ПОИСК ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ ПРОТЕКАНИЯ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ НА ОСНОВЕ КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

© Е.В. Антипина, С.А. Мустафина, А.Ф. Антипин
stepashinaev@ya.ru, mustafina_sa@mail.ru, andrejantipin@ya.ru

УДК 517.977, 544.4

DOI: 10.33184/mnkuomsh2t-2021-10-06.52.

В работе приведены результаты расчета оптимального температурного режима для реакции аминометилирования тиолов с помощью тетраметилметандиамина с целью получения максимального выхода продукта реакции.

Ключевые слова: кинетическая модель реакции, оптимальное управление, генетический алгоритм.

Search for optimal conditions for a chemical reaction based on a kinetic model

The paper presents the results of calculating the optimal temperature regime for the reaction of aminomethylation of thiols using tetramethylmethanediamine in order to obtain the maximum yield of the reaction product.

Keywords: kinetic reaction model, optimal control, genetic algorithm.

В настоящее время применение методов математического моделирования дает возможность повысить производительность технологической схемы процесса и получить конкретные количественные результаты, имитируя натурный и лабораторный эксперименты с помощью компьютерных программ. Одним из способов поиска оптимального управления химико-технологическим процессом является применение генетических алгоритмов. Генетические алгоритмы имитируют процессы, происходящие в ходе эволюции (наследственность, изменчивость, естественный отбор), в результате чего выживают наиболее приспособленные особи, которые порождают новое поколение потомков.

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (код научной темы FZWU-2020-0027).

Антипина Евгения Викторовна, к.ф.-м.н., мл. научный сотрудник, Стерлитамакский филиал БашГУ (Стерлитамак, Россия); Evgenia Antipina (Sterlitamak Branch of Bashkir State University, Russia)

Мустафина Светлана Анатольевна, д.ф.-м.н., профессор, БашГУ (Уфа, Россия); Svetlana Mustafina (Bashkir State University, Ufa, Russia)

Антипин Андрей Федорович, к.т.н., доцент, Стерлитамакский филиал БашГУ (Стерлитамак, Россия); Andrej Antipin (Sterlitamak Branch of Bashkir State University, Russia)

На основе сформулированного авторами алгоритма в работе [1] решим задачу поиска оптимального температурного режима для реакции аминотетилирования тиолов с использованием тетраметилметандиамина. Схема данной реакции представляется последовательностью стадий [2]:

где $X_1 = N_2(CH_3)_4$, $X_2 = Sm$, $X_3 = N_2(CH_3)_4 \cdot [Sm]$, $X_4 = HSC_5H_{11}$, $X_5 = (CH_3)_2NSC_5H_{11}$, $X_6 = (CH_3)_2NH$.

Кинетические уравнения скоростей стадий определяются согласно закону действующих масс и имеют вид:

$$\omega_1 = k_1 x_1 x_2, \quad \omega_2 = k_2 x_3 x_4,$$

где $x = (x_1, x_2, \dots, x_6)^T$ — вектор концентраций веществ (моль/л), k_1 , k_2 — кинетические константы реакции (л/(моль·ч)), рассчитываемые исходя из уравнения Аррениуса.

Кинетическая модель реакции аминотетилирования тиолов представляет собой систему дифференциальных уравнений:

$$\frac{dx_i}{dt} = \sum_{j=1}^2 \gamma_{ij} \omega_j, \quad i = \overline{1, 6}, \quad (2)$$

с начальными условиями

$$x_i(0) = x_i^0, \quad i = \overline{1, 6}, \quad (3)$$

где (γ_{ij}) — матрица стехиометрических коэффициентов веществ, t — время протекания реакции (ч).

Пусть управляющим параметром является температура в реакторе. Необходимо найти оптимальный температурный режим $T = T(t)$ химического процесса (1), представляемого системой дифференциальных уравнений (2) с начальными условиями (3) с целью обеспечения максимального выхода целевого продукта реакции

$$G(x, T) = x_5(t_{end}) \rightarrow \max.$$

Допустимые значения температуры задаются неравенством:

$$293K \leq T(t) \leq 333K.$$

Сформулированная задача решена с помощью генетического алгоритма со следующими параметрами: размер популяции — 60, максимальное количество популяций — 5000, количество точек разбиения временного интервала — 450. Время протекания реакции — 1 ч. Для решения системы

дифференциальных уравнений применен метод Рунге-Кутты четвертого порядка.

В результате расчета оптимального температурного режима реакции (1) установлено, что для обеспечения максимального выхода продукта реакции необходимо удерживать максимально допустимую температуру 333 К в течение всего времени протекания реакции (1 ч), а максимальный выход целевого продукта X_5 составляет 86 %. Полученный результат решения задачи оптимального управления на основе генетического алгоритма для схемы реакции (1) согласуется с тем, что для положительных значений энергий активации выход продукта всегда будет максимальным при максимальной температуре.

Литература

1. Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф. Поиск оптимального температурного режима химической реакции на основе генетического алгоритма // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия, **3** (2019), 14-23.
2. Новичкова А.В. Численный анализ реакционной способности олефинов и алюминийорганических соединений на основе кинетических моделей частных и общих реакций: дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Уфа, 2015. 110 с.