

УДК 544.421:519.63

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИОННОЙ КИНЕТИКИ В ГРАНУЛЕ КАТАЛИЗАТОРА В ПРОЦЕССЕ ГИДРОИЗОМЕРИЗАЦИИ Н-ГЕКСАДЕКАНА

Конченко П. А.¹

Научный руководитель - д-р физ.-мат. наук, зав. лабораторией математической химии Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, профессор кафедры Технологии нефти и газа Уфимского Государственного Нефтяного Технического Университета, Губайдуллин И. М.^{1,2}

¹ФГБОУ ВО УГНТУ

²Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН

Polina.konchenko05@mail.ru

Введение

В рамках развития арктических направлений добычи нефти и газа в России в последнее время особо актуальной является производство низкозастывающих дизельных топлив. На заседании Минэнерго-РФ в октябре 2023 года Вице-премьер РФ А. Новак поручил отечественным нефтяным компаниям увеличить производство зимнего дизельного топлива для проведения северного завоза и внутреннего рынка [1]. В связи с этим возникает необходимость модернизации существующих технологий переработки нефтяного сырья в высококачественное низкозастывающее топливо.

На данный момент перспективным и особо изучаемым процессом получения дизельного топлива с низкими температурами застывания является гидроизомеризация дизельной фракции (в дальнейшем – ГИ ДТ). В результате этого процесса н-парафины превращаются в изомеры, уменьшая температуру застывания товарного дизельного топлива. ГИ ДТ реализуется на бифункциональных цеолитных катализаторах пористой структуры с кислотными и металлическими центрами [2]. Целевая реакция проходит на обоих центрах, побочные продукты образуются преимущественно на кислотных центрах катализатора. При этом разработкой новых структур и составов катализаторов занимаются целые лаборатории в научных институтах, что требует большого количества финансовых и материальных затрат. В связи с этим возникает задача оптимизации подбора внутренней структуры катализатора, обеспечивающей требуемые параметры производства.

Основная часть

Математическое моделирование выступает ключевым инструментом оптимизации структуры катализаторов, позволяя существенно ускорить процесс их проектирования как на уровне стационарного слоя в реакторе, так и на микроуровне отдельной гранулы с надёжным прогнозированием целевых показателей процесса. В рамках проведённого исследования разработана комплексная модель, описывающая диффузионно-кинетические закономерности гидроизомеризации н-гексадекана (в качестве модельного сырья) в пределах гранулы катализатора. Модель базируется на фундаментальных уравнениях массопереноса в пористой среде и учитывает совокупность необходимых факторов: распределение микро- и мезопор по размерам, удельную поверхность и связность пор, концентрацию кислотных центров, а также геометрическую форму гранулы [3]. Для расчёта пространственных профилей концентраций реагентов и продуктов внутри гранулы предложен специализированный численный алгоритм, верифицированный на примере цилиндрической частицы.

Отличительные особенности различных катализаторов в рамках модели формализуются через эффективные коэффициенты диффузии компонентов $D_{эфф,i}$, зависящие от текстурных характеристик, и параметры, отражающие общее число кислотных центров. Есть возможность расширения модели для исследования процесса с учетом отдельных индивидуальных компонентов дизельной фракции.

На основе разработанной модели создан программный модуль на языке Python, который позволяет оперативно подбирать оптимальные характеристики цеолитного катализатора (включая текстуру пор и кислотность) для достижения требуемых значений конверсии, селективности и скорости реакций в конкретных производственных условиях, тем самым обеспечивая научно обоснованный подход к рациональному дизайну каталитических систем.

Выводы

Экспериментальная верификация предложенной математической модели выполнена на базе данных лаборатории молекулярно-ситовых бифункциональных каталитических систем Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН (руководитель — к. х. н., доцент М. Р. Аглиуллин). Объектом исследований выступали каталитические бифункциональные системы типа SAPO-11 для синтеза низкозастывающих дизельных топлив. Сопоставление теоретических расчётов с опытными результатами показало высокую степень соответствия: отклонения расчётных и экспериментальных значений укладываются в рамки допустимой погрешности, что подтверждает работоспособность модели и возможность её адаптации под промышленное производство.

Список использованных источников

1. А. Новак поручил Минэнерго РФ согласовать с нефтяными компаниями баланс производства зимнего дизтоплива // Neftegaz.ru URL:<https://neftegaz.ru/news/gosreg/806889-a-novak-poruchil-minenergo-rf-soglasovat-s-neftyanyami-kompaniyami-balans-proizvodstva-zimnego-diztop/> (дата обращения: 01.02.2026).

2. Аглиуллин М. Р., Серебренников Д. В., Хазипова А. Н., Малунев А. И., Дементьев К. И., Кутепов Б. И. Каталитические системы pt/sapo-11 с различными кислотностью и вторичной пористой структурой в гидроизомеризации n-гексадекана // НЕФТЕХИМИЯ. - 2023, том 63. - №5. - С. 709-719.

3. Бесков В. С., Флокк В. Моделирование каталитических процессов и реакторов. - М.: Химия, 1991. - 256 с.