

УДК 004.94

## Обратная кинетическая задача при моделировании кинетики гидрирования полициклических ароматических углеводородов \*

Загидуллин Ш. Г.<sup>1</sup>, Коледина К. Ф.<sup>1,2</sup>

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН<sup>1</sup>,  
Уфимский государственный нефтяной технический университет<sup>2</sup>

На сегодняшний день актуальным вопросом является разработка детализированной кинетической модели процесса гидрирования полициклических ароматических углеводородов (деароматизация) с учетом всех необходимых показателей, выделением стадий и кинетических параметров, ведущих к образованию нафтенов [1]. Последующая разработка методики многокритериальной оптимизации (МКО) процесса деароматизации на основе кинетической модели позволит в зависимости от критериев оптимальности (например, для более глубокого гидрирования – полного насыщения) определять наилучшие условия проведения реакции [2]. Также применение разработанной кинетической модели возможно и для других промышленных задач (для расчета необходимого количества катализатора, габаритов реактора).

Основные реакции данного процесса – это гидрирование моноциклических ароматических углеводородов (бутилбензол), гидрирование бициклических ароматических углеводородов (нафталин, дифенил) и трициклических ароматических углеводородов (антрацен).

Для моделирования кинетики процесса на основе полученных данных, построено математическое описание на базе закона действующих масс, которое представляет собой систему дифференциальных уравнений с начальными данными.

Решение системы уравнений является прямой кинетической задачей. Для восстановления кинетических параметров процесса деароматизации была решена обратная кинетическая задача на основе экспериментальных данных.

### Литература

1. Ахметов А.Ф., Ахметов А.В., Загидуллин Ш.Г., Шайжанов Н.С // Башкирский химический журнал. 2018. Т. 25, № 1. С. 96-98.
2. Коледина К. Ф., Коледин С. Н., Щаднева Н. А., Губайдуллин И. М. Кинетика и механизм каталитической реакции спиртов с диметилкарбонатом // Журнал физической химии, 2017. Т. 91, № 3. С. 422-428.

---

\*Работа выполнена по теме «Разработка новых теоретических подходов и программного обеспечения для моделирования сложных химических процессов и поиска соединений с заданными физико-химическими свойствами» (Регистрационный номер: АААА-А19-119022290011-6)

MSC2020 80A30

## **Inverse kinetic problem in modeling the kinetics of hydrogenation of polycyclic aromatic hydrocarbons**

Sh. G. Zagidullin<sup>1</sup>, K. F. Koledina<sup>1,2</sup>

Institute of Petrochemistry and Catalysis of RAS<sup>1</sup>,  
Ufa State Petroleum Technological University<sup>2</sup>