УДК 004.42

Разработка алгоритма решения обратной кинетической задачи для моделирования химического реактора

Хмелёв А.П. (ИТМО)**, Безруких П.Д.** (ИТМО)**, Верхозин М.А.** (ИТМО)**,**
Гриценко Е. Ф. (НИ ТПУ)
Научный руководитель – кандидат технических наук, Щемелинин В.Л.
(ИТМО)

Введение. Моделирование химико-технологических процессов является одной из ключевых задач современной химической инженерии, так как позволяет оптимизировать технологические процессы и повысить эффективность производства. Для создания точных моделей необходимо учитывать множество факторов, включая физико-химические свойства веществ, условия протекания реакций и их кинетические параметры. Особое внимание уделяется решению обратных кинетических задач, которые направлены на определение констант скорости химических реакций на основе экспериментальных данных о составе сырья и продуктов [1]. Это имеет большое практическое значение для повышения точности моделирования и оптимизации работы реакторов. Современные требования к надежности и безопасности оборудования обусловливают необходимость разработки новых методов решения таких задач.

Основная часть. В рамках исследования проработан алгоритм решения обратной кинетической задачи, направленный на поиск константы скорости химической реакции. Алгоритм основывается на использовании данных о составе сырья и продуктов реактора, полученных либо экспериментально, либо из предварительных расчетов.
Решение задачи осуществляется в несколько этапов [2, 3]:

1. Подготовка входных данных: анализируются начальные условия, такие как состав исходного сырья, температура, давление и другие параметры, влияющие на протекание реакции;
2. Математическое моделирование: составление системы химических превращений групп компонентов и использование уравнений химической кинетики для построения математической модели идеального реактора;
3. Оптимизация параметров: с помощью численных методов проводится подбор констант скорости реакции таким образом, чтобы модель максимально точно соответствовала экспериментальным данным о продуктах реакции;
4. Проверка адекватности: результаты моделирования сравниваются с реальными данными для оценки точности алгоритма;
5. Алгоритм будет интегрирован в программное обеспечение для моделирования химических реакторов, что позволит пользователям автоматизировать процесс определения кинетических параметров и повысить точность прогнозирования характеристик процессов.

Выводы. Разработанный алгоритм решения обратной кинетической задачи представляет собой эффективный инструмент для определения констант скорости химических реакций на основе данных о составе сырья и продуктов реактора. Интеграция алгоритма в программное обеспечение для моделирования реакторов обеспечит более точное прогнозирование характеристик процессов и возможность их оптимизации. Полученные результаты могут быть использованы для совершенствования существующих технологий и разработки новых производственных процессов.

Список использованных источников:

1. Исмагилова А.С., Спивак С.И. Обратные задачи химической кинетики // Saarbrucken: Lap Lambert Academic Publishing. – 2013. – 118 с.

2. Кольцов Н.И. Решение обратной задачи химической кинетики с применением кубических сплайнов // Изв. вузов. Химия и хим. технология. – 2020. – Т. 63. Вып. 7 – С. 61–66.

3. Кольцов Н.И. Решение обратной задачи химической кинетики для закрытого неизотермического реактора // Изв. вузов. Химия и хим. технология. – 2022. – Т. 65. Вып. 2 – С. 111–119.