УДК 519.245:678.7

Экономическая оптимизация на основе кинетической модели реакции диметилкарбоната со спиртами в присутствии октакарбонилдикобальта

Коледин С.Н. [1,2], Коледина К.Ф. [1,2], Губайдуллин И.М. [1,2]

Институт нефтехимии и катализа РАН[1],
Уфимский государственный нефтяной технический университет[2]

Аннотация: Математическое описание каталитических процессов представляет собой систему обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений, обычно большой размерности. В качестве варьируемых параметров могут рассматриваться и температура проведения реакции, время проведения реакции. Для рассматриваемой реакции приведены целевые функции оптимизации в виде экономических показателей.

Ключевые слова: Экономические показатели, кинетическая модель, реакция диметилкарбоната со спиртами, варьируемые параметры, экономическая оптимизация.

Математическая модель реакции диметилкарбоната со спиртами в присутствии $Co_2(CO)_8$ представляет собой систему обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (СОНДУ) изменения концентраций реагентов во времени [1-2]

$$\frac{dx_i}{dt} = \sum_{j=1}^{J} \nu_{ij} w_j, i = 1,...I; \quad w_j = k_j \cdot \prod_{i=1}^{I} (x_i)^{|\alpha_{ij}|} - k_{-j} \cdot \prod_{i=1}^{I} (x_i)^{\beta_{ij}}; \qquad (1)$$

с начальными условиями: $x_i(t=0) = x_i^0$, $t \in [0, t^*]$. Здесь ν_{ij} – стехиометрические коэффициенты; J – число стадий, x_i – концентрации веществ, моль/л (i -номера вещества из рис. 1, 2); I – число веществ; w_j – скорость j-ой стадии, моль/(л·мин); α_{ij} – отрицательные элементы матрицы (ν_{ij}), β_{ij} – положительные элементы (ν_{ij}), k_j, k_{-j} – константы скоростей прямой и обратной стадий, t^* - фиксированное время проведения реакции, мин.

Параметры k_j для рассматриваемой реакции были определены в работах [3-4].

При постановке задачи оптимизации необходимо выбрать целевые функции. В работах [5-6] показана необходимость применения целевых функций в виде экономических показателей при оптимизации химических реакций на основе кинетической модели. Исследуемыми показателями являются критерий прибыли, представленный в виде (2) и критерий рентабельности, представленный в виде (3) [7].

$$П = \sum_{prod=1}^{Pr} x_{prod}(t^*, T, \boldsymbol{x}^0) \cdot \eta_{prod} - \sum_{source=1}^{Sr} x_{source}(t^*, T, \boldsymbol{x}^0) \cdot \eta_{source} - \psi(t^*, T) - A \to \max \quad (2)$$

где x_{prod} – концентрации продуктов реакции; x_{source} – концентрации исходных реагентов; η – вектор удельных ценовых весов компонентов (нормир. к сумме цен компонентов и затрат); ψ – переменные затраты (нормир.); A – постоянные затраты (нормир.); Pr – число продуктов; Sr – число исходных реагентов, П – нормированная прибыль.

$$P = \frac{\sum_{prod=1}^{Pr} x_{prod}(t^*, T, \boldsymbol{x}^0) \cdot \eta_{prod}}{\sum_{source=1}^{Sr} x_{source}(t^*, T, \boldsymbol{x}^0) \cdot \eta_{source} + \psi(t^*, T) + A} \to \max \quad (3)$$

где Р – нормированная рентабельность.

Постановка задачи оптимизации реакции диметилкарбоната со спиртами в присутствии $Co_2(CO)_8$ имеет вид [8]:

- Целевые функции оптимизации в виде (2) или (3).

- Варьируемые (свободные) параметры – температура T; время проведения реакции t^*.

- Математическая модель в виде (1).

- Прямые ограничения на варьируемые параметры определяются интервалами $T \in [T_{\min}, T_{\max}]$; $t^* \in [t^*_{\min}, t^*_{\max}]$.

График изменения прибыли от времени по (2) при разных значениях температуры имеет вид (рис. 1).

На рис. 1 наблюдаются следующие закономерности.

Существует область температур с положительными значениями прибыли, причем чем больше температура, тем максимум по прибыли наступает раньше (170-220°С). Уменьшение значение прибыли интенсивнее, чем выше температура. Это происходит, вероятно, потому, что при высокой температуре конверсия реакции наступает быстрее. При полном расходовании одного из реагентов (спирт) значение конверсии второго реагента увеличиваться не может и прибыль уменьшается за счет переменных затрат (например, на поддержание температуры).

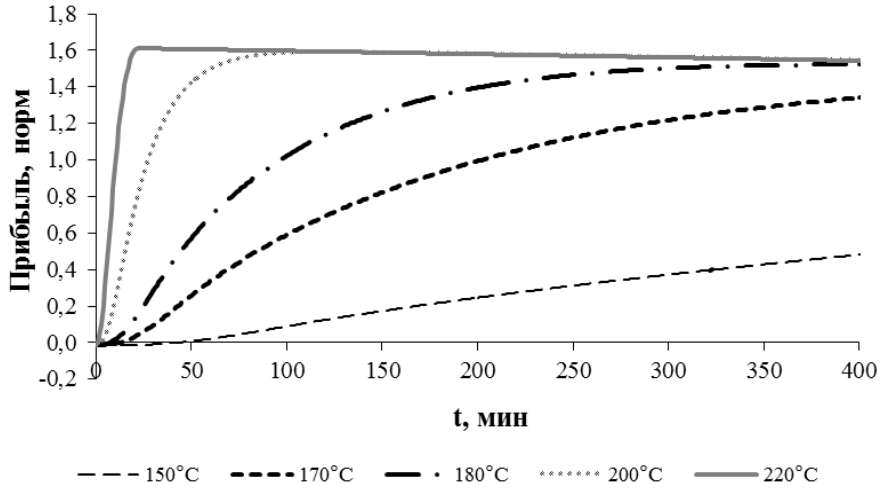

Рис. 1. Изменение критерия прибыли от времени при различных значениях температуры для реакции спиртов с диметилкарбонатом в присутствии $Co_2(CO)_8$

Рентабельность любого процесса является важным критерием для оценки эффективности химической реакции. Прежде всего, рентабельность характеризует качественное значение процесса. Также при анализе рентабельности можно отсечь нежелательные условия осуществления химической реакции уже на уровне лабораторных условий. Изменение критерия рентабельности процесса от времени по (3) изображено на рис. 2.

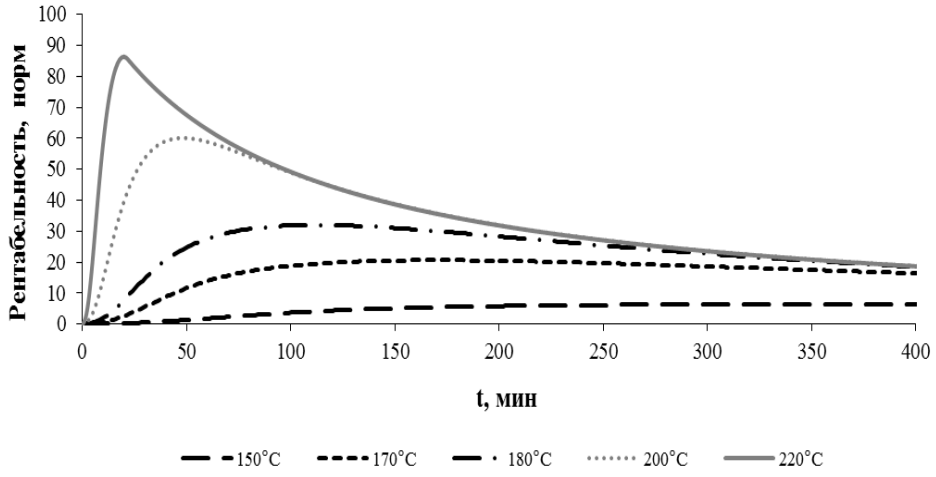

Рис. 2. Изменение критерия рентабельности по времени в диапазоне температур для реакции спиртов с диметилкарбонатом в присутствии $Co_2(CO)_8$

По рис. 2 видно, что рентабельность выходит на максимум и со временем уменьшается, что объясняется затратами на поддержание заданной температуры. С увеличением температуры максимальное значение рентабельности наступает раньше.

Таким образом, в работе приведены целевые функции оптимизации в виде экономических показателей для химической реакции. Приведена постановка и

решение задачи экономической оптимизации на основе кинетической модели реакции диметилкарбоната со спиртами в присутствии катализатора $Co_2(CO)_8$.

Литература

1. Коледина К.Ф. Последовательно-параллельное определение кинетических параметров при моделировании детального механизма гидроалюминирования олефинов // диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Башкирский государственный университет. Уфа, 2011.
2. Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М. Кинетика и механизм каталитических реакций гидроалюминирования олефинов алюминийорганическими соединениями // Журнал физической химии. 2016. Т. 90. № 5. С. 671-678.
3. Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Щаднева Н.А., Губайдуллин И.М. Кинетика и механизм каталитической реакции спиртов с диметилкарбонатом // Журнал физической химии. 2017. Т. 91. № 3. С. 422-428.
4. Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Губайдуллин И.М., Сафин Р.Р., Ахметов И.В. Информационная система построения кинетической модели каталитической реакции, планирование экономически оптимального химического эксперимента // Системы управления и информационные технологии. 2015. Т. 61. № 3. С. 79-84.
5. Коледин С.Н., Коледина К.Ф. Планирование экономически оптимального химического эксперимента на основе кинетической модели каталитической реакции взаимодействия спиртов с диметилкарбонатом // Журнал Средневолжского математического общества. 2015. Т. 17. № 2. С. 43-50.
6. Коледин С.Н., Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М., Спивак С.И. Определение оптимальных условий каталитических процессов на основе экономических критериев // Химическая промышленность сегодня. 2016. № 10. С. 24-35.
7. Коледин С.Н., Коледина К.Ф. Оптимальное управление и чувствительность оптимума в задачах химической кинетики // Журнал Средневолжского математического общества. 2016. Т. 18. № 3. С. 137-144.
8. Спивак С.И., Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Губайдуллин И.М. Информационно-вычислительная аналитическая система теоретической оптимизации каталитических процессов // Прикладная информатика. 2017. Т. 12. № 1 (67). С. 39-49.

MSC 34G10 58D25

Economic optimization based on the kinetic model of the reaction of dimethylcarbonate with alcohols in the presence of octacarbonyldicobalt

Koledin S.N. [1,2], Koledina K.F. [1,2], Gubaydullin I.M. [1,2]

Institute of Petrochemistry and Catalysis of the RAS[1],
Ufa State Petroleum Technological University[2]

Mathematical description of catalytic processes is a system of ordinary nonlinear differential equations, usually of large dimension. As variable parameters, the reaction temperature and reaction time can be considered. For the considered reaction, the target optimization functions in the form of economic indicators.

Keywords: Economic indicators, kinetic model, reaction of dimethyl carbonate with alcohols, variable parameters, economic optimization.

References

1. Koledina K.F. Sequential-parallel determination of kinetic parameters in the modeling of the detailed mechanism of hydroalumination of olefins. Dissertation for the degree of candidate of physical and mathematical sciences. Bashkir State University. Ufa, 2011.
2. Koledin K.F., Gubaydullin I.M. Kinetics and mechanism of catalytic reactions of hydroalumination of olefins by organoaluminum compounds. Journal of Physical Chemistry. 2016. 90. No. 5. P. 671-678.
3. Koledina K.F., Koledin S.N., Shchedneva N.A., Gubaydullin I.M. Kinetics and Mechanism of Catalytic Reaction of Alcohols with Dimethyl Carbonate. Journal of Physical Chemistry. 2017. 91. No. 3. P. 422-428.
4. Koledin K.F., Koledin S.N., Gubaydullin I.M., Safin R.R., Akhmetov I.V. Information system for constructing a kinetic model of a catalytic reaction, planning an economically optimal chemical experiment. Control Systems and Information Technology. 2015. Vol. 61. No. 3. P. 79-84.
5. Koledin S.N., Koledina K.F. Planning of economically optimal chemical experiment on the basis of the kinetic model of the catalytic interaction of alcohols with dimethyl carbonate. Journal of the Middle Volga Mathematical Society. 2015. V. 17. No. 2. P. 43-50.
6. Koledin S.N., Koledina K.F., Gubaydullin I.M., Spivak S.I. Determination of optimal conditions for catalytic processes on the basis of economic criteria. Chemical Industry today. 2016. No. 10. P. 24-35.

7. Koledin S.N., Koledina K.F. Optimum control and sensitivity of the optimum in problems of chemical kinetics. Middle Volga Mathematical Society Journal. 2016. V. 18. No. 3. P. 137-144.
8. Spivak S.I., Koledin K.F., Koledin S.N., Gubaydullin I.M. Informational-computational analytical system of theoretical optimization of catalytic processes. Applied Informatics. 2017. V. 12. No. 1 (67). Pp. 39-49.