УДК 517.958/519.62/.64

DOI: 10.33184/bulletin-bsu-2021.1.16

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ЖЕСТКОСТИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ ПРОЦЕССА КАТАЛИТИЧЕСКОЙ ИЗОМЕРИЗАЦИИ ПЕНТАН-ГЕКСАНОВОЙ ФРАКЦИИ

© Р. И. Фасхутдинова^{1*}, А. Г. Фасхутдинов¹, Л. В. Еникеева^{2,3},
И. М. Губайдуллин^{1,3}, Р. С. Мугалимова^{1,3}

¹Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН
Россия, Республика Башкортостан, 450075 г. Уфа, пр. Октября, 141.

²Новосибирский государственный университет
Россия, 630090 г. Новосибирск, Пирогова, 1.

³Уфимский государственный нефтяной технический университет
Россия, Республика Башкортостан, 450064 г. Уфа, Космонавтов, 1.

Тел./факс: +7 (347) 284 27 50.

*Email: roza_fask@mail.ru

В данной работе представлена модифицированная вероятная схема химических превращений процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции. Схема разработана на основе решения обратной задачи химической кинетики с использованием численных методов решения жестких систем обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (СОНДУ) – математического описания изменения концентраций, участвующих в реакциях веществ (прямая задача). Представлен краткий обзор существующих определений жестких СОНДУ. В среде Matlab было произведено сравнение результатов решения СОНДУ пятью методами (решателями) и выбраны эффективные методы решения прямой задачи. Приведенная методика анализа и выбора быстрых численных методов решения прямых задач может быть опробована для решения других обратных задач химической кинетики при исследовании механизмов сложных химических реакций.

Ключевые слова: каталитическая изомеризация пентан-гексановой фракции, реакторный блок, матрица Якоби, собственные значения, жесткая система дифференциальных уравнений.

Для исследования сложных промышленных процессов методами математического моделирования, в первую очередь, необходимо построить кинетическую модель [1]. Кинетическую модель разрабатывают на основе решения обратной задачи – путем восстановления констант скоростей и энергий активации стадий химического процесса на основе экспериментальных или промышленных данных [2]. Оперативность построения кинетической модели сильно зависит от времени многократного решения прямой задачи при идентификации констант скоростей и энергий активации [3]. Математическое описание прямой кинетической задачи представляет собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений – задачу Коши.

Системы дифференциальных уравнений можно классифицировать как жесткие и нежесткие [4–6]. И, как известно, решение жестких систем дифференциальных уравнений вызывает трудности, связанные с неустойчивостью счета.

Следует отметить, что единственного верного определения для понятия «жесткости» не существует, но среди них можно выделить несколько известных определений:

Определение 1. В работе [7] сказано, что чем более вырожденной является матрица Якоби, тем более жесткой является соответствующая система дифференциальных уравнений. Когда определитель якобиана, вне зависимости от значений функций и

переменной, равен нулю, система имеет предельно высокую степень жесткости.

Определение 2. Согласно [8] начальная задача для системы ОДУ считается жесткой в том случае, если вещественная часть хотя бы у одного из собственных чисел якобиана отрицательна и велика (по модулю), а решение на большей части отрезка интегрирования меняется медленно.

Определение 3. Задача Коши

$x'_i = f_i(t, \bar{x})$, $\bar{x}(t_0) = \bar{x}^0$, $t_0 \leq t \leq t_k$ называется жесткой в некотором интервале $I \subset [t_0, t_k]$, если:

1) $Re(\lambda_i(t)) < 0$, $1 \leq i \leq N$;

2) $\max Re(-\lambda_i(t)) / \min Re(-\lambda_i(t)) \gg 1$, где $\lambda_i(t)$ – собственные числа матрицы Якоби $\partial f_j / \partial x_i$, вычисленной на решении $\bar{f}(t, \bar{x})$.

Далее на примере схемы химических превращений процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции было произведено исследование на жесткость системы обыкновенных дифференциальных уравнений.

В качестве объекта исследования выбрана промышленная установка каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции. Сырьем данной установки является гидроочищенная бензиновая фракция с пределами кипения 62–70 °С. В качестве катализатора процесса применяют бифункциональный катализатор отечественного производства марки СИ-2. На основе имеющихся исходных данных была создана следующая схема превращений [9], которая показана на рис. 1.

Рис. 1. Принятая схема превращений процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции.

Рассматриваемая нами система ОДУ, состоявшая из 17 уравнений, поскольку реакционная смесь состоит из 17 компонентов, была записана согласно закону действующих масс [10]:

$$\frac{dx_i}{d\tau} = \sum_{j=1}^J v_{ij} w_j, i = 1, \dots, I \quad (1)$$

$$w_j = k_j \prod_{i=1}^I (x_i)^{v_{ij}} \quad (2)$$

$$k_j = k_j^0 \exp\left(-\frac{E_j}{RT}\right) \quad (3)$$

с начальными условиями: при $\tau = 0, x_i(0) = x_i^0$, где v_{ij} – стехиометрические коэффициенты схем химических превращений; J – количество стадий, x_i – мольные доли i -го компонента, участвующего в реакциях; I – количество компонентов; w_j – скорость j -ой стадии, кмоль/(ч·кг кат.); k_j – константа скорости, кмоль/(ч·кг кат.); E_j – энергии активации реакций, кал/моль; R – газовая постоянная, равная 8,314 Дж/(моль·К); T – температура, К; k_j^0 – пре-

дэкспоненциальные множители, кмоль/(ч·кг кат.); τ – условное время контакта, (кг кат.). СОНДУ, описывающая данные реакции, представлена на рис. 2.

Из рассчитанной матрицы Якоби видно, что образуются 3 нулевых столбца. Это связано с тем, что в принятой нами схеме превращений не рассмотрено вступление алканов C_1 – C_3 в различные реакции между собой и с другими компонентами, поскольку при данных условиях эти реакции маловероятны. Нами рассмотрены реакции, где алканы C_1 – C_3 могут только образоваться в следствие реакций гидрокрекинга. Следовательно, определитель якобиана не зависимо от значений функций и переменной будет равен нулю, что говорит о предельно высокой степени жесткости [7].

Далее были рассчитаны собственные значения λ для получившейся матрицы в начальный момент времени при температуре равной 147 °С (табл. 1).

Таблица 1

Собственные значения матрицы Якоби λ_{1-17} в начальный момент времени

λ	Собственные значения матрицы Якоби	λ	Собственные значения матрицы Якоби
λ_1	0	λ_{10}	$-1.0764 \cdot 10^{18}$
λ_2	0	λ_{11}	$-1.3029 \cdot 10^{18}$
λ_3	0	λ_{12}	$-8.8033 \cdot 10^{17}$
λ_4	$-5.1061 \cdot 10^{31}$	λ_{13}	$-5.4808 \cdot 10^{16}$
λ_5	$-3.9635 \cdot 10^{27}$	λ_{14}	$-5.2368 \cdot 10^{14}$
λ_6	$-1.2252 \cdot 10^{21}$	λ_{15}	$7.8384 \cdot 10^{11}$
λ_7	$-2.2475 \cdot 10^{19}$	λ_{16}	$-1.6138 \cdot 10^{13}$
λ_8	$3.7481 \cdot 10^{11} + 1.9151i$	λ_{17}	$-7.0145 \cdot 10^3$
λ_9	$3.7481 \cdot 10^{11} - 1.9151i$		

$$\begin{cases}
 \frac{dx_1}{d\tau} = -W_1 + W_{18} - W_{20} - W_{21} + W_{24} \\
 \frac{dx_2}{d\tau} = W_1 - W_{22} + W_{27} + W_{28} + W_{29} \\
 \frac{dx_3}{d\tau} = -W_2 - W_3 - W_{13} - W_{23} - W_{24} - W_{25} \\
 \frac{dx_4}{d\tau} = W_2 - W_4 - W_5 - W_6 - W_{14} - W_{26} \\
 \frac{dx_5}{d\tau} = W_3 + W_4 - W_7 - W_8 - W_{15} - W_{27} \\
 \frac{dx_6}{d\tau} = W_5 + W_7 + W_9 - W_{16} - W_{28} \\
 \frac{dx_7}{d\tau} = W_6 + W_8 + W_9 - W_{17} - W_{23} \\
 \frac{dx_8}{d\tau} = -W_{10} - W_{11} \\
 \frac{dx_9}{d\tau} = -3W_{10} - 3W_{11} + W_{13} + W_{14} + W_{15} + W_{16} + W_{17} - W_{18} - W_{20} - \\
 - W_{21} - W_{22} - W_{23} - W_{24} - W_{25} - W_{26} - W_{27} - W_{28} - W_{29} \\
 \frac{dx_{10}}{d\tau} = W_{10} - W_{12} + W_{13} \\
 \frac{dx_{11}}{d\tau} = W_{11} + W_{12} + W_{14} + W_{15} + W_{16} + W_{17} \\
 \frac{dx_{12}}{d\tau} = -W_{18} \\
 \frac{dx_{13}}{d\tau} = -W_{19} - W_{21} \\
 \frac{dx_{14}}{d\tau} = W_{19} + W_{22} + W_{25} \\
 \frac{dx_{15}}{d\tau} = W_{20} + 2W_{23} \\
 \frac{dx_{16}}{d\tau} = W_{20} + W_{25} + W_{26} \\
 \frac{dx_{17}}{d\tau} = W_{21} + W_{22} + W_{24} + W_{27} + W_{28} + W_{29}
 \end{cases}
 \begin{cases}
 W_1 = k_1 x_1 - k_2 x_2 \\
 W_2 = k_3 x_3 - k_4 x_4 \\
 W_3 = k_5 x_3 - k_6 x_5 \\
 W_4 = k_7 x_4 - k_8 x_5 \\
 W_5 = k_9 x_4 - k_{10} x_6 \\
 W_6 = k_{11} x_4 - k_{12} x_7 \\
 W_7 = k_{13} x_5 - k_{14} x_6 \\
 W_8 = k_{15} x_5 - k_{16} x_7 \\
 W_9 = k_{17} x_6 - k_{18} x_7 \\
 W_{10} = k_{19} x_8 x_9^3 - k_{20} x_{10} \\
 W_{11} = k_{21} x_8 x_9^3 - k_{22} x_{11} \\
 W_{12} = k_{23} x_{10} - k_{24} x_{11} \\
 W_{13} = k_{25} x_3 - k_{26} x_9 x_{10} \\
 W_{14} = k_{27} x_4 - k_{28} x_{11} x_9 \\
 W_{15} = k_{29} x_5 - k_{30} x_{11} x_9 \\
 W_{16} = k_{31} x_6 - k_{32} x_{11} x_9 \\
 W_{17} = k_{33} x_7 - k_{34} x_{11} x_9 \\
 W_{18} = k_{35} x_{12} x_9 - k_{36} x_{13} \\
 W_{19} = k_{37} x_{13} - k_{38} x_{14} \\
 W_{20} = k_{39} x_1 x_9 \\
 W_{21} = k_{40} x_1 x_9 \\
 W_{22} = k_{41} x_2 x_9 \\
 W_{23} = k_{42} x_3 x_9 \\
 W_{24} = k_{43} x_3 x_9 \\
 W_{25} = k_{44} x_3 x_9 \\
 W_{26} = k_{45} x_4 x_9 \\
 W_{27} = k_{46} x_5 x_9 \\
 W_{28} = k_{47} x_6 x_9 \\
 W_{29} = k_{48} x_7 x_9
 \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix}
 -k_1 - k_{36} - (k_{39} + k_{40})x_9 & k_2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 k_1 & -k_2 - k_{41}x_9 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & -k_3 - k_5 - k_{25} - (k_{42} + k_{43} + k_{44})x_9 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & k_3 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & k_5 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 k_{36} - (k_{39} + k_{40})x_9 & -k_{41}x_9 & k_{25} - (k_{42} + k_{43} + k_{44})x_9 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & k_{25} & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 k_{36} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & \dots & k_{38} & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & \dots & -k_{38} & 0 & 0 & 0 \\
 k_{39}x_9 & 0 & 2k_{42}x_9 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 k_{39}x_9 & 0 & k_{44}x_9 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 k_{40}x_9 & k_{41}x_9 & k_{43}x_9 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0
 \end{pmatrix}$$

Рис. 2. СОНДУ для описания реакций процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции и соответствующий якобиан.

Из табл. 1 видно, что некоторые собственные значения матрицы Якоби являются отрицательными и имеют большие значения по модулю ($\lambda_4 - \lambda_7, \lambda_{10} - \lambda_{14}$). А в качестве примера медленного изменения решения на большей части отрезка интегрирования приведен график изменения концентраций н-пентана и н-гексана в реакторном блоке (рис. 3). Поэтому согласно определению 2 можно утверждать, что задача является «жесткой».

Однако по определению 3 условия «жесткости» выполняются частично. Поскольку:

1) $Re(\lambda_i(t)) < 0, i = 4, 5, 6, 7, 10, 11, 12, 13, 14, 16, 17$, а $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 0$ и $Re(\lambda_i(t)) < 0, i = 8, 9, 15$;

2) $\frac{\max Re(-\lambda_4(t))}{\min Re(-\lambda_{17}(t))} = 7.28 \cdot 10^{27} \gg 1$.

Таким образом, был рассчитан якобиан для СДУ, а также собственные значения на начальный момент времени. Для определений 1 и 2 условия «жесткости» полностью выполняются, а для определения 3 выполняется частично. Следовательно, рассматриваемую прямую кинетическую задачу, описывающую химизм процесса изомеризации пентан-гексановой фракции, можно принять как «жесткую».

При решении обратных задач химической кинетики часто возникают ситуации, когда константы скоростей реакции принимают значения, отличные друг от друга на несколько порядков. Стандартные явные численные методы зачастую не справляются с интегрированием таких систем и перед нами встает задача рассмотрения методов, способных решать жесткие задачи.

Для решения нашей задачи нами были применены 5 встроенных решателей ПО Matlab, которые приведены в табл. 2.

Рис. 3. Изменение концентраций н-пентана и н-гексана в реакторах, где I — зона реактора 1, II — зона реактора 2, III — зона реактора 3, маркерами обозначены экспериментальные точки соответствующего компонента.

Таблица 2

Сравнение примененных решателей ПО Matlab

Решатель	Описание	Время расчета, сек.
ode45	Одношаговые явные методы Рунге-Кутты 4-го и 5-го порядка. Это классический метод, рекомендуемый для начальной пробы решения. Во многих случаях он дает хорошие результаты	9924.50
ode23	Одношаговые явные методы Рунге-Кутты 2-го и 4-го порядка. При умеренной жесткости системы ОДУ и низких требованиях к точности этот метод может дать выигрыш в скорости решения	7637.70
ode113	Многошаговый метод Адамса-Башворта-Мултона переменного порядка. Это адаптивный метод, который может обеспечить высокую точность решения	8540.50
ode15s	Многошаговый метод переменного порядка (от 1 до 5, по умолчанию 5), использующий формулы численного дифференцирования. Это адаптивный метод, его стоит применять, если решатель ode45 не обеспечивает решения	3.13
ode23s	Одношаговый метод, использующий модифицированную формулу Розенброка 2-го порядка. Может обеспечить высокую скорость вычислений при низкой точности решения жесткой системы дифференциальных уравнений	6.63

Исходя из табл. 2 видно, что все вышеперечисленные методы подходят для решения нашей задачи. Но при этом одношаговые явные методы Рунге-Кутты (ode23 и ode45) и многошаговый метод Адамса-Башворта-Мултона переменного порядка (ode113) имеют низкую скорость решения, что является важным показателем, так как решение обратной задачи химической кинетики это многократное решение прямой задачи.

А многошаговый метод переменного порядка (ode15s) и одношаговый метод Розенброка 2-го порядка (ode23s) показали минимальное время расчета, поэтому являются наиболее предпочтительными для решения нашей задачи. Данное утверждение хорошо согласуется с тем, что неявные методы при решении жестких задач дают лучший результат по сравнению с явными методами [11].

Выводы

В статье приведена разработанная модифицированная кинетическая модель процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции, учитывающая детальное образование побочных продуктов в ходе реакций гидрокрекинга.

В статье приведена теоретическая и экспериментальная методика исследования прямой кинетической задачи на жесткость. Установлена жесткость рассматриваемой СОНДУ на основе нескольких математических определений жесткости. В ходе работы было произведено сравнение пяти методов ode, в числе которых были методы, зарекомендовавшие себя эффективными для решения жестких систем.

Результаты проведенных вычислительных экспериментов на основе выбранных эффективных численных методов показали высокую адекватность. Данные промышленной установки были описаны с высокой точностью.

Данная методика может быть опробована для решения других задач химической кинетики, для решения которых требовались большие вычислительные ресурсы и раскрывает возможности для использования технологии параллельных вычислений при решении прямых и обратных задач при исследовании сложных механизмов промышленных технологических процессов [12–15].

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ (договор №20-31-90094/20, проект №19-37-60014) и гранта Российского научного фонда (проект №21-71-20047).

ЛИТЕРАТУРА

1. Губайдуллин И. М., Сайфуллина Л. В., Еникеев М. Р. Информационно-аналитическая система обратных задач химической кинетики // Уфа, 2011.
2. Губайдуллин И. М., Коледина К. Ф., Фасхутдинов Р. Р., Гильмутдинов А. Т. База данных кинетических моделей сложных реакций металлокомплексного катализа // Уфа, 2018.
3. Еникеева Л. В. Оптимизация кинетических параметров низкотемпературной паровой конверсии метан-пропановой смеси // Вестник Башкирского университета. 2017. Т. 22. №2. С. 386–390.
4. Шампайн Л. Ф., Гладвел И., Томпсон С. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений с использованием Matlab. СПб.: Лань, 2009. С. 304.
5. Уатт Дж. Холл, Дж. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Мир, 1979. С. 313.
6. Хайер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Наука, 1999. С. 685.
7. Тихонова М. В., Губайдуллин И. М., Спивак С. И. Численное решение прямой кинетической задачи методами Розенброка и Мишельсена для жестких систем дифференциальных уравнений // Журнал средневожского математического общества. 2010. Т. 12. №2. С. 26–32.
8. Каханер Д., Моулдер К., Нэш С. Численные методы и программное обеспечение. М.: Мир, 1998. С. 575.
9. Фасхутдинов А. Г., Ахметов И. В., Губайдуллин И. М., Мусина А. Е. Математическое моделирование процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции // Вестник Башкирского университета. 2018. Т. 23. №3. С. 739–744.
10. Еникеева Л. В. Алгоритм и программный комплекс для анализа механизма гибели ароматических нитрозооксидов и низкотемпературной конверсии легких углеводородов: дисс. ... канд. физ.-мат. наук / Башкирский государственный университет. Уфа, 2018.
11. Curtiss C. F. and Hirschfelder J. O. Integration of Stiff Equations // Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America. 1952. 38(3). С. 235–243.
12. Nurislamova L. F., Gubaydullin I. M., Koledina K. F., Safin R. R. Kinetic model of the catalytic hydroalumination of olefins with organoaluminum compounds // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. 2016. Т. 117. №1. С. 1–14.
13. Усков С. И., Еникеева Л. В., Потемкин Д. И., Беляев В. Д., Снытников П. В., Губайдуллин И. М., Кириллов В. А., Собянин В. А. Кинетика мягкого парового риформинга пропана в избытке метана на Ni-содержащем катализаторе // Катализ в промышленности. 2017. №1. С. 11–17.
14. Линд Ю. Б., Губайдуллин И. М., Мулюков Р. А. Методология параллельных вычислений для решения задач химической кинетики и буровой технологии // Системы управления и информационные технологии. 2009. №2(36). С. 44–49.
15. Коледина К. Ф. Последовательно-параллельное определение кинетических параметров при моделировании детального механизма гидроалюминирования олефинов: дисс. ... канд. физ.-мат. наук / Башкирский государственный университет. Уфа, 2011.

Поступила в редакцию 15.01.2021 г.

NUMERICAL ANALYSIS OF THE STIFFNESS OF MATHEMATICAL DESCRIPTION OF ISOMERIZATION OF PENTANE-HEXANE CUT PROCESS

© R. I. Faskhutdinova^{1*}, A. G. Faskhutdinov¹, L. V. Enikeeva^{2,3},
I. M. Gubaidullin^{1,3}, R. S. Mugalimova^{1,3}

¹*Institute of Petrochemistry and Catalysis, Ufa Federal Research Center of RAS
141 Oktyabrya Avenue, 450075 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia.*

²*Novosibirsk State University
2 Pirogov Street, 630090 Novosibirsk, Russia.*

³*Ufa State Petroleum Technological University
1 Kosmonavtov Street, 450064 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia.*

Phone: +7 (347) 284 27 50.

*Email: roza_fask@mail.ru

In this work, a modified probable scheme of chemical transformations of the catalytic isomerization of the pentane-hexane fraction is presented, taking into account the detailed formation of by-products in the course of hydrocracking reactions. The scheme was developed on the basis of solving the inverse problem of chemical kinetics using numerical methods for solving stiff systems of ordinary nonlinear differential equations (SONDE) – a mathematical description of the change in the concentrations of substances involved in the reactions (direct problem). The article presents a theoretical and experimental technique for studying the direct kinetic problem for stiffness. The Jacobian matrix was calculated for the considered SONDE, and the eigenvalues for it were found. The stiffness of the considered SONDE is established on the basis of several mathematical definitions of stiffness. In the Matlab software environment, in the course of work, a comparison of five ODE methods was made, among which there were methods proven effective for solving stiff systems. The results of the computational experiments were carried out on the basis of the selected effective numerical methods that showed high adequacy. The plant data was described with high accuracy. This technique can be tested for solving other problems of chemical kinetics, for the solution of which large computing resources were required and reveals the possibilities for using parallel computing technology in solving direct and inverse problems in the study of complex mechanisms of industrial technological processes.

Keywords: catalytic isomerization of pentane-hexane fraction, reactor block, Jacobian matrix, eigenvalues, stiff system of differential equations.

Published in Russian. Do not hesitate to contact us at bulletin_bsu@mail.ru if you need translation of the article.

REFERENCES

1. Gubaidullin I. M., Saifullina L. V., Enikeev M. R. Ufa, 2011.
2. Gubaidullin I. M., Koledina K. F., Faskhutdinov R. R., Gil'mutdinov A. T. Ufa, 2018.
3. Enikeeva L. V. Vestnik BashGU. 2017. Vol. 22. No. 2. Pp. 386–390.
4. Shampine L. F., Gladwell I., Thompson S. Reshenie obyknovennykh differentsial'nykh uravnenii s ispol'zovaniem Matlab [Solving ODEs with Mathlab]. Saint Petersburg: Lan', 2009. Pp. 304.
5. Watt G. Hall, J. Sovremennye chislennye metody resheniya obyknovennykh differentsial'nykh uravnenii [Modern numerical methods for ordinary differential equations]. Moscow: Mir, 1979. Pp. 313.
6. Haier E., Wanner G. Reshenie obyknovennykh dif-ferentsial'nykh uravnenii. Zhestkie i differentsial'no-algebraicheskie zadachi [Solving ordinary differential equations. Stiff and differential-algebraic problems]. Moscow: Nauka, 1999. Pp. 685.
7. Tikhonova M. V., Gubaidullin I. M., Spivak S. I. Zhurnal srednevolzhskogo matematicheskogo obshchestva. 2010. Vol. 12. No. 2. Pp. 26–32.
8. Kahaner D., Moler C., Nash S. Chislennye metody i programmnoe obespechenie [Numerical methods and software]. Moscow: Mir, 1998. Pp. 575.
9. Faskhutdinov A. G., Akhmetov I. V., Gubaidullin I. M., Musina A. E. Vestnik BashGU. 2018. Vol. 23. No. 3. Pp. 739–744.
10. Enikeeva L. V. Algoritm i programmyi kompleks dlya analiza mekhanizma gibeli aromaticeskikh nitrozooksidov i nizkotemperaturnoi konversii legkikh uglevodorodov: diss. ... kand. fiz-mat. nauk / BashGU. Ufa, 2018

11. Curtiss C. F. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America. 1952. 38(3). Pp. 235–243.
12. Nurislamova L. F., Gubaydullin I. M., Koledina K. F., Safin R. R. Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. 2016. Vol. 117. No. 1.S. 1–14.
13. Uskov S. I., Enikeeva L. V., Potemkin D. I., Belyaev V. D., Snytnikov P. V., Gubaidullin I. M., Kirillov V. A., Sobyenin V. A. Kataliz v promyshlennosti. 2017. No. 1. Pp. 11–17.
14. Lind Yu. B., Gubaidullin I. M., Mulyukov R. A. Sistemy upravleniya i informatsionnye tekhnologii. 2009. No. 2(36). Pp. 44–49.
15. Koledina K. F. Posledovatel'no-parallel'noe opredelenie kineticheskikh parametrov pri modelirovanii detal'nogo mekhanizma gidroaluminirovaniya olefinov: diss. ... kand. fiz-mat. nauk / BashGU. Ufa, 2011.

Received 15.01.2021.