

DOI: 10.15643/mmcct-2023-12

История развития математического моделирования в Институте нефтехимии и катализа УФИЦ РАН (НИИНефтехим)

И. М. Губайдуллин

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН

Россия, Республика Башкортостан, 450075 г. Уфа, пр. Октября, 141.

Email: irekmars@mail.ru

В работе кратко изложена история развития математического моделирования в Институте нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, приведены ключевые даты.

Ключевые слова: математическое моделирование, кинетические исследования, прямые и обратные задачи.

1976 год – переезд из г. Новосибирска (Академгородок) из Института катализа СО СССР, ныне Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН группы сотрудников – к.т.н., Шмелев Александр Сергеевич; к.ф.-м.н. Спивак Семён Израилевич, к.т.н. Воронцов Валерий Георгиевич, Балаев Александр Всеволодович. Создание отдела «Математическое моделирование и оптимизация процессов и аппаратов химической технологии» = лаборатория кинетических исследований + лаборатория контрольно-измерительных приборов и автоматизации + лаборатория электронно-вычислительных машин (ЭВМ) и программисты + лаборатория выдачи регламентов для проектирования ЭВМ – «Минск-32», «ЭВМ ЕС-1033».

1979 год – дипломное руководство (А. С. Шмелёв, Громыхалина Светлана), курс лекций С. И. Спивака на кафедре дифференциальных уравнений математического факультета Башкирского государственного университета – «Математическое описание механизмов химических реакций».

1980 год – защита Кутеповым Борисом Ивановичем диссертации на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.17.07 – химическая технология топлива и газа (тема: «Кинетика образования и взаимопревращения продуктов окисления кокса на современных катализаторах крекинга»).

1982 год – защита Балаевым Александром Всеволодовичем кандидатской диссертации на соискание ученой степени кандидата технических наук «Математическое моделирование и оптимизация процессов в неподвижном слое катализатора в нестационарных условиях» в НИИ им. Л.Я. Карпова (г. Москва).

1981–1985 гг. – выполнение научно-исследовательской работы № 646-85 «Разработка блок-программ для проектирования с помощью ЭВМ регенераторов на базе кинетики процесса». Отъезд Шмелёва А.С. из Уфы.

1985 год – защита докторской диссертации Спиваком С.И. и его переход на работу в Башкирский государственный университет на должность заведующего кафедрой математического моделирования.

1985–1989 гг. – создание автоматизированной системы научных исследований (АСНИ) на базе сетевой архитектуры ЭВМ СМ4, САМАС и процесс пассивации на никелевом катализаторе (к.т.н., Бикбаев Рафаэль Талгатович).

1988–1992 гг. – появление первых персональных компьютеров IBM PC XT 286, компьютер на базе процессоров Intel 386 (стоимость 38 000 рублей, стоимость трехкомнатной квартиры), 486, 586 и т.д. Первый коммерческий программный продукт для Уфимского мотостроительного завода, цех 1б на 7 000 рублей (стоимость автомобиля марки «Жигули»). Руководитель группы программистов – Губайдуллин И.М. Разработчики Носков Олег Валентинович и Фарит Хакимов. Договор на научно-техническую разработку информационно-аналитической системы для Стерлитамакского опытно-промышленного нефтехимического завода. Ежегодный договор на 80 000 рублей.

1992 год – закрытие отдела математического моделирования и демонтаж всех ЭВМ и АСНИ. Создание коммерческой фирмы ООО «Танып-плюс» по разработке научно-технической продукции ИВАС – информационно-вычислительной аналитической системы для любых предприятий. Официально просуществовало до 2012 года. Прекратила подставки продукции в 2022 году.

1994 год – создание лаборатории математической химии под руководством д.ф.м.н., профессора С.И. Спивака. Перед лабораторией стояли задачи по разработке эффективной системы контроля и прогнозирования качества современных гетерогенных и гомогенных металлокомплексных катализаторов, использующихся в нефтехимии, нефтепереработке, промышленном органическом синтезе и в производстве продуктов малотоннажной химии. Предполагалось создать системы математических критериев и алгоритмов, позволяющих оценивать и прогнозировать эксплуатационные свойства катализаторов.

1996 год – защита Губайдуллиным И.М. диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.16 – применение вычислительной техники, математических методов и математического моделирования в научных исследованиях (тема: «Математическое моделирование динамических режимов окислительной регенерации катализаторов в аппаратах с неподвижным слоем»).

1997–2001 гг. – преподавательская деятельность сотрудников лаборатории на кафедре вычислительной техники и инженерной кибернетики Уфимского государственного нефтяного технического университета.

2001–2015 гг. – преподавательская деятельность сотрудников лаборатории на кафедре математического моделирования и вычислительной математики математического факультета Башкирского государственного университета.

1998–2011 гг. – работы лаборатории по математическому моделированию конкретных промышленных каталитических процессов проводились в тесном контакте с химическими и нефтехимическими предприятиями Республики Башкортостан (ОАО «Каустик» и «Каучук», г.Стерлитамак).

Наиболее значимые результаты, полученные в лаборатории в области математического моделирования:

- Разработана компьютерная система для изучения кинетики и механизмов сложных каталитических реакций. Система включает базу данных и пакет прикладных программ. Реализована реляционная база данных, позволяющая накопить многочисленные экспериментальные данные и результаты расчета. Создан пакет программ для обработки экспериментов с удобным интерфейсом и графической поддержкой. Все предложенные разработки реализованы в виде комплекса прикладных программ на языке Fortran-5. Система использована для построения кинетических моделей известных каталитических реакций: гидроалюминирования и циклоалюминирования олефинов и ацетиленов алкилаланами в присутствии катализатора цирконоцендихлорида; олигомеризации α -метилстирола в присутствии цеолита NaHY; ионного обмена при приготовлении цеолита KA; дегидрирования метилбутенов.

- Разработана принципиально новая кинетическая модель реакции, лежащей в основе каталитического дегидрирования смеси бутана и бутиленов на промышленном железо-калиевом катализаторе КД-1. Модель учитывает изменение числа молей реакционной газовой смеси (или изменение реакционного объема), дезактивацию катализатора за счет образования коксовых отложений на активной поверхности и одновременно протекающую регенерацию катализатора парами воды.

- Проведен вычислительный эксперимент с помощью разработанной математической модели процесса гидрирования α -пинена в *цис*-пинан в реакторе с неподвижным слоем никель-силикатного катализатора с учетом одновременно протекающих химических и фазовых превращений. Результаты численного анализа показали, что процесс гидрирования α -пинена в *цис*-пинан можно эффективно реализовать в трубчатом реакторе с неподвижным слоем никель-силикатного катализатора при прямоточном движении реакционной смеси и хладагента. Найдены оптимальные режимы эксплуатации такого реактора, которые позволяют достичь максимального выхода целевого продукта – *цис*-пинана;

- Разработана компьютерная система для изучения кинетики и механизмов сложных каталитических реакций, которая с успехом используется для построения кинетических моделей реакций, изучаемых в Институте нефтехимии и катализа: гидроалюминирования и циклоалюминирования олефинов и ацетиленов алкилаланами в присутствии катализатора Cr_2ZrCl_2 ; олигомеризации α -метилстирола в присутствии цеолита NaHY; ионного обмена при приготовлении цеолита KA; дегидрирования метилбутенов; озонлиза фуллерена C_{60} . За этот период, под руководством профессора, д.ф.-м.н Спивака С.И. были защищены 6 диссертаций на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия: Вайман Е. В.; Вайман Александр; Абзалилова Л.Р.; Ахматсафина Эльза; Аристархов Антон; Иремадзе Э.О.

2008 год – защита Балаевым А.В. диссертации на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.15 – кинетика и катализ (тема: «Моделирование каталитических процессов с переменными свойствами реакционной среды»).

2011 год – защита Колединой К.Ф. диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия (тема: «Последовательно-параллельное определение кинетических параметров при моделировании детального механизма гидроалюминирования олефинов»).

2012 год – защита Губайдуллиним И.М. диссертации на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия (тема: «Информационно-аналитическая система решения многопараметрических обратных задач химической кинетики»).

2012–2020 гг. – тесное научное сотрудничество с коллегами из МГТУ им. Н.Э. Баумана, Институтом катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Мордовским государственным университетом им. Н.П. Огарёва и Институтом прикладной математики им. М.В. Келдыша

РАН. Защита трёх ключевых диссертаций на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия: Сафиуллина (Нурисламова) Л.Ф. – «Разработка компактной кинетической модели пиролиза пропана методами анализа чувствительности», Коледин С.Н. – «Многоцелевая оптимизация на основе кинетической модели реакции диметилкарбоната со спиртами в присутствии металлокомплексных катализаторов» и Еникеева Л.В. – «Алгоритм и программный комплекс для анализа механизма гибели ароматических нитрозооксидов и низкотемпературной конверсии легких углеводородов». Реализация 10 молодёжных грантов РФФИ «Мобильность» (стажировка в других регионах, трех инициативных проектов РФФИ. Последний из них – проект РФФИ № 18-07-00341 – «Оптимизация и управление химико-технологическими системами на основе численного моделирования кинетики с использованием высокопроизводительной вычислительной техники», 2018–2020 гг.). Также реализован проект РНФ № 19-71-00006 «Разработка математического и программного обеспечения многокритериального оптимального управления реакциями металлокомплексного катализа». (2019–2021). Руководитель – к.ф.-м.н., н.с. ИНК УФИЦ РАН Коледина К.Ф.

С 2015 года по настоящее время – преподавательская деятельность сотрудников лаборатории на кафедрах Уфимского государственного нефтяного технического университета: технологии нефти и газа; информационных технологий и прикладной математики; цифровых технологий и моделирования; вычислительной техники и инженерной кибернетики.

2021 год – защита Колединой К.Ф. диссертации на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия (тема: «Многокритериальная оптимизация и оптимальное управление химическими процессами на основе детализированной кинетической модели»).

2021 год – поддержка проекта РНФ 21-71-29947 «Разработка теоретических основ и создание высокопроизводительных алгоритмов для двухфазных математических моделей фильтрации жидкости в коллекторах трещиновато-порового типа». Руководитель – д.ф.-м.н., профессор Губайдуллин И.М. (2021–2024 гг.).

2022 год – защита Бобренёвой Ю.О. диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (тема: «Математическое моделирование массопереноса в коллекторах трещиновато-порового типа»). Защита состоялась в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН (г. Москва).

<http://ipc-ras.ru/ru/laboratory-mathematical-chemistry>