

Метод распараллеливания при моделировании детальных механизмов реакции гидроалюминирования олефинов

К.Ф. Коледина

В таблице 1 представлены схемы превращений реакции гидроалюминирования олефинов, на основании детальных (элементарных) стадий [1]. В схемах 1, 2, 3 присутствуют общие стадии. Очевидно, что константы скоростей для этих стадий должны быть сопоставимы. При определении параметров для одной схемы, необходимо учитывать, что общие константы должны подходить к остальным схемам. Для каждой частной реакции происходит разделение вычислительного процесса по температурам, то есть происходит параллельное решение обратных задач. Для каждой из температур происходит обработка нескольких экспериментов.

Таблица 1. Гипотетические схемы химических превращений реакций гидроалюминирования олефинов с АОС.

	СХЕМА № 1	СХЕМА № 2	СХЕМА № 3
ДИБАГ	$X_1 \leftrightarrow 2X_2$ $X_1 + X_5 \rightarrow X_2 + X_8$ $X_2 + X_5 \rightarrow X_8$	$X_1 + X_5 \rightarrow X_2 + X_8$ $X_1 + X_9 \rightarrow X_8 + X_{10}$ $2X_2 \leftrightarrow X_1$	$X_1 + X_5 \rightarrow X_2 + X_8$ $X_1 + X_9 \rightarrow X_8 + X_{10}$ $2X_2 \leftrightarrow X_1$ $X_2 + X_3 \rightarrow X_4 + X_5$
ТИБА	$X_1 \leftrightarrow 2X_2$ $X_1 + X_{14} \rightarrow X_2 + X_8 + X_{13}$ $X_2 + X_{14} \rightarrow X_8 + X_{13}$	$2X_2 \leftrightarrow X_1$ $X_2 + X_3 \rightarrow X_4 + X_5$ $X_2 + X_5 \leftrightarrow X_8$ $X_3 + X_8 \rightarrow X_4 + 2X_5$	$X_2 + X_3 \rightarrow X_4 + X_5$ $X_2 + X_5 \leftrightarrow X_8$ $X_3 + X_8 \rightarrow X_4 + 2X_5$ $X_4 + X_5 \rightarrow X_6 + X_7$
ДИБАХ	$X_1 \leftrightarrow 2X_2$ $X_1 + X_5 \rightarrow X_2 + X_8$ $X_2 + X_5 \rightarrow X_8$ $X_1 + X_9 \rightarrow X_8 + X_{10}$ $X_2 + X_9 \rightarrow X_5 + X_{10}$ $X_9 + X_{10} \rightarrow X_2 + X_{11} + X_{13}$	$X_4 + X_5 \rightarrow X_6 + X_7$ $X_5 + X_7 \rightarrow X_2$ $X_5 + X_{10} \leftrightarrow X_2 + X_9$ $X_5 + X_{15} \leftrightarrow X_{10}$ $X_7 + X_9 \rightarrow X_{10}$	$X_5 + X_7 \rightarrow X_2$ $X_5 + X_{10} \leftrightarrow X_2 + X_9$ $X_5 + X_{15} \leftrightarrow X_{10}$ $X_6 + X_{11} \leftrightarrow X_9 + X_{19}$ $X_7 + X_9 \rightarrow X_{10}$ $X_9 + X_{15} \leftrightarrow 2X_{11} + X_{18}$ $X_9 + X_{18} \rightarrow X_{10} + X_{13}$ $X_9 + X_{10} \rightarrow X_2 + X_{11} + X_{13}$

При обработке группы механизмов реакций возможно выявление одинаковых (общих) стадий. В связи с этим возникает необходимость синхронизации значений кинетических констант общих стадий, при обработке каждого из механизмов. Происходит вычисление кинетических констант общей стадий только для одного соединения и подстановка найденных значений в аналогичные стадии механизмов реакции других соединений. При этом подстановка может привести к получению некорректного результата, что выдвигает требование поиска констант, удовлетворяющих механизмам реакции всех соединений данной группы. После определения общих констант, начинается поиск остальных параметров для каждой схемы. В соответствии с изложенным выше алгоритмом была произведена декомпозиция реакции гидроалюминирования олефинов по АОС и выделенным стадиям. Найденны кинетические параметры для схемы 1 с АОС ТИБА. Полученные константы будут использованы при обработке остальных схем.

Литература

1. Parfenova L.V., Balaev A.V., Gubaidullin I.M., Pechatkina S.V., Abzalilova L.R., Spivak S.I., Khalilov L.M., Dzhemilev U.M. Kinetic Model of Olefins Hydroalumination by HAlBui2 and AlBui3 in Presence of Cp2ZrCl2 Catalyst// Int. J. Chem. Kinet.- 2007.- V.39.- No. 6.- P.333-339.