

Математическое и программное обеспечение решения обратных задач химической кинетики

С.И. Спивак^{1,2}, А.С. Исмагилова¹, А.А. Ахмеров¹

Башкирский государственный университет¹, Институт нефтехимии и катализа РАН

Огромное значение для современной химической кинетики имеет интенсивное развитие вычислительной техники, появление все более быстродействующих компьютеров. Это позволяет вести статистическую обработку больших массивов экспериментальных данных по кинетике химических превращений, использовать для нахождения кинетических параметров, характеризующих отдельные стадии превращений, сложные, требующие большого объема вычислительной работы процедуры минимизации функции отклонения, рассчитывать протекание процессов, описываемых системами большого числа дифференциальных и алгебраических уравнений.

При исследовании химических реакций для практики нужно знать не только возможность осуществления данной реакции, но и скорость её протекания. Ответ на этот вопрос дает химическая кинетика. Для получения кинетических закономерностей должны быть известны не только начальное и конечное состояние системы, но и путь, по которому протекает реакция, а он обычно заранее не известен. Зная эти закономерности, т.е. математическую модель изучаемой реакции и ее кинетические параметры, можно рассчитать ее скорость и оптимальные условия проведения в промышленном реакторе. Целью настоящей работы является разработка программы, позволяющей находить линейно независимые маршруты сложных химических реакций.

Входными данными для разработанной программы является количество реакций, общее количество участвующих веществ и количество промежуточных веществ, а также коэффициенты стехиометрической матрицы. Программа позволяет найти линейно независимые векторы-маршруты и соответствующие итоговые уравнения, нарисовать граф механизма реакции и подграфы, соответствующие найденным маршрутам, вывести матрицу инцидентности, с помощью которой осуществляется поиск маршрутов. Также программа позволяет сохранить исследуемый механизм реакции и открыть ранее исследованные механизмы, сохранить в отчет полученные результаты.

С помощью разработанной программы были исследованы механизмы некоторых известных реакций. Результаты полностью удовлетворяли поставленным целям, т.е. программа находила все линейно независимые маршруты для каждой реакции, выводила соответствующие этим маршрутам итоговые уравнения и подграфы механизма реакции.

Исходя из проделанной работы и полученных результатов, мы можем сделать вывод, что построенная на описанных в исследовании алгоритмах математическая модель анализа механизмов сложных химических реакций адекватна. Также мы убедились, что разработанная программа, основой которой является наша математическая модель задачи, выполняется корректно и может быть применена при поиске маршрутов реакций.

В дальнейшем планируется продолжение тестирования программы путем исследования новых механизмов химических реакций, а также применение технологий параллельного программирования для исследования сложных механизмов.