

О. А. Антонова, С. А. Мустафина (Стерлитамак, СФ БГУ).
Влияние неопределенности в кинетических константах на расчет оптимального температурного режима для последовательных реакций.

Объектом исследования выберем последовательную реакцию:



Математическая модель данной реакции совместно с сопряженной системой, построенной на основе принципа максимума Понтрягина, имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{da}{dt} = -k_1^I(T)a, \\ \frac{db}{dt} = k_1^I(T)a - k_2^I(T)b, \\ \frac{d\psi_1}{dt} = k_1^I(T)(\psi_1 - \psi_2), \\ \frac{d\psi_2}{dt} = k_2^I(T)\psi_2, \end{cases}$$

с краевыми условиями $a(0) = 1, b(0) = 0, \psi_1(1) = 0, \psi_2(1) = 1$, где a, b — концентрации веществ A и B в реакционном объеме, t — время контакта ($0 < t < t_k$), $k_1^I(T), k_2^I(T)$ — интервалы констант скоростей прямой и обратной стадий реакции, выписаны в соответствии с зависимостью Аррениуса, ψ_1, ψ_2 — вспомогательные функции.

Рассмотрим оптимизационную задачу. Найти оптимальный температурный профиль $T_{opt} = T_{opt}(t)$, на котором достигается максимум выхода целевого продукта B .

Тогда функция Понтрягина следующая:

$$H = k_1^I(T)a(t)(\psi_2(t) - \psi_1(t)) - k_2^I(T)b(t)\psi_2(t).$$

В качестве исходных данных были выбраны кинетические константы процесса пассивации никелевых катализаторов.

Разброс в условиях качественной неопределенности при относительных ошибках 5% и 10% показан на рисунке. Результаты дают основания утверждать о малой чувствительности оптимального температурного режима к вариации кинетических констант.

antonova.pcx12.32truecm5.71truecm

Рис. Чувствительность оптимального температурного режима к вариации кинетических констант в 5%(слева) и 10%(справа)