

ВОПРОСЫ ПРЕПОДАВАНИЯ И ПРИЛОЖЕНИЯ

УДК 517.9

Разработка комплекса программ для решения задачи оптимизации процесса окислительной регенерации

© М. Р. Еникеев¹, Л. В. Сайфуллина², И. М. Губайдуллин³

Аннотация. В работе описан алгоритм решения задачи оптимизации процесса окислительной регенерации катализаторов на различных уровнях: на зерне катализатора, на неподвижном и движущихся слоях, а также его программная реализация, представляющая собой совокупность модулей для соответствующих уровней с возможностью получения зависимости изменения температуры зерна в виде трехмерной визуализации.

Ключевые слова: окислительная регенерация катализаторов, генетический алгоритм, параллельные вычисления.

1. Введение

На современном этапе развития вычислительной техники химики-экспериментаторы и химики-технологи получили возможность обратиться к таким классам задач, решение которых традиционными методами крайне затруднено, и вывести компьютерное моделирование на уровень одного из важнейших методов решения научно-прикладных задач — технологии параллельных вычислений.

Многие физико-химические задачи, связанные с решением фундаментальных проблем химической технологии предполагают значительный объем вычислений, обеспечивающих в настоящее время, тем не менее, достаточно низкую точность. Именно к таким задачам относятся обратные кинетические задачи изучения механизмов сложных химических реакций, задачи проектирования и оптимизации работы реакционных аппаратов и технологических схем химических или нефтехимических производств. В этих производствах наиболее распространенные процессы - каталитические (протекающие с участием катализаторов). Зачастую причиной ухудшения режимных показателей таких процессов становится отложение кокса на активной поверхности катализатора. Для восстановления активности катализатора используют окислительную регенерацию. От проведения процесса регенерации зависит уровень активности и стабильности регенерационного катализатора, поэтому оптимальное ведение процесса регенерации имеет большое значение для многих процессов нефтепереработки.

Оптимизация процесса регенерации реального аппарата невозможна без определения условий проведения процесса на единичном зерне для оценки возможных местных перегревов, приводящих к снижению механической прочности и каталитической активности катализатора. Поэтому изучение процесса регенерации целесообразно провести последовательно на единичном зерне, слое катализатора и в реальном аппарате.

¹Магистрант 1-го курса факультета математики и информационных технологий, Башкирский государственный университет, г. Уфа; mat-83@mail.ru.

²Магистрант 1-го курса факультета математики и информационных технологий, Башкирский государственный университет, г. Уфа; leniza19@mail.ru.

³Старший научный сотрудник лаборатории математической химии, Институт нефтехимии и катализа РАН, г. Уфа; irekmars@mail.ru.

2. Моделирование процесса регенерации на единичном зерне катализатора

Закономерности регенерации закоксованного зерна катализатора были исследованы с использованием диффузионной математической модели. При построении модели сделаны допущения, обычно принимаемые в литературе: 1) зерно катализатора сферическое, его размер и структура пор не изменяются в ходе процесса; 2) теплофизические параметры, коэффициенты теплопереноса и обмена и энергии активации инвариантны относительно изменения температуры; 3) массой газа в порах по сравнению с массой зерна катализатора можно пренебречь. Дополнительное допущение — отложения кокса имеют вид гранул, число которых в ходе регенерации не меняется.

Тогда уравнения материального и теплового балансов с учётом переносов за счёт диффузии, теплопроводности и стефановского потока имеют вид [1]:

$$\varepsilon_K \frac{\partial y_k}{\partial t} = \frac{D^*}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial y_k}{\partial r} - r^2 \mu y_k \right) + \frac{\gamma_K S_K}{C_0} \sum_{j=1}^J \nu_{kj} W_j, \quad k = \overline{1,4} \quad (2.1)$$

$$c_K \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda^*}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \gamma_K S_K \sum_{j=1}^J Q_j W_j \quad (2.2)$$

начальные условия:

$$t = 0 : y_k = 0, k = \overline{1,4}, T = T_0 \quad (2.3)$$

граничные условия:

$$r = 0 : D^* \frac{\partial y_k}{\partial r} = 0, k = \overline{1,4}, \lambda^* \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (2.4)$$

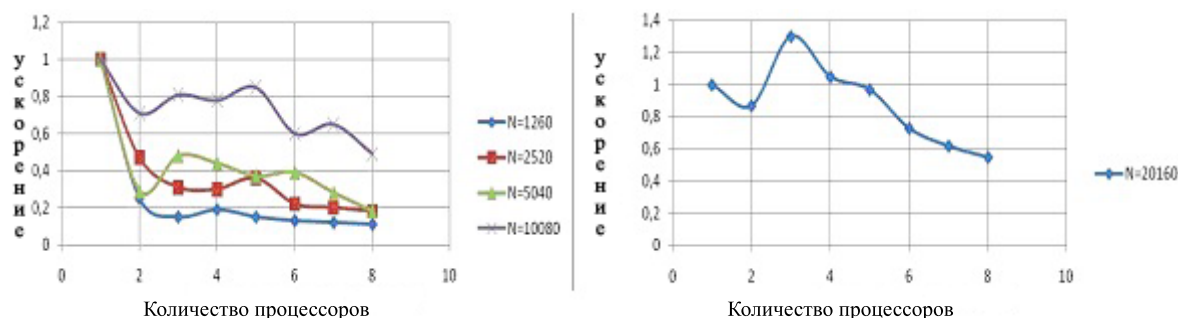
$$r = R_3 : D^* \frac{\partial y_k}{\partial r} = \beta(x_k - y_k), k = \overline{1,4}, \lambda^* \frac{\partial T}{\partial r} = \alpha(T_0 - T) \quad (2.5)$$

Здесь T, T_0 — температура зерна и газа, K ; ε_K, γ_K — пористость зерна катализатора и насыпная плотность катализатора; y_k, x_k — концентрации компонентов в порах зерна и окружающей зерно газовой фазе, мольные доли; D^* — эффективный коэффициент диффузии, m^2/c ; μ — стефановский поток, m/c ; λ^* — эффективный коэффициент теплопроводности, $Вт/(м \cdot К)$; c_K — объёмная теплоёмкость катализатора, $Дж/(м^3 \cdot К)$; α и β — коэффициенты тепло- и массообмена между зерном катализатора и газом, $Вт/(м^2 \cdot К)$ и $м/с$; Q_j — тепловые эффекты скоростей стадий, $Дж/моль$; r, R_3 — радиальная координата и радиус зерна, $м$; t — время, J — количество стадий реакций ($J = 7$).

Систему уравнений (2.1) – (2.5) замыкает условие нормировки по газовой фазе в порах зерна: $\sum_k y_k = 1$. Решение системы уравнений (2.1) – (2.5) проводится методом матричной прогонки. С целью уменьшения времени счета было решено провести сравнение данного алгоритма с его параллельной реализацией.

Суть параллельного алгоритма состоит в разбиении исходного отрезка $(0, N)$ на L интервалов распараллеливания. В узлах разбиения искомые неизвестные выбираются в качестве параметрических α . Относительно α строится вспомогательная система уравнений, после решения которой остальные искомые неизвестные находятся на L интервалах независимо. Данный параллельный алгоритм для неявной схемы абсолютно устойчив и позволяет находить решение с существенно большим временным шагом [2].

Результаты исследования ускорения алгоритма редукции представлены на рисунке 2.1.



Р и с у н о к 2.1

График зависимости ускорения (S) от числа процессоров (np): а - для малых размеров решаемой системы; б - для больших размеров системы

Из рисунка 2.1(а) следует, что при малом числе уравнений ускорение меньше единицы, т.е. параллельная программа работает медленнее, чем последовательная. Это связано с тем, что время на пересылку данных превышает выигрыш в скорости выполнения арифметических операций; также необходимо учитывать тот факт, что часть процессоров по мере выполнения прямого хода алгоритма простаивают. На больших размерах системы алгоритм имеет несущественное ускорение. Следует учесть, что в связи со спецификой задачи, задание матриц размером свыше $N \times N = 22000 \times 22000$ не представлялось возможным и целесообразным.

Анализ проведенного численного эксперимента показал, что использование данной схемы распараллеливания прогонки — нецелесообразно, в связи с этим, в программном комплексе в качестве основного используется последовательный вариант алгоритма.

3. Моделирование процесса в слое катализатора

Модель процесса на зерне катализатора является составной частью модели слоя катализатора, которая в свою очередь входит как составная часть в полную математическую модель аппарата.

Математическая модель процесса в неподвижном слое катализатора рассматривалась для двух кинетических режимов - изотермического и адиабатического [3].

Математическая модель процесса для адиабатического режима представляется в виде системы трех уравнений:

$$\begin{aligned} N_1 \frac{\partial C}{\partial \tau} + N_2 \frac{\partial C}{\partial l} &= -w \\ -\frac{\partial \rho}{\partial \tau} &= \frac{-\beta w}{\gamma_K} \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$N_3 \frac{\partial T}{\partial \tau} + N_4 \frac{\partial T}{\partial l} = -q\omega$$

с естественными начальными (3.2) и граничными (3.2) условиями:

$$\tau = 0 : C = 0, \rho_{l \geq 0} = \rho_0, T_{l \geq 0} = T_0 \quad (3.2)$$

$$l = 0 : C_{\tau > 0} = C_0, T_{\tau \geq 0} = T_0, \quad (3.3)$$

где $N_1 = \gamma_g \varepsilon$; $N_2 = V_0/S$; $N_3 = [\gamma_g \varepsilon c_g + \gamma_K(1 - \varepsilon)c_K]$; $N_4 = V_0 c_g/S$.

В математическом описании приняты следующие обозначения: V_0 — массовый поток кислородсодержащего газа с плотностью γ_g и теплоемкостью c_g , C — текущая концентрация кислорода в нем, ρ — содержание кокса на катализаторе, γ_K — насыпная плотность катализатора, c_K — его теплоемкость, ε — доля свободного объема в слое, S — сечение трубы, T — температура процесса, w — скорость реакции, измеренную по кислороду и отнесенную к единице реакционного объема, β — соотношение скоростей реакции по кислороду и коксу, q — тепловой эффект реакции.

Для изотермического реактора $\partial T/\partial l = 0$, и если рассматривать режим с постоянной в ходе всей регенерации температурой $\partial T/\partial \tau = 0$, то последнее уравнение в (3.1) переходит в независимое условие постоянства температуры, а процесс описывается двумя первыми уравнениями:

$$\begin{aligned} N_1 \frac{\partial C}{\partial \tau} + N_2 \frac{\partial C}{\partial l} &= -kC \frac{\rho}{\rho_0} \\ -\frac{\partial \rho}{\partial \tau} &= \frac{-\beta}{\gamma_K} kC \frac{\rho}{\rho_0} \end{aligned} \quad (3.4)$$

с начальными (3.5) и граничными (3.6) условиями

$$\tau = 0 : C = 0, \rho = \rho_0 \quad (3.5)$$

$$l = 0 : C = C_0 \quad (3.6)$$

Математическая модель процесса окисления кокса в реакторах с движущимся слоем контактного материала представлена уравнениями материальных балансов по кислороду и по коксу и уравнением теплового баланса:

$$\begin{aligned} C &= C_0 - \frac{\gamma_K(1 - \varepsilon)S}{f} w; \\ -\frac{d\rho}{dl} &= \frac{\beta \gamma_K(1 - \varepsilon)S}{G_K} w; \end{aligned} \quad (3.7)$$

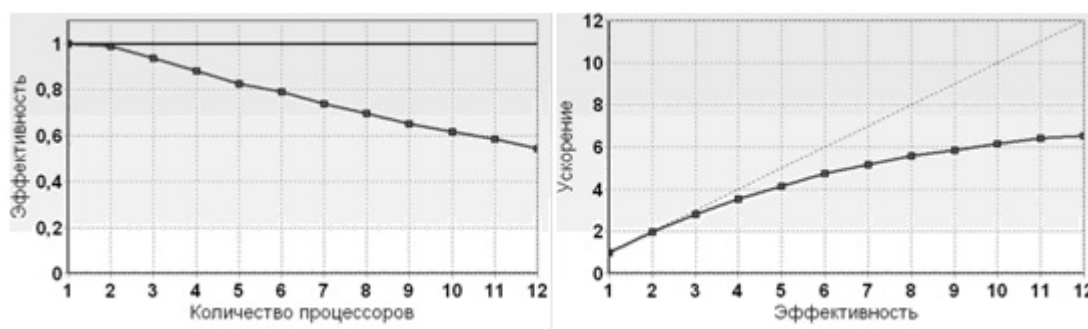
$$\begin{aligned} G_K c_K \frac{dT}{dl} + (fc_V + \lambda_1 S_n + \lambda_e S_e)T - (fc_V T_V + \lambda_1 S_n T_n + \lambda_e S_e T_e) &= -q \gamma_K(1 - \varepsilon)S w \\ l = 0 : \rho &= \rho_0, T = T_0 \end{aligned} \quad (3.8)$$

Для поиска оптимальных режимов процессов регенерации в неподвижном и движущемся слое катализатора используются соответствующие математические модели, изложенные выше. Управляющим воздействием в процессе выжигания кокса является температура T_0 (температура кислородсодержащего газа на входе в реактор), на которую в процессе поиска решения накладываются ограничения: $T_{0min} < T_0 < T_{0max}$. T_{0min} определяется из условия достаточно высокой интенсивности процесса выжигания кокса в начальный период, T_{0max} определяется, как правило, термостойкостью катализатора. Кроме того управляющим воздействием является скорость подачи воздуха — N_2 . Для процесса регенерации, проходящей в движущемся слое контактного материала, дополнительными управляющими воздействиями являются параметры кислородсодержащего газа, поступающего в первую и вторую зоны регенераторы — u_1, \dots, u_n .

Задача оптимизации: при известных входных условиях найти такое управление $U = (T_0, N_2, u_1, \dots, u_n)$, чтобы за минимальное время работы t_k выполнялись ограничения, наложенные на систему.

Для поиска оптимальных режимов работы использовался параллельный генетический алгоритм (ПГА) [4].

Поиск оптимальных режимов работы довольно трудоёмкая задача, требующая значительного времени счета. Эффективное решение данной проблемы - использование параллельных вычислений. Распараллеливание вычислительного процесса для рассматриваемой задачи осуществляется посредством передачи сообщений (стандарт MPI). В качестве реализации параллельного генетического алгоритма был выбран глобальный однопопуляционный ПГА (схема "мастер - подчиненные"), имеющий одну пространственно-распределенную популяцию. Вычислительный эксперимент проводился на компьютере, оснащённом четырёхядерным процессором AMD Phenom X4. Оценка эффективности распараллеливания алгоритма (используя гипотезу Минковского) представлена на рисунке 3.1.

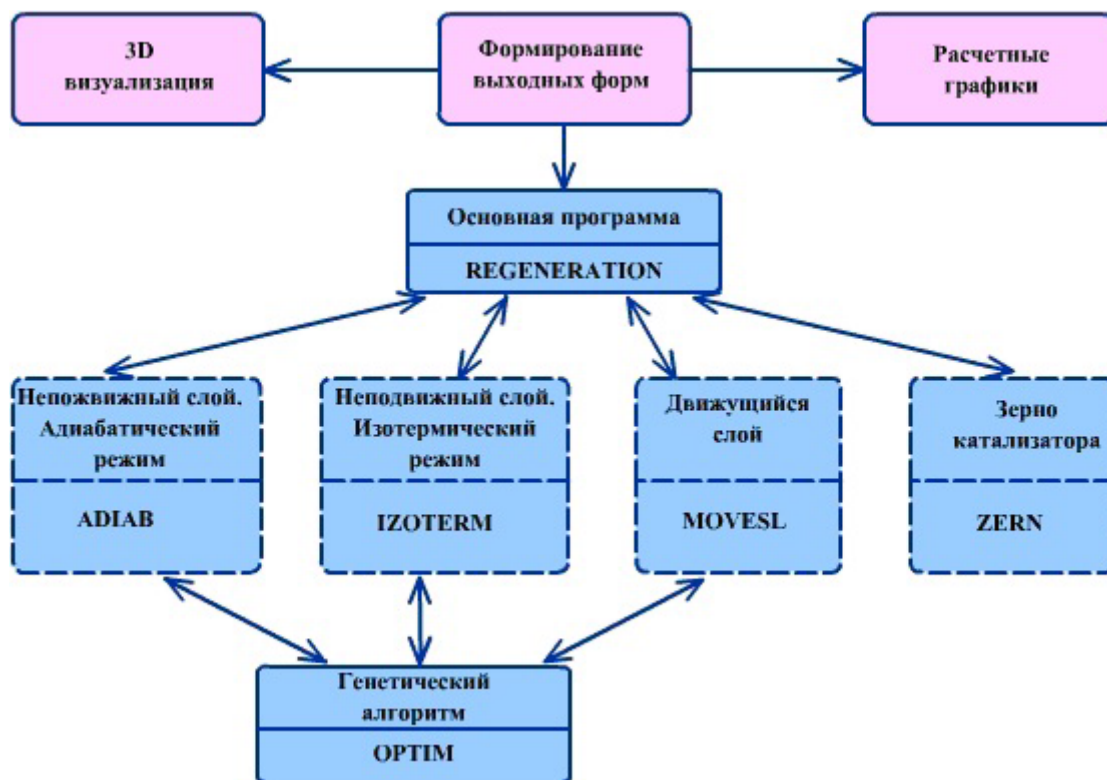


Р и с у н о к 3.1

Зависимость ускорения и эффективности, в зависимости от числа процессоров

Из графиков, изображенных на рисунке 3.1, следует, что параллельная программа работает значительно быстрее, чем последовательная. Но при использовании более 8 процессоров наблюдается снижение эффективности менее 0.7. Это связано с тем, что затраты времени на пересылку данных начинают возрастать по сравнению с выигрышем в скорости выполнения арифметических операций. Для преодоления данной проблемы, предлагается в будущем использовать островную модель ПГА, то есть использование небольшого числа относительно больших подпопуляций и миграция особей между ними.

4. Описание программного комплекса



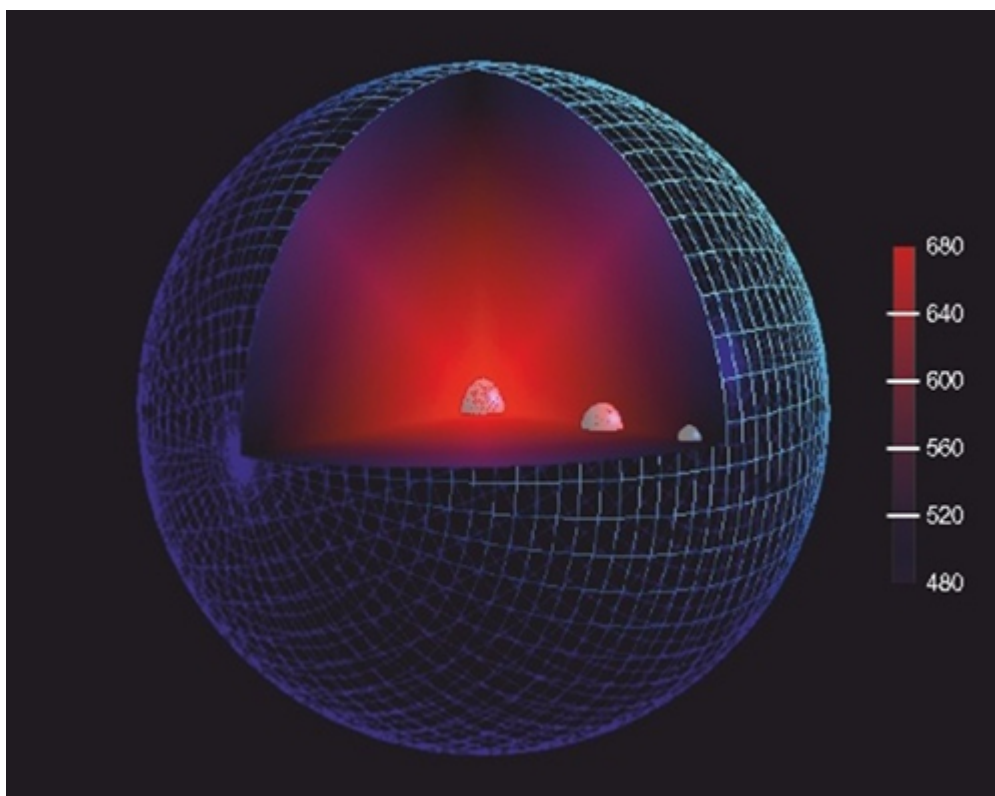
Р и с у н о к 4.1

Структура программного комплекса REGENERATION

На основе вышеизложенных алгоритмов был создан программный комплекс REGENERATION (рисунок 4.1), реализующий расчет процесса окислительной регенерации и поиск оптимальных режимов проведения процесса в среде Borland Develop Studio с использованием библиотеки OpenGL.

Основной модуль REGENERATION предоставляет интерфейс программы и служит связующим звеном с другими модулями. Модуль Zern служит для расчета процесса регенерации для единичного зерна катализатора, модули Izoterm, Adiab - для неподвижного слоя при изотермическом и адиабатическом режиме соответственно, а MoveSl - предназначен для анализа процесса регенерации в движущемся слое контактного материала. Модули Graph и 3DGraph служат для визуализации полученных результатов. Optim реализует генетический алгоритм для заданного процесса, по окончании расчета для этого модуля создается файл с результатами.

Решение задачи на единичном зерне катализатора (модуль Zern) зависит от шести параметров: радиуса зерна, времени контакта, содержания кокса, входной температуры кислорода, концентрации кислорода и количества точек разбиения для разностной схемы. В диалоговом окне предоставлена возможность изменения входных данных вручную или из текстового файла. В качестве результатов расчета выводятся графики зависимости кислорода, углерода, угарного и углекислого газа и температуры зерна (с возможностью выбора необходимого компонента) от радиуса зерна. Также была реализована возможность получить зависимость изменения температуры зерна в виде трехмерной визуализации (рисунок 4.2).



Р и с у н о к 4.2

Трехмерная визуализация изменения температуры в зерне катализатора

5. Заключение

Таким образом, реализован программный комплекс Regeneration для расчета процессов окислительной регенерации катализаторов, использующий преимущества параллельных архитектур для проведения химико-технологических расчетов, что позволило сократить время, требующееся для оптимизации параметров проведения процесса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Балаев А.В., Дробышев В.И., Губайдуллин И.М., Масагутов Р.М. Исследование волновых процессов в регенераторах с неподвижным слоем катализатора // В сб.: "Распространение тепловых волн в гетерогенных средах". Новосибирск: Наука, Сиб. отд-ние. – 1988. – С.233-246.
2. Еникеев М.Р. Распараллеливание алгоритма матричной прогонки при моделировании процессов выжигания кокса // Студент и наука: Материалы студенческих научных конференций./ гл.ред. Р.Ф. Талипов. – Уфа: РИЦ БашГУ, 2010.– С. 3.
3. Жоров Ю.М. Моделирование физико-химических процессов нефтепереработки и нефтехимии. - М.: Химия, 1978. – 376 с., ил.
4. Гладков Л. А., Курейчик В. В., Курейчик В. М. Генетические алгоритмы: Учебное пособие. – 2-е изд.. – М: Физматлит, 2006. – С. 320.

Developing of software for solution of optimization problem of oxygen regeneration process.

© M. R. Enikeev⁴, L. V. Sayfullina⁵, I. M. Gubaydullin⁶

Abstract. In the work solution algorithm of optimization problem of oxygen regeneration process is describe on different levels: on the catalyst grain, on the fixed-bed and moving bed of catalyst, its software implementation, representing the union of modules for appropriate levels with opportunity of getting the dependence of grain temperature variation in the term of 3D-visualization.

Key Words: oxygen regeneration of catalysts, genetic algorithm, parallel computing.

⁴The first year Master's degree student of Department of Mathematics and informational technologies, Bashkir state university, Ufa; mat-83@mail.ru.

⁵The first year Master's degree student of Department of Mathematics and informational technologies, Bashkir state university, Ufa; leniza19@mail.ru.

⁶Senior associate. mathematical chemistry lab, Institute of petrochemistry and catalysis of RAS, Ufa; irekmars@mail.ru.