

Численное моделирование реакции циклоалюминирования олефинов и ацетиленов на основе кинетического эксперимента

Л.Р. Абзалилова, И.М. Губайдулин, Ю.С. Лаврентьева

Институт нефтехимии и катализа РАН

Численное моделирование реакции циклоалюминирования олефинов и ацетиленов [1] заключается в нахождении кинетических констант, вычислении концентраций веществ, а также определении скоростей стадий. Корректным описанием кинетики реакции является система дифференциальных уравнений, учитывающая изменение числа молей, проходящее в ходе реакции:

$$\frac{dN}{d\tau} = \sum v_{ij} w_j = F_N; \quad \frac{dX_i}{d\tau} = \frac{F_i - X_i F_N}{N}$$

где X_i – концентрации (мольные доли) веществ, участвующих в реакции; N – относительное изменение числа молей реакционной среды; v_{ij} – элементы стехиометрической матрицы; w_j – скорость j -ой стадии, 1/с; k_j^+ и k_j^- – приведенные константы скорости прямой и обратной реакции, соответственно, 1/с. Константы k_j^+ и k_j^- находятся в соответствии с законом действующих масс.

При решении прямой и обратной задач определения кинетических параметров реакции циклоалюминирования олефинов и ацетиленов распараллеливание вычислительного процесса быть осуществлено на четырех уровнях [2]:

- 1) распараллеливание численного метода решения прямой задачи;
- 2) использование внутреннего параллелизма задачи;
- 3) распараллеливание по экспериментальной базе;
- 4) распараллеливание численного метода решения обратной задачи.

Распараллеливание вычислительного процесса по экспериментальной базе для реакции циклоалюминирования олефинов представляет собой решение прямой и обратной кинетической задач параллельно для данных при разных температурах или по разным начальным концентрациям при одинаковых температурах.

Распараллеливание вычислительного процесса по экспериментальной базе осуществляется по принципу процессорной фермы (или стратегии «главный – подчиненные»).

Рассматриваемый процесс также обладает внутренним параллелизмом, который заключается в том, что общая схема реакции включает 9 протекающих параллельно стадий. При осуществлении вычислительного процесса решение обратной задачи осуществляется независимо для параллельно протекающих стадий, что позволяет существенно сократить время расчета.

Наконец, распараллеливание численного метода решения обратной задачи осуществляется на основе принципа геометрического параллелизма, который заключается в декомпозиции расчетной области по числу работающих процессов (процессоров многопроцессорной вычислительной системы). При этом область изменения кинетических параметров задается априорно.

На основе разработанных алгоритмов создан программный комплекс, реализующий с использованием технологии параллельных вычислений расчет кинетических параметров реакции циклоалюминирования олефинов (CYCLOAL). Программный комплекс написан на языке программирования C++ с технологией многопоточного программирования OpenMP.

Литература

1. Рамазанов И.Р., Кадикова Р.Н., Джемилев У.М. Реакция циклоалюминирования функционально-замещенных олефинов и ацетиленов // International symposium on advance science in organic chemistry. – Miskhor, Crimea. – 2010. – С.323
2. 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». – № 2(36), 2009. – С. 44-50.