

УДК 51-73+519.62

Многофазные и многоуровневые математические модели и высокопроизводительные алгоритмы отечественных междисциплинарных программных комплексов нефтедобычи, нефтепереработки и нефтехимии*

Губайдуллин И. М.^{1,2}

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН¹,
Уфимский государственный нефтяной технический университет²

Аннотация: В статье представлены основные принципы математического моделирования химико-технологических процессов. Подобные модели базируются на уравнениях материального и теплового баланса и кинетических закономерностях химических реакций. Особый интерес представляют каталитические процессы, такие как риформинг, крекинг и изомеризация. В качестве примеров разработанных моделей рассматриваются модель тепломассопереноса в системе «сеть трещин - матрица» и модель нестационарного процесса окислительной регенерации. Отдельно выделено описание методов исследования сложных моделей – анализ кинетических моделей и анализ чувствительности.

Ключевые слова: математическое моделирование, численные методы, химическая кинетика, дифференциальные уравнения, обратная задача химической кинетики, анализ чувствительности параметров

Цифровизация процессов и аппаратов химической технологии требует разработки сложных высоко размерных многофазных и многоуровневых математических моделей. В промышленных установках нефтепереработки и нефтехимии одновременно происходят физические и химические процессы массо- и теплообмена между различными фазами. Особенно сложные процессы протекают в каталитических реакторах, где в порах зерна катализатора происходят гетерогенные химические процессы, и существенными становятся процессы массо- и теплопереноса по неподвижным, по движущимся и кипящим слоям катализатора. Например, в трех основных каталитических процессах получения товарного бензина таких, как риформинг, крекинг и изомеризация, количество участвующих в реакции веществ может достигать 3000, а количество химических стадий может доходить до 300 и выше. Математическое описание таких процессов с учётом химической кинетики, термодинамики, процессов диффузии и т. д. может представлять собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений или систему уравнений в частных производных эллиптического, параболического и гиперболического типа размерностью до 1000 уравнений. При этом порядки концентраций различных фаз могут меняться от 10^{-6} до 10^3 моль/л, а масштаб времени колеблется от 10^{-3} до 10^6 сек. Решать такие сложные математические модели возможно только с использованием теории анализа и хранения больших данных и технологии параллельных вычислений, т. е. суперкомпьютеров.

В докладе приведены примеры успешного применения систем дифференциальных урав-

*Работа выполнена по теме «Разработка новых теоретических подходов и программного обеспечения для моделирования сложных химических процессов и поиска соединений с заданными физико-химическими свойствами» (Регистрационный номер: АААА-А19-119022290011-6)

нений (обыкновенных и в частных производных) для математического моделирования в нефтегазовой отрасли, начиная с добычи нефтепродуктов и заканчивая сложными процессами нефтехимии. Разработка запасов углеводородов сложных геолого-геофизических условий становится насущной необходимостью, ведь к ним относится значительная часть еще не открытых и не введенных в эксплуатацию месторождений. На сегодняшний день до 48% запасов нефти и до 30% газа сосредоточено в карбонатных коллекторах, которые мало изучены по сравнению с обычным песчаником в терригенных пластах. Фильтрация жидкости в карбонатных коллекторах отличается от массопереноса в терригенных. Они подчиняются различным законам за счет появления «двойной среды» – каркаса (матрицы) и системы трещин. Для рациональной разработки нефтяных и газовых залежей важным является наличие качественной информации о фильтрационно-емкостных характеристиках коллектора, что напрямую связано с изучением особенностей фильтрации жидкостей в пластах. Это предполагает развитие существующих и разработку новых математических моделей, позволяющих моделировать процесс массопереноса во время гидродинамических исследований при различных геологических условиях, создание программного комплекса для моделирования двухфазной фильтрации в коллекторе трещиновато-порового типа.

Группой нашей школы НОСш_АЛМА-Уфа, возглавляемой Юлией Бобренёвой, разработана математическая модель теплопереноса в системе «сеть трещин - матрица», описанная в виде дифференциальных уравнений второго порядка [1–3]. В основе математического описания процессов фильтрации лежат двухфазные уравнения фильтрации жидкости в трещиновато-поровых коллекторах, записанные в дивергентной форме:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial (\varphi^f \rho_0 S_0^f)}{\partial t} + \nabla (\rho_0 U_0^f) + q_0^f = \rho_0 q_j, \\
 & \frac{\partial (\varphi^f \rho_w S_w^f)}{\partial t} + \nabla (\rho_w U_w^f) + q_w^f = \rho_w q_j, \\
 & \frac{\partial (\varphi^m \rho_0 S_0^m)}{\partial t} + q_0^m = \rho_0 q_j, \\
 & \frac{\partial (\varphi^m \rho_w S_w^m)}{\partial t} + q_w^m = \rho_w q_j, \\
 & \frac{\partial (S_w^f \varphi^f \rho_w \varepsilon_w)}{\partial t} + \frac{\partial (S_0^f \varphi^f \rho_0 \varepsilon_0)}{\partial t} + \frac{\partial (S_w^m \varphi^m \rho_w \varepsilon_w)}{\partial t} + \frac{\partial (S_0^m \varphi^m \rho_0 \varepsilon_0)}{\partial t} + \\
 & + \frac{\partial}{\partial t} \left[(1 - \varphi^f - \varphi^m) \rho_s \varepsilon_s \right] + \nabla (\rho_w U_w^f \varepsilon_w + \rho_0 U_0^f \varepsilon_0 + P^f (U_w^f + U_0^f)) + \nabla W = q_\varepsilon.
 \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь s – скелет, ε_i – внутренняя энергия, ρ_s – плотность скелета, q_ε – источник энергии, $\alpha = f, m$, где f – система трещин, m – система матриц, $i = o, w$, где o – нефть, w – вода, P^f – пластовое давление в сети трещин (МПа), P^m – пластовое давление в матрице (МПа), φ^f – пористость в системе трещин, φ^m – пористость в матрице, ρ_o – плотность нефти (г/м^3), ρ_w – плотность воды (г/м^3), S_i^f – насыщенность нефти/воды в системе трещин, S_i^m – насыщенность нефти/воды в матрице, U_i^f – скорость течения нефти/воды, q_j – дебит жидкости ($\text{м}^3/\text{сут}$), q_i^α – функция перетока между матрицей и трещинами; предполагается отсутствие течения в матрице.

Получившаяся система (1) без начальных и граничных условий является сложной системой уравнений математической физики смешанного типа. Данная система решается методом конечных разностей, но это влечет за собой ряд трудностей, которые связаны с большим количеством переменных и отсутствием важных свойств матрицы, таких как самосопряженность и симметричность, характерных только для пьезопроводных процессов. Для решения данной проблемы предлагается провести полное расщепление по физическим процессам.

Большое количество задач математического моделирования связано с каталитическими процессами нефтепереработки. С каждым годом увеличиваются требования к качеству продуктов нефтепереработки и многократно возрастают экологические ограничения по элементному составу [4]. Один из основных продуктов нефтепереработки – товарный бензин (АИ-98, АИ-95, АИ-92 – экологический класс Евро-5 и Евро-6), реализуемый с автозаправочных станций, представляет собой сложную смесь углеводородов. От состава бензина зависят все эксплуатационные свойства товарных бензинов, в том числе и октановое число, определяющее марку товарного бензина, а следовательно, и его цену. Получение товарного бензина, соответствующего всем показателям качества, невозможно с применением одной технологии, поэтому на нефтеперерабатывающих заводах (НПЗ) используют несколько технологий (от 3 до 6) для получения компонентов бензина, которые на последней стадии подвергаются смешению. Таким образом, необходимы надежные современные методы исследования, которые позволяют определять не только точный состав продуктов нефтепереработки, но и управлять концентрациями компонентов в любой момент времени во время химических превращений. Такие задачи могут быть решены только с помощью кинетических моделей. Таким образом, от подробного понимания стадий химических превращений зависит, в конечном итоге, получение качественных продуктов нефтепереработки.

Динамика концентраций веществ в ходе реакции описывается системой обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (СОНДУ). Вид математической модели зависит от условий проведения реакций. Рассмотрим некоторые из них.

Математическое описание гомогенной (однофазной) изотермической (при постоянной температуре) нестационарной (по концентрациям веществ) реакции, протекающей без изменения объема реакционной смеси в закрытой системе по закону действующих масс имеет следующий вид:

$$\frac{dy_i}{dt} = \Phi_K \sum_{j=1}^J \nu_{ij} \omega_j, \quad i = 1, \dots, I; \quad (2)$$

$$\frac{dy_i}{d\tau} = \sum_{j=1}^J \nu_{ij} \omega_j, \quad i = 1, \dots, I; \quad (3)$$

$$\omega_j = k_j \cdot \prod_{i=1}^I (y_i)^{\alpha_{ij}} - k_{-j} \cdot \prod_{i=1}^I (y_i)^{\beta_{ij}};$$

$$k_j = k_j^0 \cdot \exp\left(-\frac{E_j^+}{RT}\right); k_{-j} = k_{-j}^0 \cdot \exp\left(-\frac{E_j^-}{RT}\right); \quad (4)$$

начальные условия: при $t = 0$ $y_i(0) = y_i^0$; при $\tau = 0$ $y_i(0) = y_i^0$; $t, \tau \in [0, t^*]$.

Здесь y_i – концентрации реагентов реакции, моль/л или доли; t – время, мин; τ – условное время контакта реакционной смеси с катализатором, кг·мин/моль или кг кат.; Φ_K определяет количество катализатора в реакции, моль/л или моль/кг; J – количество стадий; I – количество веществ; ν_{ij} – стехиометрическая матрица; ω_j – скорость j -ой стадии, 1/мин или моль/(кг·мин); k_j, k_{-j} – константы скоростей стадий (приведенные), 1/мин; α_{ij} – отрицательные элементы матрицы ν_{ij} , β_{ij} – положительные элементы ν_{ij} , k_j^0, k_{-j}^0 – предэкспоненциальные множители, 1/мин; E_j^+, E_j^- – энергии активации прямой и обратной реакций, ккал/моль; R – газовая постоянная, 2 кал/(моль·К); T – температура, К, t^* – продолжительность реакции, мин.

Система (2)-(4) определяет изменение концентраций реагентов для периодического (2) или непрерывного (3) процесса. В случае периодического процесса множитель Φ_K определяет количество катализатора в реакции. В случае непрерывного процесса учет взаимодействия с катализатором определяется через время контакта τ . Модель (2)-(4) предполагает допущение выполнения уравнения Аррениуса для неэлементарных стадий.

При исследовании гомогенных изотермических процессов достаточно использовать ма-

тематическое описание (2)-(4). Однако, для каталитических реакций, протекающих с изменением температуры необходим учет термодинамических параметров:

$$\frac{dT}{d\tau} = - \frac{\sum_{i=1}^I \frac{dy_i}{d\tau} \cdot \Delta H_i(T)}{\sum_{i=1}^I y_i \cdot C_{pi}(T)}; \quad T(0) = T^0; \quad (5)$$

$$\Delta H_i(T) = \Delta H_i(298) + \int_{298}^T C_{pi}(T) dT; \quad C_{pi}(T) = a_i + b_i T + c_i T^2 + d_i T^3 + e_i T^4;$$

где $\Delta H_i(T)$ – энтальпия образования i -го компонента при температуре T , Дж/моль; $C_{pi}(T)$ – удельная теплоемкость i -го компонента при температуре T , Дж/(моль·К); a_i, b_i, c_i, d_i, e_i – коэффициенты температурной зависимости теплоемкости i -го компонента.

Химические системы часто характеризуются изменением объема реакционной смеси, т. е. для отдельных стадий возможны увеличения или уменьшения количества молей. Мольный расход реакционной смеси формируется из мольных расходов компонентов. Уравнение, учитывающее изменение количества молей реакционной смеси Q (моль/мин), имеет вид:

$$\frac{dQ}{d\tau} = \sum_{i=1}^I \frac{dy_i}{d\tau}; \quad Q(0) = Q^0; \quad (6)$$

$$\omega_j = k_j \cdot \prod_{i=1}^I \left(\frac{y_i}{Q}\right)^{|\alpha_{ij}|} - k_{-j} \cdot \prod_{i=1}^I \left(\frac{y_i}{Q}\right)^{\beta_{ij}}.$$

В (6) описывается изменение мольного расхода смеси. В качестве концентраций используются мольные доли, которые представлены в уравнении изменения скоростей стадий отношением мольного расхода компонента к мольному расходу смеси, благодаря чему система учитывает разбавление или концентрирование всех компонентов в каждый момент времени.

При создании моделей сложных гетерогенных каталитических реакций использование кинетических уравнений в рамках закона действующих масс уже не позволяет адекватно описывать качественные и количественные закономерности протекания процесса. Необходимо использовать более сложные кинетические уравнения, например, зависимости Ленгмюра-Хиншельвуда, учитывающие адсорбцию компонентов на поверхности катализатора.

Принимается, что в гетерогенном катализе компоненты адсорбируются на поверхности катализатора и приходят с этой поверхностью в состояние теплового равновесия. Такое состояние называется хемосорбированным. По окончании реакции происходит десорбция образованных продуктов реакции. В уравнение изменения скоростей стадий (4) из СОНДУ (2) вводится учет доли поверхности катализатора, занятой реагентами:

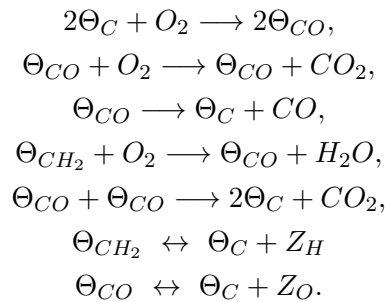
$$\omega_j = k_j \cdot \prod_{i=1}^I (y_i)^{|\alpha_{ij}|} \cdot \prod_{i=1}^I (\Theta_i)^{|\alpha_{ij}|} - k_{-j} \cdot \prod_{i=1}^I (y_i)^{\beta_{ij}} \cdot \prod_{i=1}^I (\Theta_i)^{\beta_{ij}}; \quad (7)$$

$$\Theta^* = 1 - \sum_{i=1}^I \Theta_i; \quad \Theta_i = \Theta_i(y) = \frac{b_i \cdot y_i}{1 + \sum_{i=1}^I b_i \cdot y_i}; \quad \Theta^*(0) = 1; \quad \Theta_i(0) = 0.$$

Здесь Θ_i – доля поверхности катализатора, занятая i -м компонентом; Θ^* – свободная доля поверхности катализатора в любой момент времени; b_i – коэффициент адсорбции i -го вещества, л/моль.

Математическое описание гетерогенной нестационарной реакции на основе механизма Ленгмюра-Хиншельвуда имеет вид (2), (7). Модель (2), (7) предполагает допущение о равномерности распределения активных центров на поверхности катализатора с равномерной активностью.

Примером чёткой двухфазной модели является математическая модель нестационарного процесса окислительной регенерации, сложные химические стадии которой имеют следующий вид [5, 6]:



Здесь Θ_C – свободная углеродная поверхность, Θ_{CO} – кислород-углеродный комплекс, Θ_{CH_2} – водород-углеродный комплекс в составе коксовых отложений; O_2 – кислород, содержащийся в реакционной смеси; CO_2 – углекислый газ; CO – угарный газ; H_2O – водяной пар; Z_H и Z_O – водород и кислород, образующиеся вследствие разрушения кислород-углеродного и водород-углеродного комплексов соответственно.

В таблице приведены скорости элементарных стадий и численные значения констант скоростей, рассчитанные для температуры 793,15 К:

Скорость стадии	Константа скорости, c^{-1}
$\omega_1 = k_1(T) \Theta_3^2 x_1$	0.112
$\omega_2 = k_2(T) \Theta_2 x_1$	0.563
$\omega_3 = k_3(T) \Theta_2$	0.22
$\omega_4 = k_4(T) \Theta_1 x_1$	0.315
$\omega_5 = k_5(T) \Theta_2^2$	1.890
$\omega_6 = k_6(T) \frac{\rho_C}{R_C} (\Theta_1^* - z_1)$	5.923
$\omega_7 = k_7(T) \frac{\rho_C}{R_C} (\Theta_2^* - z_2)$	1.890

Здесь Θ_1 , Θ_2 и Θ_3 соответствуют долям Θ_{CH_2} , Θ_{CO} и Θ_C в составе коксовых отложений; x_1 – концентрация кислорода в реакционной смеси, мольные доли; z_1 и z_2 – массовые доли Z_H и Z_O ; ρ_C – плотность кокса, $г/м^3$; R_C – средний радиус коксовых гранул, м; k_i , $i = \overline{1, 7}$ – константы скоростей стадий реакции, размерность k_i , $i = \overline{1, 5}$ – $1/с$, $i = \overline{6, 7}$ – $м^2/с$.

Математическая модель реакции имеет следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dq_c}{dt} = -M_C S_k (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5), \\ \frac{dz_1}{dt} = \frac{3k_6 \rho_C}{R_C} \left(\frac{\Theta_1}{6} - z_1 \right) + z_1 \frac{M_C S_k}{q_C} (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5), \\ \frac{dz_2}{dt} = \frac{3k_7 \rho_C}{R_C} \left(\frac{4\Theta_2}{3} - z_2 \right) + z_2 \frac{M_C S_k}{q_C} (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5), \\ \frac{dx_1}{dt} = -\frac{\gamma_k S_k}{c_0} (\omega_1 + \omega_2 + \omega_4) \\ \frac{dx_2}{dt} = \frac{\gamma_k S_k}{c_0} (\omega_2 + \omega_5) \\ \frac{dx_3}{dt} = \frac{c_0}{\gamma_k S_k} \omega_3 \\ \frac{dx_4}{dt} = \frac{c_0}{\gamma_k S_k} \omega_4 \end{array} \right. , \quad (8)$$

$$q_C(0) = q_C^0, \quad z_1(0) = z_1^0, \quad z_2(0) = 0, \quad x_1(0) = x_1^0, \quad x_2(0) = 0, \quad x_3(0) = 0, \quad x_4(0) = 0. \quad (9)$$

Математическое описание задач химической кинетики (2)-(7) представляет собой систему обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений с начальными данными, т. е. задачу Коши. Быстрые и медленные реакции определяют трудности при численном решении прямой кинетической задачи.

Для точного решения по быстрым переменным необходимо выбирать шаг интегрирования. Он должен быть значительно меньше, чем полное время протекания процесса, определяемое по медленным переменным. Прямые задачи химической кинетики (2)-(7) преимущественно являются жесткими и требуют применения специфических численных методов.

Таким образом, задачи химической кинетики с математической точки зрения сводятся к задаче решения и исследования систем нелинейных дифференциальных уравнений первого порядка с коэффициентами, роль которых играют константы скоростей реакции. В общем виде система уравнений химической кинетики имеет вид [9]:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = f(\bar{x}, \bar{k}), \quad (10)$$

с начальными условиями

$$\bar{x}(0) = \bar{x}_0. \quad (11)$$

Здесь $\bar{k} = (k_1, \dots, k_m)$ – вектор параметров, в качестве которых могут выступать, например, константы скорости элементарных реакций, $\bar{x} = (x_1, \dots, x_n)$, $\bar{x}_0 = (x_{10}, \dots, x_{n0})$ – вектор текущих и начальных концентраций, $f = (f_1, \dots, f_n)$ – функция кинетических зависимостей, которая строится в соответствии с принятым механизмом химических превращений, t – время проведения реакции.

При изучении динамических процессов вида (10) возникает вопрос неединственности набора параметров \bar{k} удовлетворяющего имеющимся экспериментальным данным. С другой стороны, зачастую по измеренным данным невозможно определить набор параметров \bar{k} . Нередко в лабораторных исследованиях проведение экспериментов по получению данных \bar{x} является либо финансово-затратной, либо невозможной процедурой.

Задача определения параметров модели по экспериментальной информации называется обратной задачей [7, 8]. Но прежде чем решать обратную задачу, необходимо найти условия корректности задачи (существование, единственность и/или устойчивость решения). Анализ идентифицируемости позволяет выделить условия корректности обратной задачи. Разработано множество методов структурной и параметрической идентифицируемости модели, большинство из них основаны на анализе чувствительности модели [7].

Анализ чувствительности [10, 11] для оценки идентифицируемости неизвестных параметров модели (10) используется до построения алгоритмов численного решения задач идентификации параметров. Исследование чувствительности для математической модели проводится относительно некоторых номинальных параметров, значения которых берутся из литературных источников или доступной статистической информации.

Коэффициенты чувствительности для переменной $x_i(t)$ по параметру k_j определяются как предел отношения

$$s_{ij} = \frac{\partial x_i(t)}{\partial k_j}. \quad (12)$$

Уравнения для вычисления s_{ij} получим с помощью частного дифференцирования обеих частей системы уравнения (10) и начальных условий (11) по параметру k_j

$$\frac{ds_{ij}}{dt} = \sum_{h=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_h} s_{hj} + \frac{\partial f_i}{\partial k_j}. \quad (13)$$

Здесь $\frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{x}}$ – матрица Якоби системы ОДУ, а $\frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{k}}$ – производная правой части по рассматриваемым параметрам.

В качестве начальных условий для этой системы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами имеем

$$\frac{\partial x_i}{\partial k_j}(0) = 0. \quad (14)$$

Вычисление функций чувствительности для всего комплекса параметров системы (10) сводится к совместному интегрированию уравнений вида (13) для каждого параметра k_j ($j = 1, \dots, m$).

Таким образом, в работе приведены примеры математических моделей в виде нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных. Отмечено, что в зависимости от условия проведения нефтегазовых разработок и режимов ведения каталитических процессов вид дифференциальных уравнений в математических моделях различен. Кроме того, в настоящее время актуальным вопросом остается развитие качественных методов исследования дифференциальных уравнений для оптимизации промышленных технологических процессов.

Литература

1. Мазитов А.А., Бобренёва Ю.О., Губайдуллин И.М. Математическое моделирование нестационарного течения многофазного потока в пористой среде // В сборнике: Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. Сборник материалов IX Международной научной молодежной школы-семинара имени Е.В. Воскресенского. Редколлегия: В.Ф. Тишкин (отв. ред.) [и др.]. 2020. С. 94-95.
2. Смирнов Д.Д., Бобренёва Ю.О., Мазитов А.А., Марченко М.А., Губайдуллин И.М., Черных И.Г. Параллельный алгоритм численного метода моделирования массопереноса в трещиновато-поровом коллекторе на суперкомпьютере // В сборнике: Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2020). Короткие статьи и описания плакатов. 2020. С. 255-264.
3. Бобренева Ю.О., Рагимли П.И.К., Подрыга В.О., Бажитова С.С., Бакир А.Э., Абу-Наб А.К. Об одном методе численного моделирования двухфазной жидкой системы в коллекторе трещиновато-порового типа // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2021. № 38. С. 1-20.

4. Капустин В.М. Технология производства автомобильных бензинов. М.: Химия, 2015.
5. Масагутов Р.М., Морозов Б.Ф., Кутепов Б.И. Регенерация катализаторов в нефтепереработке и нефтехимии. М.: Химия, 1987. 144 с.
6. Губайдуллин И.М., Язовцева О.С. Исследование усредненной модели окислительной регенерации закоксованного катализатора // Компьютерные исследования и моделирование. 2021. Т. 13, № 1. С. 149-161. DOI 10.20537/2076-7633-2021-13-1-149-161.
7. Спивак С.И., Губайдуллин И.М., Вайман Е.В. Обратные задачи химической кинетики. Уфа: РИО БашГУ, 2003. 110 с.
8. Губайдуллин И.М., Сайфуллина Л.В., Еникеев М.Р. Информационно-аналитическая система обратных задач химической кинетики. Уфа: БашГУ. 2003. 89 с.
9. Miao H., Xia X., Perelson A. S., We H. On Identifiability of nonlinear ode models and applications inviral dynamics. SIAM Rec. Soc. Ind. Appl. Math. 2011. Vol. 53, No. 1. 3–39.
10. Nurislamova L.F., Gubaydullin I.M. Mechanism reduction of chemical reaction based on sensitivity analysis: development and testing of some new procedure. Journal of Mathematical Chemistry, 2017. Vol. 55, Issue 9. 1779-1792.
11. Сафиуллина Л.Ф., Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М., Зайнуллин Р.З. Исследование математической модели каталитического риформинга бензина методами анализа чувствительности // Вычислительные методы и программирование. 2020. Т. 21, № 4. 440-451.

MSC2020 00A71

Multiphase and multilevel mathematical models and high-performance algorithms of domestic interdisciplinary software systems for oil production, oil refining and petrochemistry

I. M. Gubaydullin^{1,2}

Institute of Petrochemistry and Catalysis of the Russian Academy of Sciences¹,
Ufa State Petroleum Technological University²

Abstract: The article presents the basic principles of mathematical modeling of chemical-technological processes. Such models are based on the equations of material and heat balance and kinetic laws of chemical reactions. Special interest is in the catalytic processes such as reforming, cracking and isomerization. There are the model of heat and mass transfer in the «network of cracks - matrix» system and a model of a non-stationary process of oxidative regeneration as examples of the developed models. There are the description of methods for studying complex models: the analysis of kinetic models and the sensitivity analysis.

Keywords: mathematical modeling, numerical methods, chemical kinetics, differential equations, the inverse problem of chemical kinetics, the sensitivity analysis of parameters

References

1. A. A. Mazitov, Y. O. Bobreneva, I. M. Gubaydullin. Mathematical modeling of unsteady multiphase flow in a porous medium. Proceedings of the International Scientific Youth School-Seminar «Mathematical Modeling, Numerical Methods and Software complexes» named after E.V. Voskresensky (Saransk, October 8-11, 2020). Saransk: SVMO Publ, 2020. pp. 94-95. (In Russ.)
2. D. D. Smirnov, Yu. O. Bobreneva, A. A. Mazitov, M. A. Marchenko, I. M. Gubaidullin, I. G. Chernykh. Parallel algorithm of a numerical method for modeling of fluid flow processes in a fractured-porous reservoir on a supercomputer. In the collection: Parallel Computing Technologies (PaVT'2020). Short articles and poster descriptions. 2020. pp. 255-264. (In Russ.)
3. Yu. O. Bobreneva, P. I. Rahimly, V. O. Podryga, S. S. Bazhitova, A. E. Bakir, A. K. Abu-Nab. On one method of numerical modeling of a two-phase fluid system in a fractured-porous reservoir. Keldysh Institute preprints. 2021. No. 38, pp. 1-20. (In Russ.)
4. V. M. Kapustin. Tekhnologiya proizvodstva avtomobil'nykh benzinov ["Technology of automobile gasoline production"]. Moscow: Chemistry, 2015. (In Russ.)
5. R. M. Masagutov, B. F. Morozov, B. I. Kutepov. Regeneratsiya katalizatorov v neftepererabotke i neftekhimii ["Catalyst regeneration in oil refining and petrochemistry"]. Moscow: Chemistry, 1987. 144 p. (In Russ.)
6. I. M. Gubaydullin, O. S. Yazovtseva. Investigation of the averaged model of coked catalyst oxidative regeneration. Computer Research and Modeling, 2021, Vol. 13, No. 1. pp. 149-161. (In Russ.)

7. S. I. Spivak, I. M. Gubaydullin, E. V. Vajman. *Obratnye zadachi khimicheskoy kinetiki* ["Inverse problems of chemical kinetics"]. Ufa: RIO BashGU, 2003. 110 p. (In Russ.)
8. I. M. Gubaidullin, L. V. Saifullina, M. R. Enikeev. *Informatsionno-analiticheskaya sistema obratnykh zadach khimicheskoy kinetiki* ["Information-analytical system of inverse problems of chemical kinetics"]. Ufa: BashGU. 2003. 89 p. (In Russ.)
9. Miao H., Xia X., Perelson A. S., We H. On Identifiability of nonlinear ode models and applications inviral dynamics. *SIAM Rec. Soc. Ind. Appl. Math.* 2011. Vol. 53, No. 1. 3–39.
10. L. F. Nurislamova, I. M. Gubaydullin. Mechanism reduction of chemical reaction based on sensitivity analysis: development and testing of some new procedure. *Journal of Mathematical Chemistry*, 2017. Vol. 55, Issue 9. 1779-1792.
11. L. F. Safiullina, K. F. Koledina, I. M. Gubaydullin, R. Z. Zaynullin. Study of a mathematical model of gasoline catalytic reforming by sensitivity analysis methods. *Num. Meth. Prog.* Vol. 21, Issue 4. 2020. pp. 440–451. (In Russ.)