

Р. Р. Шангареев, С. А. Мустафина (Стерлитамак, СФ БГУ).
Решение задачи оптимизации процесса тримеризации хлорциана с учетом падения активности катализатора.

Получение цианур-хлорида осуществляется путем тримеризации хлорциана на активном угле. Проблема оптимизации данного процесса характеризуется следующими особенностями: быстрое падение активности катализатора и обратимость реакции [1].

Математическая модель процесса представляет собой систему дифференциальных уравнений в частных производных:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c(\tau, t)}{\partial \tau} &= - \frac{k_1(T)c\theta}{1 + k_2(T)c} \left(1 - \sqrt{\frac{1-c}{c^3 - k_p(T)}} \right) \frac{(3-2c)^2}{3}, \\ \frac{\partial \theta(\tau, t)}{\partial t} &= \frac{k_3(T)c\theta}{1 + k_2(T)c}, \quad k_i = k_{i0}e^{-E_i/(RT)}, \end{aligned} \quad (1)$$

где $c(\tau, t)$ — концентрация химического вещества, $\theta(\tau, t)$ — функция, характеризующая падение активности катализатора, $T(\tau, t)$ — температура, τ — астрономическое время, t — время действия катализатора.

Граничные условия для задачи (1) записаны в виде

$$c(0, t) = 1, \quad t \in [0, t_k], \quad \theta(\tau, 0) = 1, \quad \tau \in [0, \tau_k]. \quad (2)$$

Проблема оптимизации задачи (1)–(2) заключается в определении температуры, удовлетворяющей ограничению типа неравенств $T_* \leq T \leq T^*$, времени контакта τ_k и длительности цикла работы аппарата t_k , обеспечивающих максимум критерия

$$J = \frac{1}{\tau_k} \int_0^{\tau_k} [1 - c(\tau, t)] dt, \quad c(\tau, t) \leq 0,02. \quad (3)$$

Таким образом, задача оптимизации состоит в получении максимума выхода цианур-хлорида с единицы объёма катализатора.

Оптимизация данного процесса осуществлялась на основе принципа максимума Понтрягина с помощью численных методов раздельного интегрирования основной и сопряженной систем и движения по градиенту функции Понтрягина. Для полученного оптимального управления был применен метод вариации пространства управлений с шагом $dT = 0,5 K$. В ходе вычислений не было найдено другого наиболее оптимального управления, удовлетворяющего задаче (1)–(3). Точность в обоих методах составляла $\varepsilon = 0,001$, начальное приближение — $T_0 = 500 K$. Максимальная разница в найденных оптимальных температурах составила $12 K$. Наибыстрейшая сходимость была достигнута методом движения по градиенту функции Понтрягина.

Найденное оптимальное управление $T(\tau, t)$ является убывающей по переменной t и возрастающей по переменной τ функцией.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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