

ПРИМЕНЕНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ ПАРАМЕТРОВ ПРОЦЕССА ОКИСЛИТЕЛЬНОЙ РЕГЕНЕРАЦИИ КАТАЛИЗАТОРОВ

Л.В. Сайфуллина, М.Р. Еникеев, И.М. Губайдуллин

1. Введение

Каталитические процессы широко распространены в химической, нефтехимической и нефтеперерабатывающей промышленности. Химия и технология таких процессов весьма актуальны. Зачастую причиной ухудшения режимных показателей таких процессов становится отложение кокса на активной поверхности катализатора. Для восстановления активности катализатора используют окислительную регенерацию. От проведения процесса регенерации зависит уровень активности и стабильности регенерационного катализатора, поэтому оптимальное ведение процесса регенерации имеет большое значение для многих процессов нефтепереработки.

2. Моделирование процесса в слое катализатора

Математическая модель процесса в неподвижном слое катализатора рассматривалась для двух кинетических режимов – изотермического и адиабатического [1,2].

Математическую модель процесса для адиабатического режима представляется в виде системы трех уравнений:

$$\begin{aligned} N_1 \frac{\partial C}{\partial \tau} + N_2 \frac{\partial C}{\partial l} &= -w \\ -\frac{\partial \rho}{\partial \tau} &= \frac{\beta}{\gamma_k} w \\ N_3 \frac{\partial T}{\partial \tau} + N_4 \frac{\partial T}{\partial l} &= -qw \end{aligned} \quad (1)$$

с естественными начальными (2) и граничными (3) условиями:

$$\tau = 0 \quad C = 0 \quad \rho_{l=0} = \rho_0 \quad T_{l=0} = T_0 \quad (2)$$

$$l = 0 \quad C_{\tau>0} = C_0 \quad T_{l=0} = T_0 \quad (3)$$

где $N_1 = \gamma_2 \varepsilon$; $N_2 = \frac{V_0}{S}$; $N_3 = [\gamma_2 \varepsilon c_2 + \gamma_k (1 - \varepsilon) c_k]$; $N_4 = \frac{V_0 c_2}{S}$.

В математическом описании приняты следующие обозначения: V_0 – массовый поток кислородсодержащего газа с плотностью γ_2 , и теплоемкостью c_2 , C – текущая концентрация кислорода в нем, ρ – содержание кокса на катализаторе, γ_k – насыпная плотность катализатора, c_k – его теплоемкость, ε – доля свободного объема в слое, S – сечение трубы, T – температура процесса, w – скорость реакции, измеренную по кислороду и отнесенную к единице реакционного объема, β – соотношение скоростей реакции по кислороду и коксу, q – тепловой эффект реакции.

Для изотермического реактора $\partial T / \partial l = 0$, и если рассматривать режим с постоянной в ходе всей регенерации температурой $\partial T / \partial \tau = 0$, то последнее уравнение в (1) переходит в независимое условие постоянства температуры, а процесс описывается двумя первыми уравнениями:

$$\begin{aligned} N_1 \frac{\partial C}{\partial \tau} + N_2 \frac{\partial C}{\partial l} &= -kC \frac{\rho}{\rho_0} \\ -\frac{\partial \rho}{\partial \tau} &= \frac{\beta}{\gamma_k} kC \frac{\rho}{\rho_0} \end{aligned} \quad (4)$$

с начальными (5) и граничными (6) условиями

$$\tau = 0 \quad C = 0 \quad \rho = \rho_0 \quad (5)$$

$$l = 0 \quad C = C_0 \quad (6)$$

Математическая модель процесса окисления кокса в реакторах с движущимся слоем контактного материала представлена уравнениями материальных балансов по кислороду и по коксу и уравнением теплового баланса:

$$C = C_0 - \frac{\gamma_{\kappa}(1 - \varepsilon)S}{f};$$

$$-\frac{d\rho}{dl} = \frac{\beta \gamma_{\kappa}(1 - \varepsilon)S}{G_{\kappa}} w;$$

$$G_{\kappa} c_{\kappa} \frac{dT}{dl} + (fc_V + \lambda_1 S_n + \lambda_2 S_E)T - (fc_V T_V + \lambda_1 S_n T_n + \lambda_2 S_E T_{E_k}) = -q\gamma (1 - \varepsilon)Sw,$$

$$l = 0: \rho = \rho_0, T = T_0$$

Задачей данной работы является определение оптимальных режимов процессов регенерации в неподвижном и движущемся слое катализатора, используя соответствующие математические модели. Управляющим воздействием в процессе выжигания кокса является температура T_0 (температура кислородсодержащего газа на входе в реактор), на которую в процессе поиска решения накладываются ограничения: $T_{0min} < T_0 < T_{0max}$. T_{0min} определяется из условия достаточно высокой интенсивности процесса выжигания кокса в начальный период, T_{0max} определяется, как правило, термостойкостью катализатора. Кроме того управляющим воздействием является скорость подачи воздуха – N_2 . Для процесса регенерации, проходящей в движущемся слое контактного материала, дополнительными управляющими воздействиями являются параметры кислородсодержащего газа, поступающего в первую и вторую зоны регенератора, где $G_{в1}$ – расход воздуха в первую зону (т/ч), $G_{в2}$ – расход воздуха во вторую зону (т/ч), c_{01} – концентрация кислорода на входе в первую зону (%), плотность поверхности змеевиков (m^2/m) (таблица 1).

Таблица 1. Управляющие параметры

Управляющие параметры					
	u_1	u_2	u_3	u_4	u_5
Неподвижный слой	$T_{в0}$	N_2			
Движущийся слой	$T_{в0}$	$G_{в1}$	$G_{в2}$	$S_{п2}$	c_{01}

Задача оптимизации: при известных входных условиях найти такое управление $U=(T_0, N_2, u_1, \dots, u_n)$, чтобы за минимальное время работы t_k выполнялись ограничения, наложенные на систему.

3. Реализация

Система (1) – (3) решалась используя конечно-разностный аналог, для (4) – (6) было найдено аналитическое решение, численное решение дифференциальных уравнений (7) – (8) было найдено методом Рунге – Кутты.

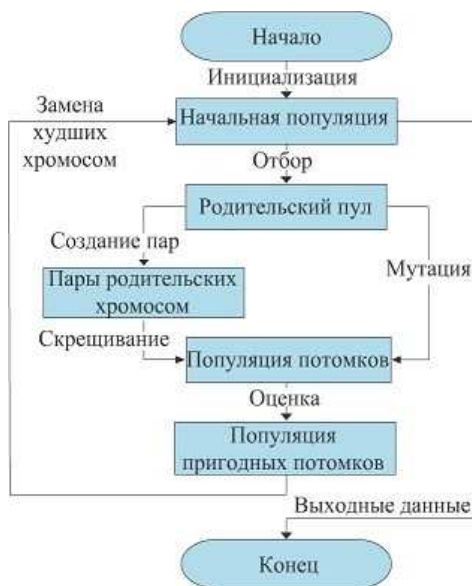


Рис. 1 Общая схема работы генетического алгоритма.

Для поиска оптимальных режимов работы использовался генетический алгоритм (ГА) [3,4] Он представляет собой искусственную эволюцию, включающую несколько этапов – инициализацию популяции случайными хромосомами, отбор, группирование хромосом в пары, скрещивание и мутацию родительских хромосом, оценку пригодности потомков, проверку условий завершения поиска. При этом хромосомы начальной популяции в процессе эволюции замещаются другими, более приспособленными хромосомами (рисунок 1).

Поиск оптимального режимов работы довольно трудоёмкая задача, требующая значительного времени счета. Эффективное решение данной проблемы — использование параллельных вычислений. Распараллеливание вычислительного процесса для рассматриваемой задачи осуществляется посредством передачи сообщений — стандарт MPI. В качестве реализации параллельного генетического алгоритма был выбран глобальный однополопуляционный параллельный генетический алгоритм (ОПГА), имеющий одну пространственно-распределенную популяцию (схема «мастер – подчиненные»).

В таблице 2 представлены характеристики ГА, используемого при решении данной задачи.

Таблица 2. Характеристики генетического алгоритма

Функция приспособленности	$t_k=t(T_0, N_2, u_1, \dots, u_n)$
Начальная популяция	2000 особей
Вероятность мутации	5%
Скрещивание	«Лучший с лучшими»
Селекция	элитный отбор

Для сравнения с результатами ОПГА была реализована островная модель параллельного генетического алгоритма (ОМПГА). Основной идея данной модификации генетического алгоритма – использование небольшого числа относительно больших подпопуляций и миграция особей между ними. Период миграций задается динамически: миграция хромосом из популяции в популяцию производится только тогда, когда хотя бы в одной из популяций длительно не улучшалось решение. Период времени для определения факта «длительного неулучшения решения» составляет 1/80 предельного времени работы ГА (эта величина была определена после нескольких «пробных» запусков алгоритма).

Вычислительный эксперимент проводился на компьютере, оснащённом процессором AMD Phenom(tm) II X4 940. Анализ задач проводился согласно гипотезе Минского, при количестве процессоров больше четырёх.

4. Вычислительный эксперимент

ОПГА (рисунок 2) работает быстрее, чем последовательный вариант алгоритма. Но при использовании более 8 процессоров наблюдается снижение эффективности менее 0.7. Это связано с тем, что затраты времени на пересылку данных начинают возрастать по сравнению с выигрышем в скорости выполнения арифметических операций. Для преодоления данной проблемы, было предложено использовать ОМПГА.

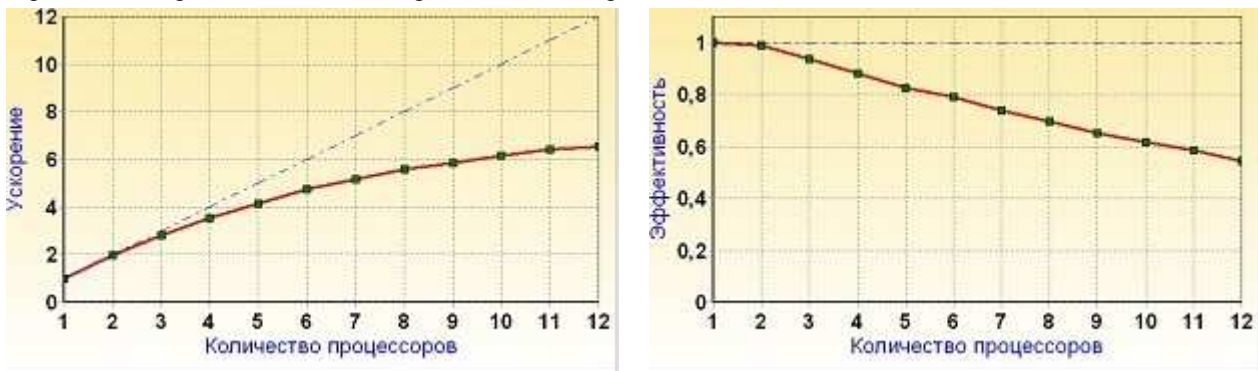


Рис. 2 Зависимость ускорения и эффективности от числа процессоров (ОПГА).

Для примера предположим, что число особей $P_0 = 2000$, количество генераций $N_k = 600$. Количество процессоров, выделенных для решения задачи $p_n = 5$ (очевидно, что для ОМПГА это число совпадает с количеством островов в модели). Результаты анализа алгоритмов сведём в таблицу 3, где использованы следующие обозначения: $\tau_{\text{вв}}$ – время выполнения одной арифметической операции (считаем, что все они выполняются одинаковое количество времени), $\tau_{\text{пс}}$ – время передачи сообщения, n_u – количество ген в хромосоме.

Таблица 3. Сравнение характеристики параллельных алгоритмов

	ОПГА	ОМПГА
Используемая память (число элементов)	$\sim 4 \cdot 10^5$	$4 \cdot 10^5$
Число операций скрещивания	~ 300000	~ 350000
Время простоя	$\sim 1200 \cdot \tau_{\text{пс}}$	$\sim 200 \cdot n_u \cdot \tau_{\text{пс}}$

Как видно из приведенной таблицы, во втором алгоритме число арифметических операций меньше в шесть раз, что подтверждают полученные результаты вычислений времени работы программ, реализующие эти алгоритмы. Сравним алгоритмы по типу коммуникаций: в первом алгоритме — глобальные коммуникации, во втором – локальные. Локальные коммуникации предпочтительнее, так как в случае глобальных коммуникаций

принимающая задача принимает данные последовательно. В случае локальных коммуникаций соседние задачи общаются друг с другом напрямую.

Второй алгоритм (рисунок 3) имеет меньшее время простоев, что также отражается на ускорении. Простоев в первом алгоритме не избежать, так как для изменения глобальной популяции необходимы «значения» особей на каждом процессоре.

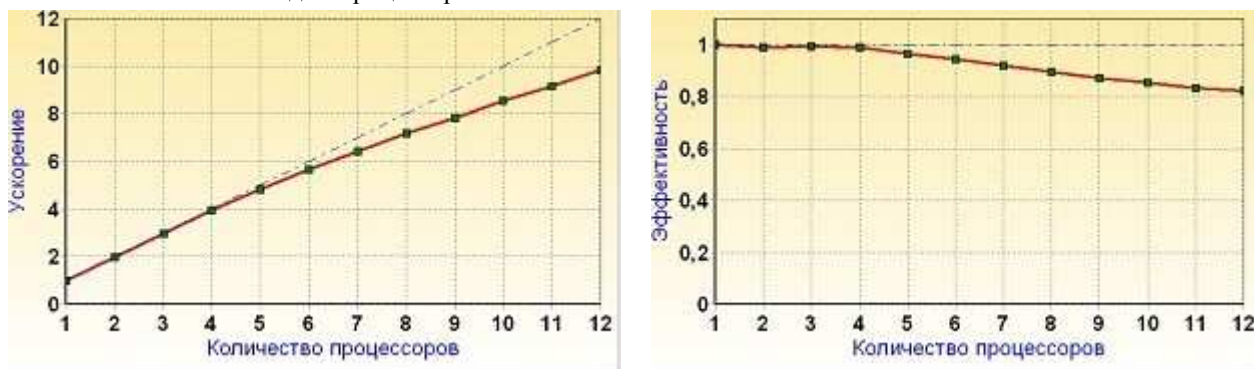


Рис. 3 Зависимость ускорения и эффективности от числа процессоров (ОМПА).

Одним из главных недостатков ОМПА является привязка к общему количеству островов, так как при слишком их большом количестве, популяции на каждом острове будут склонны к преждевременной сходимости.

ПА имеют довольно хорошую степень распараллеливания, так как в природе все процессы происходят параллельно и независимо друг от друга. Они предоставляют необъятные материалы для исследований за счет большого количества модификаций и параметров. Зачастую небольшое изменение одного из них может привести к неожиданному улучшению результата.

Численный эксперимент был проведен для процесса окислительной регенерации в неподвижном слое (изотермический и адиабатический режим) и в движущемся слое контактного материала. В таблице 4 предоставлены значения «лучших особей» при одном из запусков ПА и ОМПА соответственно.

Таблица 4. Значения «лучших особей»

	$T_{в0}$	$G_{в1}$	$G_{в2}$	$S_{п2}$	c_{01}
ОПА					
1	751	5.83108	8.69587	8.26593	0.166194
2	698.635	3.25443	11.1993	7.65237	0.190964
3	742.969	3.26523	11.2952	8.79348	0.188092
4	741.399	3.05681	9.86919	8.24292	0.165682
ОМПА					
1	725.627	3.12001	8.91429	7.41934	0.202261
2	732.728	5.72507	13.7826	8.18792	0.195477
3	729.288	3.9817	14.5086	7.11031	0.21383
4	750.919	4.37934	13.482	8.26693	0.165973

На рисунке 4 предоставлен график изменения температуры по слою с управляющими параметрами, полученными в результате расчета ПА и ОМПА (соответствующие строки выделены в таблице 4).

Результаты расчета обоими вариантами оказались схожими, их незначительное различие объясняется

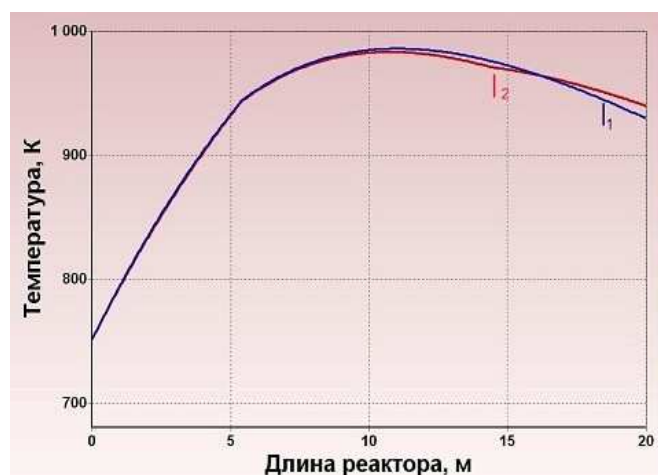


Рис. 4 Сравнение графиков зависимости изменения температуры. 1 – результат ПГА, 2 – результат ОМПА

тем, что ГА – не гарантируют того, что глобальное решение будет найдено, но они хороши для поиска "достаточно хорошего" решения задачи.

5. Выводы

В данной работе было рассмотрено применение параллельных генетических алгоритмов (ПГА) для задач математической химии, в частности были определены технологически оптимальные режимы проведения процесса окислительной регенерации в неподвижном и движущемся слое катализатора.

В дальнейшем планируется работа в двух исследовательских направлениях: разработка диффузионной математической модели для процесса окислительной регенерации и реализация самоадаптирующегося ПГА для этой модели.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Ю.М. Жоров Моделирование физико-химических процессов нефтепереработки и нефтехимии. – М.: Химия, 1978. – 376 с., ил.
2. А.В. Балаев, В.И. Дробышев, И.М. Губайдуллин, Р.М. Масагутов "Исследование волновых процессов в регенераторах с неподвижным слоем катализатора" // Распространение тепловых волн в гетерогенных средах, Новосибирск: Наука, Сиб. отд-ние, 1988. С.233-246.
3. М.Р. Еникеев Распараллеливание алгоритма матричной прогонки при моделировании процессов выжигания кокса // Студент и наука: Материалы студенческих научных конференций./ гл.ред. Р.Ф. Талипов. – Уфа: РИЦ БашГУ, 2010.-С. 3.
4. Л.А. Гладков, В.В. Курейчик, В.М. Курейчик Генетические алгоритмы: Учебное пособие. — 2-е изд.. — М: Физматлит, 2006. — С. 320.