

УДК 004.942

Численный анализ жестких систем дифференциальных уравнений в химической кинетике*

Фасхутдинова Р. И.

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН

Объектом исследования является реакторный блок установки каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции, состоящий из каскада трех реакторов. Сырьем данной установки является гидроочищенная бензиновая фракция, в качестве катализатора процесса применяют бифункциональный катализатор отечественного производства марки СИ-2 [1]. На основе имеющихся исходных данных составлена схема химических превращений, учитывающая детальное образование побочных продуктов в ходе реакций гидрокрекинга. Схема разработана на основе решения обратной задачи химической кинетики с использованием численных методов решения жестких систем обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (СОНДУ) – математического описания изменения концентраций, участвующих в реакциях веществ (прямая задача).

При решении системы дифференциальных уравнений возникли трудности, связанные с неустойчивостью счета. Поэтому был проведен численный анализ прямой кинетической задачи на жесткость. Была построена матрица Якоби, для которой были рассчитаны собственные значения. В ходе исследования была установлена жесткость рассматриваемой СОНДУ на основе нескольких математических определений жесткости [2-4]. При решении обратных задач химической кинетики часто возникают ситуации, когда константы скоростей реакции принимают значения, отличные друг от друга на несколько порядков. Стандартные явные численные методы зачастую не справляются с интегрированием таких систем и в настоящее время остро стоит вопрос исследования методов, способных эффективно решать жесткие задачи. Поэтому в среде ПО MATLAB в ходе работы было произведено сравнение пяти методов ode, в числе которых были методы, зарекомендовавшие себя эффективными для решения жестких систем. Среди них неявные методы — одноитерационный метод Розенброка 2-го порядка точности и многошаговый метод переменного порядка.

Результаты проведенных вычислительных экспериментов на основе выбранных эффективных численных методов показали высокую адекватность. Данные промышленной установки были описаны с высокой точностью. Предложенная методика может быть опробована для решения других задач химической кинетики, для решения которых требовались большие вычислительные ресурсы и раскрывает возможности для использования технологии параллельных вычислений при решении прямых и обратных задач при исследовании сложных механизмов промышленных технологических процессов [5-7].

Литература

1. Фасхутдинов А.Г., Ахметов И.В., Губайдуллин И.М., Мусина А.Е. Математическое моделирование процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции // Вестник Башкирского университета. 2018. Т. 23. № 3. С. 739-744.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ N 20-31-90094

2. Хайер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Наука, 1999. 685 с.
3. Тихонова М. В., Губайдуллин И. М., Спивак С. И. Численное решение прямой кинетической задачи методами Розенброка и Мишельсена для жестких систем дифференциальных уравнений // Журнал средневожского математического общества. 2010. Т. 12, № 2. С. 26–32.
4. Каханер Д., Моулер К., Нэш С. Численные методы и программное обеспечение. – М.: Мир, 1998. 575 с.
5. Nurislamova L.F., Gubaydullin I.M., Koledina K.F., Safin R.R. Kinetic model of the catalytic hydroalumination of olefins with organoaluminum compounds // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. 2016. Vol. 117. № 1. pp. 1-14.
6. Усков С.И., Еникеева Л.В., Потемкин Д.И., Беляев В.Д., Снытников П.В., Губайдуллин И.М., Кириллов В.А., Собянин В.А. Кинетика мягкого парового риформинга пропана в избытке метана на Ni-содержащем катализаторе // Катализ в промышленности. 2017. № 1. С. 11-17.
7. Линд Ю.Б., Губайдуллин И.М., Мулюков Р.А. Методология параллельных вычислений для решения задач химической кинетики и буровой технологии // Системы управления и информационные технологии. 2009. № 2 (36). С. 44-49.

MSC2020 49K15

Numerical analysis of stiff systems of differential equations in chemical kinetics

R. I. Faskhutdinova

Institute of Petrochemistry and Catalysis of the Russian Academy of Sciences