

## ПОШУК ПАРАМЕТРІВ КІНЕТИЧНОГО РІВНЯННЯ ПРОЦЕСУ КОНВЕРСІЇ ОКСИДУ ВУГЛЕЦЮ

Нога В.В., Гужва В.О., Мірошніченко І.О.

*Національний технічний університет*

*«Харківський політехнічний інститут», м. Харків*

Конверсія оксиду вуглецю(КОВ) – це складний технологічний процес, який є однією із стадій виробництва аміаку. Враховуючи об'єми його виробництва – близько 6 млн. т. на рік, оптимізація процесу може дати значний економічний ефект. Наприкінці 2012 року було розроблене нове, теоретично та експериментально обґрунтоване кінетичне рівняння(КР) реакції КОВ. Воно дозволяє провести аналіз впливу технологічних факторів на швидкість реакції та визначити необхідний об'єм каталізатора для заданої продуктивності реактора.

Для ідентифікації параметрів КР були проведені експерименти з різними співвідношеннями водяної пари до сухого газу( $N$ ), з різним часом знаходження суміші на шарі каталізатора( $\tau$ ) та при різних температурах( $T$ ). Пошук параметрів КР проходить у два етапи. На першому етапі розраховується швидкість протікання реакцій. Для кожної групи ( $N, T$ ) маємо ряд точок залежності зміни парціального тиску( $P$ ) від часу( $\tau$ ). Виходячи із фізичного змісту процесу, описуємо ці точки експоненціальною та дробно-раціональною моделями. Для пошуку коефіцієнтів використовуємо метод багатомірної оптимізації Хука-Дживса. Знаючи коефіцієнти моделей, беремо похідну та розраховуємо швидкість протікання реакції.

На другому етапі проходить пошук оптимальних параметрів КР процесу КОВ. Для кожної моделі (експоненціальної та дробно-раціональної) вираховуємо середню похибку. Для пошуку параметрів обираємо модель з меншою похибкою. Ідентифікація параметрів проходить шляхом мінімізації функції суми квадратів нев'язок модельної швидкості протікання реакцій та швидкості реакцій, вирахованих за кінетичним рівнянням. Кожна з невідомих КР знаходиться в певних допустимих межах. Тому для розв'язання даної задачі використовувався модифікований метод Хука-Дживса (з урахуванням обмежень). Окрім того застосовувався метод комплексів(метод Бокса). Адекватність КР з оптимальними параметрами визначали за результатами одно- та багатофакторним експериментами.

### **Література:**

1. Хіммельблау Д. Прикладне нелінійне програмування / Д. Хіммельблау – М.: Мир, 1974. – 512 с.
2. Базара М. Нелінійне програмування / М. Базара, К. Шетті – М.: Мир, 1982. – 589 с.
3. Таха Х. Введення в дослідження операцій / Х. Таха – М.: Мир, 1985. – 380 с.