

УДК 544.4:004.023

Расчет оптимального температурного режима каталитического процесса*

Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф.

Уфимский университет науки и технологий

Аннотация: В работе приведены результаты расчета оптимального температурного режима для каталитического процесса в реакторе идеального смешения с целью получения максимального выхода продуктов реакции.

Ключевые слова: оптимальный температурный режим, каталитический процесс, реактор идеального смешения.

1. Постановка задачи

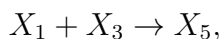
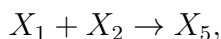
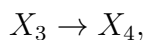
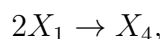
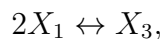
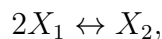
Применение методов математического моделирования для определения оптимальных условий ведения химико-технологических процессов дает возможность повысить производительность технологической схемы процесса и получить конкретные количественные результаты путем имитации лабораторного эксперимента с помощью компьютерных программ.

В качестве методов решения оптимизационных задач и задач управления можно использовать эволюционные вычисления, которые представляют собой интеллектуальные системы извлечения новых знаний и ориентированы на автоматическое их накопление с использованием процедур анализа и обобщения данных [1, 2].

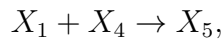
Одним из направлений эволюционных вычислений являются генетические алгоритмы. Генетические алгоритмы основаны на поиске лучших решений с помощью наследования и усиления полезных свойств множества объектов определенной области в процессе имитации их эволюции [3, 4].

С помощью генетического алгоритма определим оптимальный температурный профиль каталитического процесса димеризации α -метилстирола в реакторе идеального смешения.

Механизм реакции димеризации α -метилстирола в присутствии цеолитного катализатора NaNu описывается совокупностью стадий [4]:



*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-21-00186, <https://rscf.ru/project/24-21-00186/>.



где X_1 – α -метилстирол, X_2 – α -димер, X_3 – β -димер, X_4 – циклический димер, X_5 – тримеры.

Математическая модель процесса димеризации α -метилстирола в реакторе идеального смешения приведена в работе [5]. Параметром управления является температура хладагента, на значения которой наложены ограничения (К):

$$303 \leq T_x(t) \leq 403.$$

Поскольку целевыми продуктами реакции димеризации α -метилстирола являются линейные димеры, то зададим в качестве критерия оптимальности их максимальный выход в конечный момент времени ($t = t_{end}$):

$$x_2(t_{end}) + x_3(t_{end}) \rightarrow \max.$$

2. Результаты и их обсуждение

В результате проведенных расчетов с помощью генетического алгоритма с вещественным кодированием вычислены оптимальные концентрации веществ и оптимальный температурный режим процесса димеризации α -метилстирола в реакторе идеального смешения (рис. 1). Выявлено, что при соблюдении вычисленного оптимального температурного режима достигается максимальный выход линейных димеров (71% α -димера, 10,2% β -димера).

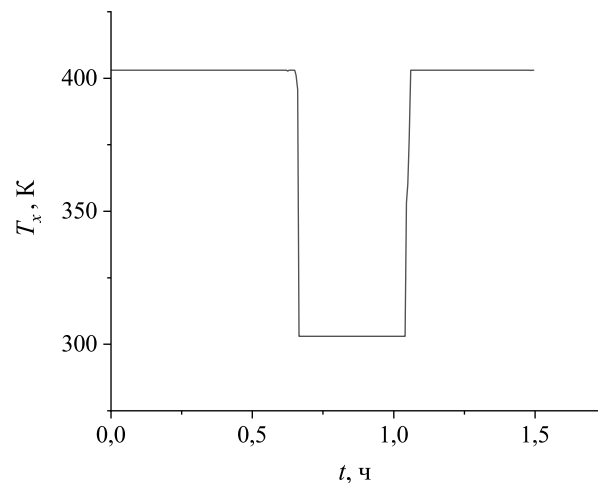


Рис. 1. Оптимальная температура хладагента

Литература

1. Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф. Численный алгоритм идентификации кинетической модели химической реакции // Вестник Технологического университета. 2019. Т. 22, № 9. С. 13-17.

2. Antipina E.V., Mustafina S.I., Antipin A.F., Mustafina S.A. A Numerical Algorithm for Solving Optimal Control Problems with Terminal Constraints for Dynamical Systems // Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing. 2020. Vol. 56, No. 6. P. 132-140.
3. Herrera F., Lozano M., Verdegay J.L. Tackling Real-Coded Genetic Algorithms: Operators and Tools for the Behaviour Analysis // Artificial Intelligence Review. 1998. Vol. 12, No. 4. P. 265-319.
4. Гладков Л.А., Курейчик В.В., Курейчик В.М. Генетические алгоритмы. 2-е издание. М.: Физматлит, 2010. 368 с.
5. Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Search for the Optimal Regime Parameters of a Catalytic Process Based on Evolutionary Computations // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2022. Vol. 56, No. 2. P. 162-169.

MSC 65K10

Calculation of the optimal temperature regime of the catalytic process

E.V. Antipina, S.A. Mustafina, A.F. Antipin

Ufa University of Science and Technology

Abstract: The work presents the results of calculations of the optimal temperature regime for the catalytic process in the ideal mixing reactor with the aim of obtaining the maximum possible yield of the reaction products.

Keywords: optimum temperature regime, catalytic process, ideal mixing process.

References

1. Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Chislennyy algoritm identifikatsii kineticheskoy modeli khimicheskoy reaktsii // Vestnik Tekhnologicheskogo universiteta. 2019. 22, 9. P. 13-17 (in Russian).
2. Antipina E.V., Mustafina S.I., Antipin A.F., Mustafina S.A. A Numerical Algorithm for Solving Optimal Control Problems with Terminal Constraints for Dynamical Systems // Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing. 2020. Vol. 56, No. 6. P. 132-140.
3. Herrera F., Lozano M., Verdegay J.L. Tackling Real-Coded Genetic Algorithms: Operators and Tools for the Behaviour Analysis // Artificial Intelligence Review. 1998. Vol. 12, No. 4. P. 265-319.
4. Gladkov L.A., Kureychik V.V., Kureychik V.M. Geneticheskiye algoritmy. 2-ye izdaniye. - M.: Fizmatlit, 2010. 368 p (in Russian).
5. Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Search for the Optimal Regime Parameters of a Catalytic Process Based on Evolutionary Computations // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2022. Vol. 56, No. 2. P. 162-169.