

Моделирование процесса окислительной регенерации закоксованных катализаторов и оптимизация процесса на основе параллельных вычислений

Л.В. Сайфуллина, М.Р. Еникеев

Башкирский государственный университет

Описан процесс окислительной регенерации в виде систем алгебраических и дифференциальных уравнений, выражающих основные законы сохранения. Предложен алгоритм численного решения систем уравнений математического описания. Приведена программная реализация вычислительного алгоритма для ЭВМ. При помощи разработанных математических моделей исследованы возможные перегревы в слое катализатора от значений основных определяющих параметров процесса.

Изучению кинетики регенерации промышленных катализаторов от углеродистых отложений окислением последним кислородом воздуха посвящено большое число расчетных и экспериментальных работ, однако авторы ряда работ делают неоправданные допущения. Математическую модель процесса получим на основе уравнений балансов: уравнения материальных балансов по кислороду и по коксу и уравнение теплового баланса для элементарного слоя за время от τ до $\tau+d\tau$ [1]. При выборе кинетической модели учитывалось, что удаляемый кокс имеет сложную структуру и представляет собой в основном продукты реакции уплотнения, содержащие связанный водород. Схема химических превращений, описывающая окисление коксовых отложений, и соответствующие ей кинетические уравнения скоростей стадий имеет вид, рассматриваемый в работе [2].

Таким образом, математическая модель процесса выжигания кокса из слоя катализатора в различных кинетических режимах представляет собой систему дифференциальных уравнений с учетом соотношений для расчета скоростей стадий реакций.

Построенная математическая модель может быть использована для исследования и расчета ряда регенерационных устройств – изотермического и адиабатического реактора. Для изотермического реактора $\partial T / \partial l = 0$, а если рассматривать режим с постоянной в ходе всей регенерации температурой, то $\partial T / \partial \tau = 0$ и описание процесса регенерации в изотермическом реакторе заметно упрощается.

Оптимизация осуществлялась с помощью генетического алгоритма. Проблема выбора критерия оптимизации связана, прежде всего, с задачей охраны окружающей среды, так как выбрасываемый в атмосферу газ должен содержать такое количество монооксида углерода, которое не превышает санитарно допустимую норму. Поэтому в качестве критерия оптимизации рассматривается условие минимизации среднего за время работы t_k содержания CO , образующегося в ходе регенерации:

$$\max \left\{ J = -\frac{1}{t_k} \int_0^{t_k} x_4(\tau_k, t) dt \right\}$$

Литература

1. Жоров Ю.М. Моделирование физико-химических процессов нефтепереработки и нефтехимии. – М.: Химия, 1978. – 376 с., ил. – (Процессы и аппараты химической и нефтехимической технологии).
2. 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. Н-ск: Наука, Сиб. отд-ние, 1988.- С. 233-246.