УДК 519.876.5

ВЛИЯНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НА ОПТИМАЛЬНОЕ ТЕМПЕРАТУРНОЕ УПРАВЛЕНИЕ ПРОЦЕССОМ ПЕРЕЭТЕРИФИКАЦИИ

А. А. АКИМОВ, В. А. СПАСКОВ
МИРЭА – Российский технологический университет
Москва, Россия

Процесс получения биодизеля переэтерификацией растительных масел характеризуется существенной зависимостью скорости химических превращений от температуры. В математических моделях эта зависимость обычно описывается уравнением Аррениуса. Значения его параметров определяются по экспериментальным данным и могут изменяться в зависимости от состава сырья и условий проведения процесса. Поэтому кинетическая неопределённость способна влиять не только на прогнозируемый выход целевого продукта, но и на рациональный закон управления [1].

В работе исследуется влияние параметров уравнения Аррениуса на структуру оптимального температурного профиля периодического процесса переэтерификации. Для каждого рассматриваемого варианта задача оптимального управления решается повторно. Рассматривается зависимость

$$\theta \to T^*(t),$$

где θ – вектор кинетических параметров; $T^*(t)$ – найденное температурное управление.

Математическая модель включает три последовательные обратимые стадии превращения триглицеридов (*TG*) в диглицериды (*DG*), моноглицериды (*MG*) и глицерин (*GL*) с образованием метиловых эфиров (*E*). Температурная зависимость шести констант скоростей задаётся выражением

$$k_i(T) = A_i \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right), \; i = 1, \ldots, 6,$$

где A_i – предэкспоненциальный множитель; E_i – энергия активации; R – универсальная газовая постоянная.

Продолжительность процесса принимается равной 100 мин. Температурный профиль задаётся кусочно-линейной функцией с узлами через 20 мин. Начальная температура составляет 320,6 К, допустимый диапазон температуры – от 315 до 335,01 К. В качестве показателя результата используется нормированный выход метиловых эфиров [2]:

$$Y = \frac{C_E(t_f)}{3C_{TG,0}}.$$

При поиске управления учитываются выход продукта и нормированная температурная нагрузка; используется малое штрафное слагаемое, ограничивающее резкие изменения наклона температурного профиля. Поиск значений узловых температур выполняется методом роя частиц.

Для оценки влияния кинетической неопределённости рассмотрен параметр прямой реакции второй стадии k_3. В номинальном варианте принимаются $A_3 = 5{,}88 \cdot 10^{12}$ л/(моль·мин) и $E_3 = 19{,}86$ ккал/моль. Отдельно исследуются изменения A_3 на ±10 % и E_3 на ±3 %. Для каждого варианта оптимизация температурного профиля выполняется заново при неизменных технологических ограничениях. Изменение структуры управления оценивается величиной

$$D_T = \sqrt{\frac{1}{5}\Sigma_{j=1}^{5}\left(T_j^* - T_{j,0}^*\right)^2}.$$

Табл. 1. Влияние кинетических параметров на температурное управление

Вариант	Узловая температура при t = 20; 40; 60; 80; 100 мин, К	Y, %	D_T, К
Номинальный	319,81; 320,98; 325,60; 332,79; 335,01	84,58	0
A_3 − 10 %	319,93; 321,21; 326,00; 333,22; 335,01	83,82	0,26
A_3 + 10 %	319,72; 320,78; 325,26; 332,41; 335,01	85,25	0,23
E_3 − 3 %	319,46; 319,73; 322,50; 328,62; 335,01	90,15	2,19
E_3 + 3 %	321,79; 324,45; 329,76; 335,01; 335,01	77,39	2,52

Полученные результаты показывают различный характер влияния параметров A_3 и E_3. Изменение предэкспоненциального множителя на ±10 % приводит преимущественно к изменению выхода продукта. Среднеквадратичное изменение узловых температур не превышает 0,26 К, поэтому структура температурного профиля практически сохраняется.

Для энергии активации наблюдается иная картина. Изменение E_3 на ±3 % приводит к D_T от 2,19 до 2,52 К, а максимальное изменение отдельных узловых температур превышает 4 К. При уменьшении E_3 повышение температуры смещается к более поздней части процесса. При увеличении E_3 более высокая температура становится целесообразной уже на промежуточных интервалах. Одновременно нормированный выход изменяется от 77,39 % до 90,15 %.

Таким образом, неопределённость кинетических параметров может приводить не только к изменению количественного результата процесса, но и к перестройке рационального закона управления. Для рассматриваемой стадии температурный профиль более чувствителен к изменению энергии активации, чем к изменению предэкспоненциального множителя. Полученный результат показывает целесообразность учитывать неопределённость кинетических параметров непосредственно при синтезе температурного управления, а не только при последующей оценке качества уже найденного режима.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 25-21-00741, https://rscf.ru/project/25-21-00741.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Benavides, P. T.** Studying various optimal control problems in biodiesel production in a batch reactor under uncertainty / P. T. Benavides, U. Diwekar // Fuel. – 2013. – Vol. 103. – P. 585–592.

2. **Noureddini, H**. Kinetics of transesterification of soybean oil / H. Noureddini, D. Zhu // Journal of the American Oil Chemists' Society. – 1997. – Vol. 74, № 11. – P. 1457–1463.