



Национальный
исследовательский
Мордовский
государственный
университет

Суперкомпьютерные дни в России

28–29 сентября 2026 г.

Development of a numerical model and a parallel algorithm for the process of coke burn-off from the catalyst layer

Olga S. Yazovtseva,

I.V. Mitryukhin, E.E. Peskova, I.R. Yanglyayev

Исследование выполнено за счет гранта
Российского научного фонда N 25-21-00242



 www.mrsu.ru

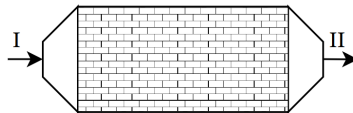
Цель и объект исследования

Цель: построение численной модели изотермического нестационарного многостадийного процесса окислительной регенерации в слое катализатора гидроочистки с цилиндрической формой зерен и сравнительный анализ параллельных алгоритмов для решения уравнений, входящих в модель

Катализаторы импортозамещения:



Схема слоя катализатора:



Химическое описание¹:



Математическая модель окислительной регенерации²

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \varepsilon y_m}{\partial \tau_k t} = \frac{D^*}{R^2 r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial y_m}{\partial r} - r \mu y_m \right) + \frac{D^*}{Z^2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial y_m}{\partial z} - \frac{Z}{R} \mu y_m \right) + \sum \nu_{mp} W_p; \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \mu + \frac{R}{Z} \frac{\partial}{\partial z} \mu = \frac{R^2}{D^*} \sum_{m=1}^{N_{\text{gas}}} \sum \nu_{mp} W_p; \\ \frac{\partial \theta_m}{\partial \tau_k t} = \sum \nu_{mp} W_p, \\ \frac{\partial x_m}{\partial l} = \beta S_z \tau_k (y_m - x_m). \\ y_m(0, r, z, l) = y_m^0, \quad \theta_n(0, r, z, l) = \theta_n^0, \quad \mu(t, 0, z, l) = 0, \quad \mu(t, r, 0, l) = 0, \\ x_m(0, l) = x_m^0, \quad x_m(t, 0) = x_m^{\text{out}}, \quad D^* \frac{\partial y_m}{\partial r} \Big|_{r=0} = D^* \frac{\partial y_m}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0, \\ D^* \frac{\partial y_m}{\partial r} \Big|_{r=1} = R \beta (x_m - y_m), \quad D^* \frac{\partial y_m}{\partial z} \Big|_{z=1} = Z \beta (x_m - y_m). \end{array} \right.$$

где R и Z – радиус и половина длины оси цилиндра (зерна катализатора), м.



Разностная схема

$$\varepsilon \frac{y_{m,i,j}^n - y_{m,i,j}^{n-1}}{\tau} = \frac{D^* \tau_k}{R^2 (i h_r) h_r} \left[\left((i + 0.5) h_r \frac{y_{m,i+1,j}^n - y_{m,i,j}^n}{h_r} - \right. \right. \\ \left. \left. - (i - 0.5) h_r \frac{y_{m,i,j}^n - y_{m,i-1,j}^n}{h_r} \right) - \frac{1}{2} \left((i + 0.5) h_r \mu_{i+1,j} y_{m,i+1,j}^n - (i - 0.5) h_r \mu_{i-1,j} y_{m,i-1,j}^n \right) \right] + \\ + \frac{D^* \tau_k}{Z^2} \left[\frac{y_{m,i,j+1}^n - 2y_{m,i,j}^n + y_{m,i,j-1}^n}{h_z^2} - \frac{Z}{R} \frac{\mu_{i,j+1} - \mu_{i,j-1}}{2h_z} \right] + y_{m,i,j}^n,$$

$$y_{m,i,j}^{n*} = \left(\tau_k \sum_{p=1}^{N_{reac}} \nu_{mp} W_p \right)_{i,j}^n, \quad \theta_{o,i,j}^{n*} = \left(\tau_k \sum_{p=1}^{N_{reac}} \nu_{op} W_p \right)_{i,j}^n \quad (2)$$

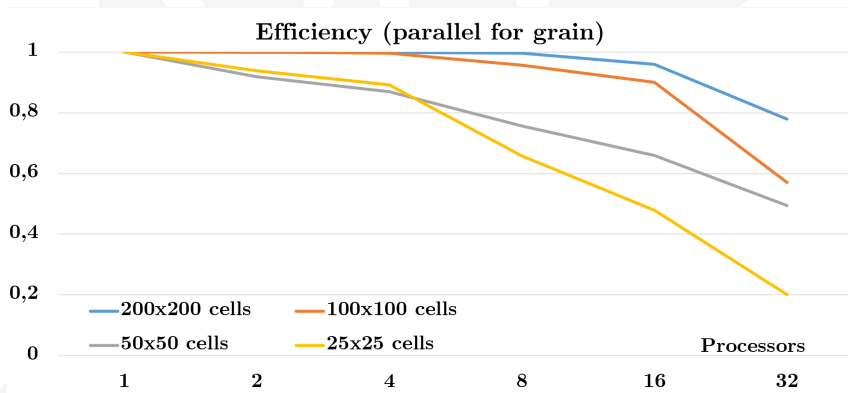
$$\frac{1}{i h_r} \left[\left(i + \frac{1}{2} \right) \mu_{i+1,j} - \left(i - \frac{1}{2} \right) \mu_{i-1,j} \right] + \frac{R}{Z} \cdot \frac{\mu_{i,j+1} - \mu_{i,j-1}}{2h_z} = \frac{R^2}{D^*} \left(\sum_{m=1}^{N_{gas}} \sum_{p=1}^{N_{reac}} \nu_{mp} W_p \right)_{i,j}$$

$$\frac{x_m^{n+1} - x_m^n}{h_k} = \tau_k \beta S_z (y_m^{n+1} - x_m^{n+1})$$



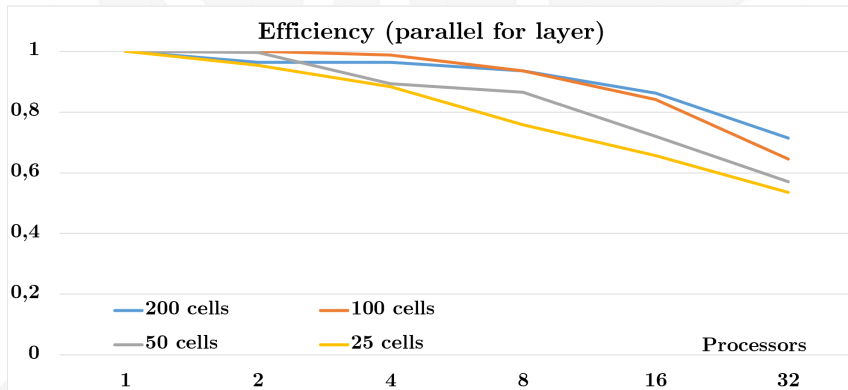
Геометрический параллелизм для модели процессов на зерне катализатора³

Блочная декомпозиция области интегрирования осесимметричной задачи:



Геометрический параллелизм для модели процессов в слое катализатора⁴

Декомпозиция по длине слоя:



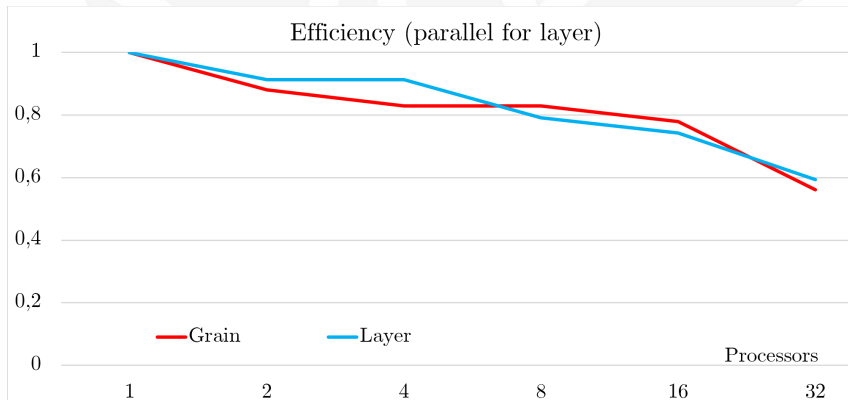
4

Национальный
исследовательский
Мордовский
государственный
университет

Расчеты выполнены на рабочей станции МГУ им. Н.П. Огарёва



Сравнительный анализ

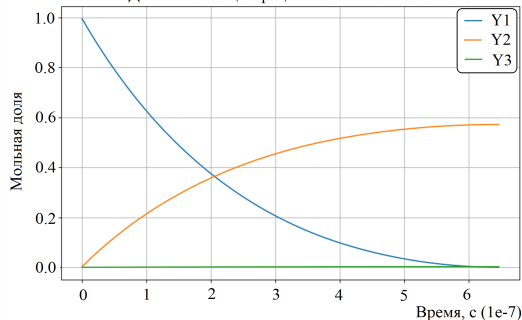


Эффективности алгоритмов равны при размерах сетки 125x125x125

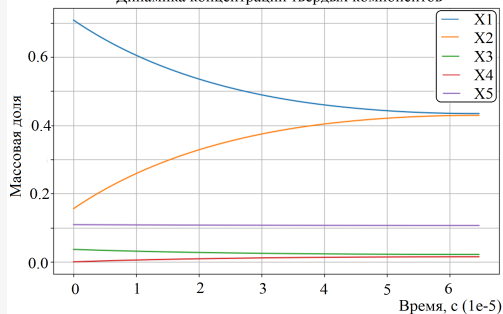


Результаты расчетов

Динамика концентраций газовых компонентов



Динамика концентраций твердых компонентов



Параметр	Обозначение	Значение
Радиус зерна	R	$6.5 \cdot 10^{-4}$ м
Длина полуоси зерна	Z	$2 \cdot 10^{-3}$ м
Начальная температура зерна и газа	T_0	573 К (300°C)
Начальная доля Θ_1	θ_1^0	0.682
Начальная доля Θ_2	θ_2^0	0.169
Начальная доля Θ_3	θ_3^0	0.04
Начальная доля Θ_4	θ_4^0	0
Начальная доля кокса Θ_5	θ_5^0	0.109
Начальная мольная доля Y_1	y_1^0	1



Основные результаты и перспективы исследования

Выводы:

1. Разработана численная модель изотермического нестационарного многостадийного процесса окислительной регенерации в слое катализатора гидроочистки с цилиндрической формой зерен.
2. Проведен сравнительный анализ эффективности параллельных алгоритмов с геометрическим параллелизмом для зерна и слоя катализатора для решения уравнений, входящих в модель.
3. Получено, что при разбиении зерна более, чем на 125×125 ячеек, эффективнее работает параллельный счет на зерне, в ином случае – по слою.

Дальнейшее развитие исследований:

1. Численная модель будет обобщена на неизотермический процесс и иные химические реакции.
2. Разработка параллельного алгоритма с применением гибридных технологий.
3. Разработка параллельного алгоритма с оптимизацией нагрузки.



Спасибо за внимание!

Development of a numerical model and a parallel algorithm for the process of coke burn-off from the catalyst layer

Olga S. Yazovtseva, I.V. Mitryukhin, E.E. Peskova, I.R. Yanglyayev

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда N 25-21-00242