

Расчёт прямой кинетической задачи моделирования реакции селективного гидрирования ацетилена

С.А. Габитов^а, Н.М. Байназарова^б, К.Ф. Коледина^{а,б}, И.М. Губайдуллин^{а,б}

^а Уфимский государственный нефтяной технический университет, 450062, ул. Космонавтов, 1, Уфа, Россия

^б Институт нефтехимии и катализа РАН, 450075, пр. Октября, 141, Уфа, Россия

Аннотация

Одним из эффективных способов очистки олефиновой (этиленовой) фракции от примесей ацетилена является гидрирование ацетилена до этилена в присутствии катализатора. В качестве катализатора в данной работе рассматриваются кластеры золота. Исследования состава смеси во времени и селективности катализатора требуют решения прямой кинетической задачи, математически представляющей собой систему дифференциальных уравнений. Наличие в схеме реакции как быстро, так и медленно протекающих реакций обуславливает жесткость задачи, что приводит к увеличению объема вычислений. Следовательно, для решения необходимо подобрать такой неявный метод, который будет обладать хорошими свойствами устойчивости. Решение системы нелинейных алгебраических уравнений (СЛАУ) на каждом шаге выполняется методом Вегстейна, который сходится даже при плохих начальных приближениях.

Ключевые слова: этилен; кластеры золота; селективное гидрирование; гетерогенный катализ; жесткие системы; задача Коши; неявные методы решения ДУ

1. Введение

Этилен – одно из самых востребованных органических соединений в мире и является ценным сырьём для производства многих органических соединений.

Особый интерес вызывают каталитические системы на основе нанодисперсного золота.

Исследования состава смеси во времени и селективности катализатора требуют решения прямой кинетической задачи, математически представляющей собой систему дифференциальных уравнений. Наличие в схеме реакции как быстро, так и медленно протекающих реакций обуславливает жесткость задачи, что приводит к увеличению объема вычислений. Актуальной остается задача выбора оптимальных методов решения жестких задач химической кинетики. Она осложняется тем фактом, что метод с малой областью устойчивостью может решить систему лишь при очень малых значениях шага интегрирования, однако это ведёт к росту погрешности из-за машинного округления и делает этот метод совсем не пригодным для решения. Таким образом, выбранный метод должен обладать хорошими свойствами устойчивости.

Согласно механизму исследуемой реакции, на катализаторе протекают химические превращения веществ по трем независимым путям – образование и трансформация комплексов π -, σ - и μ -типа [1]. Данная особенность позволяет проводить расчёты для каждого пути и по каждому набору начальных данных отдельно (параллелизм по параметру), упрощая вычислительный эксперимент.

2. Математическая модель реакции селективного гидрирования ацетилена на кластере золота

На основании квантово-химических расчетов [2] была предложена схема протекания реакции, представленная в табл. 1.

Согласно предложенной схеме химических превращений (табл. 1) с использованием разработанной в лаборатории математической химии Института нефтехимии и катализа РАН информационно-аналитической системы обратных задач химической кинетики разработана математическая модель в виде системы обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (СОНДУ) (1) [3,4].

$$\begin{aligned} dx_1 / dt &= -w_1 - w_2 - w_3; \\ dx_2 / dt &= w_1 - w_6; \\ dx_3 / dt &= w_2 - w_8; \\ dx_4 / dt &= w_3 - w_{10}; \\ dx_5 / dt &= -w_4; \\ dx_6 / dt &= w_4 - w_5; \\ dx_7 / dt &= 2w_5 - w_6 - w_7 - w_8 - w_9 - w_{10} - w_{15} - w_{16} - w_{17} - w_{18} - w_{19} - w_{20}; \\ dx_8 / dt &= w_6 - w_7; \\ dx_9 / dt &= w_7 - w_{11} - w_{12} - w_{15}; \\ dx_{10} / dt &= w_8 - w_9 + w_{10}; \\ dx_{11} / dt &= w_9 - w_{13} - w_{14} - w_{18}; \\ dx_{12} / dt &= w_{11} + w_{13}; \\ dx_{13} / dt &= w_{12} - w_{17}; \\ dx_{14} / dt &= w_{14} - w_{20} - w_{23}; \\ dx_{15} / dt &= w_{15} - w_{16} + w_{17}; \\ dx_{16} / dt &= w_{16} - w_{21}; \end{aligned} \tag{1}$$

$$\begin{aligned}
dx_{17} / dt &= w_{18} - w_{19} + w_{20}; \\
dx_{18} / dt &= w_{19} - w_{22}; \\
dx_{19} / dt &= w_{21} + w_{22}; \\
dx_{20} / dt &= w_{23}; \\
dx_{21} / dt &= -w_1 - w_2 - w_3 - w_4 - w_5 + w_6 + w_7 + w_8 + w_9 + w_{10} + w_{11} + w_{13} + w_{15} - w_{16} + w_{17} + w_{18} \\
&\quad + w_{19} + w_{20} + w_{21} + w_{22};
\end{aligned}$$

где w_j – скорости отдельных стадий (моль/л·с) согласно закону действующих масс согласно схеме химических превращений (табл. 1);

Таблица 1. Схема химических превращений в исследуемой реакции

1	$Au_{12} + C_2H_{2(r)} \leftrightarrow Au_{12}C_2H_2(\mu)_{(ад)}$
2	$Au_{12} + C_2H_{2(r)} \leftrightarrow Au_{12}C_2H_2(2\sigma)_{(ад)}$
3	$Au_{12} + C_2H_{2(r)} \leftrightarrow Au_{12}C_2H_2(\pi)_{(ад)}$
4	$Au_{12} + H_2 \leftrightarrow Au_{12}H_{2(ад)}$
5	$Au_{12} + Au_{12}H_{2(ад)} \rightarrow 2Au_{12}H_{(ад)}$
6	$Au_{12}C_2H_2(\mu)_{(ад)} + Au_{12}H_{(ад)} \rightarrow Au_{12}CH=CH_2(\mu)_{(ад)} + Au_{12}$
7	$Au_{12}CH=CH_2(\mu)_{(ад)} + Au_{12}H_{(ад)} \rightarrow Au_{12}CH_2=CH_2(\mu)_{(ад)} + Au_{12}$
8	$Au_{12}C_2H_2(2\sigma)_{(ад)} + Au_{12}H_{(ад)} \rightarrow Au_{12}CH=CH_2(2\sigma)_{(ад)} + Au_{12}$
9	$Au_{12}CH=CH_2(2\sigma)_{(ад)} + Au_{12}H_{(ад)} \rightarrow Au_{12}CH_2=CH_2(2\sigma)_{(ад)} + Au_{12}$
10	$Au_{12}C_2H_2(\pi)_{(ад)} + Au_{12}H_{(ад)} \rightarrow Au_{12}CH=CH_2(2\sigma)_{(ад)} + Au_{12}$
11	$Au_{12}CH_2=CH_2(\mu)_{(ад)} \rightarrow CH_2=CH_{2(r)} + Au_{12}$
12	$Au_{12}CH_2=CH_2(\mu)_{(ад)} \rightarrow Au_{12}CH_2=CH_2(\pi)_{1(ад)}$
13	$Au_{12}CH_2=CH_2(2\sigma)_{(ад)} \rightarrow CH_2=CH_{2(r)} + Au_{12}$
14	$Au_{12}CH_2=CH_2(2\sigma)_{(ад)} \rightarrow Au_{12}CH_2=CH_2(\pi)_{2(ад)}$
15	$Au_{12}CH_2=CH_2(\mu)_{(ад)} + Au_{12}H_{(ад)} \rightarrow Au_{12}CH_2-CH_3_{1(ад)} + Au_{12}$
16	$Au_{12}CH_2-CH_3_{1(ад)} + Au_{12}H_{(ад)} \rightarrow Au_{12}CH_3-CH_3_{1(ад)} + Au_{12}$
17	$Au_{12}CH_2=CH_2(\pi)_{1(ад)} + Au_{12}H_{(ад)} \rightarrow Au_{12}CH_2-CH_3_{1(ад)} + Au_{12}$
18	$Au_{12}CH_2=CH_2(2\sigma)_{(ад)} + Au_{12}H_{(ад)} \rightarrow Au_{12}CH_2-CH_3_{2(ад)} + Au_{12}$
19	$Au_{12}CH_2-CH_3_{2(ад)} + Au_{12}H_{(ад)} \rightarrow Au_{12}CH_3-CH_3_{2(ад)} + Au_{12}$
20	$Au_{12}CH_2=CH_2(\pi)_{2(ад)} + Au_{12}H_{(ад)} \rightarrow Au_{12}CH_2-CH_3_{2(ад)} + Au_{12}$
21	$Au_{12}CH_3-CH_3_{1(ад)} \rightarrow CH_3-CH_{3(r)} + Au_{12}$
22	$Au_{12}CH_3-CH_3_{2(ад)} \rightarrow CH_3-CH_{3(r)} + Au_{12}$
23	$Au_{12}CH_2=CH_2(\pi)_{2(ад)} \rightarrow Au_{12}-CH-CH_{3(ад)}$

$$\begin{aligned}
w_1 &= k_1 x_1 x_{21} & w_9 &= k_9 x_7 x_{10} & w_{17} &= k_{17} x_7 x_{13} \\
w_2 &= k_2 x_1 x_{21} & w_{10} &= k_{10} x_4 x_7 & w_{18} &= k_{18} x_7 x_{11} \\
w_3 &= k_3 x_1 x_{21} & w_{11} &= k_{11} x_9 & w_{19} &= k_{19} x_7 x_{17} \\
w_4 &= k_4 x_5 x_{21} & w_{12} &= k_{12} x_9 & w_{20} &= k_{20} x_7 x_{14} \\
w_5 &= k_5 x_6 x_{21} & w_{13} &= k_{13} x_{11} & w_{21} &= k_{21} x_{16} \\
w_6 &= k_6 x_2 x_7 & w_{14} &= k_{14} x_{11} & w_{22} &= k_{22} x_{18} \\
w_7 &= k_7 x_7 x_8 & w_{15} &= k_{15} x_7 x_9 & w_{23} &= k_{23} x_{14} \\
w_8 &= k_8 x_3 x_7 & w_{16} &= k_{16} x_7 x_{15} & &
\end{aligned} \quad (2)$$

где $x_1 = C_2H_{2(c)}$, $x_2 = C_2H_2(\mu)_{(ад)}$, $x_3 = C_2H_2(2\sigma)_{(ад)}$, $x_4 = C_2H_2(\pi)_{(ад)}$, $x_5 = H_2$, $x_6 = H_{2(ад)}$, $x_7 = H_{(ад)}$, $x_8 = CH=CH_2(\mu)_{(ад)}$, $x_9 = CH_2=CH_2(\mu)_{(ад)}$, $x_{10} = CH=CH_2(2\sigma)_{(ад)}$, $x_{11} = CH_2=CH_2(2\sigma)_{(ад)}$, $x_{12} = CH_2=CH_{2(c)}$, $x_{13} = CH_2=CH_2(\pi)_{1(ад)}$, $x_{14} = CH_2=CH_{2(c)}(\pi)_{2(ад)}$, $x_{15} = CH_2-CH_3_{1(ад)}$, $x_{16} = CH_3-CH_3_{1(ад)}$, $x_{17} = CH_2-CH_3_{2(ад)}$, $x_{18} = CH_3-CH_3_{2(ад)}$, $x_{19} = CH_3-CH_{3(c)}$, $x_{20} = -CH-CH_{3(ад)}$, $x_{21} = Au_{12}$.

Тогда, зная значения констант скоростей k_i , необходимо решить СОНДУ и определить значения концентраций веществ x_j , то есть решить прямую задачу. Под прямой задачей мы понимаем изменение концентраций компонентов на основе заданной кинетической модели, согласно закону действующих масс представляет собой задачу Коши [4]:

$$\begin{aligned}
\frac{dC_i}{dt} &= F_i, i = 1..M; \quad F_i = \sum_{j=1}^N S_{ij} W_j; \\
W_j &= P_j \cdot \prod_{i=1}^M (C_i)^{\alpha_{ij}} - Q_j \cdot \prod_{i=1}^M (C_i)^{|\beta_{ij}|};
\end{aligned} \quad (3)$$

где M – количество веществ; N – количество стадий; C_i – концентрации веществ, участвующих в реакции, мольные доли; S_{ij} – элементы стехиометрической матрицы (α_{ij} и β_{ij} – положительные и отрицательные элементы); W_j – скорость j -ой стадии, 1/с; P_j и Q_j – константы скорости прямой и обратной стадии, 1/с.

Система решается при нескольких вариантах начальных условий, в зависимости от массовых долей реагентов (табл. 2).

Исследование свойств катализатора основывалось на варьировании его начальной концентрации и оценке влияния на образование продуктов.

Реакция моделируется на двух интервалах по времени (сек.): $t \in [0, 2]$ (для анализа мгновенных процессов), $t \in [0, 120]$.

Исследование реакции показало, что наряду с медленно протекающими реакциями в схеме присутствуют быстро протекающие, что обуславливает различие коэффициентов при разных слагаемых. Таким образом, решение прямой кинетической задачи осложняется жесткостью системы дифференциальных уравнений, описывающей механизм этой реакции.

Таблица 2. Начальные условия

Вариант	Массовые доли ацетилена (C ₂ H ₂), этилена (C ₂ H ₄), водорода (H ₂) и золота (Au ₁₂) соответственно
1	1:96:3:1
2	96:1:3:1
3	25:25:50:1

Существует множество определений жесткости задач. Одним из них является следующее [5]: задача Коши $y' = f(t, y), \bar{y}(t_0) = y^0, t_0 \leq t \leq t_k$ называется жесткой в некотором интервале $I \subset [t_0, t_k]$, если:

$$1) \operatorname{Re}(\lambda_i(t)) \leq 0, \quad 1 \leq i \leq N;$$

$$2) \frac{\max \operatorname{Re}(-\lambda_i(t))}{\min \operatorname{Re}(-\lambda_i(t))} \gg 1,$$

где $\lambda_i(t)$ – собственные числа матрицы Якоби $\frac{\partial f_j}{\partial y_i}$, вычисленной на решении $\bar{y}(t)$.

Таким образом, для проверки жесткости системы, необходимо найти якобиан вектора правых частей системы, а затем найти собственные значения полученной матрицы. Для этой проверки было решено использовать среду Wolfram Mathematica. При заданных значениях концентраций исходных веществ реакции и констант скорости, а также в соответствие с системой дифференциальных уравнений математического описания реакции [2], рассчитаны собственные значения матрицы Якоби, представленные в табл. 3 (среда автоматически отсортировала их по убыванию модуля действительной части).

Таблица 3. Собственные значения матрицы Якоби

λ_1	$-2,1 \cdot 10^{16}$	λ_8	$-5,7 \cdot 10^{-2}$	λ_{15}	0
λ_2	$-1 \cdot 10^{12}$	λ_9	$-2 \cdot 10^{-2}$	λ_{16}	0
λ_3	$-1,5 \cdot 10^4$	λ_{10}	$-2,5 \cdot 10^{-29}$	λ_{17}	0
λ_4	$-1,4 \cdot 10^3$	λ_{11}	0	λ_{18}	0
λ_5	$-2,9 \cdot 10^1$	λ_{12}	0	λ_{19}	0
λ_6	-1,7	λ_{13}	0	λ_{20}	0
λ_7	-0,9	λ_{14}	0	λ_{21}	0

Первое условие жесткости выполняется (среди собственных чисел нет положительных). Второе условие жесткости даже без учёта нулей (при делении на ноль получается бесконечность, что не противоречит этому условию) также выполняется:

$$\frac{\max \operatorname{Re}(-\lambda_i(t))}{\min \operatorname{Re}(-\lambda_i(t))} = \frac{2,06 \cdot 10^{16}}{2,5 \cdot 10^{-29}} = 6,4 \cdot 10^{44} \gg 1,$$

Анализ приведенных значений собственных чисел матрицы Якоби позволяет утверждать, что система дифференциальных уравнений математического описания указанной реакции является жесткой. Таким образом, необходимо грамотно подойти к подбору метода(-ов) решения, т.к. жесткость задачи накладывает определенные ограничения на выбор метода, в частности, делает непригодными для решения явные методы. Вместо этого необходимо использовать неявные методы, которые более сложны в реализации, но более эффективны для решения жестких задач.

Кроме непосредственного решения системы ДУ необходимо наблюдать поведение концентрации ключевых веществ: ацетилен (C₂H₂), этилен (C₂H₄), этан (C₂H₆) и катализатор золота (Au₁₂). Так для ацетилена необходимо добиться максимального превращения в этилен, для этилена – не допущения дальнейшего гидрирования до этана, для золота – происходит ли образование побочных веществ, так называемого «зеленого масла», которое негативно влияет на качество катализатора.

Для удостоверения правильности полученного решения также рассчитываются стехиометрические балансовые соотношения, которые выводятся методами линейной алгебры и величина которых должна быть одинаковой в любой момент времени (в каждой точке полученного решения). Для их вывода необходимо найти ФСР (фундаментальную систему решений) системы линейных уравнений, составленной на основе транспонированной стехиометрической матрицы S^T , строки которой описывают реакции, а столбцы – вещества. Кроме того, количество балансовых соотношений определяется разностью количества неизвестных системы (веществ) и ранга матрицы S^T .

Для исследуемой реакции найдена ФСР из которой могут быть выведены соответствующие балансовые соотношения (табл. 4).

Таблица 4. ФСР системы

	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅	X ₆	X ₇	X ₈	X ₉	X ₁₀	X ₁₁	X ₁₂	X ₁₃	X ₁₄	X ₁₅	X ₁₆	X ₁₇	X ₁₈	X ₁₉	X ₂₀	X ₂₁
1	-2	-1	-1	-1	1	2	1,5	-0,5	0	-0,5	0	-1	0	0	0,5	1	0,5	1	0	0	1
2	2	2	2	2	-1	-1	-0,5	1,5	1	1,5	1	1	1	1	0,5	0	0,5	0	0	1	0
3	-1	-1	-1	-1	1	1	0,5	-0,5	0	-0,5	0	0	0	0	0,5	1	0,5	1	1	0	0

Соблюдение вышеперечисленных требований приводит к решению обратной задачи. Под обратной задачей мы понимаем восстановление на основе натуральных закономерностей вида кинетической модели и ее параметров [3].

3. Программная реализация

Для решения задачи применены следующие методы:

1) многошаговые методы Гира [6], вычислительные схемы которых имеют вид:

$$\sum_{i=0}^q \alpha_{q,i} Y_{q-i+1} + h\beta_q F(x_n, Y_n) Y_n = 0$$

где q определяет порядок метода, константы β_q и $\alpha_{q,i}$, $i = 0, 1, \dots, q$ соответствуют выбранному порядку метода.

2) многошаговые методы Адамса-Моултона [6], вычислительные схемы которых имеют вид:

$$Y_{n+1} = Y_n + h \sum_{i=0}^q \beta_i F(x_{n-i+1}, Y_{n-i+1}),$$

где q определяет порядок метода, константы β_i , $i = 0, 1, \dots, q$ соответствуют выбранному порядку метода.

3) неявные методы Рунге-Кутты.

В общем виде метод Рунге-Кутты может быть представлен в следующей форме [6]:

$$k_i = Y_n + h \sum_{j=0}^{i-1} \alpha_{ij} F(x_n + c_j h, k_j),$$

$$Y_{n+1} = Y_n + h \sum_{j=0}^{s-1} \beta_j F(x_n + c_j h, k_j),$$

где s определяет порядок метода.

Коэффициенты a, b, c удобно представлять в виде таблицы Бутчера:

c ₀	α_{00}	α_0	...
c ₁	α_{10}		
...	\vdots		
...	...		
c _s			
	β_0	β_1	... β_s

Используемые нами неявные методы имеют ненулевые α_{ij} на главной диагонали и над ней. В случае, если ненулевые элементы имеются на главной диагонали и их нет над ней, метод называется диагонально-неявным.

Для вычисления значения концентраций в очередной точке (момент времени) необходимо решить систему нелинейных уравнений. В рассматриваемой задаче матрица якобиана является вырожденной, т.е. её определитель в определенный момент времени равен нулю, более того, якобиан вырожден в начальный момент времени (это связано с большим количеством нулей).

Поэтому воспользуемся методом Вегстейна [7], который является модификацией метода секущих. При решении нелинейного уравнения (для систем метод обобщается аналогично) $f(x) = 0$, приведенного к виду $x = g(x)$ используется следующая неявная формула:

$$x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})(x_{k-1} - x_{k-2})}{f(x_{k-1}) - f(x_{k-2})}$$

Это двухшаговый метод, и для начала вычислений необходимо задать 2 приближения x_0, x_1 .

Весомым преимуществом метода Вегстейна, по сравнению с методом простых итераций, методом Брауна, и даже методом Ньютона, является сходимость к корню даже при плохих начальных приближениях.

Согласно Гиру [8], можно выделить три основных способа распараллеливания алгоритмов интегрирования ОДУ:

1. Параллелизм на уровне метода, т.е. выполнение некоторых шагов метода параллельно. Данный вид параллелизма обычно не дает большого ускорения и плохо масштабируется, так как большинство методов состоят из относительно небольшого числа шагов, причем не все они могут быть выполнены параллельно. Однако полностью игнорировать такой подход не стоит.

Существуют так называемые параллельно-итерируемые методы Рунге-Кутты (PIRK, parallel-iterated Runge-Kutta methods). Суть этих методов заключается в том, что вместо явного решения систем алгебраических уравнений на каждом шаге применяется метод последовательных приближений. Соответственно, итерации могут выполняться параллельно для каждого шага метода k_i , однако масштабируемость такого метода ограничена s (количество шагов

метода Рунге-Кутты) процессорами. К тому же итерированный метод обладает значительно меньшей устойчивостью, чем исходный неявный метод, в частности свойства A- и L-устойчивости теряются.

2. Параллелизм на уровне системы уравнений предполагает разделение системы на части некоторым образом, так что каждая часть может быть вычислена относительно независимо. В нашей задаче это возможно благодаря наличию в механизме реакции внутреннего параллелизма, о чем было сказано ранее.

3. Параллелизм по входным параметрам, например, по начальным условиям, как в нашем случае.

4. Параллелизм решения системы алгебраических уравнений (СЛУ). При решении системы ОДУ неявными методами большая часть времени уходит на решение СЛУ, как правило, нелинейной. Поэтому даже последовательную реализацию неявного метода решения системы ОДУ часто можно ускорить, распараллелив метод решения СЛУ (как вариант, независимо вычислять значения правой части уравнений).

Способы распараллеливания, специфичные для методов решения систем ОДУ иногда неприменимы либо дают недостаточный эффект, в таких случаях стоит обратить внимание на «общие» методы распараллеливания, такие как параллельная реализация векторных операций. Идея заключается в том, что многие численные алгоритмы можно представить в виде операций над векторами и матрицами и разделить эти векторы и матрицы между процессами. Обмен данными происходит при следующих операциях: вычислении правой части системы, вычислении максимального и минимального элементов вектора, вычислении нормы вектора, вычислении скалярного произведения векторов и некоторых других, реже встречающихся, во время как для большинства операций, таких как сложение векторов, умножение вектора на скаляр, копирование векторов и так далее, межпроцессные коммуникации не требуются.

4. Вычислительный эксперимент

На рис. 1 приведены графики решения задачи для одного из случаев (1-й вариант начальных условий). Моделирование производилось на интервале 0-120 секунд. Поведение моделируемых веществ соответствует характеру протекания реакции: идет образование этана, а также расход ацетилена.

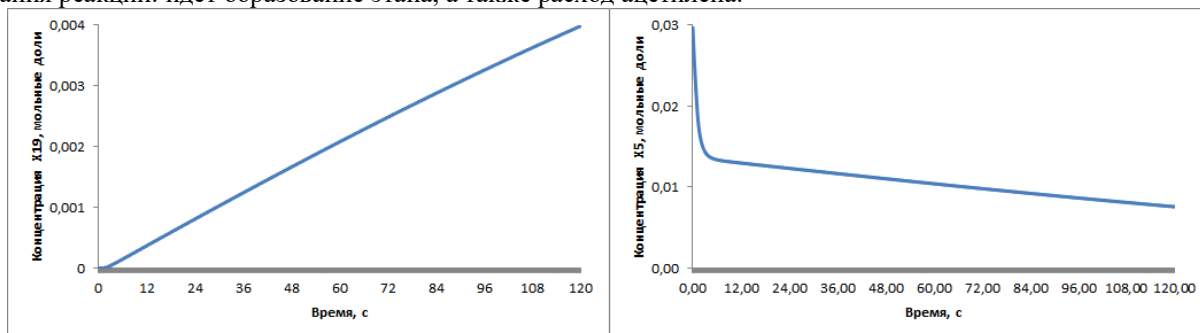


Рис. 1. а - зависимость концентрации этана от времени; б - зависимость концентрации ацетилена от времени.

5. Заключение

Математическое описание реакции селективного гидрирования ацетилена на катализаторе представляет собой систему дифференциальных уравнений, осложняющуюся жесткостью системы. Вывод о жесткости системы требует выбора эффективного метода решения прямой кинетической задачи, способного провести расчет, гарантируя точность и устойчивость решения. Предложены методы, способные решить такую жесткую задачу. Планируется распараллеливание по автоматически генерируемым начальным параметрам в пределах заданного диапазона, с учетом особенностей протекания самой реакции.

Литература

- [1] Байназарова, Н.М. Распараллеливание расчета кинетической модели селективного гидрирования ацетилена на кластере золота. / Н.М. Байназарова, К.Ф. Коледина, Д.А. Пичугина // Сборник трудов Международной научной конференции «Параллельные вычислительные технологии (ПАВТ'2016)». – г. Челябинск.; Изд. центр ЮУрГУ, 2016, С. 425-431.
- [2] Пичугина, Д.А. Квантово-химическое моделирование адсорбции этилена и ацетилена на кластерах золота. / Д.А. Пичугина, С.А. Николаев, Д.Ф. Мухамедзянова, Н.Е. Кузьменко // Журнал физической химии, 2014. Т. 88. № 6, с. 1–6.
- [3] Яблонский, Г.С. Математические модели химической кинетики / Г.С. Яблонский, С.И. Спивак. – М.: Знание, 1977. – 64 с.
- [4] Губайдуллин, И.М. Автоматизированная система структурной и параметрической идентификации кинетических моделей химических реакций с участием металлоорганических соединений на основе базы данных кинетических исследований. / И.М. Губайдуллин, К.Ф. Коледина, Р.Р. Сафин // Системы управления и информационные технологии. 2014. Т. 58. № 4. С. 10-16.
- [5] Самарский, А.А. Численные методы / А.А. Самарский, А.В. Гулин. – М.: Наука, 1989. – С. 251.
- [6] Заусаев А. Ф. Разностные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. учеб. пособие / А. Ф. Заусаев. – Самара, 2010. - 99 с.
- [7] Вержбицкий, В.М. Основы численных методов: Учеб. пособие для вузов / В. М. Вержбицкий. - М., 2002. – С. 261-264.
- [8] Gear, C.W. The potential for parallelism in ordinary differential equations / C.W. Gear // Tech. Rep. UIUCDCS-R-86-1246. – Urbana: University of Illinois, 1986. Roosta S. H. Parallel Processing and Parallel Algorithms: Theory and Computation. Springer, 2000. 566 p. DOI: 10.1007/978-1-4612-1220-1.