phương pháp leo dốc có các giới hạn	217
3.4 Phương pháp hai đạo hàm	218
3.5 Thuật toán và sơ đồ khởi của chương trình giải bài toán quy hoạch phi tuyến trong công nghệ hóa học	221
Chương IV. Các phương pháp tự động hóa tìm cực trị (điểm tối ưu)	
4.1 Tìm kiếm mờ	233

4.2. Tìm kiếm và phân tích các kết quả trung gian	233
4.3. Các phương pháp tìm kiếm cục bộ	234
Chương V. Tối ưu hóa các quá trình phản ứng xúc tác	
5.1. Mô hình hóa các quá trình xúc tác	236
5.2. Tối ưu hóa các quá trình xúc tác dị thể làm việc ở chế độ tĩnh và giả tĩnh	258
5.3. Tính toán chế độ công nghệ tối ưu cho các quá trình xúc tác dị thể có hoạt độ giảm dần nhờ nguyên lý Pontryagin	304
5.4. Tính toán chế độ công nghệ tối ưu cho quá trình chuyển hóa SO_2 thành SO_3	327