

УДК 517.977.5

## Моделирование крупнотоннажных промышленных процессов: риформинга бензина, каталитического крекинга и изомеризации\*

Губайдуллин И.М.<sup>1,2</sup>, Фасхутдинова Р.И.<sup>1</sup>

ИНК УФИЦ РАН<sup>1</sup>,  
Уфимский государственный нефтяной технический университет<sup>2</sup>

Товарный бензин, который поступает в автозаправочные станции, формируется компаундированием (смешиванием) продуктов, полученных из разных нефтеперерабатывающих установок. Значительный объём высокооктанового бензина формируют три каталитических процесса: риформинг, изомеризация и крекинг. Главная задача компаундирования – получить высокооктановый бензин с наименьшими затратами. На сегодняшний день все существующие методы оптимального смешивания бензинов с разными показателями октанового числа чисто эмпирические. С каждым годом увеличиваются экологические требования к составу товарного бензина. Например, содержание бензола в товарном бензине не должно превышать одного процента. Естественно, оптимальное смешивание невозможно провести, не решая класс оптимизационных задач для каждого конкретного процесса.

В работе приводятся результаты многокритериальной оптимизации промышленного неизотермического каталитического процесса риформинга бензина с использованием трёх-каскадного реактора. Такая оптимизация проведена на основе разработанной детализированной групповой кинетической модели.

Кинетическая модель построена на основе решения жестких систем обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (СОНДУ) большой размерности (от 30 до 300). При разработке кинетической модели учитывалось применение адиабатических реакторов для проведения реакций с сильным эндотермическим эффектом (перепад может достигать до 80°C в реакторе). Таким образом, полное математическое описание включает в себя 38 уравнений по концентрациям реагирующих веществ и одно уравнение изменения температуры смеси в зависимости от времени контакта [1]. Для учета изменения количества молей в результате реакции были пересмотрены размерности основных величин. В уравнениях концентрация, выраженная в массовых долях, заменена на мольный расход компонента [кмоль/ч]. Мольный расход реакционной смеси формируется из мольных расходов компонентов. Тогда дифференциальное уравнение, учитывающее изменение количества молей реакционной смеси, имеет вид:

$$\frac{dF}{d\tau} = \sum_{i=1}^I \frac{dx_i}{d\tau},$$

где  $x_i$  – мольный расход  $i$ -го компонента, (кмоль/ч), участвующего в реакции,  $I$  – количество компонент (38),  $\tau$  – условное время контакта (кг/кат.),  $F$  – мольный расход потока (кмоль/ч). Данное дифференциальное уравнение описывает изменение мольного расхода смеси. В качестве концентраций используются мольные доли, которые представлены отношением мольного расхода компонента к мольному расходу смеси, являющейся мольной долей, благодаря чему система учитывает разбавление или концентрирование всех компонент в каждый момент времени.

---

\*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ № 18-07-00341.

Таким образом, ранее разработанную группированную кинетическую модель каталитического риформинга бензина [1] предлагается дополнить учетом изменения объёма реакционной смеси химических превращений. Сравнение рассчитанных концентраций групповых компонент реакции каталитического риформинга бензина и полного температурного профиля процесса не превышает 3%.

Аналогичным образом планируется разработать групповые кинетические модели процессов изомеризации и каталитического крекинга. Рассчитанные скорости вышеперечисленных процессов будут использоваться при разработке трёхфазных математических моделей физико-химических процессов на зерне и в слое катализатора, математическое описание которых представляет собой системы уравнений в частных производных параболического, эллиптического и гиперболического типов.

## **Литература**

1. Zainullin R.Z., Koledina K.F., Akhmetov A.F., Gubaidullin I.M. // *Kinetics and Catalysis*. 2017. Vol. 58, No. 3. P. 279–289.

MSC2010 35F61

## **Modelling of large-scale industrial processes: gasoline reforming, catalytic cracking and isomerization**

I.M. Gubaydullin<sup>1,2</sup>, R.I. Faskhutdinova<sup>1</sup>

Institute of Petrochemistry and Catalysis of the Russian Academy of Science<sup>1</sup>,  
Ufa State Petroleum Technological University<sup>2</sup>