

УДК 51-7

Параллельный алгоритм для моделирования нестационарного процесса в слое катализатора*

Иншакова А.С.¹, Язовцева О.С.², Губайдуллин И.М.³

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет¹,
Математический институт им. В.А. Стеклова РАН²,
Институт нефтехимии и катализа РАН³

Аннотация: В статье представлен сравнительный анализ параллельных алгоритмов на основе технологии OpenMP для моделирования нестационарного процесса в слое катализатора со сферической формой зерна. Химическая реакция описана одной стадией. Математическая модель включает в себя уравнения диффузии-реакции для зерна катализатора, теплопроводности для зерна катализатора и тепломассопереноса для газа в слое катализатора. Исследовано ускорение алгоритма в случае применения параллельного счета к различным вычислительным этапам. Наибольшего значения ускорение достигает при параллельном расчете процессов в слое катализатора.

Ключевые слова: нестационарные процессы, параллельный алгоритм, OpenMP.

1. Постановка задачи

Трудоемкость расчетов при исследовании нестационарных физико-химических процессов предполагает использование параллельных технологий при программной реализации алгоритмов [1]. В условиях лаборатории не всегда существует возможность удаленного подключения к высокопроизводительным системам, поэтому актуально использование технологии OpenMP для проведения вычислительных экспериментов на персональных компьютерах и ноутбуках.

Рассмотрена математическая модель, описывающая одностадийный химический процесс [2]. В модели учитывается диффузия компонент реакционной смеси в поры зерна и посредством граничных условий их выход в общий газовый поток. Тепломассоперенос по слою катализатора учитывается для двух фаз. Для скелета катализатора записано уравнение теплопроводности с интегральным источником членом. Для газа в слое катализатора записано уравнение переноса, аналогично учитывается массоперенос по слою катализатора.

Система уравнений смешанного типа, отвечающая математической модели, имеет вид:

$$\varepsilon_z \frac{\partial y}{\partial t} = \frac{D_{eff}}{\hat{r}^2} \frac{\partial}{\partial \hat{r}} \left(\hat{r}^2 \frac{\partial y}{\partial \hat{r}} \right) - W, \quad (1)$$

$$c_z \frac{\partial \hat{T}_z}{\partial t} = -\alpha S_z (\hat{T}_z - \hat{T}_g) + \lambda_{eff} \frac{\partial^2 \hat{T}_z}{\partial \hat{t}^2} + \frac{\rho}{V} \int_0^V QW dV, \quad (2)$$

$$\frac{\partial m}{\partial t} = -W, \quad (3)$$

*Работа выполнена при финансовой поддержке Института нефтехимии и катализа Российской академии наук (тема № FMRS-2025-0031).

$$uc_g \frac{\partial \hat{T}_g}{\partial \hat{l}} = \alpha S_z (\hat{T}_z - \hat{T}_g), \quad (4)$$

$$u \frac{\partial x}{\partial \hat{l}} = \beta S_z (y - x) \quad (5)$$

Здесь ε_z – пористость зерна; $y(t, \hat{l}, \hat{r})$, – мольная доля кислорода в газовой фазе в порах зерна; t – время, с; $\hat{r}$ – пространственная координата по радиусу зерна катализатора; $\hat{l}$ – пространственная координата по длине слоя; D_{eff} – коэффициент диффузии реакционной смеси в порах зерна, м²/с; $\hat{T}_z$ – температура слоя катализатора, К; $\hat{T}_g$ – температура газа, К; c_z – эффективный коэффициент теплоемкости катализатора, Дж/м³/К; α – коэффициент теплообмена, Вт/м²/К; S_z – удельная площадь поверхности катализатора, м²/м³; λ_{eff} – эффективный коэффициент теплопроводности катализатора, Вт/м/К; Q – тепловой эффект реакции, Дж/кг; u – скорость движения газового потока, м/с; x – мольная доля кислорода в газе в слое катализатора; β – коэффициент массообмена, м/с; R – радиус зерна, м; L – длина слоя катализатора, м.

Разностная схема носит явно-неявный характер. Неявная аппроксимация применена к линейным уравнениям, что позволяет сохранить эффективность алгоритма при реализации с использованием параллельных технологий [3].

Программа написана на языке C++ с использованием библиотеки OpenMP для параллельных вычислений на многопроцессорных системах. Алгоритм протестирован на устройстве Macbook Pro M1 2020. Количество ядер 8 (4 производительности и 4 эффективности). Было протестировано несколько вариантов параллельного расчета: внешнего цикла по длине слоя катализатора, внутреннего цикла по зерну катализатора и вложенная параллелизация обоих циклов. В программной реализации предусмотрен случай гонки данных (одновременного изменения одной и той же переменной без синхронизации). В контексте многозадачности гонка данных возникает, когда два или более потока одновременно обращаются к общей памяти, что нарушает корректность выполнения программы и ее производительность.

2. Сравнительный анализ ускорения алгоритмов

В качестве наглядных примеров представлены вычислительные эксперименты для 30 секунд технологического времени при различном количестве расчетных ячеек.

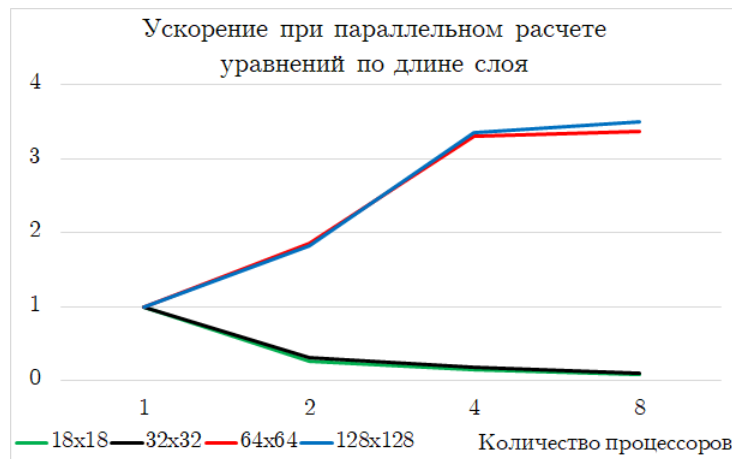


Рис. 1. Ускорение алгоритма для различных размерностей расчетной сетки при применении параллельного счета к циклу по длине слоя

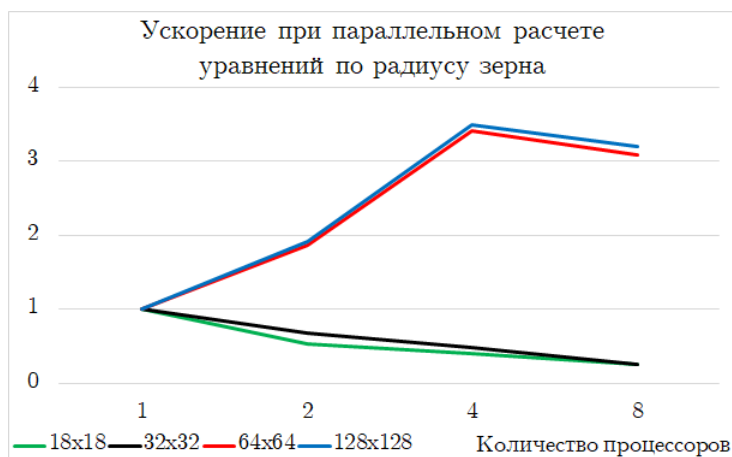


Рис. 2. Ускорение алгоритма для различных размерностей расчетной сетки при применении параллельного счета к циклу по зерну катализатора

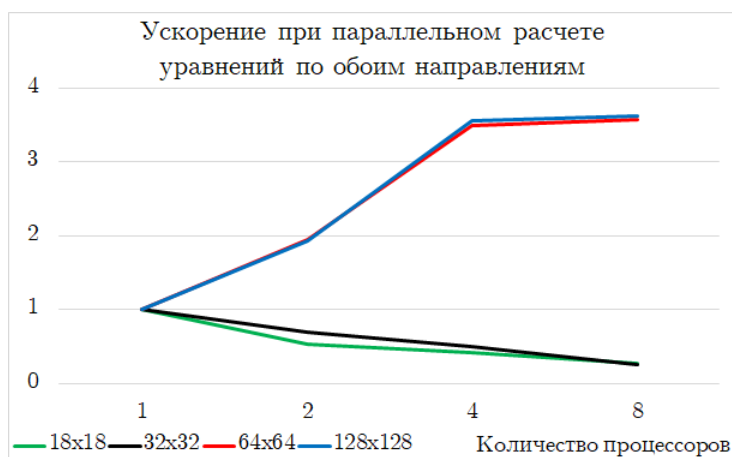


Рис. 3. Ускорение алгоритма для различных размерностей расчетной сетки при применении параллельного счета к обоим пространственным циклам

Как видно из графиков, ускорение параллельного алгоритма при небольших размерах расчетной сетки достаточно мало в силу большой затраты ресурсов на создание и управление потоками, в также несбалансированной нагрузки между ними. Ускорение на больших размерах сетки адекватно.

При расчете абсолютного значения ускорения наилучшие результаты показывает параллельный расчет обоих пространственных циклов, однако, при увеличении количества процессоров его рост замедляется. Тенденция к увеличению ускорения наблюдается при применении параллельного счета к решению уравнений по длине слоя катализатора.

Литература

1. Губайдуллин И. М., Пескова Е. Е., Язовцева О. С., Загоруйко А. Н. Численное моделирование окислительной регенерации сферического зерна катализатора // Математическое моделирование. 2022. Т. 34, № 11. С. 48-66. DOI: 10.20948/mm-2022-11-04.

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. Vol. 380. P. 122374. DOI: 10.1016/j.cej.2019.122374.
3. Yazovtseva O. S. Numerical Study of Wave Processes during Oxidative Regeneration of a Stationary Catalyst Layer // Mathematical Models and Computer Simulations. 2024. Vol. 16, no. S2. P. S272-S281. DOI: 10.1134/S2070048224700972.

MSC 34D20

Parallel algorithm for modeling an unsteady process in a catalyst layer

A.S. Inshakova¹, O.S. Yazovtseva², I.M. Gubaydullin³

National Research Mordovia State University¹, Steklov Mathematical Institute of Russian Academy of Sciences ², Institute of Petrochemistry and Catalysis of RAS ³

Abstract: The article presents a comparative analysis of parallel algorithms based on OpenMP technology for modeling an unsteady process in a catalyst layer with spherical grain shapes. The chemical reaction is described in one stage. The mathematical model includes the diffusion-reaction equations for the catalyst grain, heat equation for the catalyst grain, and heat and mass transfer for the gas in the catalyst layer. The acceleration of the algorithm in the case of applying parallel computation to various computational stages is investigated. The greatest acceleration is achieved when processes in the catalyst layer are calculated in parallel.

Keywords: unsteady processes, parallel algorithm, OpenMP.

References

1. Gubaydullin I. M., Peskova E. E., Yazovtseva O. S., Zagoruiko A. N. Chislennoe modelirovanie oksislitelnoi regeneratsii sfericheskogo zerna katalizatora [Numerical modeling of oxidative regeneration of spherical catalyst grains] // Matematicheskoe modelirovanie. 2022. Vol. 34, no. 11. P. 48-66. DOI: 10.20948/mm-2022-11-04. (in Russian)
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. Vol. 380. P. 122374. DOI: 10.1016/j.cej.2019.122374.
3. Yazovtseva O. S. Numerical Study of Wave Processes during Oxidative Regeneration of a Stationary Catalyst Layer // Mathematical Models and Computer Simulations. 2024. Vol. 16, no. S2. P. S272-S281. DOI: 10.1134/S2070048224700972.