ИССЛЕДОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ОКИСЛИТЕЛЬНОЙ РЕГЕНЕРАЦИИ КАТАЛИЗАТОРА

@ О.С. Язовцева, И.М. Губайдуллин, Е.Е. Пескова

kurinaos@gmail.com, irekmars@mail.ru, e.e.peskova@mail.ru

УДК 51-73

DOI: 10.33184/mnkuomsh2t-2021-10-06.101.

В докладе представлены математические модели окислительной регенерации, описанные нелинейными системами дифференциальных уравнений. Освещены основные проблемы, связанные с исследованием моделей. Приведены результаты качественного исследования устойчивости усредненной модели, результаты вычислительных экспериментов.

Ключевые слова: нелинейные модели, дифференциальные уравнения, химическая кинетика, жесткие системы.

Investigation of a mathematical model of oxidative catalyst regeneration

The report presents mathematical models of oxidative regeneration described by nonlinear systems of differential equations. There are the main problems associated with the investigation of models. The results of a qualitative study of the stability of the averaged model and the results of computational experiments are presented.

Keywords: nonlinear models, differential equations, chemical kinetics, stiff systems.

Настоящий доклад посвящен исследованию математических моделей окислительной регенерации. Актуальность темы обусловлена стратегически важной политикой вторичного использования материалов. Отработанный катализатор непригоден к дальнейшему использованию из-за коксовых отложений на его зернах, снижающих каталитическую активность [1]. Одним из методов восстановления эффективности катализатора является окислительная регенерация, т. е. выжиг кокса кислородсодержащим газом [2]. В работах [3, 4] показано, что при различных начальных условиях проведения подобного процесса возникают различные

Язовцева Ольга Сергеевна, к.ф.-м.н., доцент, Национальный исследовательский Мордовский государственный университет (Саранск, Россия); Olga Yazovtseva (National Research Mordovian State University, Saransk, Russia)

Губайдуллин Ирек Марсович, д.ф.-м.н., профессор, Уфимский государственный нефтяной технический университет (Уфа, Россия); Irek Gubaydullin (Ufa State Petroleum Technological University, Ufa, Russia)

Пескова Елизавета Евгеньевна, к.ф.-м.н., доцент, Национальный исследовательский Мордовский государственный университет (Саранск, Россия); Elizaveta Peskova (National Research Mordovian State University, Saransk, Russia)

проблемы — от низкой эффективности метода до необратимой порчи катализатора. Безопасное и рентабельное исследование процесса возможно при помощи математического моделирования.

В общем случае математическая модель окислительной регенерации катализатора представляет собой нелинейную систему обыкновенных дифференциальных уравнений в частных производных [3]. Она учитывает материальный и тепловой балансы, теплообмен газа и слоя катализатора, экзотермический характер процесса окисления и прочие немаловажные аспекты. Наиболее эффективным методом исследования таких моделей является численный метод. Модель можно описать несколькими способами, например, в сферической или декартовой системе координат. Основной проблемой при этом остается жесткость системы, для искусственного снижения которой прибегают к обезразмериванию или масштабированию [5].

Одной из основных проблем, возникающих в ходе окислительной регенерации является образование «горячих пятен» [2-3]. Для исследования могут быть использованы методы теории устойчивости дифференциальных уравнений [6]. Этот этап допускает сведение модели к усредненному виду в обыкновенных дифференциальных уравнениях без потери общности [7]. Однако практические модели чаще всего обладают большим количеством фазовых переменных и технологических параметров, что затрудняет использование второго метода Ляпунова. Первый метод же неприменим ввиду наличия критического случая (множества нулевых собственных значений у матрицы линейного приближения). Возможным вариантом решения проблемы представляется использование метода асимптотической эквивалентности [8-10] или нахождение некоторого преобразования, не меняющего асимптотических свойств [11].

В докладе представлены визуализированные результаты вычислительных экспериментов для модели окислительной регенерации и теоретическое исследование устойчивости для усредненной нелинейной модели.

Литература

1. Хьюз Р. Дезактивация катализаторов. М.: Химия, 1989. 280 с.
2. Масагутов Р.М., Морозов Б.Ф., Кутепов Б.И. Регенерация катализаторов в нефтепереработке и нефтехимии. М.: Химия, 1987. 144 с.
3. Губайдуллин И.М. Математическое моделирование динамических режимов окислительной регенерации катализаторов в аппаратах с неподвижным слоем: дис. . . . канд. физ.-мат. наук / Институт Нефтехимии и катализа АН РБ. Уфа, 1996. 109 с.
4. Буянов Р.А. Закоксование и регенерация катализаторов дегидрирования при получении мономеров. Новосибирск: Наука, 1968. 64 с.

5. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999. 685 с.

6. Губайдуллин И.М. Устойчивость зон высокой температуры в неподвижном слое катализатора // Тез. докл. II Всесоюз. конф. молодых ученых по физхимии. М., 1983. С. 232–233.

7. Губайдуллин И.М., Язовцева О.С. Исследование усредненной модели окислительной регенерации закоксованного катализатора // Компьютерные исследования и моделирование, 2021, т. 13, № 1, с. 149–161.

8. Воскресенский Е.В. Асимптотические методы: теория и приложения. Саранск: СВМО, 2000. 300 с.

9. Шаманаев П.А., Язовцева О.С. Достаточные условия полиустойчивости по части переменных нулевого решения нелинейных систем обыкновенных дифференциальных уравнений // Журнал Средневолжского математического общества. 2018. Т. 20, № 3. С. 304–317.

10. Язовцева О.С., Мамедова Т.Ф., Губайдуллин И.М. Исследование устойчивости некоторого решения системы кинетических уравнений химической реакции // Журнал Средневолжского математического общества. 2016. Т. 18, № 4. С. 152–158.

11. Yazovtseva O.S., Gubaydullin I.M. Investigation of stability of an averaged catalyst oxidative regeneration model // Mathematical physics, Dynamical systems and Infinite-dimensional analysis. Moscow, 2021. Pp. 208–209.