

УДК 519.63

Применение гиперболизации в диффузионной модели гетерогенного процесса на сферическом зерне катализатора*

О.С. Язовцева

Математический институт им. В.А. Стеклова Российской академии наук, ул. Губкина, 8, Москва, 119991

E-mail: kurinaos@gmail.com

Английская версия этой статьи печатается в журнале “Numerical Analysis and Applications” № 4, Vol. 17, 2024.

Язовцева О.С. Применение гиперболизации в диффузионной модели гетерогенного процесса на сферическом зерне катализатора // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2024. — Т. 27, № 4. — С. 457–471.

В статье исследовано применение гиперболизации параболических уравнений к уравнениям материального и теплового баланса для математической модели окислительной регенерации сферического зерна катализатора с детальной кинетикой. Первоначальная модель сферического зерна построена с использованием диффузионного подхода в сферической системе координат и представляет собой нелинейную систему дифференциальных уравнений. Материальный баланс газовой фазы модели описан уравнениями диффузии–конвекции–реакции с источниками членами, составленными для концентраций веществ газовой фазы, баланс твердой фазы — нелинейными обыкновенными дифференциальными уравнениями. Уравнение теплового баланса зерна катализатора представляет собой уравнение теплопроводности с неоднородным членом, отвечающим разогреву зерна в ходе химической реакции. Медленные процессы тепломассопереноса в сочетании с быстрыми химическими реакциями приводят к существенным сложностям при разработке вычислительного алгоритма. Для обхода вычислительной сложности применена гиперболизация параболических уравнений модели, заключающаяся во введении второй производной по времени, домноженной на малый параметр, с целью расширения области устойчивости вычислительного алгоритма. Для модифицированной модели построена явная трехслойная разностная схема, реализованная в виде программного модуля. Представлен анализ сходимости разработанного алгоритма. Проведен сравнительный анализ нового вычислительного алгоритма с ранее построенным. Показано преимущество нового алгоритма при сохранении порядка точности. Результатом работы реализованного нового алгоритма являются профили распределения температуры и веществ вдоль радиуса зерна катализатора.

DOI: 10.15372/SJNM20240407

EDN: SWNGQW

Ключевые слова: нелинейная модель, явная трехслойная разностная схема, жесткая система, гиперболизация, химическая кинетика, окислительная регенерация.

Yazovtseva O. Application of hyperbolization in the diffusion model of a heterogeneous process on a spherical catalyst grain // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2024. — Vol. 27, № 4. — P. 457–471.

The article investigates an application of hyperbolization for parabolic equations to material and thermal balance equations in a mathematical model of oxidative regeneration of the spherical catalyst grain with detailed kinetics. The initial spherical grain model is constructed using a diffusion approach. It is a nonlinear system of differential equations in a spherical coordinate system. The material balance of the gas phase is described by diffusion–convection–reaction equations with source terms for the concentrations of the substances of the gas phase; the balance of the solid phase is represented by nonlinear ordinary differential equations. The thermal balance equation of the catalyst grain is a thermal conduction equation with an inhomogeneous term

*Исследование выполнено за счет гранта Российской научного фонда (проект № 19-71-30012)
<https://rscf.ru/en/project/23-71-33002/>.

corresponding to grain heating during a chemical reaction. The slow processes of heat and mass transfer in combination with the fast chemical reactions cause significant difficulties in the development of a computational algorithm. Hyperbolization of the parabolic equations is used to avoid the computational complexity. It consists in the introduction of a second time derivative multiplied by a small parameter to extend the stability area of the computational algorithm. An explicit three-layer difference scheme is constructed for the modified model. It is implemented in the form of a software module. The convergence of the thus developed algorithm is analyzed. A comparative analysis of the new computational algorithm with a previously constructed one is carried out. The new algorithm has an advantage while maintaining the order of accuracy. The new algorithm resulted in profiles of distributions of the temperature and substances along the radius of the catalyst grain.

Keywords: *nonlinear model, explicit three-level difference scheme, stiff system, hyperbolization, chemical kinetics, oxidative regeneration.*

1. Введение

Более полувека математическое моделирование химических процессов не теряет своей актуальности [1]. Первые работы по применению качественных численных методов исследования в химической технологии показали, что большинство задач этой области нетривиальны и требуют специализированных подходов.

Особый интерес представляют каталитические процессы как основа современной химической промышленности [2]. При их моделировании традиционно выделяют несколько этапов (или уровней) [3]: кинетика, зерно катализатора и т. д. Кинетический уровень служит для математического описания химических процессов, обычно он оформляется в виде нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений и является “фундаментом” всей модели. Второй уровень — моделирование зерна катализатора [4]. Этот уровень приобретает особую актуальность при наличии процессов внутридиффузионного торможения, имеющих место, например, в зерне катализатора с мелкими порами [5]. Моделированию пористых зерен катализатора посвящено значительное количество работ. Классическая методика, неоднократно доказавшая свою эффективность, использует диффузионный подход [4]. Она основана на предположениях равномерности зерен катализатора во всех направлениях и их достаточно высокой пористости [6]. На основе нескольких параметров рассчитывается эффективный коэффициент диффузии в поры зерна и коэффициенты тепломассообмена [7, 8]. Модель описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений — уравнений материального и теплового баланса. Многие модели являются нестационарными, что значительно усложняет математический аппарат для их исследования [9].

Особенностью нестационарных моделей физической химии является наличие разномасштабных процессов [10]. Как известно, вычислительные алгоритмы для подобных задач сложны и энергозатратны. Разработка вычислительных алгоритмов для задач с разномасштабными процессами — одна из важнейших задач вычислительной математики в настоящее время [11].

Существует несколько подходов к разработке алгоритмов для столь сложных процессов. Во-первых, используются устойчивые неявные методы, позволяющие интегрировать уравнения с достаточно большим шагом по времени [12, 13]. Однако многие системы являются существенно нелинейными, что нивелирует снижение времени расчета в силу трудоемкости решения неявного нелинейного уравнения.

Вторым подходом видится использование современных программных решений, в том числе высокопроизводительных вычислений [14, 15]. Этот подход обуславливает развитие явных разностных схем. Разработка эффективных явных схем на основе многочле-

нов Чебышева для задач с многофакторными воздействиями описана в работах [16, 17]. Явные схемы для расчета сверхзвуковых газодинамических потоков с учетом физико-химических процессов приведены в [18]. Эффективность использования параллельных вычислений для задач физической химии в дозвуковых потоках продемонстрирована в [19, 20]. Как известно, очевидным недостатком явных схем является жесткое ограничение на шаг по времени [21].

Настоящая работа посвящена исследованию применения аналога гиперболической модели теплопроводности [22] к уравнениям материального и теплового баланса окислительной регенерации сферического зерна катализатора с детальной гетерогенной кинетикой [23]. Данный подход предложен в работе [24] и заключается в следующем. В уравнение параболического типа искусственно добавляется член с малым параметром, содержащий вторую производную искомой функции по времени. Далее для исходной задачи составляется трехслойная по времени явная разностная схема. Это не вносит существенных возмущений в решение параболической задачи [25], однако значительно сокращает расчетное время за счет ослабления условия устойчивости явной схемы, поскольку теперь разностная схема записана для гиперболического уравнения. В статьях [26, 27] представлены примеры применения гиперболизации к одномерному уравнению теплопроводности: однородному и с учетом излучения. Целью настоящей работы является апробация применения гиперболизации к уравнениям материального и теплового баланса известной математической модели окислительной регенерации сферического зерна катализатора с детальной гетерогенной кинетикой, представленной в статье [28].

2. Диффузионная математическая модель

В работе рассматривается математическая модель окислительной регенерации сферического зерна катализатора, ранее представленная в [23, 28]. Для удобства модель представлена в безразмерном виде:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\lambda_{\text{eff}} \sigma}{c_{\text{eff}} D_{\text{eff}}} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\hat{S} c_0}{T_{\text{op}} c_k} \sum_{j=1}^5 Q_j \omega_j, \\ \frac{\partial y_m}{\partial \tau} = \frac{1}{\sigma \varepsilon_{\text{cat}}} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial y_m}{\partial r} - r^2 \hat{\mu} y_m \right) + \frac{\hat{S}}{\varepsilon_{\text{cat}}} \sum_{j=1}^5 \nu_{mj} \omega_j, \\ \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \hat{\mu} \right) = \sigma r^2 \hat{S} \sum_{j=1}^5 \delta_j \omega_j, \\ \frac{\partial q_c}{\partial \tau} = - \frac{M_{\text{C}} c_0}{\gamma_{\text{cat}}} \hat{S} (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5), \\ \frac{\partial z_1}{\partial \tau} = \frac{c_0}{\gamma_{\text{cat}} q_{\text{c}}} \hat{S} (\omega_6 + z_1 M_{\text{C}} (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5)), \\ \frac{\partial z_2}{\partial \tau} = \frac{c_0}{\gamma_{\text{cat}} q_{\text{c}}} \hat{S} (\omega_7 + z_2 M_{\text{C}} (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5)), \\ \frac{\partial \theta_1}{\partial \tau} = - \hat{S} \left(\omega_4 + \frac{c_0}{\gamma_{\text{cat}}} \omega_6 \right), \\ \frac{\partial \theta_2}{\partial \tau} = \hat{S} \left(2\omega_1 - \omega_3 + \omega_4 - 2\omega_5 - \frac{c_0}{\gamma_{\text{cat}}} \omega_7 \right). \end{array} \right. \quad (1)$$

Здесь τ — безразмерное время; r — пространственная координата, отвечающая безразмерному радиусу зерна катализатора, $r \in [0, 1]$; T — безразмерная температура зерна катализатора, $T \in [0, 1]$; $y_m, m = \overline{1, 4}$, — мольная доля компонент в газовой фазе реакции; $\hat{\mu}$ — безразмерная скорость стефановского потока; q_c — массовая доля кокса на зерне катализатора; z_1 и z_2 — массовые доли водорода и кислорода в объеме коксовых отложений; θ_1 и θ_2 — доли водород-углеродного и кислород-углеродного комплексов на поверхности зерна; σ — числовой параметр обезразмеривания; ε_{cat} — пористость зерна катализатора; $\hat{S} = \frac{S_k}{S_k^0}$ — безразмерная площадь коксовых гранул; ν_{mj} — стехиометрические коэффициенты из схемы реакции; δ_j — стехиометрические коэффициенты для расчета стефановского потока; $\omega_j = W_j \frac{\gamma_{\text{cat}} S_k^0}{c_0} \tau_k$, $j = \overline{1, 7}$, — обезразмеренные скорости реакций, используемые в [29, 30]; c_0 — мольная плотность газа, моль/м³; T_{op} — температура, при которой экспериментально получены константы скоростей реакций, К; Q_j , $j = \overline{1, 5}$, — тепловые эффекты реакций, Дж/моль; γ_{cat} — насыпная плотность катализатора, г/м³; M_C — молекулярная масса кокса, г/моль; λ_{eff} , c_{eff} и D_{eff} — усредненные значения эффективных коэффициентов теплопроводности среды, теплоемкости материала катализатора и диффузии реакционной смеси в поры зерна [19, 31].

Начально-краевые условия, отвечающие беспрепятственному втеканию реакционной смеси в поры зерна и теплообмену на границе, примут вид

$$\begin{aligned} \tau = 0 : \quad & q_c(0, r) = q_C^0, \quad z_1(0, r) = z_1^0, \quad z_2(0, r) = 0, \quad \theta_1(0, r) = \theta_1^0, \quad \theta_2(0, r) = 0, \\ & T(0, r) = \frac{T(0, r)}{T_{\text{op}}}, \quad y_m(0, r) = y_m^0, \quad m = \overline{1, 4}, \\ r = 0 : \quad & \mu(\tau, 0) = 0, \quad \left. \frac{\partial y_m}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} = 0; \\ r = 1 : \quad & y_m(\tau, 0) \Big|_{r=1} = y_{\text{out}, m}^0, \quad \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=1} = \frac{\alpha R}{\lambda_{\text{eff}}} \left(\frac{T(0)}{T_{\text{op}}} - T \right). \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь R — радиус зерна катализатора, м; α — коэффициент теплообмена, Вт/м²/К.

3. Гиперболизация задачи

Математическая модель (1) включает в себя разномасштабные процессы. Вычислительные алгоритмы для таких задач трудоемки. Для их построения можно использовать неявные разностные схемы. Они позволяют интегрировать задачу с достаточно большим шагом по времени, сохраняя устойчивость алгоритма. Но зачастую существенная нелинейность правой части системы значительно осложняет решение полученной системы алгебраических уравнений и тем самым сводит на нет сокращение расчетного времени.

Тенденции развития вычислительной техники в настоящее время направлены в сторону многопоточных вычислений. Наиболее простыми для многопоточной реализации являются явные разностные схемы. Очевидным их недостатком является сохранение устойчивости только при малом шаге по времени, что приводит к крайне неэффективным алгоритмам. Возможным средством решения этой проблемы является гиперболизация параболических уравнений [27].

Гиперболизация уравнения заключается во введении в параболическое уравнение члена, содержащего производную второго порядка по времени, домноженного на малый параметр. Малый параметр выбирается на основе соотношения характерных времен процессов [26].

3.1. Гиперболическая система уравнений

Математическая модель (1) с учетом гиперболизации параболических уравнений принимет вид

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial T}{\partial \tau} + \xi_0 \frac{\partial^2 T}{\partial \tau^2} = \frac{1}{\sigma} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\hat{S} c_0}{T_{\text{оп}} c_k} \sum_{j=1}^5 Q_j \omega_j, \\ \frac{\partial y_m}{\partial \tau} + \xi_m \frac{\partial^2 y_m}{\partial \tau^2} = \frac{1}{\sigma \varepsilon_{\text{cat}}} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial y_m}{\partial r} - r^2 \hat{\mu} y_m \right) + \frac{\hat{S}}{\varepsilon_{\text{cat}}} \sum_{j=1}^5 \nu_{mj} \omega_j, \\ \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \hat{\mu}) = \sigma r^2 \hat{S} \sum_{j=1}^5 \delta_j \omega_j, \\ \frac{\partial q_c}{\partial \tau} = - \frac{M_{\text{C}} c_0}{\gamma_{\text{cat}}} \hat{S} (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5), \\ \frac{\partial z_1}{\partial \tau} = \frac{c_0}{\gamma_{\text{cat}} q_c} \hat{S} (\omega_6 + z_1 M_{\text{C}} (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5)), \\ \frac{\partial z_2}{\partial \tau} = \frac{c_0}{\gamma_{\text{cat}} q_c} \hat{S} (\omega_7 + z_2 M_{\text{C}} (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5)), \\ \frac{\partial \theta_1}{\partial \tau} = - \hat{S} \left(\omega_4 + \frac{c_0}{\gamma_{\text{cat}}} \omega_6 \right), \\ \frac{\partial \theta_2}{\partial \tau} = \hat{S} \left(2\omega_1 - \omega_3 + \omega_4 - 2\omega_5 - \frac{c_0}{\gamma_{\text{cat}}} \omega_7 \right). \end{array} \right. \quad (3)$$

Здесь обозначения переменных и параметров совпадают с обозначениями в модели (1), а ξ_m , $m = \overline{0, 4}$, — малые параметры. При этом

$$\xi_0 = h \frac{\lambda_{\text{eff}}}{c_{\text{eff}}}, \quad \xi_m = h \frac{D_{\text{eff}}}{\varepsilon}, \quad m = \overline{1, 4}. \quad (4)$$

Значения малых параметров выбраны исходя из характерной скорости процессов без учета химических взаимодействий, поскольку химические реакции рассчитываются трехстадийным методом Рунге–Кутты пятого порядка точности в отдельном блоке. В статье [26] представлена оценка малого параметра для уравнения теплопроводности с характерной скоростью V и шагом интегрирования по пространству h :

$$\xi_m < \frac{h}{V}. \quad (5)$$

Для задач химии важно определить лимитирующие стадии — процессы с наименьшей скоростью. В зависимости от этого реакция идет либо в кинетической области, либо в диффузионной [32]. В данном случае скорости реакций превышают скорости диффузионных и конвективных потоков, а также скорость распространения тепла по грануле, процесс идет в диффузионной области. На основании этого факта были получены значения малых параметров (4), которые отвечают требованиям устойчивости явной трехслойной разностной схемы и не вносят существенных возмущений в решения параболической системы.

3.2. Разностная схема

Аппроксимация первых производных записана с использованием центральных разностей, вторых производных — с использованием трехслойной явной разностной схемы [21, 26, 27]:

$$\frac{\partial U}{\partial \tau} = \frac{U^{n+1} - U^{n-1}}{2 \Delta \tau}, \quad \frac{\partial^2 U}{\partial \tau^2} = \frac{U^{n+1} - 2U^n + U^{n-1}}{\Delta \tau^2}, \quad (6)$$

где U — искомая функция, n — номер временного слоя, $\Delta \tau$ — шаг интегрирования по времени.

Разностный аналог задачи (3) с начальными и граничными условиями (2) примет вид

$$\begin{aligned} & \frac{T_k^{n+1} - T_k^{n-1}}{2\Delta\tau} + \xi_0 \frac{T_k^{n+1} - 2T_k^n + T_k^{n-1}}{\Delta\tau^2} \\ &= \frac{1}{\sigma r_k^2 h} \left(r_{k+1/2}^2 \frac{T_{k+1} - T_k}{h} - r_{k-1/2}^2 \frac{T_k - T_{k-1}}{h} \right)^n + \left(\frac{\hat{S} c_0}{T_{\text{оп}} c_k} \sum_{j=1}^5 Q_j \omega_j \right)_k^n, \quad (7) \\ & \frac{y_{m,k}^{n+1} - y_{m,k}^{n-1}}{2\Delta\tau} + \xi_m \frac{y_{m,k}^{n+1} - 2y_{m,k}^n + y_{m,k}^{n-1}}{\Delta\tau^2} \\ &= \frac{1}{\sigma \varepsilon_{\text{cat}}} \frac{1}{r_k^2 h} \left[\left(r_{k+1/2}^2 \frac{y_{m,k+1} - y_{m,k}}{h} - r_{k+1/2}^2 \hat{\mu}_{k+1/2} \frac{y_{m,k+1} + y_{m,k}}{2} \right) - \right. \\ & \quad \left. \left(r_{k-1/2}^2 \frac{y_{m,k} - y_{m,k-1}}{h} - r_{k-1/2}^2 \hat{\mu}_{k-1/2} \frac{y_{m,k} + y_{m,k-1}}{2} \right) \right]^n + \\ & \quad \left(\frac{\hat{S}}{\varepsilon_{\text{cat}}} \sum_{j=1}^5 \nu_{mj} \omega_j \right)_k^n, \quad (8) \end{aligned}$$

$$\hat{\mu}_{k+1/2} = \sigma \frac{1}{r_{k+1/2}^2} \left(r_{k-1/2}^2 \hat{\mu}_{k-1/2} + h r_k^2 \left(\hat{S} \sum_{j=1}^5 \delta_{ij} \omega_j \right)_k \right), \quad (9)$$

$$\frac{q_c^{n+1} - q_c^{n-1}}{2\Delta\tau} = \left(-\frac{M_C c_0}{\gamma_{\text{cat}}} \hat{S} (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5) \right)^n, \quad (10)$$

$$\frac{z_1^{n+1} - z_1^{n-1}}{2\Delta\tau} = \left(\frac{c_0}{\gamma_{\text{cat}} q_c} \hat{S} (\omega_6 + z_1 M_C (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5)) \right)^n, \quad (11)$$

$$\frac{z_2^{n+1} - z_2^{n-1}}{2\Delta\tau} = \left(\frac{c_0}{\gamma_{\text{cat}} q_c} \hat{S} (\omega_7 + z_2 M_C (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5)) \right)^n, \quad (12)$$

$$\frac{\theta_1^{n+1} - \theta_1^{n-1}}{2\Delta\tau} = \left(\omega_4 + \frac{c_0}{\gamma_{\text{cat}}} \omega_6 \right)^n, \quad (13)$$

$$\frac{\theta_2^{n+1} - \theta_2^{n-1}}{2\Delta\tau} = \left(\hat{S} \left(2\omega_1 - \omega_3 + \omega_4 - 2\omega_5 - \frac{c_0}{\gamma_{\text{cat}}} \omega_7 \right) \right)^n. \quad (14)$$

Расчет значений искомых функций на первом временном слое проведен с использованием интегро-интерполяционного метода. Рассчитанные значения используются в качестве исходных данных для трехслойной разностной схемы.

3.3. Сходимость алгоритма

Анализ сходимости разработанного алгоритма реализован в постановке сгущающихся сеток. Для этого проведены вычислительные эксперименты при разбиении отрезка интегрирования на 10, 50, 100 и 500 ячеек с соответствующими значениями шагов по пространству $h = 0.1, 0.02, 0.01, 0.002$. Результаты расчетов температуры и концентрации кислорода на 10-й секунде процесса регенерации приведены на рисунках 1 и 2.

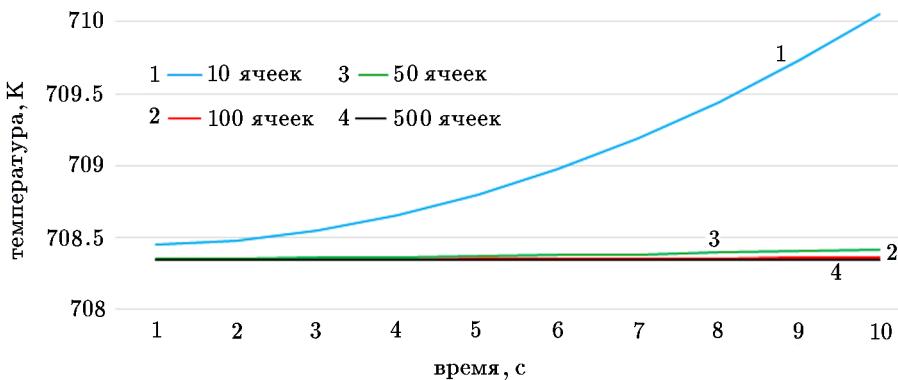


Рис. 1. Температура зерна

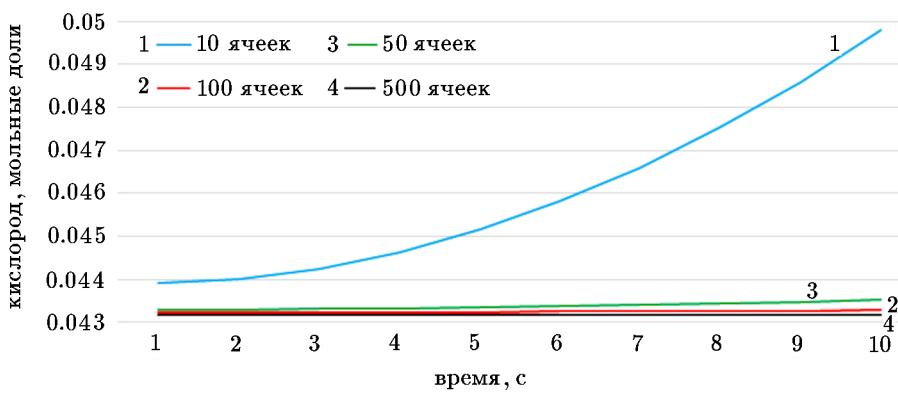


Рис. 2. Концентрация кислорода

Из рис. 1 и 2 видна значительная разница в решениях при разбиении на 10 ячеек и на большее количество. При увеличении количества ячеек различия существенно сокращаются. Это свидетельствует о сходимости предложенного алгоритма.

4. Сравнительный анализ вычислительных алгоритмов

4.1. Сферическая система координат

Для верификации и валидации алгоритма были проведены вычислительные эксперименты. Численные значения параметров были взяты в соответствии с технологическими условиями проведения окислительной регенерации [23]. Расчет был проведен для следующих физических условий: концентрация кислорода в реакционной смеси и в зерне — 5 % (об.); концентрация кокса — 3 % (мас.); начальная температура зерна катализатора — 693 К, газа — 793 К. При таких температурных условиях горение кокса начинается с самого начала регенерации, скорость реакции достаточно большая, коэффициент диффузии смеси в поры зерна мал. Система обладает достаточно большим числом жесткости.

Сравнение результатов расчета представлено на рис. 3–6. Разбиение отрезка интегрирования произведено на 100 ячеек. Сплошной линией обозначено решение системы (1) интегро-интерполяционным методом [23], точками — решение гиперболизированной системы (3). Распределения концентрации кислорода и температуры по радиусу зерна на 1 секунду процесса представлены на рис. 3 и 4.

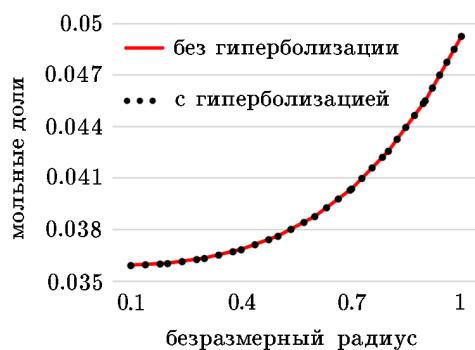


Рис. 3. Концентрация кислорода по безразмерному радиусу в порах зерна

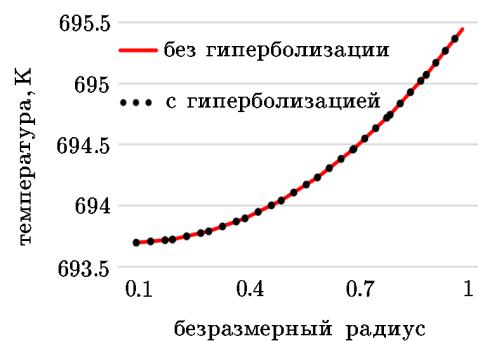


Рис. 4. Температура зерна катализатора по безразмерному радиусу

Рисунки 5 и 6 отображают зависимости от времени концентраций кислорода и температур усредненных по радиусу зерен. Как видно из рис. 3–6, решения отличаются незначительно. Это свидетельствует о правомерности использования гиперболизации параболических уравнений с малым параметром, рассчитанным по формулам (6).

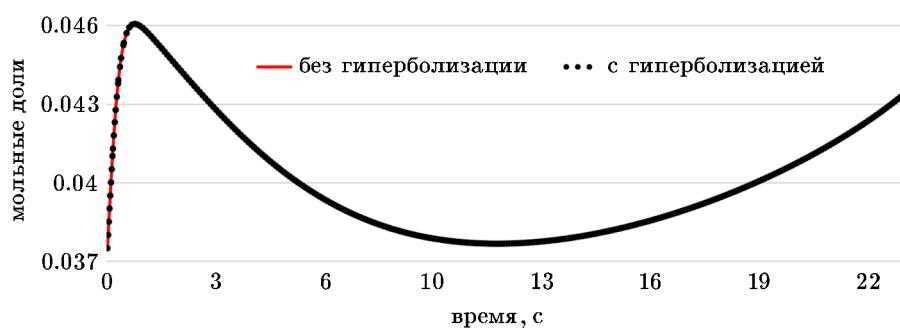


Рис. 5. Концентрация кислорода в зависимости от времени

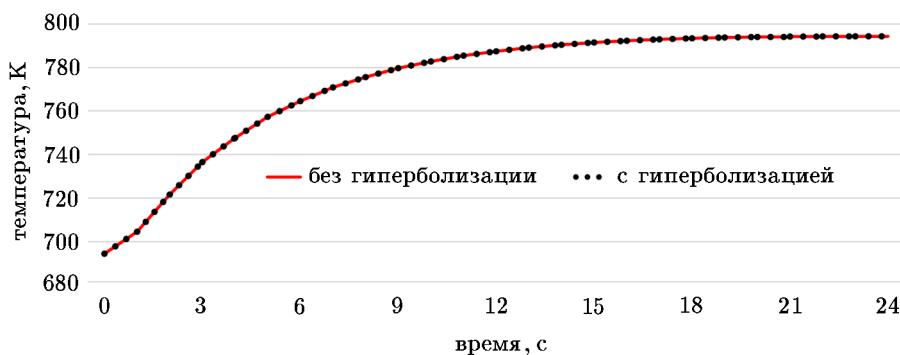


Рис. 6. Температура зерна катализатора в зависимости от времени

В таблице представлен сравнительный анализ времени работы алгоритма для расчета 1 секунды процесса регенерации при разном количестве расчетных ячеек.

Таблица. Расчетное время для различных сеток

| Количество ячеек | Интегро-интерполяционный метод | | Гиперболизация уравнений | |
|------------------|--------------------------------|-----------|--------------------------|----------|
| | шаг по времени | время, с | шаг по времени | время, с |
| 10 | $2 \cdot 10^{-3}$ | 0.533 | $2 \cdot 10^{-2}$ | 0.071 |
| 50 | $1 \cdot 10^{-4}$ | 44.228 | $2 \cdot 10^{-3}$ | 2.614 |
| 100 | $4 \cdot 10^{-5}$ | 215.832 | $9 \cdot 10^{-4}$ | 12.401 |
| 500 | $1 \cdot 10^{-6}$ | 13575.428 | $7 \cdot 10^{-5}$ | 522.631 |
| 1000 | $5 \cdot 10^{-7}$ | 93692.376 | $2 \cdot 10^{-5}$ | 4397.325 |

Ожидаемо, систему с гиперболическими уравнениями можно интегрировать с более крупным шагом по времени, что дает ощутимое преимущество при расчете на подробных сетках. При разбиении отрезка интегрирования на 100 ячеек время расчета сократилось в 17 раз, при разбиении на 1000 ячеек — более, чем в 20 раз.

4.2. Полярная система координат

Для оценки адекватности применения гиперболической модели в случае плоской двумерной системы координат была рассмотрена постановка задачи (1), (2) в полярных координатах, приведенная к безразмерному виду для удобства интегрирования:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\lambda_{\text{eff}} \sigma}{c_{\text{eff}} D_{\text{eff}}} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial T}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 T}{\partial \rho^2} + \frac{16}{\pi^2 \rho^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \varphi^2} \right) + \frac{\hat{S} c_0}{T_{\text{op}} c_k} \sum_{j=1}^5 Q_j \omega_j, \\ \frac{\partial y_m}{\partial \tau} = \frac{\sigma}{\varepsilon_{\text{cat}}} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial y_m}{\partial \rho} - \hat{\mu} y_m \right) + \frac{16}{\pi^2 \rho^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial y_m}{\partial \varphi} - \varphi \hat{\mu} y_m \right) \right) + \frac{\hat{S}}{\varepsilon_{\text{cat}}} \sum_{j=1}^5 \nu_{mj} \omega_j, \\ \rho \frac{\partial \hat{\mu}}{\partial \rho} + \frac{\partial}{\partial \varphi} (\varphi \hat{\mu}) = \sigma \rho^2 \hat{S} \sum_{j=1}^5 \delta_j \omega_j, \\ \frac{\partial q_c}{\partial \tau} = - \frac{M_{\text{C}} c_0}{\gamma_{\text{cat}}} \hat{S} (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5), \\ \frac{\partial z_1}{\partial \tau} = \frac{c_0}{\gamma_{\text{cat}} q_c} \hat{S} (\omega_6 + z_1 M_{\text{C}} (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5)), \\ \frac{\partial z_2}{\partial \tau} = \frac{c_0}{\gamma_{\text{cat}} q_c} \hat{S} (\omega_7 + z_2 M_{\text{C}} (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5)), \\ \frac{\partial \theta_1}{\partial \tau} = - \hat{S} \left(\omega_4 + \frac{c_0}{\gamma_{\text{cat}}} \omega_6 \right), \\ \frac{\partial \theta_2}{\partial \tau} = \hat{S} \left(2\omega_1 - \omega_3 + \omega_4 - 2\omega_5 - \frac{c_0}{\gamma_{\text{cat}}} \omega_7 \right). \end{array} \right.$$

Здесь ρ — безразмерный полярный радиус, φ — безразмерный угол поворота, остальные обозначения, начально-краевые условия и значения параметров совпадают с постановкой задачи в сферических координатах.

Система была гиперболизирована и для нее записан аналог трехслойной разностной схемы из п. 3.2. Сходимость и устойчивость алгоритма также исследованы в постановке

сгущающихся сеток, выбрана сетка размерности 100×100 . Стоит отметить, что гиперболизированная модель также дает существенное увеличение шага интегрирования по времени, при этом ускорение расчетов растет в силу двумерной постановки задачи. Ниже приведены графики усредненных по зерну концентрации кислорода и температуры зерна исходной и гиперболизированной систем как наиболее резко меняющихся функций. Для иллюстративности расчет представлен на 10 секунд технологического времени (далее кривые концентраций совпадают до седьмого знака после запятой, а кривые температуры — до пятого).

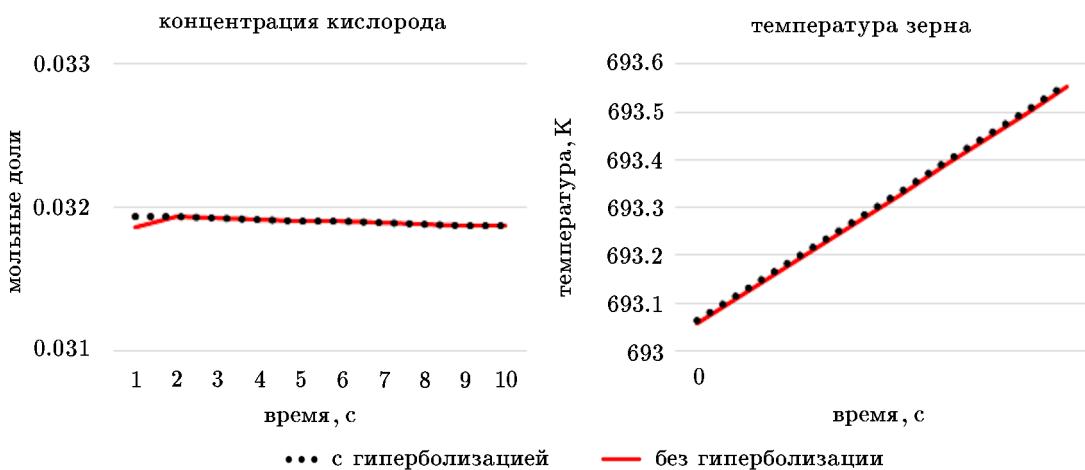


Рис. 7. Концентрация кислорода и температура в зависимости от времени

Как видно из рис. 7, на начальных стадиях расхождения концентраций достигают 10^{-4} (для сравнения при решении одномерной задачи присутствуют различия порядка 10^{-8}). Относительно высокая точность расчета достигается за счет использования трехстадийного метода Рунге–Кутты пятого порядка точности при быстрых химических реакциях, которые приводят к существенным колебаниям концентраций. Расхождения в значениях температуры достигают более серьезного значения — порядка 10^{-4} . Это связано с более низким порядком точности при расчете температуры — решающую роль играет теплообмен между зерном катализатора и окружающей средой, вклад экзотермических реакций на первых порах невелик.

5. Заключение

В этой статье представлено применение метода гиперболизации параболических уравнений для математической модели окислительной регенерации сферического зерна катализатора. Для гиперболизированной модели построена и реализована трехслойная разностная схема с расщеплением по физическим процессам; химическая кинетика интегрируется отдельно трехстадийным методом Рунге–Кутты пятого порядка с адаптивным шагом.

Для апробации алгоритма были проведены вычислительные эксперименты. Новый алгоритм многократно превосходит интегро-интерполяционный метод с расщеплением по физическим процессам при интегрировании на подробных сетках. Это объясняется ослаблением условия устойчивости разностной схемы: в новой гиперболической системе шаг интегрирования по времени лимитируется его отношением к шагу по пространству, а не к квадрату шага по пространству, как в параболической исходной задаче.

Для проверки адекватности алгоритма также была рассмотрена двумерная постановка задачи в полярных координатах. Анализ показал, что применение гиперболизации позволяет значительно сократить расчетное время, при этом при использовании методов высокого порядка точности различия между решениями возмущенной и исходной систем несущественны.

Результаты исследования дают основания полагать эффективность гиперболизации для двумерной задачи моделирования цилиндрического зерна катализатора и пространственно более сложной задачи моделирования процесса регенерации в слое катализатора. Исследуемый алгоритм является перспективным с точки зрения повышения порядка точности по времени и пространству до второго, это обеспечит нахождение решений на первом временном слое с использованием методов второго порядка точности.

Литература

1. **Боресков Г.К., Слинько М.Г.** Моделирование химических реакторов // Теоретические основы химической технологии. — 1967. — Т. 1. № 1. — С. 5–16.
2. **Боресков Г.К., Слинько М.Г.** Расчет каталитических процессов в промышленных реакторах // Химическая промышленность. — 1960. — № 3. — С. 17–25.
3. **Слинько М.Г.** Некоторые итоги развития и применения математического моделирования химических реакторов // Управляемые системы. — 1968. — № 1. — С. 74–82.
4. **Малиновская О.А., Бесков В.С., Слинько М.Г.** Моделирование каталитических процессов на пористых зернах. — Новосибирск: Наука, 1975.
5. **Боресков Г.К., Бесков В.С., Иванов А.А., Малиновская О.А.** Роль внутридиффузационного торможения для обратимых процессов // Докл. АН СССР. — 1969. — Т. 188, № 4. — С. 855–858.
6. **Масагутов Р.М., Морозов Б.Ф., Кутепов Б.И.** Регенерация катализаторов в нефтепереработке и нефтехимии. — М.: Химия, 1987.
7. **Франк-Каменецкий Д.А.** Диффузия и теплопередача в химической кинетике. — М.: Наука, 1987.
8. **Загоруйко А.Н.** Основы математического моделирования каталитических реакторов. — Новосибирск: Редакционно-издательский центр НГУ, 2015.
9. **Матрос Ю.П.** Каталитические процессы в нестационарных условиях. — Новосибирск: Наука, 1987.
10. **Oran E.S., Boris J.P.** Numerical Simulation of Reactive Flow. — Elsevier Ecience Publishing, 1987.
11. **Снытников В.Н., Пескова Е.Е., Стояновская О.П.** Модель двухтемпературной среды газ–твердые наночастицы с лазерным пиролизом метана // Мат. моделирование. — 2023. — Т. 35, № 4. — С. 24–50. — DOI: 10.20948/mm-2023-04-02. Перевод: Snytnikov V.N., Peskova E.E. Stoyanovskaya O.P. Mathematical model of a two-temperature medium of gas–solid nanoparticles with laser methane pyrolysis // Math. Models. Comput. Simul. — 2023. — Vol. 15. — P. 877–893. — DOI: 10.1134/S2070048223050095.
12. **Жалнин Р.В., Масягин В.Ф., Тишкун В.Ф.** Решение двумерных задач газовой динамики с использованием неявной схемы для метода Галеркина с разрывными базисными функциями на неструктурированных треугольных сетках // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2022. — Т. 25, № 1. — С. 19–32. Перевод: Zhalnin R.V., Masyagin V.F., Tishkin V.F. Solving two-dimensional problems of gas dynamics using an implicit scheme for the discontinuous Galerkin method on unstructured triangular

grids // Numerical Analysis and Applications. — 2022. — Vol. 15, № 1. — P. 16–26. — DOI: 10.1134/S1995423922010025.

13. **Buranay S.C., Arshad N.** Solution of heat equation by a novel implicit scheme using block hybrid preconditioning of the conjugate gradient method // Bulletin of the Karaganda University. Mathematics Series. — 2023. — Vol. 109, № 1. — P. 58–80. — DOI: 10.31489/2023M1/58-80.
14. **Четверушкин Б.Н., Якобовский М.В.** О перспективах развития в России высокопроизводительных вычислений и предсказательного моделирования в современных технологиях // Вестник Российской академии наук. — 2021. — Т. 91, № 12. — С. 1108–1114. — DOI: 10.31857/S0869587321120057.
15. **Осипов В.П., Четверушкин Б.Н.** Вычислительные алгоритмы для систем с экстрамассивным параллелизмом // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 2020. — Т. 60, № 5. — С. 802–814. — DOI: 10.31857/S004466920050117. Перевод: Osipov V.P., Chetverushkin B.N. Numerical algorithms for systems with extramassive parallelism // Comput. Mathem. Math. Phys. — 2020. — Vol. 60. — P. 783–794. — DOI: 10.1134/S0965542520050115.
16. **Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б.** О прямом методе решения задачи сопряженного теплообмена газовой смеси и твердого тела. — Москва, 2023. — (Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша; 12). — DOI: 10.20948/prepr-2023-12.
17. **Feodoritova O.B., Krasnov M.M., Zhukov V.T.** A numerical method for conjugate heat transfer problems in multicomponent flows // J. Physics: Conf. Series. — 2021. — Vol. 2028, № 1. — Article № 012024. — DOI: 10.1088/1742-6596/2028/1/012024.
18. **Волков К.Н., Емельянов В.Н., Карпенко А.Г.** Численное моделирование газодинамических и физико-химических процессов при обтекании тел гиперзвуковым потоком // Вычислительные методы и программирование. — 2017. — Т. 18, № 4. — С. 387–405. — DOI: 10.26089/NumMet.v18r433.
19. **Yazovtseva O.S., Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Sukharev L.A., Zagoruiko A.N.** Computer simulation of coke sediments burning from the whole cylindrical catalyst grain // Mathematics. — 2023. — Vol. 11, № 3. — Article № 669. — DOI: 10.3390/math11030669.
20. **Peskova E.E.** Numerical modeling of subsonic axisymmetric reacting gas flows // J. Physics: Conf. Series. — 2021. — Vol. 2057, № 1. — Article № 012071. — DOI: 10.1088/1742-6596/2057/1/012071.
21. **Самарский А.А., Гулин А.В.** Устойчивость разностных схем. Изд. 3-е, стереотип. — Москва: Книжный дом “ЛИБРОКОМ”, 2009.
22. **Голант В.Е., Жилинский А.П., Сахаров И.Е.** Основы физики плазмы. — М.: Атомиздат, 1977.
23. **Губайдуллин И.М., Пескова Е.Е., Язовцева О.С., Загоруйко А.Н.** Численное моделирование окислительной регенерации сферического зерна катализатора // Матем. Моделирование. — 2022. — Т. 34, № 11. — С. 48–66. — DOI: 10.20948/mm-2022-11-04. Перевод: Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Yazovtseva O.S., Zagoruiko A.N. Numerical simulation of oxidative regeneration of a spherical catalyst grain // Math. Models Comput. Simul. — 2023. — Vol. 15. — P. 485–495. — DOI: 10.1134/S2070048223030079.
24. **Репин С.И., Четверушкин Б.Н.** Оценки разности приближенных решений задач Коши для параболического диффузационного уравнения и гиперболического уравнения с малым параметром // Докл. РАН. — 2013. — Т. 451, № 3. — С. 255–258.
25. **Мышецкая Е.Е., Тишкун В.Ф.** Оценки влияния гиперболизации для уравнения теплопроводности // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 2015. — Т. 55, № 8. — С. 1299–1304. Перевод: Myshetskaya E.E., Tishkin V.F. Estimates of the hyperbolization effect on the heat equation // Comput. Mathem. Math. Phys. — 2015. — Vol. 55, № 8. — P. 1270–1275. — DOI: 10.1134/S0965542515080138.

26. Четверушкин Б.Н., Ольховская О.Г. Моделирование процесса лучистой теплопроводности на высокопроизводительных вычислительных системах // Докл. РАН. Математика, информатика, процессы управления. — 2020. — Т. 491, № 1. — С. 111–114. — DOI: 10.31857/S2686954320020083.
27. Четверушкин Б.Н., Ольховская О.Г., Гасилов В.А. Явная схема для решения нелинейного уравнения теплопроводности // Мат. моделирование. — 2022. — Т. 34, № 12. — С. 3–19. — DOI: 10.20948/mm-2022-12-01. Перевод: Chetverushkin B.N., Olkhovskaya O.G., Gasilov V.A. An Explicit difference scheme for a nonlinear heat conduction equation // Math. Models Comput. Simul. — 2023. — Vol. 15. — P. 529–538. — DOI: 10.1134/S207004822303003.
28. Yazovtseva O., Grishaeva O., Gubaydullin I., Peskova E. Construction of a parallel algorithm for the numerical modeling of coke sediments burning from the spherical catalyst grain // Communications in Computer and Information Science. — 2022. — Vol. 1618: Parallel Computational Technologies. — P. 248–260. — DOI: 10.1007/978-3-031-11623-0_17.
29. Губайдуллин И.М. Математическое моделирование динамических режимов окислительной регенерации катализаторов в аппаратах с неподвижным слоем: Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук: 05.13.16. — Уфа: НИИ нефтехимии и катализа, 1996.
30. Губайдуллин И.М., Язовцева О.С. Исследование усредненной модели окислительной регенерации закоксованного катализатора // Компьютерные исследования и моделирование. — 2021. — Т. 13, № 1. — С. 149–161.
31. Yazovtseva O.S., Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Usmanova A.A., Zagoruiko A.N. MPI-Based computational algorithm for modeling a cylindrical catalyst grain during oxidative regeneration // Communications in Computer and Information Science. — 2023. — Vol. 1868: Parallel Computational Technologies. — P. 336–350. — DOI: 10.1007/978-3-031-38864-4_24.
32. Зельдович Я.Б. К теории реакции на пористом или порошкообразном материале // Журн. физ. химии. — 1939. — Т. 13, № 2. — С. 163–172.

Поступила в редакцию 12 сентября 2023 г.
После исправления 29 мая 2024 г.
Принята к печати 26 августа 2024 г.

Литература в транслитерации

1. Boreskov G.K., Slinko M.G. Modelirovaniye khimicheskikh reaktorov // Teoreticheskie osnovy khimicheskoi tekhnologii. — 1967. — Т. 1. № 1. — С. 5–16.
2. Boreskov G.K., Slinko M.G. Raschet kataliticheskikh processov v promyshlennykh reaktorakh // Khimicheskaya promyshlennost'. — 1960. — № 3. — С. 17–25.
3. Slinko M.G. Nekotorye itogi razvitiya i primeneniya matematicheskogo modelirovaniya khimicheskikh reaktorov // Upravlyayemye sistemy. — 1968. — № 1. — С. 74–82.
4. Malinovskaya O.A., Beskov V.S., Slinko M.G. Modelirovaniye kataliticheskikh processov na poristykh zernakh. — Novosibirsk: Nauka, 1975.
5. Boreskov G.K., Beskov V.S., Ivanov A.A., Malinovskaya O.A. Rol' vnutridiffuzionnogo tormozheniya dlya obratimykh processov // Dokl. AN SSSR. — 1969. — Т. 188, № 4. — С. 855–858.
6. Masagutov R.M., Morozov B.F., Kuteporov B.I. Regeneraciya katalizatorov v neftepererabotke i neftekhimii. — M.: Khimiya, 1987.
7. Frank-Kamenetskiy D.A. Diffuziya i teploperedacha v khimicheskoi kinetike. — M.: Nauka, 1987.
8. Zagoruiko A.N. Osnovy matematicheskogo modelirovaniya kataliticheskikh reaktorov. — Novosibirsk: Redakcionno-izdatel'skii centr NGU, 2015.

9. **Matros Yu.Sh.** Kataliticheskie processy v nestacionarnykh usloviyakh. — Novosibirsk: Nauka, 1987.
10. **Oran E.S., Boris J.P.** Numerical Simulation of Reactive Flow. — Elsevier Ecience Publishing, 1987.
11. **Snytnikov V.N., Peskova E.E., Stoyanovskaya O.P.** Model' dvukh temperaturnoi sredy gaz-tverdye nanochasticy s lazernym pirolizom metana // Mat. modelirovanie. — 2023. — T. 35, № 4. — S. 24–50. — DOI: 10.20948/mm-2023-04-02. Perevod: Snytnikov V.N., Peskova E.E. Stoyanovskaya O.P. Mathematical model of a two-temperature medium of gas-solid nanoparticles with laser methane pyrolysis // Math. Models. Comput. Simul. — 2023. — Vol. 15. — P. 877–893. — DOI: 10.1134/S2070048223050095.
12. **Zhalnin R.V., Masyagin V.F., Tishkin V.F.** Reshenie dvumernykh zadach gazovoi dinamiki s ispol'zovaniem neyavnoi skhemy dlya metoda Galerkina s razryvnymi bazisnymi funkciyami na nestrukturirovannykh treugol'nykh setkakh // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie. — Novosibirsk, 2022. — T. 25, № 1. — S. 19–32. Perevod: Zhalnin R.V., Masyagin V.F., Tishkin V.F. Solving two-dimensional problems of gas dynamics using an implicit scheme for the discontinuous Galerkin method on unstructured triangular grids // Numerical Analysis and Applications. — 2022. — Vol. 15, № 1. — P. 16–26. — DOI: 10.1134/S1995423922010025.
13. **Buranay S.C., Arshad N.** Solution of heat equation by a novel implicit scheme using block hybrid preconditioning of the conjugate gradient method // Bulletin of the Karaganda University. Mathematics Series. — 2023. — Vol. 109, № 1. — P. 58–80. — DOI: 10.31489/2023M1/58-80.
14. **Chetverushkin B.N., Yakobovskii M.V.** O perspektivakh razvitiya v Rossii vysokoproizvoditel'nykh vychislenii i predskazatel'nogo modelirovaniya v sovremennykh tekhnologiyakh // Vestnik Rossiiskoi akademii nauk. — 2021. — T. 91, № 12. — S. 1108–1114. — DOI: 10.31857/S0869587321120057.
15. **Osipov V.P., Chetverushkin B.N.** Vychislitel'nye algoritmy dlya sistem s ekstramassivnym parallelizmom // Zhurn. vychisl. matem. i mat. fiziki. — 2020. — T. 60, № 5. — S. 802–814. — DOI: 10.31857/S0044466920050117. Perevod: Osipov V.P., Chetverushkin B.N. Numerical algorithms for systems with extramassive parallelism // Comput. Mathem. Math. Phys. — 2020. — Vol. 60. — P. 783–794. — DOI: 10.1134/S0965542520050115.
16. **Zhukov V.T., Novikova N.D., Feodoritova O.B.** O pryamom metode resheniya zadachi sopryazhennogo teploobmena gazovoi smesi i tverdogo tela. — Moskva, 2023. — (Preprint IPM im. M.V. Keldysha; 12). — DOI: 10.20948/prepr-2023-12.
17. **Feodoritova O.B., Krasnov M.M., Zhukov V.T.** A numerical method for conjugate heat transfer problems in multicomponent flows // J. Physics: Conf. Series. — 2021. — Vol. 2028, № 1. — Article № 012024. — DOI: 10.1088/1742-6596/2028/1/012024.
18. **Volkov K.N., Emel'yanov V.N., Karpenko A.G.** Chislennoe modelirovaniye gazodinamicheskikh i fiziko-khimicheskikh processov pri obtekaniye tel giperzvukovym potokom // Vychislitel'nye metody i programmirovaniye. — 2017. — T. 18, № 4. — S. 387–405. — DOI: 10.26089/NumMet.v18r433.
19. **Yazovtseva O.S., Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Sukharev L.A., Zagoruiko A.N.** Computer simulation of coke sediments burning from the whole cylindrical catalyst grain // Mathematics. — 2023. — Vol. 11, № 3. — Article № 669. — DOI: 10.3390/math11030669.
20. **Peskova E.E.** Numerical modeling of subsonic axisymmetric reacting gas flows // J. Physics: Conf. Series. — 2021. — Vol. 2057, № 1. — Article № 012071. — DOI: 10.1088/1742-6596/2057/1/012071.
21. **Samarskiy A.A., Gulin A.V.** Ustoichivost' raznostnykh skhem. Izd. 3-e, stereotip. — Moskva: Knizhnyi dom "LIBROKOM", 2009.
22. **Golant V.E., Zhilinskii A.P., Sakharov I.E.** Osnovy fiziki plazmy. — M.: Atomizdat, 1977.

23. **Gubaidullin I.M., Peskova E.E., Yazovtseva O.S., Zagoruiko A.N.** Chislennoe modelirovaniye okislitel'noi regeneracii sfericheskogo zerna katalizatora // Matem. Modelirovaniye. — 2022. — T. 34, № 11. — S. 48–66. — DOI: 10.20948/mm-2022-11-04. Perevod: Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Yazovtseva O.S., Zagoruiko A.N. Numerical simulation of oxidative regeneration of a spherical catalyst grain // Math. Models Comput. Simul. — 2023. — Vol. 15. — P. 485–495. — DOI: 10.1134/S2070048223030079.
24. **Repin S.I., Chetverushkin B.N.** Ocenki raznosti priblizhennykh reshenii zadach Koshi dlya parabolicheskogo diffuzionnogo uravneniya i giperbolicheskogo uravneniya s malym parametrom // Dokl. RAN. — 2013. — T. 451, № 3. — S. 255–258.
25. **Myshetskaya E.E., Tishkin V.F.** Ocenki vliyaniya giperbolizacii dlya uravneniya teploprovodnosti // Zhurn. vychisl. matem. i mat. fiziki. — 2015. — T. 55, № 8. — S. 1299–1304. Perevod: Myshetskaya E.E., Tishkin V.F. Estimates of the hyperbolization effect on the heat equation // Comput. Mathem. Math. Phys. — 2015. — Vol. 55, № 8. — P. 1270–1275. — DOI: 10.1134/S0965542515080138.
26. **Chetverushkin B.N., Olkhovskaya O.G.** Modelirovaniye processa luchistoi teploprovodnosti na vysokoproizvoditel'nykh vychislitel'nykh sistemakh // Dokl. RAN. Matematika, informatika, processy upravleniya. — 2020. — T. 491, № 1. — S. 111–114. — DOI: 10.31857/S2686954320020083.
27. **Chetverushkin B.N., Olkhovskaya O.G., Gasilov V.A.** YAvnaya skhema dlya resheniya nelineinogo uravneniya teploprovodnosti // Mat. modelirovaniye. — 2022. — T. 34, № 12. — S. 3–19. — DOI: 10.20948/mm-2022-12-01. Perevod: Chetverushkin B.N., Olkhovskaya O.G., Gasilov V.A. An Explicit difference scheme for a nonlinear heat conduction equation // Math. Models Comput. Simul. — 2023. — Vol. 15. — P. 529–538. — DOI: 10.1134/S207004822303003.
28. **Yazovtseva O., Grishaeva O., Gubaydullin I., Peskova E.** Construction of a parallel algorithm for the numerical modeling of coke sediments burning from the spherical catalyst grain // Communications in Computer and Information Science. — 2022. — Vol. 1618: Parallel Computational Technologies. — P. 248–260. — DOI: 10.1007/978-3-031-11623-0_17.
29. **Gubaidullin I.M.** Matematicheskoe modelirovaniye dinamicheskikh rezhimov okislitel'noi regeneracii katalizatorov v apparatakh s nepodvizhnym sloem: Avtorefer. dis. ... kand. fiz.-mat. nauk: 05.13.16. — Ufa: NII neftekhimii i kataliza, 1996.
30. **Gubaidullin I.M., Yazovtseva O.S.** Issledovaniye usrednennoi modeli okislitel'noi regeneracii zakoksovannogo katalizatora // Komp'yuternye issledovaniya i modelirovaniye. — 2021. — T. 13, № 1. — S. 149–161.
31. **Yazovtseva O.S., Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Usmanova A.A., Zagoruiko A.N.** MPI-Based computational algorithm for modeling a cylindrical catalyst grain during oxidative regeneration // Communications in Computer and Information Science. — 2023. — Vol. 1868: Parallel Computational Technologies. — P. 336–350. — DOI: 10.1007/978-3-031-38864-4_24.
32. **Zeldovich Ya.B.** K teorii reakcii na poristom ili poroshkoobraznom materiale // Zhurn. fiz. khimii. — 1939. — T. 13, № 2. — S. 163–172.

