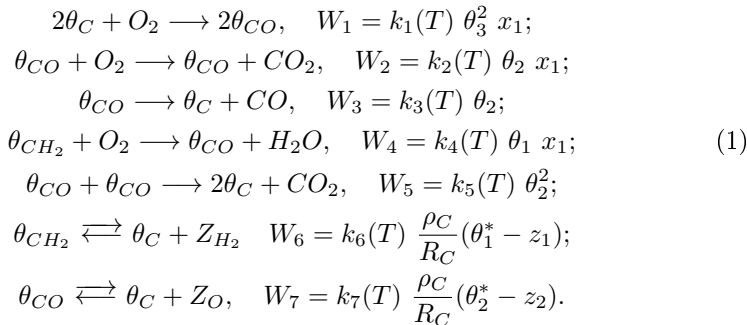


Numerical simulation of catalyst grain during oxidative regeneration with MPI technologies

Численное моделирование окислительной регенерации
зерна катализатора с использованием MPI-технологий

к.ф.-м.н. Язовцева О. С. (г. Саранск),
магистрант Гришаева О. В. (г. Саранск),
д.ф.-м.н. Губайдуллин И. М. (г. Уфа),
к.ф.-м.н. Пескова Е. Е. (г. Саранск)

НИ МГУ им. Н.П. Огарёва,
УГНТУ, ИНК РАН УФИЦ



¹Кутепов Б. И. Кинетика образования и взаимопревращения продуктов окисления кокса на современных катализаторах крекинга: дис. ... канд. тех. наук. Уфа, 1980. 134 с.

²Масагутов Р. М., Морозов Б. Ф., Кутепов Б. И. Регенерация катализаторов в нефтепереработке и нефтехимии. М.: Химия, 1987. 144 с.

³Губайдуллин И. М. Математическое моделирование динамических режимов окислительной регенерации катализаторов в аппаратах с неподвижным слоем: дис. ... канд. физ.-мат. наук / Институт Нефтехимии и катализа АН РБ, Уфа, 1996. 109 с.

Модель процессов на зерне катализатора

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \frac{\partial y_i}{\partial \tau} = \frac{1}{\varphi \varepsilon_k} \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial y_i}{\partial \rho} - \rho^2 \hat{\mu} y_i \right) + \frac{\hat{S}}{\varepsilon_k} \sum_{j=1}^5 \nu_{ij} \omega_j, \\
 \frac{\partial \Theta}{\partial \tau} = \frac{1}{\varphi} \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial \Theta}{\partial \rho} \right) + \frac{\hat{S} c_0}{T_{op} c_k} \sum_{j=1}^5 Q_j \omega_j, \\
 \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho^2 \hat{\mu}) = \rho^2 \frac{\varphi c_0 \hat{S}}{\gamma_k} \sum_{j=1}^5 \delta_{ij} \omega_j, \\
 \frac{\partial q_c}{\partial \tau} = - \frac{M_C c_0}{\gamma_k} \hat{S} (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5), \\
 \frac{\partial z_1}{\partial \tau} = \frac{c_0}{\gamma_k q_c} \hat{S} (\omega_6 + z_1 M_C (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5)), \\
 \frac{\partial z_2}{\partial \tau} = \frac{c_0}{\gamma_k q_c} \hat{S} (\omega_7 + z_2 M_C (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5)), \\
 \frac{\partial \theta_1}{\partial \tau} = - \hat{S} \left(\omega_4 + \frac{c_0}{\gamma_k} \omega_6 \right), \\
 \frac{\partial \theta_2}{\partial \tau} = \hat{S} \left(2\omega_1 - \omega_3 + \omega_4 - 2\omega_5 - \frac{c_0}{\gamma_k} \omega_7 \right).
 \end{array} \right. \quad (2)$$

Модель процессов на зерне катализатора

Начальные условия:

$$\tau = 0 : q_c(0) = q_C^0, z_1(0) = z_1^0, z_2(0) = 0, \theta_1(0) = \theta_1^0, \theta_2(0) = 0, \quad (3)$$

$$\Theta(0) = \frac{T(0)}{T_{op}}, y_1(0) = 1, y_i(0) = 0, i = \overline{2, 4}. \quad (4)$$

Граничные условия:

$$\rho = 0 : \mu = 0, \frac{\partial y_i}{\partial \rho} = 0, \frac{\partial \Theta}{\partial \rho} = 0; \quad (5)$$

$$\rho = 1 : \frac{\partial y_i}{\partial \rho} = 0, \frac{\partial \Theta}{\partial \rho} = \beta_0 \left(\frac{T(0)}{T_{op}} - \Theta \right). \quad (6)$$

The difference analog of the (2) system has the form:

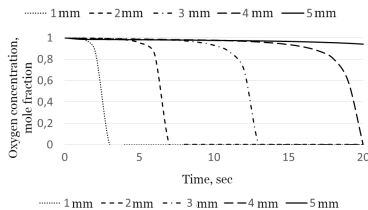
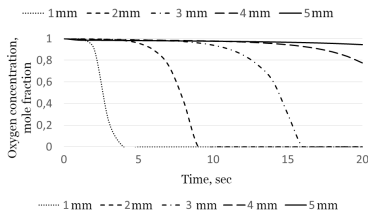
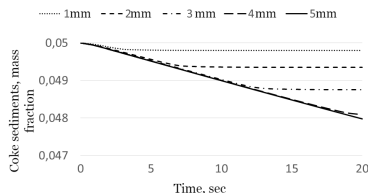
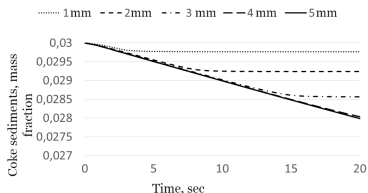
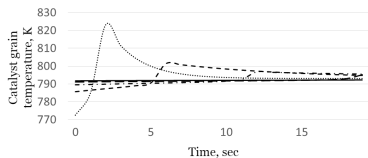
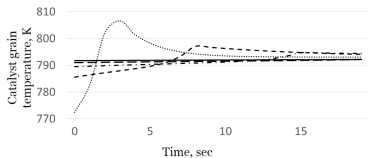
$$\left\{ \begin{aligned} \Theta_k^{n+1} &= \Theta_k^n + \Delta t \left(\frac{1}{\varphi} \frac{1}{r_k^2 h_r} \left(r_{k+1/2}^2 \frac{\Theta_{k+1} - \Theta_k}{h_r} - r_{k-1/2}^2 \frac{\Theta_k - \Theta_{k-1}}{h_r} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\hat{S}c_0}{T_{op}c_k} \sum_{j=1}^7 Q_j \omega_j \right)_k \right), \\ y_{i,k}^{n+1} &= y_{i,k}^* + \Delta t \left(\frac{1}{\varphi \varepsilon_k} \frac{1}{r_k^2 h_r} \left(\left(r_{k+1/2}^2 \frac{y_{i,k+1} - y_{i,k}}{h_r} - \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - r_{k+1/2}^2 \hat{\mu}_{k+1/2} \frac{y_{i,k+1} + y_{i,k}}{2} \right) - \right. \\ &\quad \left. - \left(r_{k-1/2}^2 \frac{y_{i,k} - y_{i,k-1}}{h_r} - r_{k-1/2}^2 \hat{\mu}_{k-1/2} \frac{y_{i,k} + y_{i,k-1}}{2} \right) \right) + \\ &\quad \left. + \left(\frac{\hat{S}}{\varepsilon_k} \sum_{j=1}^7 \nu_{ij} \omega_j \right)_k \right), \\ \hat{\mu}_{k+1/2} &= \frac{1}{r_{k+1/2}^2} \left(r_{k-1/2}^2 \hat{\mu}_{k-1/2} + h_r r_k^2 \left(\frac{\varphi c_0 \hat{S}}{\gamma_k} \sum_{j=1}^7 \delta_{ij} \omega_j \right)_k \right), \end{aligned} \right.$$

$y_{i,k}^*$ – предварительно рассчитанные мольные доли компонент реакционной смеси, полученные при решении кинетической системы методом РАДО.

Эффективность параллельного алгоритма

	Ускорение		Эффективность	
	10 cells	100000 cells	10 cells	100000 cells
1 processor	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
2 processors	1.9897	1.9286	0.99	0.96
4 processors	3.8993	3.7886	0.97	0.94
8 processors	7.4368	7.3938	0.93	0.92

Результаты расчетов



Результаты расчетов

