

УДК 004.94

Математическое моделирование и оптимизация флюидодинамических процессов в пористых средах*

Губайдуллин И.М.

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН,
Уфимский государственный нефтяной технический университет

Аннотация: В статье представлен обзор развития математического моделирования нестационарных процессов в зерне и слое катализатора. Отмечена необходимость исследования детальных процессов различной природы: химических, диффузионных и конвективных.

Ключевые слова: физическая химия, нестационарные процессы, математическое моделирование, вычислительный алгоритм.

Флюидодинамические процессы – это движение твёрдых, жидких и газообразных веществ. В данной работе рассматриваются процессы в порах катализаторов, которые являются одним из основных компонентов химических реакторов и аппаратов. На современном этапе химики-экспериментаторы в лабораторных условиях, а также химики-технологи в промышленном масштабе научились разрабатывать отечественные катализаторы с заданной внутренней структурой на уровне атомов и молекул. Сочетание химических и вычислительных экспериментов заметно ускоряет разработку катализаторов. Адекватная математическая модель в основе компьютерных стендов позволит оперативно смоделировать практически все технологические режимы использования катализаторов в химико-технологических реакторах. Это естественным образом существенно сокращает материальные и временные затраты на испытание новых отечественных промышленных катализаторов.

В химических реакторах катализаторы представляют собой в основном частицы (зёрна) размером от 10^{-2} до 4 мм в виде гранул сферической, цилиндрической и других форм, уложенных в несколько слоев. Различают несколько видов слоев катализатора: неподвижный, движущийся и кипящий. В промышленности преобладают реакторы с неподвижным слоем катализатора. Несмотря на обилие форм зерен и типов слоев катализаторов, необходимо учитывать химические реакции во время проникновения сырья в катализатор и внутри зерна, а также выход продуктов реакций. Большинство исследователей ограничивают химизм процесса только анализом компонентного состава сырья и продуктов реакций, без учета процессов, сопутствующих реакциям, например, изменения объема реакционной смеси в порах зерна.

Необходимость учёта дополнительных процессов в пористых средах за счёт химических реакций при моделировании промышленных процессов был предложен член-корр. АН СССР, д.х.н. М.Г. Слинько [1]. В 1946 г. при его участии на основе математического моделирования был спроектирован и построен завод получения тяжелой воды по методу многоступенчатого электролиза в сочетании с каталитическим изотопным обменом дейтерия между водородом и парами воды. Трудность создания производства тяжелой воды определялась низким содержанием дейтерия в природ-

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

ной воде, что требовало перерабатывать на начальных стадиях процесса от 10 до 100 м³ сырьевой воды на каждый литр производимой тяжелой воды и строить многоступенчатый каскад из разделительных элементов сложной структуры. В основу разработанной математической модели процесса разделения изотопов была положена идея структурных уровней. На первом, молекулярном, уровне решены термодинамические и кинетические задачи; на втором, зерне катализатора, – определены кинетические уравнения с учетом диффузионных процессов; на третьем определена структура разделительного элемента; на четвертом рассчитан оптимальный каскад. Взаимозависимость и связь этих уровней отражают целостность и специфичность каталитического процесса разделения. Этот подход был в дальнейшем развит и применен при моделировании химических реакторов. В частности, в 80х гг. прошлого столетия одному из учеников М.Г. Слинько д.х.н. А.В. Балаеву со своими учениками (в том числе, и с автором настоящей работы) удалось разработать математическую модель окислительной регенерации закоксованных катализаторов с учетом дополнительных процессов, сопутствующих химическим реакциям. Уравнения материального баланса для зерна катализатора с учётом изменения объема за счёт химических реакций приводят к возникновению переноса массы в порах зерна дополнительным (стефановским) потоком [2].

Благодаря учёту дополнительных процессов было проведено динамическое моделирование и оптимизация ряда промышленных процессов. Например, для четырехслойного реактора гидрокрекинга длины 20 м установлен оптимальный режим, который позволил сократить время восстановления активности катализатора почти в 2 раза.

Развитие этих подходов при моделировании сложных химико-технологических систем на современном этапе представлено в работах [4, 4, 6, 7, 7].

В работе [7] построен вычислительный алгоритм на основе принципа расщепления по физическим процессам для нестационарного процесса в сферическом зерне катализатора. Процесс описан пространственно одномерной задачей математической физики в силу предположения о центральной симметрии зерна. Расщепление заключается в раздельном расчете химических задач и диффузионных потоков. Это позволяет получить существенный выигрыш в расчетном времени даже в сравнении с параллельной реализацией алгоритма [4].

Обобщение алгоритма на пространственно двумерную задачу – моделирование нестационарных процессов в цилиндрическом зерне катализатора описано – в [4]. Новая математическая модель исследована в осесимметричной постановке, что позволяет эффективно применять для ускорения расчетов технологию MPI [6].

Моделирование слоя катализатора влечет дополнительное усложнение задачи в связи с переходом на следующий уровень – уровень реактора. Это приводит к возникновению вычислительных трудностей при разработке численных моделей и требует дополнительных средств для сохранения устойчивости расчетов [8, 8, 9].

В статье [7] проведен численный анализ движения фронта горения при окислительной регенерации неподвижного слоя в случае одностадийного описания химизма. Численное моделирование фронта горения проведено в условиях динамического режима выжига, т.е. при переменных граничных условиях. Расчеты подтвердили экспериментально обнаруженные преимущества динамического выжига в сравнении со стационарным.

В настоящее время математическая модель слоя [7] обобщена с учетом детальной кинетики процесса и стефановского потока в зерне. Это позволило получить хорошее

совпадение расчетных и экспериментальных данных, полученных на лабораторной установке в УГНТУ (г. Уфа). Далее планируется разработка новой математической модели нестационарного процесса в слое катализатора с цилиндрической формой зерна, что позволит более детально исследовать процессы, например, в катализаторе гидроочистки. Апробация модели будет проведена также на примере окислительной регенерации. Для этого планируется реализация натурального эксперимента в УГНТУ, в том числе и в условиях динамического режима.

Литература

1. Слинько М.Г. История развития математического моделирования каталитических процессов и реакторов // Теоретические основы химической технологии. 2007. Т. 41, № 1. С. 16–34.
2. Балаев А.В. Моделирование каталитических процессов с переменными свойствами реакционной среды. Уфа, 2008. 47 с.
3. Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Yazovtseva O.S., Zagoruiko A.N. Numerical Simulation of Oxidative Regeneration of a Spherical Catalyst Grain // Mathematical Models and Computer Simulations. 2023. V. 15. P. 485–495. DOI: 10.1134/S2070048223030079.
4. 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. // Communications in Computer and Information Science Series. 2022. V. 1618. DOI: 10.1007/978-3-031-11623-0_17.
5. Yazovtseva O.S., Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Sukharev L.A., Zagoruiko A.N. Computer Simulation of Coke Sediments Burning from the Whole Cylindrical Catalyst Grain // Mathematics. 2023. Vol. 11, No. 3. P. 669. DOI: 10.3390/math11030669.
6. Yazovtseva O.S., Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Usmanova A.A., Zagoruiko A.N. MPI-Based Computational Algorithm for Modeling a Cylindrical Catalyst Grain During Oxidative Regeneration // Communications in Computer and Information Science. 2023. V. 1868. Springer, Cham. DOI: 10.1007/978-3-031-38864-4_24.
7. Язовцева О.С., Губайдуллин И.М., Загоруйко А.Н. Моделирование фронта горения в процессе окислительной регенерации катализатора // Многофазные системы. 2023. Т. 18, № 4. С. 362–363. DOI: 10.21662/mfs2023.4.111.
8. Zhukov V.T., Feodoritova O.V., Novikova N.D., Duben A.P. Explicit-iterative scheme for the time integration of a system of Navier–Stokes equations // Mathematical Models and Computer Simulations. 2020. V. 12(6). P. 958–968. DOI: 10.1134/S2070048220060174.
9. Peskova E.E., Yazovtseva O.S. Application of the Explicitly Iterative Scheme to Simulating Subsonic Reacting Gas Flows // Comput. Math. and Math. Phys. 2024. V. 64. P. 326–339. DOI: 10.1134/S0965542524020106.
10. Chetverushkin B.N., Olkhovskaya O.G., Gasilov V.A. An Explicit Difference Scheme for a Nonlinear Heat Conduction Equation // Mathematical Models and Computer Simulations. 2023. V. 15. P. 529–538. DOI: 10.1134/S2070048223030031.

MSC 93A30

Mathematical modeling and optimization of fluid dynamic processes in porous media

I.M. Gubaydullin

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

Abstract: The article provides an overview of the development of mathematical modeling of nonstationary processes in the grain and the catalyst layer. It is noted that it is necessary to study detailed processes of various nature: chemical, diffusive and convective.

Keywords: physical chemistry, nonstationary processes, mathematical modeling, computational algorithm.

References

1. Slinko M.G. The history of the development of mathematical modeling of catalytic processes and reactors // Theoretical foundations of chemical technology. 2007. Vol. 41, No. 1. pp. 16-34.
2. Balaev A.V. Modeling of catalytic processes with variable properties of the reaction medium. Ufa, 2008. 47 p.
3. Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Yazovtseva O.S., Zagoruiko A.N. Numerical Simulation of Oxidative Regeneration of a Spherical Catalyst Grain // Mathematical Models and Computer Simulations. 2023. V. 15. P. 485–495. DOI: 10.1134/S2070048223030079.
4. 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. // Communications in Computer and Information Science Series. 2022. V. 1618. DOI: 10.1007/978-3-031-11623-0_17.
5. Yazovtseva O.S., Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Sukharev L.A., Zagoruiko A.N. Computer Simulation of Coke Sediments Burning from the Whole Cylindrical Catalyst Grain // Mathematics. 2023. Vol. 11, No. 3. P. 669. DOI: 10.3390/math11030669.
6. Yazovtseva O.S., Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Usmanova A.A., Zagoruiko A.N. MPI-Based Computational Algorithm for Modeling a Cylindrical Catalyst Grain During Oxidative Regeneration // Communications in Computer and Information Science. 2023. V. 1868. Springer, Cham. DOI: 10.1007/978-3-031-38864-4_24.
7. Yazovtseva O.S., Gubaydullin I.M., Zagoruiko A.N. Modeling of the combustion front in the process of oxidative regeneration of the catalyst // Multiphase systems. 2023. Vol. 18, No. 4. P. 362–363. DOI: 10.21662/mfs2023.4.111.
8. Zhukov V.T., Feodoritova O.V., Novikova N.D., Duben A.P. Explicit-iterative scheme for the time integration of a system of Navier–Stokes equations //

- Mathematical Models and Computer Simulations. 2020. V. 12(6). P. 958–968. DOI: 10.1134/S2070048220060174.
9. Peskova E.E., Yazovtseva O.S. Application of the Explicitly Iterative Scheme to Simulating Subsonic Reacting Gas Flows // Comput. Math. and Math. Phys. 2024. V. 64. P. 326–339. DOI: 10.1134/S0965542524020106.
10. Chetverushkin B.N., Olkhovskaya O.G., Gasilov V.A. An Explicit Difference Scheme for a Nonlinear Heat Conduction Equation // Mathematical Models and Computer Simulations. 2023. V. 15. P. 529–538. DOI: 10.1134/S2070048223030031.