Р. Р. Шангареев, Р. С. Давлетшин, С. А. Мустафина (Стерлитамак, СФ БГУ)**. Математическая модель процессов с изменяющейся активностью катализатора с несколькими управляющими параметрами.**

Технология и аппаратурное оформление многих процессов полностью зависят от активности катализатора. К ним относятся крекинг, риформинг, дегидрирование, изомеризация, гидроочистка и т. п. Активность и селективность катализатора обеспечивают скорость и качество протекания каталитической реакции, а стабильность — устойчивость этих показателей в течение срока службы катализатора. Математическую модель процессов с изменяющейся активностью катализатора с несколькими управляющими параметрами можно представить в виде

$$\frac{\partial c_i}{\partial \tau} = f_i(c, \theta, u_1, \dots, u_k) \ (i = 1, \dots, n), \quad \frac{\partial \theta_j}{\partial t} = g_j(c, \theta, u_1, \dots, u_k) \ (j = 1, \dots, m), \tag{1}$$

с граничными условиями

$$c(0, t) = v(t), \qquad t \in [0, t_k], \quad \theta(\tau, 0) = w(\tau), \qquad \tau \in [0, \tau_k], \tag{2}$$

где $c(\tau, t)$ — вектор-функция, характеризующая состояние процесса (концентрация, температура, давление и т. д.); $\theta(\tau, t)$ — вектор-функция, описывающая изменение каталитической активности; $u_1(\tau, t), \dots, u_k(\tau, t)$ — вектор-функции, характеризующие управляющие воздействия; τ — астрономическое время; t — время действия катализатора.

При наличии в задаче фазовых ограничений их выполнение обеспечивается путем введения штрафного слагаемого $A(\tau, t)$, задаваемого в виде

$$A(\tau, t) = A_k \sum_{n=1}^{2} [x_n(\tau, t) \mu(-x_n(\tau, t))]^2, \tag{3}$$

где A_k — параметры штрафа; $x_n(\tau, t)$ — вектор-функция, компонентами которой являются функции $c(\tau, t)$ и $\theta(\tau, t)$; $\mu(x_n)$ — функция Хевисайда.

Задача оптимизации состоит в нахождении оптимальных значений функций $u_i(\tau, t)$ $(i = 1, 2, \dots, k)$ и соответствующих им решений $c(\tau, t)$ и $\theta(\tau, t)$, удовлетворящих критерию оптимизации. В качестве критерия оптимизации рассматривают задачу определения значений u_k^*, v^*, w^* и τ_k, t_k, доставляющих максимум функционалу

$$\int_0^{t_k} \int_0^{\tau_k} (G(\tau, t, u_1, \dots, u_k, v, w, c, \theta) + A(\tau, t))\, d\tau\, dt \to \max_{u, v, w \in \Omega,\ \tau_k, t_k \in D}, \tag{4}$$

где $G = G(\tau, t, u, v, w, c, \theta)$ — некоторая достаточно гладкая функция.

Для решения задачи (1)–(4) были разработаны численные алгоритмы, основанные на методе раздельного интегрирования основной и сопряженной систем, методе движения по градиенту функции Понтрягина и релаксационном методе [1].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Быков В. В.* Моделирование химико-технологических процессов. Красноярск: ИПЦКГТУ, 2002, 298 с.