****_{*} 化学化工 ∦

文章编号:1000-8608(2014)04-0397-06

三甲基萘脱烷基反应 S-系统数值解析

于志家*,张强,邹哲,毛庆,刘洋

(大连理工大学 化工学院, 辽宁 大连 116024)

摘要:被称为 S-系统的幂指数型解析法广泛应用在生物学研究中,但在化工领域应用很少. 对该法在三甲基萘脱烷基管式催化反应器数值解析中的应用进行了阐述.将反应的相关微分 方程组转化为 S-系统标准形式,结合有限泰勒级数的一般算法进行 S-系统解析,模拟了物料 沿反应器长度的转化情况与反应达到稳定状态时的产物分布情况.运算结果与 Runge-Kutta 法运算结果吻合.选取不同操作条件进行计算,结果表明,压力增大有利于三甲基萘的转化和 萘的生成,三甲基萘的转化率和萘的收率随反应时间的增加而增大,二甲基萘的收率随时间 增加先增大后减小,一甲基萘的收率随时间增加而增大.S-系统解析对化工生产的模拟与分 析具有高可靠性,解析结果对化工过程的平稳运行、故障诊断、优化设计具有指导意义.

关键词:S-系统;数值解析;过程模拟;萘的制备 **中图分类号:**TQ011 **文献标识码:**A **doi**:10.7511/dllgxb201404004

0 引 言

S-系统(synergistic and saturable system)是 指一类协同饱和幂指数形式的常微分方程,也称 GMA(generalized mass action)-系统.使用 S-系 统在求非线性常微分方程数值解时,不仅可以简 化方程,使其易于处理,使计算效率提高,而且可 以达到超高级的计算精度^[1-3].目前,S-系统主要 应用于生物学领域^[4-11],在化工方面应用^[12]较少. 随着计算技术的发展与化工模型的完善,该法在 化工领域内的应用前景广阔.

萘是重要的有机化工原料,广泛用于合成纤 维、树脂、增塑剂、染料等的生产中.国内外的萘产 品大多是经脱烷基反应制得的^[13].本文对管式反 应器中三甲基萘脱烷基反应进行模拟.

1 S-系统解析原理

S-系统的标准形式^[3]如下:

$$X_{i}^{(1)} = \alpha_{i} \prod_{j=1}^{n} X_{j}^{g_{i,j}} - \beta_{i} \prod_{j=1}^{n} X_{j}^{h_{i,j}}; i = 1, 2, \cdots, n$$

(1)

式中: X_i 、 α_i 、 β_i 为非负实数, $g_{i,j}$ 和 $h_{i,j}$ 为实数, $X_i^{(1)} = dX/dt$.

假设式(1)有解,其解在对数空间内用有限 泰勒级数展开,可以写为

$$Y_{i}(t + \Delta_{i}) = Y_{i}(t) + \sum_{m=1}^{p} \frac{Y_{i}^{(m)}(t)}{m!} \Delta_{i}^{m} =$$
$$Y_{i}(t) + \sum_{m=1}^{p} D_{i,m}; \ i = 1, 2, \cdots, n$$
(2)

式中: $Y_i \in X_i$ 的对数; $\Delta_i \in t$ 内到达下一计算点 时的增加量,即步长; $p \in A$ 限展开的阶数; $Y_i^{(m)}(t) \in Y_i(t) \in t$ 时刻的m 阶导数; $D_{i,m}$ 可用递 推的方式求得:

$$D_{i,1} = Y_i^{(1)} \cdot \Delta_i = \left(\frac{X_i^{(1)}}{X_i}\right) \cdot \Delta_i =$$

$$\Delta_i \cdot \alpha_i \exp\left(\sum_{j=1}^n g'_{i,j} Y_j\right) -$$

$$\Delta_i \cdot \beta_i \exp\left(\sum_{j=1}^n h'_{i,j} Y_j\right) =$$

$$A_i^{(1)} - B_i^{(1)}; \ i = 1, 2, \cdots, n \qquad (3)$$

收稿日期: 2014-01-19; 修回日期: 2014-05-04.

作者简介: 于志家*(1956-),男,博士,副教授,E-mail:yuzhijia@dlut.edu.cn.

式中:
$$g'_{i,j} = g_{i,j} - \delta_{i,j}$$
, $h'_{i,j} = h_{i,j} - \delta_{i,j}$;当 $i = j$ 时,
 $\delta_{i,j} = 1$;当 $i \neq j$ 时, $\delta_{i,j} = 0$.

$$D_{i,m} = \frac{Y_i^{(m)}}{m!} \cdot \Delta_i^m = \frac{Y_i^{(m)}}{m} = \frac{A_i^{(m)} - B_i^{(m)}}{m}$$
(4)

其中

$$Y_{i}^{(m)} = A_{i}^{(m)} - B_{i}^{(m)} = \frac{Y_{i}^{(m)}\Delta_{i}^{m}}{(m-1)!}$$
(5)

$$\overset{\smile}{A}_{i}^{(m)} = \frac{1}{m-1} \sum_{q=1}^{m-1} (\overset{\smile}{A}_{i}^{(m-q)} \sum_{j=1}^{n} g'_{i,j} Y_{j}^{(q)})$$
(6)

$$\overset{\circ}{B}_{i}^{(m)} = \frac{1}{m-1} \sum_{q=1}^{m-1} (\overset{\circ}{B}_{i}^{(m-q)} \sum_{j=1}^{n} h'_{i,j} Y_{j}^{(q)})$$
(7)

式(6) 与(7) 的递推关系可用数学归纳法予以证明. 对式(6),分别写出 A⁽¹⁾ ~ A⁽⁵⁾,各项系数组成杨辉三角形,由其对称性得到递推公式:

$$A^{(m)} = \sum_{r=1}^{m-1} \frac{(m-2)!}{(r-1)!(m-r-1)!} A^{(m-r)} \sum_{j=1}^{N} g'_{i,j} Y_{j}^{(r)}$$
(8)

假设当 m = k 时成立:

$$A^{(k)} = \sum_{r=1}^{k-1} \frac{(k-2)!}{(r-1)!(k-r-1)!} \times A^{(k-r)} \sum_{j=1}^{N} g'_{i,j} Y_j^{(r)} = A^{(k-r)} \sum_{j=1}^{N} g'_{i,j} Y_j^{(1)} + (k-2) \times A^{(k-2)} \sum_{j=1}^{N} g'_{i,j} Y_j^{(2)} + \dots + \frac{(k-2)!}{(r-2)!(k-r)!} A^{(k-r+1)} \sum_{j=1}^{N} g'_{i,j} Y_j^{(r-1)} + \frac{(k-2)!}{(r-1)!(k-r-1)!} A^{(k-r)} \sum_{j=1}^{N} g'_{i,j} Y_j^{(r)} + \dots + A^{(1)} \sum_{j=1}^{N} g'_{i,j} Y_j^{(k-1)}$$
(9)

当m = k + 1时,

$$A^{(k+1)} = (A^{(k)})' = A^{(k)} \sum_{j=1}^{N} g'_{i,j} Y_{j}^{(1)} + A^{(k-1)} \sum_{j=1}^{N} g'_{i,j} Y_{j}^{(2)} + (k-2)A^{(k-1)} \sum_{j=1}^{N} g'_{i,j} Y_{j}^{(2)} + (k-2)A^{(k-2)} \sum_{j=1}^{N} g'_{i,j} Y_{j}^{(3)} + \dots + \frac{(k-2)!}{(r-2)!(k-r)!} A^{(k-r+2)} \sum_{j=1}^{N} g'_{i,j} Y_{j}^{(r-1)} + \dots$$

$$\frac{(k-2)!}{(r-2)!(k-r)!}A^{(k-r+1)}\sum_{j=1}^{N}g'_{i,j}Y_{j}^{(r)} + \frac{(k-2)!}{(r-1)!(k-r-1)!}A^{(k-r+1)}\sum_{j=1}^{N}g'_{i,j}Y_{j}^{(r)} + \frac{(k-2)!}{(r-1)!(k-r-1)!}A^{(k-r)} \times \sum_{j=1}^{N}g'_{i,j}Y_{j}^{(r+1)} + \dots + A^{(2)}\sum_{j=1}^{N}g'_{i,j}Y_{j}^{(k-1)} + A^{(1)}\sum_{j=1}^{N}g'_{i,j}Y_{j}^{(k)} \quad (10)$$

每一项求导得两项,其中前一项求导所得的后一 项与第二项求导的前一项的变量项相同,可以合 并.所以:

$$\begin{aligned} A^{(k+1)} &= A^{(k)} \sum_{j=1}^{N} g'_{i,j} Y^{(1)}_{j} + (k+1-2) \times \\ & A^{(k-1)} \sum_{j=1}^{N} g'_{i,j} Y^{(2)}_{j} + \dots + \\ & \left[\frac{(k-2)!}{(r-2)!(k-r)!} + \right. \\ & \left. \frac{(k-2)!}{(r-1)!(k-r-1)!} \right] A^{(k-r+1)} \times \\ & \left. \sum_{j=1}^{N} g'_{i,j} Y^{(r)}_{j} + \dots + A^{(1)} \sum_{j=1}^{N} g'_{i,j} Y^{(k)}_{j} \end{aligned}$$
(11)

其中

$$\frac{(k-2)!}{(r-2)!(k-r)!} + \frac{(k-2)!}{(r-1)!(k-r-1)!} = \frac{(k-2)!}{(r-1)!(k-r)!} (k-1) = \frac{(k+1-2)!}{(r-1)!(k+1-r-1)!}$$
(12)

所以,当m = k + 1时也成立,则式(8)成立.

同理可证
$$B^{(m)} = \sum_{r=1}^{m-1} \frac{(m-2)!}{(r-1)!(m-r-1)!} B^{(m-r)} \sum_{j=1}^{N} h'_{i,j} Y_{j}^{(r)}$$
(13)

成立.

由式(5) 可知:

$$V_{j}^{(m)} = Y_{j}^{(m)} \Delta^{m} / (m-1)!$$
 (14)
 $\Delta^{(m)} = \Delta^{(m)} \Delta^{m} / (m-1)!$ (15)

$$A_j = A_j \Delta / (m-1)!$$
(15)

$$B_{j}^{(m)} = B_{j}^{(m)} \Delta^{m} / (m-1)!$$
(16)

将式(8)代人式(15)有

$$\begin{split} \widetilde{A}_{j}^{(m)} &= \frac{A_{j}^{(m)}\Delta^{m}}{(m-1)!} = \\ &\sum_{r=1}^{m-1} \frac{(m-2)!\Delta^{m}}{(r-1)!(m-r-1)!(m-1)!} \times \\ &A^{(m-r)} \sum_{j=1}^{N} g'_{i,j} Y_{j}^{(r)} = \\ &\frac{1}{(m-1)} \sum_{r=1}^{m-1} \frac{A^{(m-r)}\Delta^{m-r}}{(m-r-1)!} \times \\ &\sum_{j=1}^{N} g'_{i,j} \frac{Y_{j}^{(r)}\Delta^{r}}{(r-1)!} = \\ &\frac{1}{(m-1)} \sum_{r=1}^{m-1} \widetilde{A}_{j}^{(m-r)} \sum_{j=1}^{N} g'_{i,j} \widetilde{Y}_{j}^{(r)} \end{split}$$

同理可证得式(7).

2 三甲基萘脱烷基反应模型与解析

2.1 反应模型

在管式反应器中于 4.05 MPa 及 936 K 等温 条件下进行三甲基萘脱烷基反应^[14]:



根据物料衡算和反应动力学建立微分方程 组:

$$\frac{\mathrm{d}X_{\mathrm{t}}}{\mathrm{d}\tau} = k_1 (1 - X_{\mathrm{t}}) c_{\mathrm{h}} \tag{17}$$

$$\frac{\mathrm{d}Y_{\mathrm{d}}}{\mathrm{d}\tau} = \left[k_1(1-X_{\mathrm{t}}) - k_2 Y_{\mathrm{d}}\right]c_{\mathrm{h}} \tag{18}$$

$$\frac{\mathrm{d}Y_{\mathrm{m}}}{\mathrm{d}\tau} = k_{2}Y_{\mathrm{d}}c_{\mathrm{h}} - k_{3} \Big[Y_{\mathrm{m}}c_{\mathrm{h}} - \frac{c_{\mathrm{to}}(X_{\mathrm{t}} - Y_{\mathrm{d}} - Y_{\mathrm{m}})(3X_{\mathrm{t}} - 2Y_{\mathrm{d}} - Y_{\mathrm{m}})}{Kc_{\mathrm{h}}}\Big]$$
(19)

$$c_{h} = [c_{h0} - c_{t0} (3X_{t} - 2Y_{d} - Y_{m})]^{1/2}$$
 (20)
式中: X_t 为三甲基萘转化率, Y_d 为二甲基萘收

率, $Y_{\rm m}$ 为一甲基萘收率, τ 为反应时间, $c_{\rm h}$ 为反应 器内氢气浓度, $c_{\rm h0}$ 为氢气的初始浓度, $c_{\rm t0}$ 为三甲 基萘的初始浓度, $K = k_3/k_{-3}$. 在反应条件下, $K = 5, k_1 = 5.660 \times 10^{-6} \text{ m}^{1.5}/(\text{mol}^{0.5} \cdot \text{s}), k_2 =$ $5.866 \times 10^{-6} \text{ m}^{1.5}/(\text{mol}^{0.5} \cdot \text{s}), k_3 = 2.052 \times 10^{-6}$ $\text{m}^{1.5}/(\text{mol}^{0.5} \cdot \text{s}).$

2.2 S-系统的改写

将以上各式改写为 S-系统:

设 $X_t = x_1, Y_d = x_2, Y_m = x_3, c_h = x_4, k_1 = A, k_2 = B, k_3 = C, K = D, c_{t0} = E, c_{h0} = F.$

再设 $x_2 = x_5 x_6$, $\dot{x}_2 = \dot{x}_5 x_6 + x_5 \dot{x}_6$, $x_4 = x_7^{\frac{1}{2}}$, $x_8 = x_1 - x_2 - x_3$, $x_3 = x_9 x_{10}$, $x_8 = x_{11} x_{12}$, $x_4 = x_{13} x_{14} x_{15}$.

对以上方程组中的变量重新编号(5→2,6→ 3,9→4,10→5,11→6,12→7,13→8,14→9,15 → 10),得到 S-系统的标准形式:

$$x_{1}^{(1)} = A x_{8} x_{9} x_{10} - A x_{1} x_{8} x_{9} x_{10}$$
(21)

$$x_{2}^{(1)} = A x_{3}^{-1} x_{8} x_{9} x_{10} - A x_{1} x_{3}^{-1} x_{8} x_{9} x_{10}$$
(22)

$$x_{3}^{(1)} = -Bx_{3}x_{8}x_{9}x_{10}$$
(23)

$$x_{4}^{(1)} = Bx_{2}x_{3}x_{5}^{-1}x_{8}x_{9}x_{10} - Cx_{4}x_{8}x_{9}x_{10}$$
(24)

$$x_{5}^{(1)} = \frac{CF}{D} x_{4}^{-1} x_{6} x_{7} x_{8}^{-1} x_{9}^{-1} x_{10}^{-1} - \frac{C}{D} x_{4}^{-1} x_{6} x_{7} x_{8} x_{9} x_{10}$$

$$x_6^{(1)} = C x_4 x_5 x_7^{-1} x_8 x_9 x_{10}$$
(26)

$$x_7^{(1)} = \frac{C}{D} x_7 x_8 x_9 x_{10} - \frac{CF}{D} x_7 x_8^{-1} x_9^{-1} x_{10}^{-1}$$
(27)

$$x_{8}^{(1)} = \frac{AE}{2} x_{1} x_{9}^{-1} x_{10}^{-1} - \frac{AE}{2} x_{9}^{-1} x_{10}^{-1}$$
(28)

$$x_{9}^{(1)} = -\frac{BE}{2}x_{2}x_{3}x_{8}^{-1}x_{10}^{-1} - \frac{CE}{2}x_{4}x_{5}x_{8}^{-1}x_{10}^{-1}$$
 (29)

$$x_{10}^{(1)} = \frac{CEF}{2D} x_{6} x_{7} x_{8}^{-3} x_{9}^{-3} x_{10}^{-2} - \frac{CE}{2D} x_{6} x_{7} x_{8}^{-1} x_{9}^{-1} \quad (30)$$

初值条件为

$$egin{aligned} &x_1(0)=0\,,x_2(0)=0\,,x_3(0)=0\,,x_4(0)=0\,,\ &x_5(0)=0\,,x_6(0)=0\,,x_7(0)=0\,,\ &x_8(0)=F^{1/2}\,,x_9(0)=1\,,x_{10}(0)=1 \end{aligned}$$

计算流程图如图 1 所示,其中 n 为方程个数, p 为泰勒展开式级数,n、为所取计算点数.

按图1编制程序,上机计算,可得三甲基萘转 化率 X_t、二甲基萘收率 Y_d、一甲基萘收率 Y_m 和





图 1 S-系统程序框图 Fig. 1 S-system program block diagram

3 计算结果与讨论

本文依据三甲基萘脱烷基反应动力学模型与 S-系统解析方法,进行了管式固定床催化反应器 的数值模拟,图 2 为在 $T_0 = 936$ K、p = 4.05 MPa 时 X_t 、 Y_d 、 Y_m 、 Y_n 随时间的变化.由图可知,三甲 基萘的转化率 X, 和萘的收率 Y, 随反应时间的 增加而增大,二甲基萘的收率Y_d随时间增加先增 大后减小,一甲基萘的收率 Ym 随时间增加而增 大. 在反应初期,二甲基萘浓度较小,主要发生三 甲基萘的转化,二甲基萘收率增大;随着二甲基萘 浓度增大,二甲基萘转化成一甲基萘的反应速率 增大,当其反应速率超过生成速率,二甲基萘收率 Y_d下降,出现二甲基萘收率的极值点.工程实际 中, X_t要达到 80%,需要 280 min(16 800 s),即 需要的管长 L=16 800×0.1=1 680 m.此时,萘 的收率为 0.34, 与文献 [14] 数据(0.335 8) 一致. 显然,气体流过这样长的管道,压降将不可忽略.

改用多管并联的方法是可取的,这样可使压降大 为减小.研究中,还采用 Runge-Kutta 法进行了计 算,并与 S-系统解析进行了对比,从图 2 中可知, S-系统和Runge-Kutta 两种计算方法结果一致.



模拟计算中,系统地改变了操作压力,以考核 过程压力对反应进程的影响.图 3 为反应 5.5 h 后 X_t、Y_d、Y_m、Y_n随压力的变化.由图可知,三甲 基萘的转化率 X_t、一甲基萘的收率 Y_m、萘的收率 Y_n都随压力的升高而增大,而二甲基萘的收率 Y_d 随压力的升高而减小.从这点来看,高压有利 于获得产品萘.但在较高的压力下,萘的收率增大 变缓.选择反应压力时还需考虑反应器承压能力 等因素,以获得优化设计.



图 3 X_t 、 Y_d 、 Y_m 、 Y_n 随压力的变化 Fig. 3 Changes of X_t , Y_d , Y_m , Y_n with pressure

三甲基萘和二甲基萘的转化均为不可逆反 应,因此三甲基萘的转化率应该在无限长时间后 趋于1,而二甲基萘的收率在无限长时间后应趋 于0.一甲基萘的转化是一个可逆反应,因此其收 率最终应稳定在某值附近.萘的收率应在增大到 一定数值后在第三个反应平衡后趋于稳定.

图 4 为经过 55 h 三甲基萘脱烷基反应的产



图 4 反应 55 h 后 X_t 、 Y_d 、 Y_m 、 Y_n 的分布 Fig. 4 Distribution of X_t , Y_d , Y_m , Y_n after 55 h

4 结 论

(1)阐述了 S-系统数值解析的理论及求解方法,并用数学归纳法对求解递推公式进行了证明.

(2)模拟了三甲基萘在管式反应器中的脱烷 基反应,将其改写为 S-系统并进行计算机运算, 得到了此反应的数值解.模拟了物料随反应时间 的转化情况,对反应工况预测、反应器故障诊断与 反应器优化操作具有指导意义.将运算结果与 Runge-Kutta 法的运算结果进行比较,两者结果 一致.

(3)讨论了操作压力对三甲基萘脱烷基生产 萘的影响,升高压力有利于三甲基萘的转化和萘 的生成.

(4)预测了三甲基萘脱烷基反应充分进行后的产物分布情况,结果与 S-系统计算结果预测相符.

参考文献:

- Irvine D H. Efficient solution of nonlinear models expressed in S-system canonical form [J].
 Mathematical and Computer Modelling, 1988, 11: 123-128.
- [2] Atkinson K. Elementary Numerical Analysis [M].
 2nd ed. New York: John Wiley & Sons, 1993.
- [3] Shiraishi F. Highly accurate solution of the axial

dispersion model expressed in S-system canonical form by Taylor series method [J]. **Chemical Engineering Journal**, 2001, **83**(3):175-183.

- [4] Sriyudthsak K, Shiraishi F. Investigation of the performance of fermentation processes using a mathematical model including effects of metabolic bottleneck and toxic product on cells [J].
 Mathematical Biosciences, 2010, 228(1):1-9.
- [5] 于志家, Shiraishi F. 密封舱室内氧气再生过程的模拟计算[J]. 工程热物理学报,2005,26(5):808-810.

YU Zhi-jia, Shiraishi F. Computer simulation of oxygen regeneration and carbon dioxide reduction in closed chamber [J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2005, 26(5):808-810. (in Chinese)

[6] 刘顺会,陶嫦立,黄贞仪,等.利用S-系统方程模拟 p53信号转导途径[J].生物医学工程学杂志, 2010,27(3):505-510.

LIU Shun-hui, TAO Chang-li, HUANG Zhen-yi, et al. Modeling of p53 signaling pathway based on S-system equations [J]. Journal of Biomedical Engineering, 2010, 27(3):505-510. (in Chinese)

- [7] 徐恭贤,冯恩民,邵 诚,等. 色氨酸生物合成的稳态优化[J]. 工程数学学报,2005,22(6):975-982.
 XU Gong-xian, FENG En-min, SHAO Cheng, et al. Steady-state optimization of tryptophan biosynthesis [J]. Chinese Journal of Engineering Mathematics, 2005, 22(6):975-982. (in Chinese)
- [8] 冯 斌,余永红,孙 俊. 基于 QPSO 算法和 S-系统的基因调控网络分析与重构[J]. 计算机应用研究, 2010, 27(9):3279-3282.
 FENG Bin, YU Yong-hong, SUN Jun. Analysis and reconstruction of genetic regulatory networks based on QPSO algorithm and S-system [J].
 Application Research of Computers, 2010, 27(9): 3279-3282. (in Chinese)
- [9] Savageau M A. Biochemical systems analysis: I. Some mathematical properties of the rate law for the component enzymatic reactions [J]. Journal of Theoretical Biology, 1969, 25(3):365-369.
- [10] Marín-Sanguino A, Torres N V. Optimization of biochemical systems by linear programming and general mass action model representations [J].

Mathematical Biosciences, 2003, 184(2):187-200.

- [11] Shiraishi F, Furuta S, Ishimatsu T, et al. A simple and highly accurate numerical differentiation method for sensitivity analysis of large-scale metabolic reaction systems [J]. Mathematical Biosciences, 2007, 208(2):590-606.
- [12] Jorquera O, Kiperstok A, Sales E A, et al. Ssystems sensitivity analysis of the factors that may influence hydrogen production by sulfur-deprived Chlamydomonas reinhardtii [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2008, 33(9): 2167-2177.
- [13] 许杰. 国内外石油萘生产技术进展[J]. 化学工业与工程技术, 2002, 23(2):30-34.
 XU Jie. Progress of production technologies for petroleum naphthalene inland and abroad [J].
 Journal of Chemical Industry & Engineering, 2002, 23(2):30-34. (in Chinese)
 - [14] 李绍芬.反应工程[M].2版.北京:化学工业出版 社,2000.

LI Shao-fen. **Reaction Engineering** [M]. 2nd ed. Beijing: Chemical Industry Press, 2000. (in Chinese)

Numerical analysis of dealkylation process of trimethylnaphthalene with S-system

YU Zhi-jia*, ZHANG Qiang, ZOU Zhe, MAO Qing, LIU Yang

(School of Chemical Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

Abstract: Power-law representation, called S-system, has been widely used in biology, but its application to chemical engineering is rare. An application of this representation to the numerical analysis of dealkylation of trimethylnaphthalene in a tubular catalytic reactor is introduced. The relevant differential equations for the reactions are recast into S-system canonical form and numerically solved by the generalized calculation algorithm of a finite Taylor-series method. The conversion of reactant as function of reactor length and the distribution of products at the steady state are simulated. Comparisons of the calculated results with those by the Runge-Kutta method indicate consistency of the calculation algorithm. The calculation results under different operating conditions reveal that increased pressure leads to higher conversion of trimethylnaphthalene and generation of naphthalene. The conversion of trimethylnaphthalene increases firstly and then decreases, and the yield of methylnaphthalene increases with reaction time. The S-system method is highly reliable for the simulation and analysis of chemical production and the numerical analytical results can be used for the smooth operation, fault diagnosis and optimized design of chemical processes.

Key words: S-system; numerical analysis; process simulation; synthesis of naphthalene