

УДК 004.942

Максимизация выхода индивидуальных высокооктановых компонентов в процессе каталитической изомеризации на основе кинетической модели*

Фасхутдинова Р. И., Фасхутдинов А. Г., Губайдуллин И. М.

Институт нефтехимии и катализа – обособленное структурное подразделение
Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского
федерального исследовательского центра Российской академии наук

В работе рассматривается оптимизация реакторного блока процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции с использованием кинетической модели, направленной на увеличение содержания высокооктановых индивидуальных компонентов, степени превращения *n*-пентана и *n*-гексана и снижение выхода продуктов гидрокрекинга (метана, этана, пропана и бутанов) на основе Парето-аппроксимации.

Основная задача исследования заключается в подборе технологического режима, при котором увеличатся селективность суммы 2,2-диметилбутана и 2,3-диметилбутана, селективность изопентана, степени превращения *n*-пентана, *n*-гексана и уменьшится выход продуктов гидрокрекинга.

На основе литературных и промышленных данных составлена схема химических превращений и разработана кинетическая модель [1]. Основным отличием применяемого в данной работе подхода является детальное моделирование реакций гидрокрекинга компонентов реакционной смеси с образованием метана, этана, пропана, *n*-бутана и изобутана. Скорости реакций, входящие в кинетическую модель, были записаны согласно закону действующих масс [2]. Математическая модель процесса представляет собой систему нелинейных дифференциальных уравнений [3,4].

После апробации нескольких явных и неявных методов численного решения систем дифференциальных уравнений подходящим в итоге методом оказался одноитерационный метод Розенброка 3-го порядка точности. Обратная задача решалась генетическим алгоритмом.

Перейдя к объекту исследования, варьируемыми параметрами при оптимизации реакторного блока процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции являются температуры на входе в реакторы.

Поставленная задача оптимизации была решена алгоритмом Nondominated Sorting Genetic Algorithm II (NSGA-II) [5] в ПС Matlab.

Всего было обработано более 100 значений варьируемых параметров температуры. Каждое значение соответствует отдельным температурным режимам работ реакторов.

Таким образом, на основе расчетов был подобран температурный режим реакторного блока, который позволяет увеличить селективность изопентана (по сравнению с промышленными данными), суммы 2,2-диметилбутана и 2,3-диметилбутана, повысить степень превращения *n*-пентана, *n*-гексана, а также снизить выход продуктов гидрокрекинга.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований (Договор № 20-31-90094/20)

Литература

1. Faskhutdinov A.G., Akhmetov I.V., Musina A.E., Gubaydullin I.M. Improvement of resource efficiency of the catalytic isomerization process by mathematical modeling. CEUR-WS. 2018. Vol. 2212. pp. 377-383.
2. Logan S.R. Fundamentals of Chemical Kinetics. AddisonWesleyLongman. 1996. 280 p.
3. Коледина К. Ф., Губайдуллин И. М. // Журнал физической химии. 2016. Т. 90. №5. С.671-678.
4. Губайдуллин И. М., Коледина К. Ф., Линд Ю. Б. // Наука и образование: научное издание МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2011. №6. С. 10.-65
5. Nurislamova L., Gubaydullin I., Koledina K., Safin R. Reac. Kinet. Mech. Cat. 2016. vol. 117(1). pp. 1-14.

MSC2020 49K15

Maximization of the yield of individual high-octane components in the process of catalytic isomerization based on the kinetic model

R. I. Faskhutdinova, A. G. Faskhutdinov, I. M. Gubaydullin
Institute of Petrochemistry and Catalysis of Russian Academy of Sciences