

УДК 519.63

Дифференциальные уравнения в оптимизации каталитических процессов с использованием суперкомпьютерного моделирования*

Губайдуллин И.М.^{1,2}, Коледина К.Ф.^{1,2}

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН¹,
Уфимский государственный нефтяной технический университет²

Аннотация: В работе представлены результаты исследования двух промышленно важных процессов с научными группами из других регионов. Показаны общие подходы и преимущества каждой из групп: 1) МГТУ им. Н.Э. Баумана – полимеризация, т. е. процесс образования высокомолекулярного вещества (полимера) путём многократного присоединения молекул низкомолекулярного вещества (мономера) к активным центрам в растущей молекуле полимера; 2) ИПМ им. М.В. Келдыша РАН – течение углеводородного флюида в проточном химическом реакторе со слоем катализатора. В результате совместной работы получены: комплексные математические модели, учитывающие сверхжесткость дифференциальных уравнений и включающие квазигидродинамическую систему уравнений, дополненную уравнениями теплопроводности и уравнениями конвекции-диффузии-реакции для концентраций компонент флюида; специализированная методика решения систем дифференциальных уравнений на основе сеточных методов; параллельная реализация численных алгоритмов на базе технологий MPI и OpenMP; комплекс программ для решения выбранных класса задач; цифровая платформа для проведения масштабных вычислительных экспериментов.

Ключевые слова: математическое моделирование, полимеризация, сверхжесткие дифференциальные уравнения, углеводородный флюид, численные методы.

1. Постановка задачи

В последнее время предприятия нефтегазовой отрасли (буровые установки добычи, транспортировки, первичная и вторичная переработка, нефтехимия) преимущественно использовали иностранные компьютерные программы для хранения и анализа данных, а также математического моделирования технологических процессов. Зачастую эти программные комплексы работают по принципу «чёрного ящика» – неизвестны математическое описание и алгоритмы решения задач, пользователю доступны только входные и выходные (результаты работы программ) информационные потоки. Опыт работы с такими комплексами показал, что у них имеются свои плюсы и минусы. Из плюсов на сегодняшний день – бесспорно использование компьютерных программ позволяет оперативно принимать оптимальные технические решения химикам-технологам на заводах, что в свою очередь, влияет на качество и масштабы выпускаемых продукции.

Очевидно, что доля программ на основе математического описания в виде систем обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (СОНДУ), а также в виде уравнений в частных производных постоянно растет. Например, ужесточа-

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

ются требования к компонентному составу выпускаемых автомобильных бензинов и топлив специального назначения. Если по стандарту Евро-6 требования к содержанию бензола было 1%, то в Евро-7 – уже 0.8 %. Требования к плотности реактивного топлива военного назначения – значения должны превышать 900 кг/м^3 при 20°C . Таких показателей можно добиться только на основе учёта быстрых и медленных химических реакций. Математическое описание таких реакций представляет собой сверхжёсткие СОНДУ, размерности которых порой достигает 100 тысяч уравнений. Описание процессов тепломассопереноса на зерне катализатора с учётом химических процессов в нелинейном многофазном потоке на основе эллиптических, гиперболических и параболических уравнений в частных производных до сих пор нерешённая практическая задача.

В данной работе представлены предварительные результаты совместного математического моделирования двух промышленно важных процессов с нашими коллегами. Первый процесс – полимеризация – процесс образования высокомолекулярного вещества (полимера) путём многократного присоединения молекул низкомолекулярного вещества (мономера) к активным центрам в растущей молекуле полимера исследован совместно с МГТУ им. Н.Э. Баумана. Второй процесс – течения углеводородного флюида в проточном химическом реакторе со слоем катализатора – совместно с коллегами из ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

2. Математическая постановка задачи моделирования процесса полимеризации

Молекула мономера, входящая в состав полимера, образует так называемое мономерное (структурное) звено. Элементный состав (молекулярные формулы) мономера и полимера приблизительно одинаков. При описании кинетики полимеризации возникает трудность в решении СОНДУ, так как число таких полимеров, а следовательно и уравнений в СОНДУ, в общем случае, бесконечно.

Обычно исследователи прибегают к различным методам сокращения размерности, например – применению моментов. Однако есть исследования, где решение таких СОНДУ осуществляется с большим числом уравнений напрямую. В настоящей работе предлагается решать СОНДУ напрямую, ограничить систему и рассмотреть число звеньев в полимере i до 8000.

Число уравнений в системе СОНДУ оценивается по формуле: $2 + (2 \cdot i + 3 \cdot j)$, где i – количество звеньев мономера, j – количество активных центров (АЦ). Требуется рассчитать систему СОНДУ для $i = 8000$, $j = 6$, т. е. с числом дифференциальных уравнений: $2 + (2 \cdot 8000 + 5) \cdot 6 = 96032$ уравнений. Решатели систем СОНДУ [1,2], разработанные группой Маничева Владимира Борисовича, к.ф.-м.н. доцента кафедры РК6 (САПР) МГТУ им. Н. Э. Баумана предназначены для решения систем сверхжестких СОНДУ очень большой размерности. Написана программа «MANZHUK» (скрипт) на языке С для генерации систем дифференциальных уравнений в программы, описывающих процесс полимеризации. Получен достоверный результат для количества уравнений порядка 2000. Выполнено сравнение с зарубежным математическим пакетом MATLAB Octave. Сравнение показало улучшение результат почти на два порядка точности.

3. Математическая постановка задачи для течения углеводородного флюида в проточном химическом реакторе со слоем катализатора

В данном исследовании ИНК УФИЦ РАН представляют сотрудники лаборатории математической химии и приготовления катализаторов, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН – сотрудники отдела № 16 «Проблемы математического моделирования и высокопроизводительных вычислений» во главе д.ф.-м.н. Поляковым Сергеем Владимировичем.

В математической модели процесса необходимо как минимум иметь описание четырех ее составляющих [3, 4]:

- 1) сплошной среды для анализа поля течения флюида;
- 2) химических превращений;
- 3) пористого остова с разной степенью разрешения;
- 4) граничных эффектов.

Современные предлагаемые подходы к моделированию включают в себя: единое осредненное описание всех процессов на основе закона Дарси с учетом упрощенной химической кинетики и раздельное описание всех процессов и стадий на основе методов расщепления и многомасштабности.

Таким образом, итоговый выбор многомасштабного подхода, сочетающий методы сплошной среды и методы частиц заключается в разделении процессов на 4 блока:

- 1) течение двухфазной вязкой теплопроводной жидкости в пористой среде;
- 2) химические превращения;
- 3) деформации пористых материалов под действием давления и тепла;
- 4) граничные эффекты.

В первом приближении были следующие допущения [5]: несущей средой является жидкая часть флюида; продукт реакции также является в основном жидкостью; пористое тело не деформируется; граничные эффекты описываются на макроскопическом уровне. В этих предположениях в модели будут присутствовать две системы уравнений – гидродинамическая и химическая, сопрягаемые в рамках схемы расщепления по физическим процессам. В качестве первой системы выбрана квазигидродинамическая (КГиД) система уравнений, развиваемая в работах Б.Н. Четверушкина, Т.Г. Елизаровой, Ю.В. Шеретова, А.А. Злотника (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, ТГУ, НИУ ВШЭ), дополненная уравнениями теплопроводности и уравнениями конвекции-диффузии-реакции (КДР) для концентраций компонент флюида. В качестве второй системы используется система уравнений химической кинетики [6], описывающая процесс изомеризации в присутствии металлического катализатора, предложенная группой И.М. Губайдуллина и К.Ф. Колединой (ИНК УФИЦ РАН), она уточняет уравнения КДР.

В работе использованы следующие вычислительной математики:

- 1) сеточный метод конечных объемов;
- 2) гибридные нерегулярные сетки;
- 3) треугольные и четырехугольные ячейки;
- 4) явные и неявные схемы по времени;
- 5) итерации для нелинейности.

Для реализации представленных методов применены следующие технологии:

- ◇ Расчетное ядро кода – язык программирования: ANSI C/C++;
- ◇ Параллельные технологии – метод разделения области на домены и параллель-

ные стандарты MPI, OpenMP.

Разработанные алгоритмы легли в основу созданной цифровой платформы, которая включает в себя [7]:

- 1) сервер управления (**Linux**);
- 2) Клиент (интерфейс пользователя) на Python (**Windows, Linux**);
- 3) переносимое расчетное ядро;
- 4) систему визуализации.

4. Заключение

Для исследования двух промышленно важных процессов полимеризации и изомеризации углеводородного флюида, стимулируемого катализатором в проточном реакторе разработаны:

1. Комплексные математические модели, учитывающие сверхжесткость СОНДУ и включающие квазигидродинамическую систему уравнений, дополненную уравнениями теплопроводности и уравнениями конвекции-диффузии-реакции для концентраций компонент флюида.

2. Методика решения систем дифференциальных уравнений на основе сеточных методов.

3. Параллельные реализации численных алгоритмов на базе технологий MPI и OpenMP.

4. Комплекс программ для решения выбранных класса задач.

5. Цифровая платформа для проведения масштабных вычислительных экспериментов.

По разным причинам промышленность отказалась от использования не отечественных программных продуктов практически полностью. Для оперативного создания отечественных программных продуктов необходима консолидация узких специалистов из разных регионов, из разных школ.

Сейчас сложилась патовая ситуация: университеты загружены в основном ненужными бумажными отчётами, часовая нагрузка с каждым годом увеличивается в сторону аудиторных часов. Ведущим преподавателям некогда налаживать тесные контакты с производством, да и менталитет таков: «если кому-то надо – придут». В последнее время на публикации преподавателей, у которых основное место работы университет, введен «мораторий». Академические институты переживают «молодежный голод». При этом маленькие стипендии и точечные гранты – не самая большая проблема, наиболее остро стоит вопрос о перспективе работы молодых кандидатов и докторов наук. Зарплаты остепенённых ученых и преподавателей не позволяют вести качественную научную и образовательную деятельность. Крупные нефтегазовые компании г. Уфы создали свои научные центры, которые столкнулись со следующей проблемой – раздутые штаты и низкая наукоемкость разработанных проектов. На сегодняшний день единственным выходом из сложившейся ситуации видится объединение лучших научных кадров вокруг решения конкретных производственных задач и заключение прямых хозяйственных договоров с предприятиями. Эти работы позволят также подключить будущих молодых ученых – студентов вузов.

Литература

1. Жук Д.М., Кожевников Д.Ю., Маничев В.Б. Проблемы разработки математического ядра для программ моделирования динамики технических

- систем // Проблемы разработки перспективных микро- и наноэлектронных систем (МЭС), 2020. № 4. С. 31-38.
2. Маничев В.Б., Митенкова Е.Ф., Фельдман Э.О., Кожевников Д.Ю., Соловьева Е.В. Достоверность и точность решения задач нуклидной кинетики // Информационные технологии, 2020. Т.26. № 4. С. 231-238.
 3. Елизарова Т.Г., Злотник А.А., Четверушкин Б.Н. О квазигазо- и гидродинамических уравнениях бинарных смесей газов // Доклады Академии наук, 2014. Т.459. № 4. 395 с.
 4. Антонов А.Н., Елизарова Т.Г., Четверушкин А.Н., Шеретов Ю.В. Численное моделирование пульсационных режимов при сверхзвуковом обтекании полого цилиндра // Журнал вычислительной математики и математической физики, 1990. Т.30. № 4. 548 с.
 5. Поляков С.В., Подрыга В.О., Тарасов Н.И. // Материалы VII Всероссийской научной конференции «Актуальные проблемы теории и практики гетерогенных катализаторов и адсорбентов». 28 июня – 1 июля 2023 года. Россия. Владимирская область, г. Суздаль.
 6. Коледина К.Ф., Зайнуллин Р.З., Губайдуллин И.М., Мугаллимова Р.С // Материалы VII Всероссийской научной конференции «Актуальные проблемы теории и практики гетерогенных катализаторов и адсорбентов». 28 июня – 1 июля 2023 года. Россия. Владимирская область, г. Суздаль.
 7. Тарасов Н.И., Поляков С.В., Подрыга В.О. // Материалы VII Всероссийской научной конференции «Актуальные проблемы теории и практики гетерогенных катализаторов и адсорбентов». 28 июня – 1 июля 2023 года. Россия. Владимирская область, г. Суздаль.

MSC 00A71

Differential Equations in the Optimization of Catalytic Processes by Supercomputer Simulation

I.M. Gubaydullin^{1,2}, K.F. Koledina^{1,2}

Institute of Petrochemistry and Catalysis of RAS ¹, Ufa State Oil Technical University ²

Abstract: The paper presents the results of a study of two industrially important processes with scientific groups from other regions. The general approaches and advantages of the groups are shown: 1) Bauman Moscow State Technical University – polymerization, the process of formation of a high molecular weight substance (polymer) by repeated attachment of molecules of a low molecular weight substance (monomer) to active centers in a growing polymer molecule; 2) Keldysh Institute of Applied Mathematics RAS – hydrocarbon fluid flow in a flow chemical reactor with a catalyst bed. As a result of the joint approach, the following have been developed: complex mathematical models that take into account the superrigidity of differential equations and include a quasi-hydrodynamic system of equations, supplemented by heat conduction equations and convection-diffusion-reaction equations for fluid component concentrations; technique for solving systems of differential equations based on grid methods; parallel algorithms for the implementation of numerical schemes based on MPI and OpenMP technologies; a set of programs for solving the selected class of problems; digital platform for conducting large-scale computational experiments.

Keywords: mathematical modeling, polymerization, superstiff differential equations, hydrocarbon fluid, numerical methods.

References

1. Zhuk D.M., Kozhevnikov D.Yu., Manichev V.B. Problems of developing a mathematical kernel for programs for modeling the dynamics of technical systems // Problems of developing promising micro- and nanoelectronic systems (MES), 2020. No.4. P. 31-38.
2. Manichev V.B., Mitenkova E.F., Feldman E.O., Kozhevnikov D.Yu., Solovieva E.V. Reliability and accuracy of solving problems of nuclide kinetics // Information technologies. 2020. Vol.26. No.4. P. 231-238.
3. Elizarova T.G., Zlotnik A.A., Chetverushkin B.N. On quasi-gas- and hydrodynamic equations of binary mixtures of gases // Reports of the Academy of Sciences, 2014. Vol.459. No.4. 395 p.
4. Antonov A.N., Elizarova T.G., Chetverushkin A.N., Sheretov Yu.V. Numerical simulation of pulsation regimes in supersonic flow around a hollow cylinder // Journal of Computational Mathematics and Mathematical Physics, 1990. Vol.30. No.4. 548 p.
5. Polyakov S.V., Podryga V.O., Tarasov N.I. Proceedings of the VII All-Russian Scientific Conference "Actual Problems of Theory and Practice of Heterogeneous Catalysts and Adsorbents". June 28 - July 1, 2023. Russia. Vladimir region, Suzdal.

6. Koledina K.F., Zainullin R.Z., Gubaidullin I.M., Mugallimova R.S. Proceedings of the VII All-Russian Scientific Conference "Actual Problems of Theory and Practice of Heterogeneous Catalysts and Adsorbents". June 28 - July 1, 2023. Russia. Vladimir region, Suzdal.
7. Tarasov N.I., Polyakov S.V., Podryga V.O. Proceedings of the VII All-Russian Scientific Conference "Actual Problems of Theory and Practice of Heterogeneous Catalysts and Adsorbents". June 28 - July 1, 2023. Russia. Vladimir region, Suzdal.