

УДК 51-73+519.62

Опыт междисциплинарной и межрегиональной работы при моделировании процессов в химической технологии*

Губайдуллин И. М.

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН

Аннотация: В работе рассматриваются современные подходы организации междисциплинарной и межрегиональной работы при математическом моделировании сложных промышленных процессов химической технологии. На сегодняшний день, когда промышленные заводы химической технологии работают в режиме жесткой конкуренции, методы математического моделирования становятся самым эффективным и мало затратным способом оптимизации физико-химических процессов с целью улучшения качества выпускаемой продукции и повышения прибыли. Приводится опыт сотрудничества с коллегами из лаборатории динамических и управляемых систем кафедры дифференциальных уравнений, математического и численного анализа Института информационных технологий, математики и механики Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского. На примере математического моделирования промышленно важного процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами показана эффективная организация совместной работы с четким выделением научной специализации научных школ Уфы и Нижнего Новгорода. Результатом такой межрегиональной и междисциплинарной работы является разработка кинетической модели реакции сернокислотного алкилирования изобутана олефинами с использованием асинхронного алгоритма глобальной оптимизации. Также итогом представленной работы является постановка новых задач математического моделирования и оптимизации вышеуказанного процесса. Целью работы является определение оптимального соотношения исходных реагентов (изобутан/олефин), концентрации катализатора (серной кислоты) и температуры ведения промышленного процесса алкилирования для максимального выхода продукта.

Ключевые слова: межрегиональный и междисциплинарный подход, иерархическая структура математического моделирования химико-технологических процессов, кинетическое моделирование, алкилирование изобутана олефинами, асинхронный алгоритм глобальной оптимизации, задачи оптимального управления химическими процессами.

С каждым годом качество товарных бензинов всё больше определяется концентрациями отдельных компонентов углеводородного состава. При этом происходит детализация ранее принятых при характеристике состава бензина групп углеводородов. Например, проведенные в последнее время научные исследования показали, что парафины необходимо рассмотреть более детально – в случае изомеров с минимальным октановым числом для нормальных и разветвленных парафинов с одинаковым числом атомов углерода разница составляет от 35 до 40 пунктов. Таким образом, для точной оценки октанового числа необходимо разделение парафинов на нормальные и на разветвленные. Кроме того, их реакционная способность к одним и тем же видам реакций различна. В случае с нафтенами пятичленные (циклопентаны) и ше-

*Работа выполнена в рамках Государственного задания Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН (тема №FMRS-2022-0078).

стичленные (циклогексаны) нафтены имеют различную селективность реакции ароматизации. Это является достаточным обоснованием необходимости их разделения при описании кинетики процесса, поскольку ароматические углеводороды обладают более высоким октановым числом. Более глубокая детализация состава бензина диктуется и экологическими требованиями: например, стандарт Евро-5 требовал содержания олефинов не более 14 %, а Евро-6 – уже не более 11 %. Таким образом, при проведении научных исследований с целью повышения качества нефтепродуктов и соблюдения экологических требований возникает необходимость детализации компонентного состава товарных бензинов. Это в свою очередь, приводят к увеличению количество стадий химических процессов при описании промышленно важных процессов. Следовательно, в технологической цепочке совершенствования действующих и разработки новых процессов и аппаратов методы математического суперкомпьютерного моделирования, теория анализа и хранения больших данных, становятся не просто необходимой, а обязательной частью. Также это обусловлено сложностью решаемых задач и необходимостью сокращения сроков исследований [1].

Товарный бензин – это смесь нефтепродуктов из разных установок с реализованными различными химико-технологическими процессами. Одним из идеальных компонентом бензина является алкилат. Он характеризуется низкой летучестью, практически не содержит непредельных и ароматических углеводородов, обладает высоким октановым числом. Быстрое увеличение автомобильного парка и соответствующий рост спроса на высокооктановый бензин ставят вопрос увеличения производства алкилата за максимально короткое время. Оптимальный выход определяется тремя важными составляющими процесса алкилирования: соотношения исходных продуктов (изобутана и олефина); концентрации катализатора (серная кислота) и температуры ведения процесса. Решить такую промышленно необходимую многокритериальную оптимальную задачу со сложным механизмом химических превращений за короткий срок под силу только суперкомпьютерному моделированию. Таким образом, актуальность представленной работы не вызывает сомнений.

Успех суперкомпьютерного моделирования промышленно важных сложных химико-технологических процессов и установок определяется тесным взаимодействием научных школ разных городов [2]. Одному коллективу нереально одновременно формировать базу данных входных и выходных информационных потоков, составлять математическое описание сложных химико-физических процессов, происходящих в аппаратах сложной конструкции, разрабатывать эффективные устойчивые быстросходящиеся численные методы, создавать интерфейсно удобные программные комплексы. Очень важно также наличие высокопроизводительных вычислительных центров с гибридными суперкомпьютерами, которые в свою очередь требует постоянного технического обслуживания.

Для успешной реализации совместных работ разных школ, владеющими разными специализациями необходимо представить сложный химико-технологический процесс в виде иерархической структуры. Основоположник математического моделирования химико-технологических процессов, член-корр. Михаил Гаврилович Слинко выделил 6 этапов такой структуры [3]. На сегодняшний день, учитывая возросшую сложность математического описания, объем экспериментальных и вычислительных данных, параллельных алгоритмов и численных методов современное математическое моделирование нуждается в углублении и расширении иерархической структуры до 10 этапов. К 6 первоначальным этапам необходимо добавить разработку баз данных входных и выходных информационных потоков, грамотное разделение

численных алгоритмов по физическим процессам, технологии суперкомпьютерного параллельного программирования и WEB-вычислительную лабораторию с удобным интерфейсом удалённого доступа.

Для суперкомпьютерного моделирования процесса сернокислотного алкилирования на сегодняшний день реализован первый фундаментальный этап в структуре иерархического моделирования [4]. Проведено суперкомпьютерное кинетическое моделирование реакции сернокислотного алкилирования изобутана олефинами с использованием асинхронного алгоритма глобальной оптимизации. При этом решены следующие задачи:

- 1) созданы базы входных данных кинетических исследований;
- 2) построено математическое описание прямой задачи кинетики алкилирования;
- 3) формализована задача оптимизации – идентификация параметров химических реакций (минимизации функционала разности экспериментальных и расчетных данных концентраций участвующих в реакции веществ, при разных временах, при разных температурах);
- 4) реализованы методы решения задач глобальной оптимизации;
- 5) редуцированы размерности;
- 6) разработан параллельный алгоритм глобального поиска;
- 7) разработана программная система Globalizer;
- 8) проведены вычислительные эксперименты.

Работа была выполнена в тесном удалённом контакте сотрудниками лаборатории математической химии Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН и сотрудниками лаборатории динамических и управляемых систем кафедры дифференциальных уравнений, математического и численного анализа Института информационных технологий, математики и механики Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского. Разделение выполнения задач было следующее. Пункты 1)-3) реализовала уфимская школа, а пункты 4)-7) – школа Нижнего Новгорода. Восьмой пункт был реализован совместными усилиями дистанционно. Вычислительные эксперименты проводились на суперкомпьютере «Лобачевский» (ННГУ). Один узел: 2 процессора Intel Sandy Bridge E5-2660 2.2 GHz 8 ядер, 64 Gb RAM, 3 GPU NVIDIA Kepler K20X 2688 CUDA-ядер. Компилятор GCC 5.5.0 Intel MPI 2017. Язык реализации программ – Python 3.9.

В статье [5] приведены результаты работы последовательного, параллельного синхронного и параллельного асинхронного алгоритмов при использовании 8 узлов (16 процессоров). Все методы нашли одинаковое (по значению целевой функции) решение. Получены графики сравнения концентрации расчетных и экспериментальных данных наблюдаемых веществ. Значения функционала разности составила менее 1 %.

Далее необходимо перейти на следующий этап иерархической структуры суперкомпьютерного моделирования – моделирование единичного блока в каскаде реакторов с учётом влияния концентрации катализатора (серной кислоты) и внешнего обогрева [6, 7]. После – провести оптимизацию введения процесса с целью максимального выхода продукта процесса – алкилата. Предварительное исследование показало, что выход алкилата зависит от трёх составляющих: 1) соотношения исходных реагентов; 2) концентрация катализатора; 3) температуры внешнего обогрева реактора. Проведена формализация многокритериальной оптимизации процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами [8].

В заключение хочется отметить, что в данной работе приведено только сов-

местное сотрудничество между научными школами Уфы и Нижнего Новгорода. За последнее 10 лет, коллективом лаборатории математической химии ИНК УФИЦ РАН, совместно с коллегами из других регионов успешно решены ряд других научно-технических и практических задач. Коллегами из Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН проведено успешное математическое моделирование химизмов процесса пиролиза этана и пропана [9] и низкотемпературной конверсии легких углеводородов [10]. Научное сотрудничество с коллегами из Национального исследовательского Мордовского государственного университета им Н.П. Огарёва позволило моделировать более высокие уровни иерархического этапа – процессов на зерне [11-13] и в газовом потоке [14]. Таким образом, поэтапное моделирование в тесном сотрудничестве школ из разных городов в конечном итоге позволит создать отечественные программные комплексы. А это необходимый фундамент научно-технического проведения цифровизации химико-технологических промышленных процессов.

В списке литературы данной работы не случайно приведены диссертационные работы молодых ученых из разных регионов. Они успешно были защищены именно на основе совместного сотрудничества и очных контактов школ различных регионов! Для молодёжи особенно важно участие в научных семинарах и конференциях из других регионов, что даёт дополнительный стимул для привлечения молодёжи в науку и сохранения связи поколений.

Литература

1. Слинько М.Г. О сокращении сроков разработки и усовершенствования каталитических процессов // Катализ в промышленности. 2006. № 4. С. 3-11.
2. Слинько М.Г. Нам необходима новая стратегия развития промышленного катализа // Катализ в промышленности. 2007. № 1. С. 3-8.
3. Слинько М.Г. История развития математического моделирования каталитических процессов и реакторов // Теоретические основы химической технологии. 2007. Т. 41. № 1. С. 16-34.
4. Губайдуллин И.М. Информационно-аналитическая система решения многопараметрических обратных задач химической кинетики // диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук / Башкирский государственный университет. Уфа, 2012.
5. Gubaydullin I., Enikeeva L., Barkalov K., Lebedev I. Parallel global search algorithm for optimization of the kinetic parameters of chemical reactions // Communications in Computer and Information Science. 2021. Т. 1510 CCIS. С. 198-211.
6. Балаев А.В. Моделирование каталитических процессов с переменными свойствами реакционной среды // диссертация на соискание ученой степени доктора химических наук / Институт нефтехимии и катализа. Уфа, 2008.
7. Бесков В.С., Флокк В. Моделирование каталитических процессов и реакторов // М.: Химия, 1991. 256 с.
8. Коледина К.Ф. Многокритериальная оптимизация и оптимальное управление химическими процессами на основе детализированной кинетической модели // диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук / Башкирский государственный университет. Уфа, 2021.

9. Нурисламова Л.Ф. Разработка компактной кинетической модели пиролиза пропана методами анализа чувствительности // диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Башкирский государственный университет. Уфа, 2015.
10. Еникеева Л.В. Алгоритм и программный комплекс для анализа механизма гибели ароматических нитрооксидов и низкотемпературной конверсии легких углеводородов // диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Башкирский государственный университет. Уфа, 2018.
11. Язовцева О.С. Исследование устойчивости решений математических моделей по части компонент на основе локальной покомпонентной асимптотической эквивалентности // диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Ульяновский государственный университет. Ульяновск, 2019.
12. Губайдуллин И.М., Язовцева О.С. Исследование усредненной модели окислительной регенерации закоксованного катализатора // Компьютерные исследования и моделирование. 2021. Т. 13. № 1. С. 149-161
13. Yazovtseva O., Grishaeva O., Gubaydullin I., Peskova E. Construction of a Parallel Algorithm for the Numerical Modeling of Coke Sediments Burning from the Spherical Catalyst Grain // Parallel Computational Technologies. PCT 2022. Communications in Computer and Information Science. Springer, Cham, 2022. V. 1618. https://doi.org/10.1007/978-3-031-11623-0_17.
14. Пескова Е.Е. Моделирование химически реагирующих потоков с использованием вычислительных алгоритмов высокого порядка точности // диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / ИПМ им М.В. Келдыша. Москва, 2018.

MSC 00A71

Experience of interdisciplinary and interregional work in modeling processes in chemical technology

I. M. Gubaydullin

Institute of Petrochemistry and Catalysis of the Russian Academy of Sciences

Abstract: The paper considers modern approaches to the organization of interdisciplinary and interregional work in the mathematical modeling of complex industrial processes of chemical technology. Today, when industrial chemical technology plants operate in a highly competitive mode, mathematical modeling methods become the most effective and low-cost way to optimize physico-chemical processes in order to improve the quality of products and increase profits. The experience of cooperation with colleagues from the Laboratory of Dynamic and Controlled Systems of the Department of Differential Equations, Mathematical and Numerical Analysis, the Institute of Information Technology, Mathematics and Mechanics of Nizhny Novgorod State University named after N.I. Lobachevsky is given. Using the example of mathematical modeling of the industrially important process of sulfuric acid alkylation of isobutane with olefins, an effective organization of joint work with a clear allocation of scientific specialization of scientific schools of Ufa and Nizhny Novgorod is shown. The result of such interregional and interdisciplinary work was the development of a kinetic model of the reaction of sulfuric acid alkylation of isobutane with olefins using an asynchronous global optimization algorithm. Also, the result of the presented work is the formulation of new problems of mathematical modeling and optimization of the above process. The purpose of which is to determine the optimal ratio of the initial reagents (isobutane/olefin), the concentration of the catalyst (sulfuric acid) and the temperature of the industrial alkylation process for maximum product yield.

Keywords: interregional and interdisciplinary approach, hierarchical structure of mathematical modeling of chemical-technological processes, kinetic modeling, alkylation of isobutane with olefins, asynchronous algorithm of global optimization, the problems of optimal control of chemical processes.

References

1. M.G. Slinko, On shortening the terms of development and improvement of catalytic processes, *Catalysis in industry*, 2006, No. 4, P. 3-11.
2. M.G. Slinko, We need a new strategy for the development of industrial catalysis, *Catalysis in industry*, 2007, No. 1, P. 3-8.
3. M.G. Slinko, The history of the development of mathematical modeling of catalytic processes and reactors, *Theoretical foundations of chemical technology*, 2007, Vol. 41, No. 1, P. 16-34.
4. I.M. Gubaydullin, Information and analytical system for solving multiparametric inverse problems of chemical kinetics, Dissertation for the degree of Doctor of Physico-mathematical Sciences, Bashkir State University, Ufa, 2012.
5. I. Gubaydullin, L. Enikeeva, K. Barkalov, I. Lebedev, Parallel global search algorithm for optimization of the kinetic parameters of chemical reactions,

- Communications in Computer and Information Science*, 2021, Vol. 1510 CCIS, P. 198-211.
6. A.V. Balaev Modeling of catalytic processes with variable properties of the reaction medium, Dissertation for the degree of Doctor of Chemical Sciences, Institute of Petrochemistry and Catalysis, Ufa, 2008.
 7. V.S. Beskov, V. Flock, Modeling of catalytic processes and reactors, Moscow, Khimiya, 1991, 256 p.
 8. K.F. Koledina, Multicriteria optimization and optimal control of chemical processes based on a detailed kinetic model, dissertation for the degree of Doctor of Physico-mathematical Sciences, Bashkir State University, Ufa, 2021.
 9. L.F. Nurislamova, Development of a compact kinetic model of propane pyrolysis by sensitivity analysis methods, Dissertation for the degree of Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Bashkir State University, Ufa, 2015.
 10. L.V. Enikeeva Algorithm and software package for analyzing the mechanism of death of aromatic nitroxides and low-temperature conversion of light hydrocarbons, Dissertation for the degree of Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Bashkir State University, Ufa, 2018.
 11. O.S. Yazovtseva Investigation of the stability of solutions of mathematical models in terms of components based on local component-by-component asymptotic equivalence, Dissertation for the degree of Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Ulyanovsk State University, Ulyanovsk, 2019.
 12. I.M. Gubaydullin, O.S. Yazovtseva, Investigation of the averaged model of oxidative regeneration of a coked catalyst, *Computer studies and modeling*, 2021, Vol. 13, No. 1, P. 149-161
 13. O. Yazovtseva, O. Grishaeva, I. Gubaydullin, E. Peskova, Construction of a Parallel Algorithm for the Numerical Modeling of Coke Sediments Burning from the Spherical Catalyst Grain, *Parallel Computational Technologies. PCT 2022. Communications in Computer and Information Science*, Springer, Cham, 2022, V. 1618. https://doi.org/10.1007/978-3-031-11623-0_17.
 14. E.E. Peskova Modeling of chemically reacting flows using computational algorithms of high order of accuracy, dissertation for the degree of Candidate of Physical and Mathematical Sciences, IPM named after M.V. Keldysh, Moscow, 2018.