

УДК 004.94

Применение OpenMP в задаче о моделировании нестационарного процесса в слое катализатора

Родькин А.В.¹, Ткачева С.В.², Язовцева О.С.¹

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет¹,
Мордовский государственный педагогический университет им. М.Е. Евсевьева²

Аннотация: В работе представлено исследование эффективности применения технологии параллельного программирования OpenMP при моделировании нестационарного процесса в слое катализатора. Химические превращения описаны одной стадией. Математическая модель является системой уравнений в частных производных. Для нее поставлены краевые условия и заданы начальные данные. Вычислительный алгоритм построен на основе метода конечных объемов. Приведен анализ ускорения, полученного для разного количества потоков.

Ключевые слова: окислительная регенерация, математическое моделирование, вычислительный алгоритм, OpenMP.

Многие технологические процессы в области химии и инженерии требуют математического моделирования для оптимизации и повышения эффективности. Эксперименты с каждым годом становятся всё более трудоёмкими и дорогими, что делает вычислительное программирование неотъемлемой частью исследований.

Среди различных методов восстановления каталитической активности особое место занимает окислительная регенерация, заключающаяся в выжиге коксовых отложений с помощью кислородсодержащего газа [4]. Для технологической оптимизации данного процесса можно варьировать такие параметры, как температура выжига и концентрация кислорода. Однако, стоит отметить, что проведение реального эксперимента в условиях горения может привести к нежелательным процессам: перегреву, повреждению катализатора, поэтому математическое моделирование регенерации катализатора приобретает особую актуальность.

Целью работы является исследование эффективности параллельной реализации вычислительного алгоритма на основе метода конечных объемов с использованием технологии OpenMP. Оно проведено на примере математической модели окислительной регенерации слоя катализатора с одностадийным описанием химических превращений [2]. Выбор OpenMP, позволяющей задействовать процессор для одновременного решения задачи на нескольких потоках, обусловлен необходимостью ускорения расчетов на ПК в отсутствие доступа к сети, а также простотой в адаптации последовательного кода.

Математическая модель окислительной регенерации слоя катализатора включает описание процессов в зерне катализатора и его слое. Это приводит к большим различиям в характерных размерах исследуемых объектов и усложнению требований устойчивости разностной схемы [7]. Для удовлетворения требований устойчивости в работе использован явно-неявный алгоритм. Модель предполагает пространственное разбиение слоя катализатора на ячейки, в каждой из которых ведется интегрирование по радиусу осредненного зерна катализатора. Для реализации параллельного счета использована директива `omp parallel for` в циклах по радиусу зерна и по длине слоя. Расчеты проведены на ПК, содержащем 6 двухпоточных ядер AMD

Ryzen 5 2600 3.4GHz. Расчетное время для разных пространственных разбиений по радиусу и слою катализатора представлено в таблице ниже.

Потоки	20×20		50×50		100×100	
	Время, с	Ускорение	Время, с	Ускорение	Время, с	Ускорение
1	10.69	1	27.13	1	50.38	1
2	8.52	1.25	19.8	1.37	30.9	1.63
4	7.34	1.45	18.2	1.49	27.38	1.84
6	6.83	1.56	16.74	1.62	22.59	2.23

Проведенные расчеты с изменением размерности сетки показали значительное повышение производительности с ростом числа ячеек.

Результатом работы является исследовательский код, реализованный на языке C++ с применением технологии параллельных вычислений OpenMP, являющейся программной платформой для организации параллельных вычислений с использованием центрального процессора. Сравнение результатов расчетов последовательных и параллельных версий программы показало их совпадение. Наиболее эффективное распараллеливание позволило достичь ускорения выполнения программы в 2 раза.

Предложенный параллельный алгоритм может быть модернизирован для случая многостадийной кинетики [7], в том числе и для цилиндрической формы зерна [4], и в дальнейшем использован для отслеживания процессов горения в слое катализатора при проведении экзотермических реакций [10].

Литература

1. Масагутов Р.М., Морозов Б.Ф., Кутепов Б.И. Регенерация катализаторов в нефтепереработке и нефтехимии. М.: Изд-во Химия, 1986. 144 с.
2. Reshetnikov S.I., Petrov R., Zazhigalov S., Zagoruiko A.N. Mathematical modeling of regeneration of coked Cr-Mg catalyst in fixed bed reactors // Chemical Engineering Journal. 2020. V. 380. DOI: 10.1016/j.cej.2019.122374.
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.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.
5. 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. 1983. С. 233–246.

MSC 65Y05

Application of OpenMP in the problem of modeling a non-stationary process in a catalyst layer

A.V. Rodkin¹, S.V. Tkacheva², O.S. Yazovtseva¹

National Research Mordovia State University¹,
Mordovia State Pedagogical University named after M.E. Evseviev²

Abstract: The paper presents a study of the effectiveness of the OpenMP parallel technology for modeling of a non-stationary process in a catalyst layer. Chemical transformations are described in one stage. A mathematical model is a system of partial differential equations. Boundary conditions and initial data has been set for it. The computational algorithm is based on the finite volume method. An analysis of the acceleration obtained for a different number of flows is given.

Keywords: oxidative regeneration, mathematical modeling, computational algorithm, OpenMP.

References

1. Masagutov R.M., Morozov B.F., Kutepov B.I. Regeneration of catalysts in oil processing and petrochemistry. Moscow, USSR, 1987. 144 p.
2. Reshetnikov S.I., Petrov R., Zazhigalov S., Zagoruiko A.N. Mathematical modeling of regeneration of coked Cr-Mg catalyst in fixed bed reactors // Chemical Engineering Journal. 2020. V. 380. DOI: 10.1016/j.cej.2019.122374.
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.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.
5. Balaev A.V., Drobyshevich V.I., Gubaydullin I.M., Masagutov R.M. Investigation of wave processes in regenerators with a fixed catalyst layer // Propagation of heat waves in heterogeneous media, 1983. P. 233–246.