

*Иремадзе Элисо Отаровна,*

*канд. хим. наук, доцент кафедры математического моделирования;*

*Хачануридзе Кристина Мерабовна,*

*студентка экономического факультета,*

*Стерлитамакский филиал*

*ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет»,*

*г. Стерлитамак, Республика Башкортостан, Россия*

## **РАСЧЁТ ОПТИМАЛЬНОГО ТЕМПЕРАТУРНОГО РЕЖИМА ДЛЯ РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ МОНООКСИДА УГЛЕРОДА**

Рассматривается вопрос влияния неопределенности в параметрах математической модели на практические результаты; проведен анализ ОТР при варьировании значения энергий активации; проводился вычислительный эксперимент при расчёте ОТР для реакции окисления монооксида углерода; получены экспериментальные данные; построен оптимальный температурный режим и исследована задача анализа чувствительности оптимального температурного режима для реакции получения окиси этилена в реакторе идеального вытеснения с неподвижным слоем катализатора.

**Ключевые слова:** моделирование, оптимальный температурный режим, вычислительный эксперимент, экспериментальное измерение, химические реакции, анализ чувствительности, интервалы, кинетические параметры, дифференциальные уравнения.

Всякое экспериментальное измерение включает в себя некоторую неопределенность, количественно выражаемую интервалом. Таким образом, значение измерения является объектом интервального анализа. Отсюда, если все вычисления, осуществляемые ранее для получения той или иной инварианты, повторить в интервальной арифметике, то результирующий интервал обладает двумя важными свойствами: гарантированности и независимости от закона распределения случайной величины.

В данной работе рассматривается вопрос влияния неопределенности в параметрах математической модели на практические результаты. Рассмотрение примеров приводит к следующему факту: знание энергий активации уже достаточно для прогноза оптимального температурного режима. В то же время следует заметить, что явное математические выражения в виде формул удаётся

получить только для сравнительно простых случаях. В реальных ситуациях число дифференциальных уравнений математического описания может достигать десяти и более. Вид правых частей может также усложняться по сравнению с законом действующих масс. В этих ситуациях получить аналитические выражения для ОТР и условий качественной неизменности становится невозможным. И вопрос о чувствительности ОТР к вариации кинетических параметров становится задачей вычислительного эксперимента [1].

Вычислительный эксперимент проводился при расчете ОТР для реакции окисления монооксида углерода [2]. Обработка данных с целью решения обратной кинетической задачи проводилась на основе кинетического уравнения вида:

$$W(x, T) = k(T) \cdot [O_2]^m \cdot [x]^n, \text{ где} \quad (1)$$

$x$  – концентрация этана или СО,  $n$  - порядки реакции по этану или СО.

Для таких функций найдены численные значения кинетических параметров: предэкспонентов, энергий активации и порядков реакции по ключевым компонентам.

Все экспериментальные данные получены в изотермических условиях при постоянном давлении. Математическое описание окисления этана и монооксида углерода в изотермическом реакторе идеального смешения представляется системой уравнений [3].

Входящие в правые части уравнений составляющие ( $F_i$ ) равны:

$$F_1 = - 0.5w_1 - 3.5 w_2; \quad (2)$$

$$F_2 = - w_1; \quad (3)$$

$$F_3 = - w_2; \quad (4)$$

$$F_4 = w_1 + 2 w_2; \quad (5)$$

$$F_5 = 3w_2; \quad (6)$$

$$F_N = - 0.5w_1 + 0.5w_2. \quad (7)$$

Система дифференциальных уравнений, построенная в соответствии с кинетической схемой, имеет вид:

$$\frac{dN}{dt} x_1 + \frac{dx_1}{dt} N = 0.5\omega_1 - 3.5\omega_2 \quad (8)$$

$$\frac{dN}{dt} x_2 + \frac{dx_2}{dt} N = -\omega_1 \quad (9)$$

$$\frac{dN}{dt} x_3 + \frac{dx_3}{dt} N = -\omega_2 \quad (10)$$

$$\frac{dN}{dt} x_4 + \frac{dx_4}{dt} N = \omega_1 + 2\omega_2 \quad (11)$$

$$\frac{dN}{dt} x_5 + \frac{dx_5}{dt} N = 3\omega_2 \quad (12)$$

$$\frac{dN}{dt} = F_N, \text{ где } F_N = 0.5\omega_1 + 0.5\omega_2 : \quad (13)$$

$$\frac{dx_1}{dt} = \frac{(0.5\omega_1 - 3.5\omega_2) - x_1 F_N}{N} \quad (14)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = \frac{-\omega_1 - x_2 F_N}{N} \quad (15)$$

$$\frac{dx_3}{dt} = \frac{-\omega_2 - x_3 F_N}{N} \quad (16)$$

$$\frac{dx_4}{dt} = \frac{(\omega_1 + 2\omega_2) - x_4 F_N}{N} \quad (17)$$

$$\frac{dx_5}{dt} = \frac{3\omega_2 - x_5 F_N}{N} \quad (18)$$

Система дифференциальных уравнений решалась с изменяемыми начальными данными.

В работе проведен анализ ОТР при варьировании значения энергий активации. Выбирается значение энергии активации, полученное для каждого из трех катализаторов. Это значение является базовым. Изменяя базовое значение в пределах  $\pm 25\%$ , получаем 7 значений для каждой энергии активации. В результате расчета получены 63 графика: для 3 катализаторов, 3 наборов начальных данных и 7 значений энергий активации [4].

Вариация энергии активации  $E_1$  в пределах 25% приводит к изменению температуры не более 20-25%. Иначе говоря, вариация энергии активации в некоторых пределах (в данном случае, до 25%) не меняет вид оптимального температурного режима. В данной работе такая ситуация наблюдается почти для всех наборов начальных данных и всех катализаторов.

Хотя на практике могут возникнуть такие ситуации, когда изменение энергии активации в небольших пределах приводит к достаточно большому изменению температуры. То есть, в определенных условиях может наблюдаться повышенная чувствительность к изменению кинетических параметров [5].

Анализ проведенного вычислительного эксперимента позволяет определить точность в кинетических константах, необходимую для надежного определения оптимальных характеристик технологического процесса.

Из всего вышесказанного можно сделать выводы, что в случае дробно-рациональной зависимости скорости реакции от концентраций получены явные математические выражения для оптимального температурного режима и чувствительности по кинетическим константам. Построен оптимальный температурный режим и исследована задача анализа чувствительности оптимального температурного режима для реакции получения окиси этилена в реакторе идеального вытеснения с неподвижным слоем катализатора. Модифицирован комплекс прикладных программ для расчета химико-технологических процессов с изменяющимися свойствами реакционной среды в реакторах с неподвижным слоем катализатора.

Уровень сервиса разработанного математического обеспечения позволяет использовать его при решении задачи расчёта и анализа оптимального температурного режима для широкого класса каталитических процессов. Разработанное математическое обеспечение использовано при расчете и анализе оптимального температурного режима для промышленно значимой реакции – очистки углеводородсодержащих газов от монооксида углерода в присутствии металлических катализаторов. Анализ вычислительного

эксперимента по анализу чувствительности оптимального температурного режима к вариации кинетических констант позволяет оценить область вариации оптимального температурного режима при вариации кинетических констант в пределах, определяемых величиной погрешности измерений. Проведённые расчеты позволяют оценить надежность технологических решений, следующих из результатов математического моделирования соответствующих процессов.

#### *СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ*

- 1. Моделирование объектов химической технологии // Иремадзе Э.О., Мустафина С.А., Спивак С.И. – Уфа, 2007.*
- 2. Оптимизация нестационарных процессов в условиях неопределенности кинетических параметров // Мустафина С.А., Иремадзе Э.О., Спивак С.И. Труды Средневолжского математического общества. – 2007. – Т. 9. – № 1. – С. 218-221.*
- 3. Применение теории чувствительности для оптимизации каталитических процессов и реакторов // Мустафина С.А., Иремадзе Э.О., Спивак С.И. Обзорение прикладной и промышленной математики. – 2005. – Т. 12. – № 2. – С. 447.*
- 4. Чувствительность оптимального температурного режима каталитического процесса к вариации кинетических констант // Иремадзе Э.О. Диссертация на соискание ученой степени кандидата химических наук / Уфа, 2002.*
- 5. Неопределенность в кинетических константах и расчет оптимальной температуры / Иремадзе Э.О., Мустафина С.А., Спивак С.И. Математическое моделирование. – 2000. – Т. 12. – № 3. – С. 21-22.*