

РАЗРАБОТКА КОМПЛЕКСА WEB-ПРОГРАММ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА ОКИСЛИТЕЛЬНОЙ РЕГЕНЕРАЦИИ КАТАЛИЗАТОРОВ

Л.В. Сайфуллина

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 имеется реальная потребность в доступном проблемно-ориентированном программном обеспечении, обеспечивающем математическое и компьютерное моделирование данных процессов. Также велика потребность в организации совместной работы коллектива исследователей, инженеров и заказчиков, накоплении и передаче знаний, информационной поддержке образовательного процесса. Такие возможности сочетают в себе интерактивные приложения, работающие в сети Интернет и получившие общее название Web-приложений. Современные Web-приложения – это сложные программные комплексы, разработка и поддержание которых становится непростой задачей [1].

Целью данного исследования является разработка комплекса Web-программ для моделирования процессов окислительной регенерации закоксованных катализаторов в виде виртуальной лаборатории.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

- привести математическое описание процесса окислительной регенерации катализаторов в виде систем алгебраических и дифференциальных уравнений, выражающих основные законы сохранения;
- разработать программный комплекс для моделирования, а также построить структурно-функциональную модель виртуальной лаборатории как среды для размещения разработанных приложений;
- на основе реализованных моделей провести численные исследования характеристик процесса регенерации от значений основных параметров процесса.

Математическое описание процесса

Стратегия моделирования заключается в последовательном исследовании и анализе основных закономерностей регенерации на моделях различных уровней: кинетическом, зерна и слоя катализатора, контактного аппарата в целом.



Рис.1. Структура математической модели контактного аппарата

Первый уровень многоступенчатой модели любого реактора – кинетическая модель. Кинетическая модель представляет собой совокупность элементарных стадий, реакций и уравнений, характеризующих зависимость скорости химического превращения от параметров реакции: давления, температуры, концентраций реагентов и др. Такие зависимости определяются на основе экспериментальных данных. Кинетическая модель

является первым уровнем модели любого реактора и базисом для его математических моделей. Достаточно надёжная кинетическая модель выжигания кокса, позволяющая с необходимой точностью рассчитывать не только скорость удаления кокса, но и состав газовой фазы в регенераторе, представлена в работе [2].

В практике математического моделирования процесса окислительной регенерации выявлению закономерностей выжигания кокса на зёрне катализатора уделяется серьёзное внимание.

Основной вопрос, интересующий исследователей, – какие перегревы возможны при регенерации зёрен катализатора в зависимости от выбора начальных условий: массы отложившегося кокса, температуры, концентрации кислорода в газе и размера зёрен.

При построении модели сделаны допущения: 1) зерно катализатора сферическое, его размер и структура пор не изменяются в ходе процесса; 2) теплофизические параметры, коэффициенты теплопереноса и обмена и энергии активации инвариантны относительно изменения температуры; 3) массой газа в порах по сравнению с массой зерна катализатора можно пренебречь; 4) отложения кокса имеют вид гранул, число которых в ходе регенерации не меняется.

Тогда уравнения материального и теплового балансов с учётом переносов за счёт диффузии, теплопроводности и стефановским потоком имеют вид [3]:

$$\varepsilon_k \frac{\partial y_k}{\partial t} = \frac{D^*}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial y_k}{\partial r} - r^2 \mu y_k) + \frac{\gamma_k S_k}{C_0} \sum_{j=1}^j v_{kj} W_j \quad k = \overline{1,4}$$

$$c_k \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda^*}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial T}{\partial r}) + \gamma_k S_k \sum_{j=1}^j Q_j W_j$$

начальные условия: $t=0: y_k = 0, k = \overline{1,4}, T = T_0;$

граничные условия: $r=0: D^* \frac{\partial y_k}{\partial r} = 0, k = \overline{1,4}, \lambda^* \frac{\partial T}{\partial r} = 0;$

$r=R_3: D^* \frac{\partial y_k}{\partial r} = \beta(x_k - y_k), k = \overline{1,4}, \lambda^* \frac{\partial T}{\partial r} = \alpha(T_0 - T);$

Математическую модель процесса получим на основе уравнения балансов для элементарного слоя за элементарное время.

1. Уравнения материального баланса по кислороду:

$\varepsilon S \gamma_o dldC$	$=$	$V_0 C d\tau$	$-$	$V_0 (C + CdC) d\tau$	$-$	$(\sum w) S dld\tau$
<i>(накопление кислорода в слое)</i>		<i>(поступление кислорода в слой)</i>		<i>(выход кислорода из слоя)</i>		<i>(расход кислорода на реакцию)</i>

2. Уравнения материального баланса по коксу:

$\gamma_k \rho S dl$	$-$	$\gamma_k (\rho + d\rho) S dl$	$=$	$\beta (\sum w) S dld\tau$
<i>(количество кокса в элементарном объеме к мо – менту τ)</i>		<i>(количество кокса в элементарном объеме к мо – менту $\tau + d\tau$)</i>		<i>(расход кокса на реакцию)</i>

3. Уравнения теплового баланса:

$$\begin{aligned}
 [\gamma_z \varepsilon c_z + \gamma_x (1 - \varepsilon) c_x] S dl dT &= V_0 c_z T d\tau - V_0 c_z (T + dT) d\tau - \\
 &\quad \text{(разогрев} && \text{(поступление} && \text{(выход} \\
 &\quad \text{газа и} && \text{тепла} && \text{тепла с} \\
 &\quad \text{катализатора)} && \text{с газом)} && \text{газом)} \\
 - q(\sum w) S dl d\tau &- k_m S_0 dl (T - T_x) d\tau \\
 &\quad \text{(выделение} && \text{(телопередача} \\
 &\quad \text{тепла} && \text{через} \\
 &\quad \text{реакцией)} && \text{стенку)}
 \end{aligned}$$

Расчет процессов окисления кокса проводился в реакторе с неподвижным слоем катализатора и с движущимся слоем контактного материала. Математическую модель в неподвижном слое катализатора можно представить системой уравнений материального и теплового балансов (1) с естественными начальными (2) и граничными (3) условиями.

$$\begin{aligned}
 N_1 \frac{\partial C}{\partial \tau} + N_2 \frac{\partial C}{\partial l} &= -(\sum w) \\
 -\frac{\partial \rho}{\partial \tau} &= \frac{\beta}{\gamma_x} (\sum w)
 \end{aligned} \tag{1}$$

$$N_3 \frac{\partial T}{\partial \tau} + N_4 \frac{\partial T}{\partial l} + \frac{k_m S_0 (T - T_x)}{S} = -q(\sum w)$$

$$\tau = 0 \quad C = 0 \quad \rho_{z=0} = \rho_0 \quad T_{z=0} = T_0 \tag{2}$$

$$l = 0 \quad C_{z=0} = C_0 \quad T_{z=0} = T_0 \tag{3}$$

Представленная математическая модель (1) реактора с неподвижным слоем катализатора является общей математической моделью и может быть использована для исследования и расчета ряда регенерационных устройств:

Изотермические реакторы. 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 системы (4) переходит в независимое условие постоянства температуры, а процесс описывается двумя первыми уравнениями.

Адиабатические реакторы. Использование общей модели (1) позволяет производить расчеты и адиабатических реакторов. Теплопередачи через стенку регенератора не происходит, поэтому тепловое уравнение в системе также упрощается:

Все приведенные выше формулы для слоя катализатора взяты из литературного источника [4]. Однако автор характеризует процесс выжигания коксовых отложений единой скоростью W . На самом деле различные компоненты «кокса» выжигаются с разными скоростями, поэтому использовалась описанная выше кинетическая модель.

Расчет процессов окисления кокса в реакторах с движущимся слоем контактного материала.

Выжигание кокса в промышленных аппаратах осуществляется и в движущемся слое контактного материала. Такой способ регенерации используется для восстановления активности быстро отравляющихся катализаторов и для ввода тепла в тех случаях, когда осуществляемый химический контактный процесс сильно эндотермичен. Рассмотрим математическую модель промышленного аппарата для регенерации алюмосиликатного катализатора в движущемся слое.

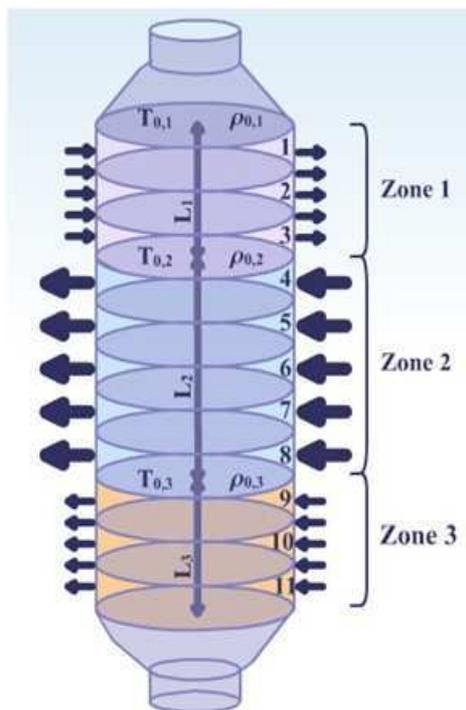


Рис.2. Схема регенератора

Промышленный регенератор представляет собой вертикальный аппарат, через который сверху вниз движется катализатор. Аппарат разделен на 11 или больше секций, в каждую секцию подается кислородсодержащий газ, из каждой секции выводятся газообразные продукты горения и избыточное тепло передается водяному пару (см. рис. 2). Возможны различные модификации режима, например, передача дымовых газов, богатых кислородом, из нижних секций в верхние, и др.

Интенсивное поперечное перемешивание и быстрый теплообмен приводят к тому, что по сечению аппарата концентрации и температуры не меняются, и при этом по оси идет поток идеального вытеснения. Таким образом, элементарный слой регенератора является аппаратом идеального вытеснения для потока катализатора и аппаратом идеального смешения для потока газа, т.е. поступающий в этот слой газ выходит из аппарата, но не переходит в соседние элементарные слои.

При этих упрощениях математическую модель промышленного регенератора можно представить в виде системы дифференциальных уравнений, описывающих для элементарного слоя материальные балансы по кислороду и коксу и тепловой баланс.

Тогда систему, описывающую окислительную регенерацию в реакторах с движущимся слое катализатора, можно записать в следующей форме:

$$C = C_0 - \frac{\gamma_k(1-\varepsilon)wS}{f}$$

$$-\frac{d\rho}{dl} = \frac{\beta\gamma_k(1-\varepsilon)Sw}{G_k}$$

$$G_k c_k \frac{dT}{dl} + (fc_\varepsilon + \lambda_1 S_n + \lambda_2 S_n)T - (fc_\varepsilon T_\varepsilon + \lambda_1 S_n T_n + \lambda_2 S_n T_n) = -q\gamma_k(1-\varepsilon)Sw$$

Архитектура приложения

Для реализации данных математических моделей была разработана виртуальная лаборатория, которая представляет собой Web-приложением. Web-приложение написано на языке программирования Java.

Web-приложение на Java представляет собой совокупность таких компонентов как Java-сервлеты, Java Server Page, драйверы для работы с БД, дескриптор доставки, статические компоненты (HTML-страницы, каскадные таблицы стилей CSS, изображения), прочие ресурсы.

Приложение реализует паттерн проектирования Model-view-controller (Модель-Вид-Контроллер). Данная аббревиатура отражает тот факт, что приложение представляет собой три взаимодействующих части:

Модель отвечает за управление данными, она сохраняет и извлекает сущности из БД и содержит логику, реализованную в приложении.

Представление несет ответственность за отображение данных, которые дает контроллер. В данном приложении Web-приложении представление реализуется в виде страницы JSP.

Контроллер связывает модель и представление. В роли контроллера в данном приложении выступает сервлет. Он получает запрос от клиента, анализирует его параметры и обращается к модели для выполнения операций над данными запроса. От модели поступают уже скомпонованные объекты. Затем они перенаправляются в представление, генерируемое сервлетом. Представление отображает конечную информацию.

Таким образом, в данном паттерне выделены отдельные функциональные компоненты, следовательно, изменения, вносимые в один из компонентов, оказывают минимальное воздействие на другие компоненты, что позволяет создавать гибкие и масштабируемые приложения.

Заключение

Разработано Web-приложение в виде виртуальной лаборатории, направленной на решение широкого круга задач естественнонаучной направленности. Планируется размещение моделей из математики, физики, биологии, химии, экологии.

Для адаптации в Web-лаборатории уже написанных программ на C++ была применена технология Java Native Interface (JNI) – стандартный механизм для запуска кода, под управлением виртуальной машины Java (JVM), который написан на языках C/C++, и скомпонован в виде динамических библиотек.

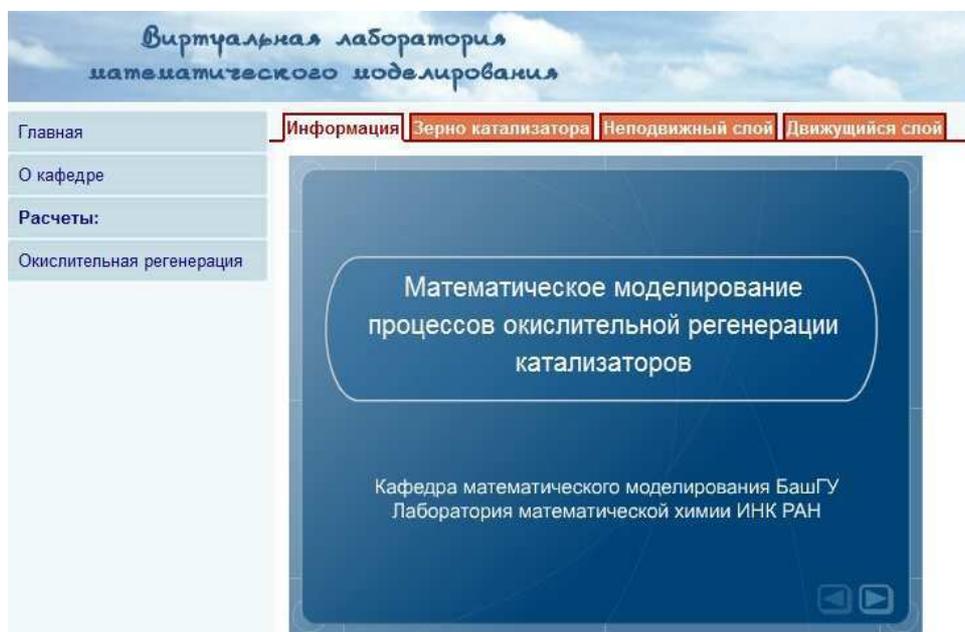


Рис.3. Интерфейс Web-приложения. Раздел «Окислительная регенерация»

На сегодняшний день виртуальная лаборатория состоит из одного раздела «Окислительная регенерация», представляющего собой отдельную Web-страницу с удобным интерфейсом.

Интерфейс включает в себя описательный блок, который несет в себе информацию о названии исследуемой модели, системах уравнений, характеризующих данную модель.

Имеются все необходимые элементы управления для исследования: поля для ввода значений начальных условий и параметров, определяющих поведение модели; переключатели, определяющие вариант вывода результатов на экран для сравнения результатов; кнопка для запуска расчетов.

С помощью блок вывода результатов расчета выполнен вычислительный эксперимент и получены результаты в виде графических зависимостей.

ЛИТЕРАТУРА:

1. В.П. Носов Исследование и разработка методов построения и кэширования веб-приложений. Автореферат дисс. на соиск. учен. степ. канд. техн. наук. Москва, 2009. - 21 с.
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. Р.М. Масагутов, Б.Ф. Морозов, Б.И. Кутепов Регенерация катализаторов в нефтехимии и нефтепереработке. - М.: Химия. - 1987. 143 с.

4. Ю.М. Жоров Моделирование физико-химических процессов нефтепереработки и нефтехимии. - М.: Химия, 1978. - 376 с.