

О. А. Антонова, С. А. Мустафина (Стерлитамак, СФ БГУ).
Гарантированность изотермического режима на этапе теоретической оптимизации.

Рассмотрено решение задачи быстродействия на примере пассивации (неполного окисления) никелевого катализатора, используемого в промышленности для получения оксидной пленки никеля в n слоев.

Суть заключается в следующем: обычно предельное насыщение пассивируемого кислородом никелевого катализатора известно либо из физико-химических соображений, либо из требований, предъявляемых катализатору. Другими словами, концентрация кислорода в газе в начале процесса и в конце известны: x_0, x_k .

Смысл этапа теоретической оптимизации заключается в определении оптимального температурного режима, позволяющего получить пассивационную пленку за минимальное время t .

Сформулируем задачу: найти $\min_{T_* \leq T(t) \leq T^*} t_k$ для системы уравнений вида $d\mathbf{x}/dT = k\mathbf{x}$ с краевыми условиями $\mathbf{x}(0) = (x_0, 0, \dots, 0)$, $x_1(t) = x_k$, где $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ — соответственно концентрации кислорода в объеме, на поверхности и в $(n - 2)$ монослоях. Константы скорости: $k = -\text{diag}(k_1, k_2, \dots, k_n)$, $k_i(T) = k_i^0 e^{-E_i/(RT)}$, $i = 1, 2, \dots, n$.

Функция Понтрягина имеет вид $H = \sum_{i=1}^n \psi_i[(Pz)_i + \varphi_i] + \psi_{n+1}$.

В качестве исходных данных были взяты шесть монослоев. Допустимые ошибки определения варьировались от 5% до 10%. Результаты анализа надежности энергий активаций стадии пассивации никелевых катализаторов приведены в таблице.

Энергия активации	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	E_6
Максимальная точность (%)	40	87	91	97	97	98

Как видно из приведенных результатов, анализ получаемых данных позволяет выделить основные стадии, определяющие изотермичность процесса.