

С. И. Спивак, докт. физ.-мат. наук, профессор,

*Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Башкирский государственный университет, г. Уфа, semen.spivak@mail.ru*

*К. Ф. Коледина, канд. физ.-мат. наук, Уфимский государственный нефтяной технический
университет, Институт нефтехимии и катализа РАН, г. Уфа, koledinakamila@mail.ru*

*С. Н. Коледин, аспирант, Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Институт нефтехимии и катализа РАН, г. Уфа, koledinsrg@gmail.com*

*И. М. Губайдуллин, докт. физ.-мат. наук, доцент, Уфимский государственный нефтяной технический
университет, Институт нефтехимии и катализа РАН, г. Уфа, irekmars@mail.ru*

Информационно-вычислительная аналитическая система теоретической оптимизации каталитических процессов¹

Информационно-вычислительная аналитическая система включает в себя справочник кинетических исследований на основе распределенных баз данных и последовательно-параллельные алгоритмы обработки кинетических измерений. Разработан алгоритм проведения теоретической оптимизации каталитического процесса на основе экономических критериев. Разработана кинетическая модель каталитической реакции спиртов с диметилкарбонатом. Проведены расчеты и определены условия достижения экстремальных значений показателей.

Ключевые слова: информационно-вычислительная аналитическая система, теоретическая оптимизация, рентабельность, диметилкарбонат, кинетическая модель.

Введение

Целью моделирования любого процесса, в том числе и каталитического, является определение оптимальных условий его проведения. На первом этапе определения оптимального режима процесса необходимо провести теоретическую оптимизацию, т. е. найти лучшие значения управляющих параметров, не задаваясь возможностью их реализации [1; 2]. Следующий шаг оптимизации — выбор реактора, который позволит максимально соответствовать определенному ранее режиму.

¹ Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ № 15-07-01764 А «Оптимальное управление химическими реакциями металлокомплексного катализа».

Постановка задачи оптимизации предполагает наличие целевой функции, управляющих параметров и некоторых ограничений на управляющие параметры. Нередко критериями оптимизации в каталитических процессах являются условия максимального выхода целевого продукта или максимальной интенсивности процесса при заданном выходе целевого продукта [3]. Однако при такой постановке задачи возникают конкурирующие свойства процесса: «количество продукта — качество продукта», «количество продукта — расход сырья» и т. д. [4]. Тогда возможна постановка критерия оптимизации в терминах экономической эффективности [5].

Управляемым процессом в рассматриваемой задаче является химическая реакция,