

ОБРАТНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ В ЗАДАЧЕ АНАЛИЗА УСЛОВИЙ ИНИЦИАЦИИ СЛОЖНЫХ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

Хамисов О.В., Шаманский В.А., Козлова М.А.

Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН, Иркутск
khamisov@isem.irk.ru

Стационарное состояние газофазной реагирующей смеси в проточных химических реакторах, например, в камерах сгорания энергетических установок, зависит от многих внешних и внутренних факторов, определяющих оптимальные технологические режимы процесса. К основным таким факторам относятся: состав и температура исходных компонентов, скорость их поступления в реактор, распределение температур и давлений в реакционной зоне, газодинамика внутренних потоков, формирующая распределение концентраций реагирующих компонентов в пространстве реактора. Задача обратной оптимизации для таких систем заключается в определении внешних условий, обеспечивающих наилучший состав и стабильность реагирующего потока на выходе из реактора, в соответствии с заданными критериями оптимальности. Для условий стационара исследуемая модель химических превращений в газофазном потоке задана следующей системой нелинейных уравнений:

$$\sum_{j=1}^m \mathfrak{R}_{ij} \frac{(\xi_{1j} - \xi_{2j})^2}{(1 - f_j)^2} f_j \alpha_j + v_i = 0, \quad f_j = \frac{\xi_{1j}}{\xi_{2j}} e^{(\xi_{1j} - \xi_{2j}) \alpha_j \tau}, \quad (\xi_{1j} - \xi_{2j})^2 = b_j^2 - 4c_j^2, \quad (1)$$

$$b_j = \frac{x^\top P_j + K_j x^\top Q_j}{1 - K_j}, \quad c_j = \frac{\prod_{i=1}^n x_i^{p_{ij}} - K_j \prod_{i=1}^n x_i^{q_{ij}}}{1 - K_j}, \quad i = \overline{1, n}, j = \overline{1, m}, \quad (2)$$

m — количество элементарных реакций, n — количество реагирующих веществ, \mathfrak{R} — $n \times m$ целочисленная матрица химических реакций [1], $\alpha_j = k_j^- - k_j^+, k_j^\pm = A_j^\pm \left(\frac{T}{298}\right)^{n^\pm} e^{-\frac{E_j^\pm}{RT}}, k_j^\pm$ — кинетические коэффициенты прямых (+) и обратных (−) полуреакций, P — $n \times m$ матрица, составленная из неотрицательных элементов \mathfrak{R} , P_j — j -й столбец P , $Q = P - \mathfrak{R}$, $K_j = \frac{k_j^-}{k_j^+}$. Переменные системы (1)-(2): $(\xi_{1j}, \xi_{2j}, f_j, b_j, c_j, x_i)$. Параметры системы: $v = (v_1, \dots, v_n)$ — состав веществ на входе в реактор, τ — текущее время реакции, T — температура реактора в изотермическом процессе. Задано множество $X^* \subset \mathbb{R}^n$. Требуется определить такие значения параметров $v^* \in V \subset \mathbb{R}^m$, $\tau^* \in \mathbb{R}_+$, $T^* \in \mathbb{R}_+$, что при подстановке этих параметров в систему (1)-(2) получившаяся система имеет решение и вектор x^* , являющийся частью решения, принадлежит X^* или установить, что искомого набора параметров не существует. В работе предложена методика решения поставленной задачи, основанная на методах глобальной оптимизации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Козлова М.А., Шаманский В.А. Построение графа химических реакций для анализа реагирующих систем. // Информационные и математические технологии в науке и управлении, 2022, №4(28), с. 108-118.