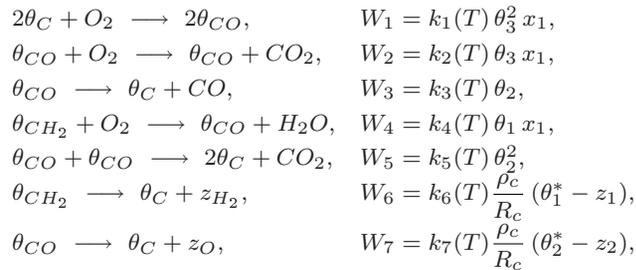


А. Д. Саитгалина, А. А. Юнусов, И. М. Губайдуллин, М. Р. Файзуллин (Уфа, БашГУ, ИНК РАН). Математическое моделирование процесса окислительной регенерации закоксованных катализаторов на кинетическом уровне с использованием GPGPU.

В работе [1] были определены кинетические параметры реакции окислительной регенерации цеолитсодержащих катализаторов каталитического крекинга. При этом решены следующие задачи: сконструировано математическое описание в виде нелинейной системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) для концентраций участвующих в реакции веществ; найдены численные значения кинетических параметров, описывающих экспериментальные данные.

В результате вычислительного эксперимента определена наиболее вероятная схема химических превращений и соответствующие им кинетические уравнения, которые имеют вид [2]:



где W_j — скорость j -й стадии ($j = 1, \dots, 7$), k_j — константа скорости j -й реакции.

Для данной схемы была решена обратная кинетическая задача. Система ОДУ решалась с помощью метода Рунге–Кутты четвертого порядка, на видеокarte ATI. Обратная задача также решалась на GPGPU. Полученные численные значения кинетических констант скоростей адекватно описывают эксперимент.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Губайдуллин И. М. Математическое моделирование динамических режимов окислительной регенерации катализаторов в аппаратах с неподвижным слоем. Дис. на соискание уч. ст. канд. физ.-матем. наук. Уфа, 1996, 109 с.
2. Спивак С. И., Губайдуллин И. М., Вайман Е. В. Обратные задачи химической кинетики. Уфа: РИО БашГУ, 2003, 110 с.