Исследование кинетики химической реакции на основе метода анализа чувствительности

Л.Ф. Нурисламова[1], И.М. Губайдуллин[1], Н.М. Байназарова[2]

Институт нефтехимии и катализа РАН[1],
Башкирский государственный университет[2]

Важным этапом при моделировании химического процесса является проведение анализа чувствительности математической модели реакции к изменению параметров модели – констант скоростей отдельных стадий. С применением данного анализа была исследована кинетика реакции газофазного дегидрирования этана [1].

Исследование анализа чувствительности базируется на теории глобальных показателей чувствительности для изучения нелинейных математических явлений предложенной Соболем И.М. [2]. Чем большее значение имеет показатель чувствительности, тем более влиятельна данная переменная на изменение исследуемой функции. Цель данного анализа: исследовать и количественно оценить влияние отдельных переменных, выделить существенные и наименее влиятельные переменные [3].

В результате анализа чувствительности показано, что изменение констант скоростей стадий 1 (термический распад этана на 2 метильных радикала) и 12 меньше других влияет на изменение расчетных значений концентраций. В то же время вариация констант цикла продолжения цепи (стадии 3-5) и зарождения и гибели бирадикала этилена (стадии 13-15) оказывает влияние на все наблюдаемые концентрации компонентов смеси – этана, метана, этилена, водорода, ацетилена, пропилена. Для изучаемой схемы было проведено сокращение стадий и показана дальнейшая нередуцируемость схемы и адекватность для температурного диапазона 750-900 ^{0}C.

Предлагаемые алгоритмы вычисления глобальных показателей чувствительности, а также нахождение возможных значений констант скоростей стадий ориентированы на использование многопроцессорных вычислительных систем и кластерных архитектур. Параллелизм алгоритма реализуется через независимое вычисление значений целевой функции.

Все вычисления производились в Matlab версии R2010a. Для распараллеливания алгоритма между процессорами использовался цикл parfor. Цикл, в котором решалась прямая задача химической кинетики с сгенерированными значениями точек был распараллелен. Задача запускалась на компьютере со следующими характеристиками: AMD Phenom II X4 940, nVidia GeForce gts 450.

Литература

1 Snytnikov V.S., Mishchenko T.I., Snytnikov Vl.S., Malykhin S.E., Avdeev V.I., Parmon V.N. Autocatalytic gas-phase dehydrogenation of ethane // Research on Chemical Intermediates. 2012. No. 38. P. 1133–1147.

2 А. Сальтелли, И.М. Соболь. Анализ чувствительности нелинейных математических моделей: численные опыты // Математическое моделирование. 1995. Т. 7, № 11. С. 16-28.

3 Turanyi, T., Nagy, T., Zsely, I.Gy., Cserhati, M., Varga, T., Szabo, B.T., Sedyo, I., Kiss, P.T., Zempleni, A., Curran, H.J. Int J Chem Kinet. 2012. No 44. P. 284-302.