



Рис. 2.
Части механических молекулярных машин. Подшипники

Высокопроизводительные вычисления в задаче оптимизации процесса окислительной регенерации

18 Высокопроизводительные вычисления в задаче оптимизации процесса окислительной регенерации

Для каталитических процессов нефтепереработки и нефтехимии наиболее распространенная причина ухудшения режимных показателей — отложение кокса на активной поверхности катализатора. Для удаления коксовых отложений и восстановления активности катализатора используют окислительную регенерацию — процесс контролируемого выжига кокса.

Решение задач моделирования окислительной регенерации, поиск оптимальных режимов процесса и получение надежных результатов расчетов наиболее эффективно может быть осуществлено с использованием технологии параллельных вычислений.

Развитие вычислительной техники на современном этапе позволило химикам-экспериментаторам и химикам-технологам 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. Дополнительный негативный момент применения традиционных методов решения — длительное время расчетов. Наиболее сложными с вычислительной точки зрения являются обратные кинетические задачи, решаемые при построении кинетических моделей сложных химических реакций, задачи поиска оптимальных режимов работы реакционных аппаратов и химико-технологических схем, особенно при наличии ограничений на фазовые переменные и тепловые и массовые рецикловые потоки.

Что касается нефтехимических гетерогенных каталитических процессов, то для них эффективность определяется в первую очередь активностью и стабильностью используемых катализаторов. В процессе эксплуатации наблюдается ухудшение этих характеристик. Для современных каталитических процессов нефтепереработки и нефтехимии наиболее распространенная причина ухудшения показателей — отложение кокса на поверхности катализатора.

Восстановление каталитических свойств катализатора происходит на стадии окислительной регенерации — процесса контролируемого выжига кокса кислородсодержащими смесями. Основная задача процесса регенерации — достижение глубины выжига кокса порядка 95%. Дополнительные задачи процесса: поиск локальных перегревов на зерне катализатора и в регенерируемом слое и сокращение общей продолжительности стадии.

Рассмотрим регенерацию катализатора в аппарате полочного типа с несколькими слоями. Все результаты получены для реактора гидроочистки вакуумного газойля (г. Уфа).

Выжиг коксовых отложений практически всегда имеет ярко выраженный волновой характер. При традиционном способе регенерации, когда волна горения последовательно проходит через все слои катализатора, начиная с первого, для ускорения процесса выжига кокса практически нет управляющих параметров. Начальная концентрация кислорода и входная температура определяются допустимыми разогревами в слое катализатора, а расход и давление газа в аппарате зависят от мощности используемого компрессора и фактически всегда поддержи-

АВТОРЫ:

А.В. Балаев – докт. хим. наук, вед. науч. сотрудник лаборатории математической химии Ин-та нефтехимии и катализа РАН;
e-mail: avbalaev@gmail.com

И.М. Губайдуллин – канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотрудник лаборатории математической химии Ин-та нефтехимии и катализа РАН;
e-mail: irekmars@mail.ru

М.Р. Еникеев – магистр 1-го курса БашГУ;
e-mail: mat-83@mail.ru

Л.В. Сайфуллина – магистр 1-го курса БашГУ;
e-mail: leniza19@mail.ru

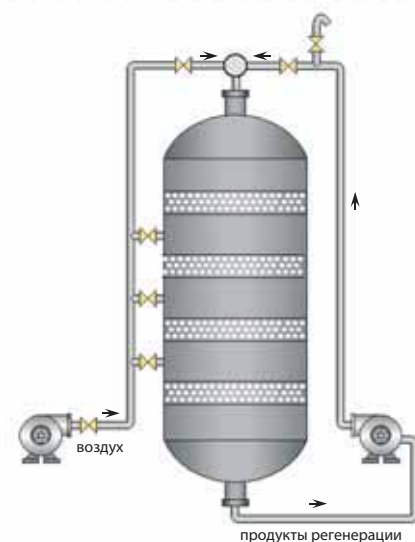


Рис. 1.
Схема 4-слойного реактора гидроочистки вакуумного газойля

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.

Детально не затрагивая математическое описание, отметим, что для анализа зерна катализатора при решении данной задачи было существенным изменение 6 параметров, основные из которых:

- t — время контакта: от 2 секунд до 30 минут.
- концентрация кокса: от 2 до 10%.
- входная температура: от 100 до 700°C.

В программной реализации использовались разностные аналоги для уравнения теплового и материального балансов. Решение разностной схемы (размерность сетки от 40 000 до 50 000) проводилось методом редукции, основная идея которого — разбиение исходной сетки на L интервалов распараллеливания (L — количество процессоров).

В итоге для одного набора параметров задачу требовалось решить от 500

ваются на уровне предельных значений.

Перспективным для регенерации катализатора в аппарате полочного типа является использование динамического управления процессом. Возможность динамического управления режимом выжига кокса в таких аппаратах фактически единственная — изменять в ходе регенерации количество подаваемого на каждый слой воздуха, т.е. изменение во времени начальных концентраций кислорода на входе в каждый слой.

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

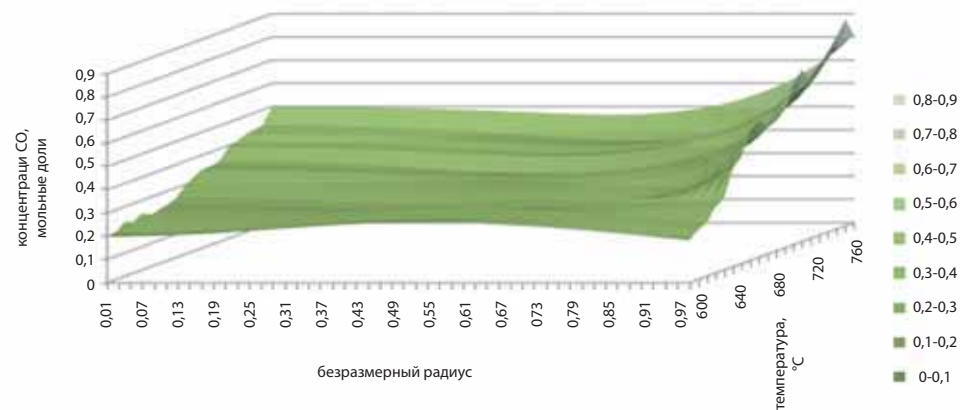


Рис. 2.
Изменение концентрации угарного газа (CO) по длине безразмерного радиуса при изменении температуры

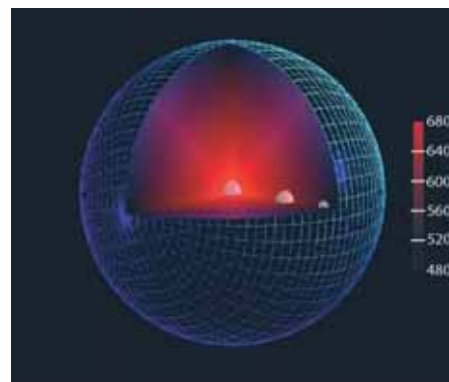


Рис. 3.
Изменение температуры по радиусу зерна при входных параметрах: время контакта — 4,8 сек, температура — 400°C, начальное содержание кокса — 3%

до 1500 раз, в зависимости от заданной точности вычислений. Время счета для одного набора параметров на кластере Башкирского государственного университета составило около 20 минут, а общее время для анализа зерна катализатора при входной температуре потока от 400°C до 600°C (около 500 различных наборов входных параметров) — более 160 часов.

Произведены вычисления при $t = 4,8$ секунды и концентрации кокса, равной 3%, результаты которых представлены в виде зависимостей на рисунках ниже.

Результаты расчета

По способу ведения процесса с момента времени $t=0$ можно выделить два различных варианта динамического управления.

Первый вариант связан с подачей кислорода на все слои одновременно. Второй вариант динамического управления связан с изменением последовательности регенируемых слоев катализатора. Время изменения управления подбиралось наиболее удобным для обслуживающего персонала.

Таблица 1

Динамические изменения начальных концентраций O₂ за время Δt. Первый вариант динамического управления

Временной интервал Δt (ч)	Начальная концентрация кислорода для слоя, % об.			
	1	2	3	4
0–14	0,7	0,8	0,9	1,0
14–24	1,2	0,2	0	0
24–35	0,7	0	0,2	0,3
35–50	0,7	0	0	0,3
50–68	0,2	0,7	0	0

Таблица 2

Динамические изменения начальных концентраций O₂ за время Δt. Второй вариант динамического управления

Временной интервал Δt (ч)	Начальная концентрация кислорода для слоя, % об.			
	1	2	3	4
0–12	0	0	0	1,0
12–22	0	0	0,9	1,0
22–34	0	0,8	0,9	0
34–50	1,2	0	0,2	0
50–68	0,8	0	0	0

При традиционном способе время выжиг кокса до глубины регенерации 95% составляет 134 часа. Как видно из приведенных данных, применение предлагаемого динамического управления режимом регенерации позволяет вдвое сократить продолжительность процесса по сравнению с традиционным стационарным управлением процессом.

Графическое представление по изменению максимальной температуры

в слоях для варианта 1 динамического управления приведено на рис. 4, а изменение средней относительной закоксованности катализатора для варианта 2 — на рис. 5.

Таким образом, использование параллельных вычислений в задачах математической химии имеет ряд следующих преимуществ:

- существенное сокращение времени расчета одного варианта задачи (для одного набора входных данных);
- увеличение количества рассчитываемых вариантов задачи за определенный промежуток времени;
- возможность увеличить размерность расчетной сетки, что позволяет решать разностную задачу с большей точностью.

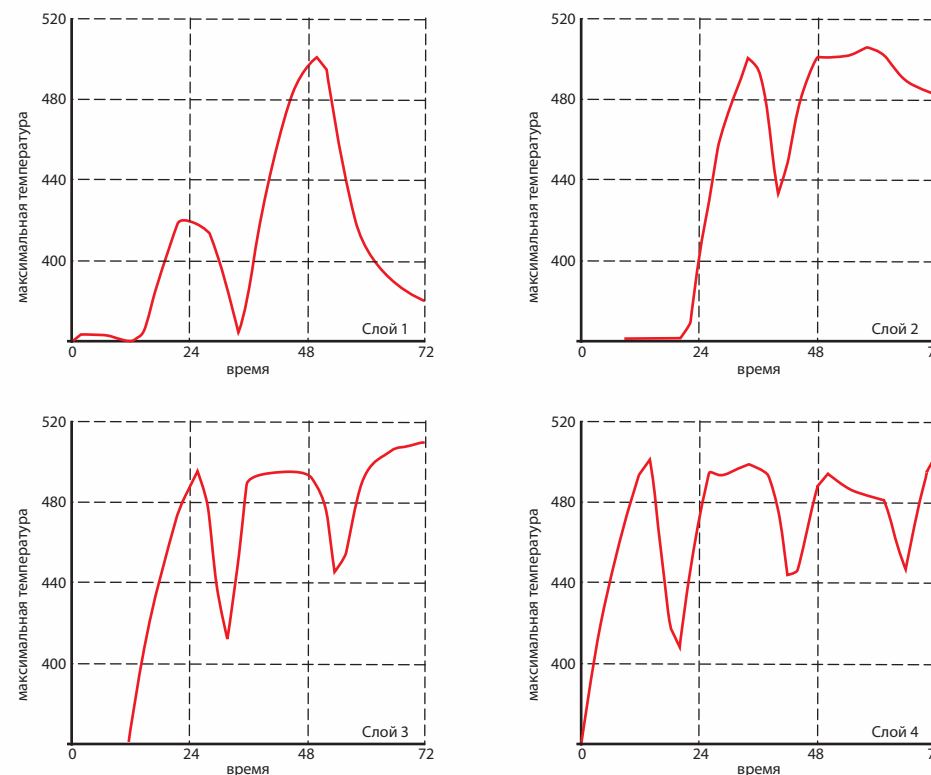


Рис. 4. Изменение в ходе регенерации максимальной температуры (°C) катализатора при динамическом изменении концентрации O₂

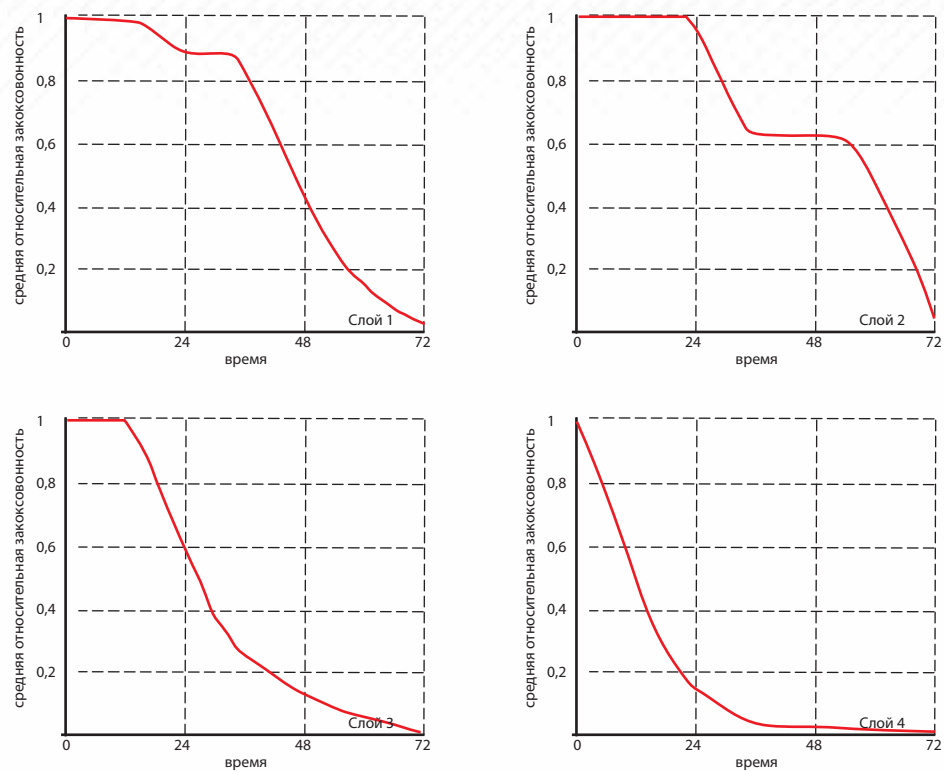


Рис. 5. Изменение средней относительной закоксованности ($Z_c = q_c / q_c^0$) слоев катализатора при динамическом изменении концентрации O_2

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Масагутов Р.М., Морозов Б.Ф., Кутепов Б.И. Регенерация катализаторов в нефтехимии и нефтепереработке. М.: Химия, 1987.
2. Балаев А.В., Дробышев В.И., Губайдуллин И.М., Масагутов Р.М. Исследование волновых процессов в регенераторах с неподвижным слоем катализатора // Распространение тепловых волн в гетерогенных средах. Новосибирск: Наука, 1988. С.233–246.
3. Слинко М.Г. Основы и принципы моделирования каталитических процессов. Новосибирск: ИК им.Г.И. Борескова СО РАН, 2004.

Параллельные вычисления в нефтехимии и буровой технологии

