

УДК 519.63

Математическая модель реакторного блока каталитического риформинга с учетом гидродинамики неподвижного слоя катализатора и кинетики химических превращений

Кузьменкова М.А.¹, Поздникова А.Д.¹, Губайдуллин И.М.^{1,2}

УГНТУ¹, ИНК УФИЦ РАН²

Аннотация: В работе рассматривается разработка составной математической модели реакторного блока каталитического риформинга с учетом особенностей движения реакционной смеси в неподвижном слое катализатора и кинетики химических превращений углеводородных компонентов. Модель включает гидродинамический и кинетический модули. В качестве расчетной схемы реактора используется модель реактора идеального вытеснения. Кинетическая часть основана на детализированном описании состава сырья и основных реакций каталитического риформинга.

Ключевые слова: каталитический риформинг, математическое моделирование, реактор идеального вытеснения, неподвижный слой катализатора, кинетика, гидродинамика.

1. Введение

Каталитический риформинг является одним из ключевых процессов нефтепереработки, предназначенным для получения высокооктановых компонентов бензинов и ароматических углеводородов.

Промышленный процесс осуществляется в блоке последовательно соединенных реакторов с неподвижным слоем катализатора. Газосырьевая смесь после смешения с водородсодержащим газом проходит через реакторы, где протекают реакции ароматизации, дегидроциклизации, изомеризации и гидрокрекинга.

Процесс характеризуется высокой чувствительностью к температуре, давлению, составу сырья и активности катализатора. Температура в зоне реакции составляет порядка 470–530 °С, что требует учета тепловых эффектов протекающих превращений.

Целью работы является разработка математической модели реакторного блока каталитического риформинга, включающей гидродинамическое описание слоя катализатора и кинетическое описание химических превращений.

2. Гидродинамический модуль модели

Гидродинамический модуль предназначен для формирования структуры неподвижного слоя катализатора и расчета движения реакционной смеси через межзерновое пространство.

В модели выполняется построение расчетной области, содержащей гранулы катализатора заданного размера. Размещение частиц осуществляется с учетом геометрических ограничений, что позволяет получить структуру слоя, приближенную к

реальному каталитическому блоку.

В отличие от методов дискретных элементов, требующих расчета большого количества контактных взаимодействий, используется геометрический подход формирования упаковки частиц. Это позволяет уменьшить вычислительные затраты при сохранении физической корректности представления каталитического слоя.

Расчет движения потока выполняется на основе модели реактора идеального вытеснения (РИВ), предполагающей поршневое движение газосырьевой смеси вдоль длины реактора без учета продольного перемешивания.

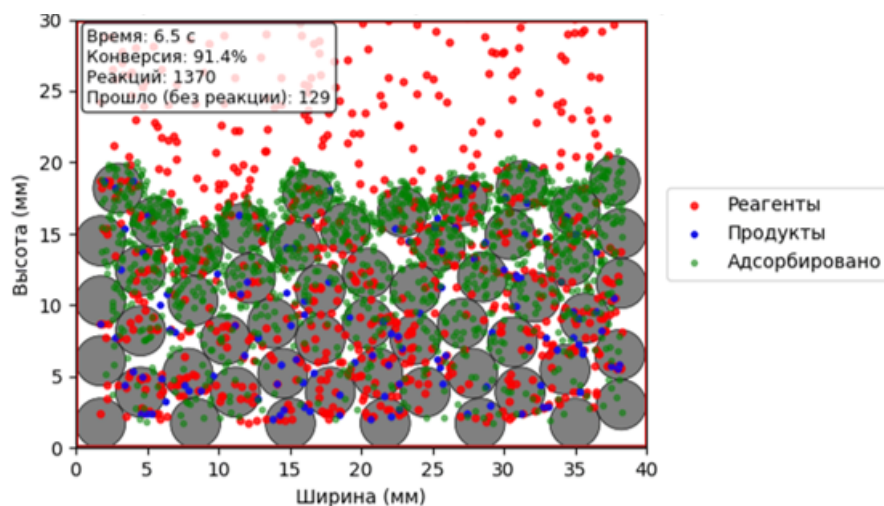


Рис. 1. Моделирование движения реакционной смеси через слой катализатора

Полученная структура слоя используется для анализа взаимодействия компонентов потока с активной поверхностью катализатора.

3. Кинетический модуль

Кинетический модуль предназначен для расчета изменения компонентного состава реакционной смеси в процессе каталитического риформинга.

В модели используется укрупненное представление состава сырья с выделением 19 групп компонентов: нормальных и изопарафинов, пяти- и шестичленных нафтеннов, ароматических соединений, олефинов, легких углеводородных газов, водорода, серо- и азотсодержащих соединений, а также кокса.

Кинетическая схема включает 21 реакцию, объединяющую основные направления превращений:

- изомеризация парафинов;
- ароматизация и дегидроциклизация нафтеннов;
- гидрокрекинг углеводородов;
- гидрирование примесей;
- реакции уплотнения с образованием кокса.

Изменение расходов компонентов описывается системой материальных балансов:

$$\frac{dF_i}{dl} = \sum_j \nu_{ij} r_j$$

где F_i – молярный расход компонента, l – координата реактора, ν_{ij} – стехиометриче-

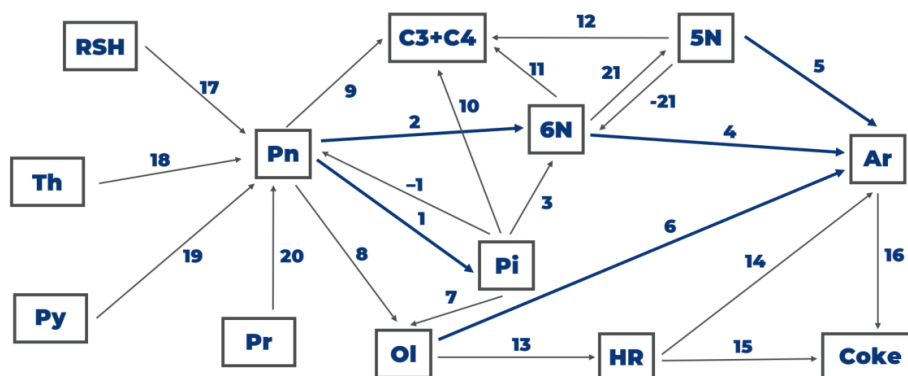


Рис. 2. Схема основных направлений химических превращений в модели каталитического риформинга

ский коэффициент, r_j – скорость реакции.

Скорость реакции определяется кинетическим выражением с учетом адсорбции компонентов:

$$r_j = a \frac{k_j \prod_i P_i^{n_{ij}}}{1 + \sum_i K_{ad,i} P_i}$$

Температурная зависимость константы скорости учитывается уравнением Аррениуса:

$$k_j = k_{0j} \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right)$$

Для учета тепловых эффектов реакций используется энергетический баланс:

$$\frac{dT}{dl} = -\frac{\sum_j r_j \Delta H_j}{F_t c_p}$$

Снижение активности катализатора вследствие образования кокса учитывается коэффициентом активности:

$$a = \exp(-k_d C_{coke})$$

4. Численная реализация модели

Расчетная модель представляет собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений относительно координаты реактора.

В качестве ядра модели используется реактор идеального вытеснения. Для решения жесткой системы уравнений применяется неявный метод обратного дифференцирования BDF.

Входными параметрами модели являются температура, давление, расход сырья, расход водородсодержащего газа и компонентный состав исходной смеси.

В результате расчета определяются температурный профиль, распределение компонентов, выход водорода и показатели качества продукта.

5. Расчетная схема реакторного блока

В текущей версии модели реактор рассматривается как РИВ без учета продольного перемешивания.

Межреакторный подогрев реакционной смеси на данном этапе не учитывается и является направлением дальнейшего развития модели.

6. Заключение

Разработана составная математическая модель реакторного блока каталитического риформинга, включающая гидродинамический и кинетический расчетные модули.

Использование гидродинамического блока позволяет учитывать особенности структуры неподвижного слоя катализатора, а кинетический модуль обеспечивает расчет превращений основных групп углеводородных компонентов.

Предлагаемая модель может использоваться для анализа технологических режимов и дальнейшей оптимизации работы реакторного блока каталитического риформинга.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН FMRS-2025-0031 «Компьютерное моделирование химических и химико-технологических процессов: разработка и тестирование новых алгоритмов и программ».

Список литературы

1. Коледина К.Ф. Многокритериальная оптимизация и оптимальное управление химическими процессами на основе детализированной кинетической модели. Диссертация. Уфа, 2020.
2. Прокофьева Т.В., Круглов С.С. Технологический расчет реакторного блока установки каталитического риформинга с платиновым катализатором. Москва: РГУ нефти и газа им. И.М. Губкина, 2019.
3. Петьков В.И., Корытцева А.К. Химические реакторы: электронное учебно-методическое пособие. Нижний Новгород, 2012.
4. Ахметов С.А., Гайсина А.Р. Моделирование и инженерные расчеты физико-химических свойств углеводородных систем. Санкт-Петербург: Недра, 2010.

MSC 65L05

Mathematical model of the catalytic reforming reactor unit taking into account the hydrodynamics of the stationary catalyst layer and the kinetics of chemical transformations

M.A. Kutiyenkova¹, A.D. Pozdnikova¹, I.M. Gubaydullin^{1,2}

UPSTU¹, Institute of Petrochemistry and Catalysis UFIC RAS²

Abstract: The paper considers the development of a complex mathematical model of a catalytic reforming reactor unit, taking into account the characteristics of the movement of the reaction mixture in a stationary catalyst layer and the kinetics of chemical transformations of hydrocarbon components. The model includes hydrodynamic and kinetic modules. An ideal displacement reactor model is used as the design scheme of the reactor. The kinetic part is based on a detailed description of the composition of the raw materials and the main reactions of catalytic reforming.

Keywords: catalytic reforming, mathematical modeling, ideal displacement reactor, stationary catalyst layer, kinetics, hydrodynamics.