

УДК 66.01

## ИНЖЕНЕРНЫЕ МОДЕЛИ ПРОЦЕССОВ НЕФТЕПЕРЕРАБОТКИ: ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ МНОГОСТАДИЙНОГО ПРОИЗВОДСТВА БЕНЗИНОВ

Ивашкина Елена Николаевна<sup>1</sup>,  
ivashkinaen@tpu.ru

Кокшаров Антон Георгиевич<sup>2</sup>,  
antonk11@mail.ru

**Иванчина Эмилия Дмитриевна<sup>1</sup>**

Чузов Вячеслав Алексеевич<sup>1</sup>,  
chuva@tpu.ru

Назарова Галина Юрьевна<sup>1</sup>,  
silko@tpu.ru

Чернякова Екатерина Сергеевна<sup>1</sup>,  
sharova@tpu.ru

Долганов Игорь Михайлович<sup>1</sup>,  
dolganim@tpu.ru

<sup>1</sup> Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30.

<sup>2</sup> ООО «КИНЕФ»,  
Россия, 187110, г. Кириши, ш. Энтузиастов, 1.

**Актуальность** работы обусловлена необходимостью импортозамещения программного обеспечения в области проектирования, моделирования и оптимизации процессов подготовки и переработки нефти и газа. Практически все используемые на предприятиях нефтегазового сектора пакеты моделирующих систем представляют собой разработки США, Канады, Великобритании и других стран. В сложившихся условиях санкционных рисков по использованию импортного программного обеспечения для моделирования технологических процессов крайне актуальной задачей является разработка и быстрая адаптация инженерных математических моделей всех базовых процессов нефтепереработки, которые в дальнейшем станут основой российских импортозамещающих программных продуктов. В Национальном исследовательском Томском политехническом университете более 30 лет проводятся исследования процессов получения моторных топлив, на основании которых разработаны надежные математические модели таких технологий, как каталитический риформинг бензинов, изомеризация пентан-гексановой фракции углеводородов, каталитический крекинг вакуумного дистиллята и смешанного нефтяного сырья, гидропереработки нефтяных фракций, компаундирование высокооктановых бензинов и других. Отличительной особенностью разработанных математических моделей является то, что они, с одной стороны, построены на основе фактических промышленных данных по эксплуатации установок на различных НПЗ, а с другой, учитывают основные фундаментальные физико-химические закономерности механизмов реакций, дезактивации катализаторов, макрокинетические факторы процессов производства моторных топлив. Решение многокритериальной задачи оптимизации технологии приготовления моторных топлив (бензинов и дизельных топлив) возможно с применением метода математического моделирования на физико-химической основе, т. е. с учетом термодинамики и кинетики превращений углеводородов на поверхности катализатора, а также нестационарности протекания процессов ввиду закоксовывания, старения и отравления катализатора вредными примесями, изменения химического состава перерабатываемого сырья.

**Цель:** разработка технических решений, направленных на повышение эффективности многостадийного производства бензинов с использованием инженерных моделей процессов нефтепереработки.

**Методы** исследования базируются на использовании математического моделирования многокомпонентных процессов переработки углеводородного сырья. В качестве исходных данных использованы результаты хроматографического определения группового и индивидуального состава различных нефтяных фракций.

**Результаты.** Выполнены оценка и прогнозирование влияния компонентного состава перерабатываемого сырья каталитического риформинга на качественные и количественные характеристики компонентов товарного бензина. Применение модели каталитического крекинга показало, что выход целевых продуктов процесса и активность катализатора выше на 4,9 и 6,7 % мас. при переработке сырья с более низким содержанием ароматических углеводородов и смол (29,9 и 1,6 % мас.), что связано со снижением содержания кокса на катализаторе на 0,15 % мас. Определен максимальный выход бензина для двух типов сырья (55,4 и 56,5 % мас.), который достигается при 536,0 и 534,0 °С, что объясняется их углеводородным составом. Выполнены прогнозные расчеты с оценкой влияния состава потока бензиновой фракции каталитического крекинга на рецептуру и качество получаемого товарного бензина при использовании более легкого сырья на установке крекинга. Показана возможность увеличения доли потока бензиновой фракции каталитического крекинга в рецептуру приготовления товарного бензина. Себестоимость производства моторного топлива в этом случае снижается на величину от 0,1 до 1,0 %.

### Ключевые слова:

инженерные модели, каталитический риформинг, каталитический крекинг, бензин, оптимизация, повышение эффективности.

### Введение

В настоящее время особенно остро стоит вопрос импортозамещения программного обеспечения в области проектирования, моделирования и оптимизации процессов подготовки и переработки нефти и газа.

Практически все используемые на предприятиях нефтегазового сектора пакеты моделирующих систем представляют собой разработки США, Канады, Великобритании и других стран [1–6]. В сложившихся условиях санкционных рисков по использованию импортного программного обеспечения для моделиро-

вания технологических процессов крайне актуальной задачей является разработка и быстрая адаптация инженерных математических моделей всех базовых процессов нефтепереработки [7–15], которые в дальнейшем станут основой российских импортозамещающих программных продуктов.

В Национальном исследовательском Томском политехническом университете более 30 лет проводятся исследования процессов получения моторных топлив, на основании которых разработаны надежные математические модели таких технологий, как каталитический риформинг бензинов, изомеризация пентангексановой фракции углеводородов, каталитический крекинг вакуумного дистиллята и смесового нефтяного сырья, гидропереработка нефтяных фракций, компаундирование высокооктановых бензинов и другие [16–18].

Отличительной особенностью разработанных математических моделей является то, что они, с одной стороны, построены на основе фактических промышленных данных по эксплуатации установок на различных НПЗ, а с другой, учитывают основные фундаментальные физико-химические закономерности механизмов реакций, дезактивации катализаторов, макрокинетические факторы процессов производства моторных топлив.

Решение многокритериальной задачи повышения эффективности существующих технологий приготовления высококачественных бензинов и дизельного топлива возможно с применением метода математического моделирования на физико-химической основе, т. е. с учетом кинетических и термодинамических закономерностей превращений углеводородов на поверхности катализатора, а также нестационарности протекания процессов ввиду закоксовывания, старе-

ния и отравления катализатора вредными примесями, изменения химического состава перерабатываемого сырья [19–21].

Целью является разработка технических решений, направленных на повышение эффективности многостадийного производства бензинов с использованием инженерных моделей процессов нефтепереработки.

#### Объекты исследования

В работе представлены результаты прогнозирования и оптимизации основных стадий производства бензинов на примере технологии, включающей процессы каталитического риформинга бензинов, каталитического крекинга и гидрокрекинга вакуумного дистиллята и компаундирования потоков с установок изомеризации, алкилирования и т. д. (рис. 1).

Процесс каталитического риформинга реализован по классической трехреакторной схеме со стационарным слоем Pt-Re-катализатора. Исходным сырьем является бензиновая фракция 85–180 °С с установок первичной переработки нефти.

Наличие комплекса глубокой переработки нефти на НПЗ позволяет вовлекать в сырье процесса риформинга фракцию 85–155 °С (тяжелая нефть) с блока выделения легких фракций установки гидрокрекинга. Катализатором данного процесса служит Ni-Mo-каталитическая система на носителе в виде оксида алюминия, синтетических аморфных алюмосиликатов и цеолитов.

В процесс компаундирования бензинов также может быть вовлечена бензиновая фракция с установки каталитического крекинга. В этой связи возникает необходимость решения многокритериальной задачи компаундирования товарных бензинов с оценкой ключевых показателей качества получаемых топлив.

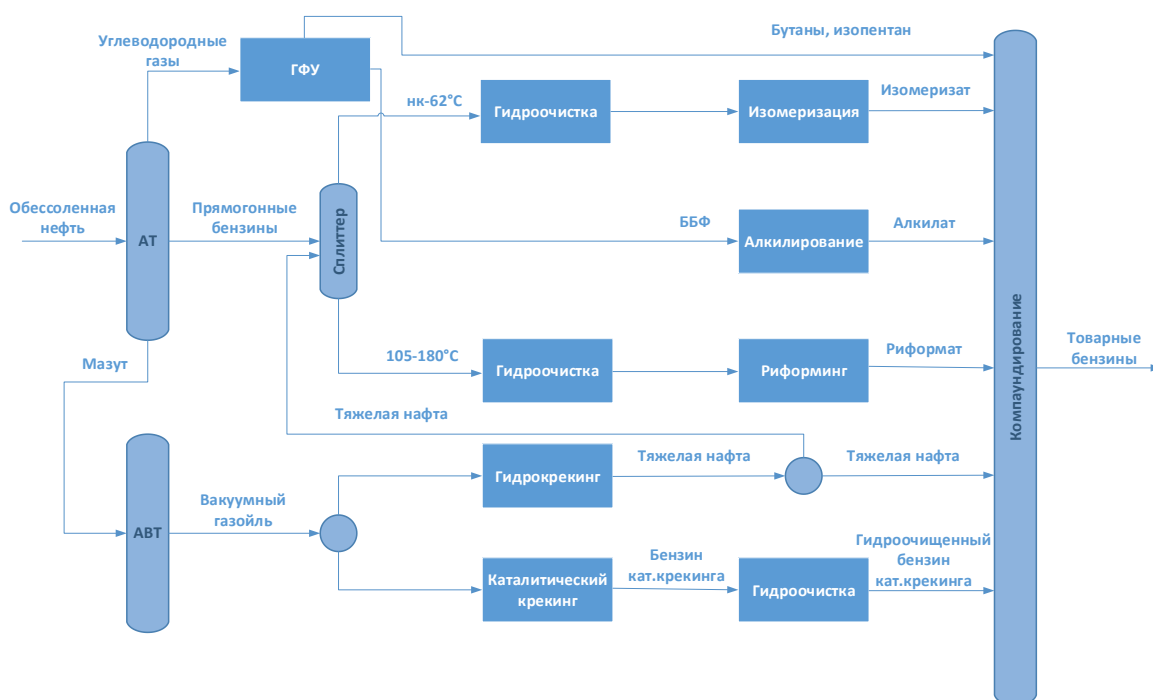


Рис. 1. Блок-схема производства товарных бензинов

Fig. 1. Block diagram of the production of commercial gasoline

На рис. 2 показана принципиальная технологическая блок-схема процесса каталитического крекинга вакуумного газойля с непрерывной регенерацией катализатора, типа КТ-1/1. В качестве катализатора на установке ис-

пользуют микросферический цеолитсодержащий катализатор типа ZSM-5 с насыпной плотностью 0,872–0,877 г/см<sup>3</sup> и объемом пор 0,419–0,423 см<sup>3</sup>/г, активность регенерированного катализатора не менее 72–76 %.

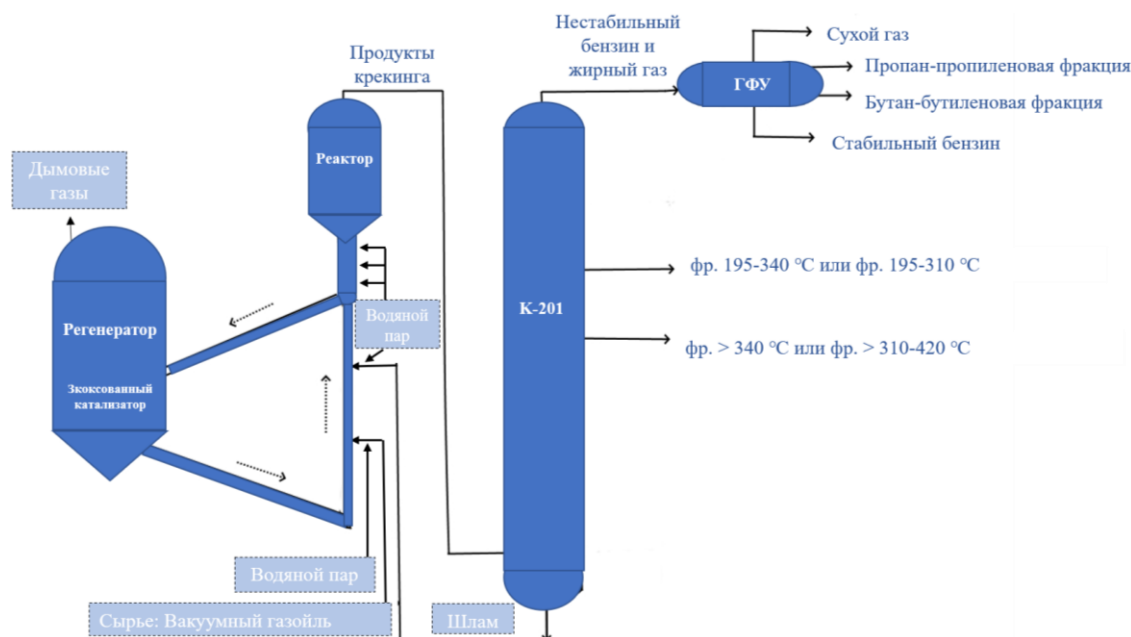


Рис. 2. Технологическая блок-схема процесса каталитического крекинга

Fig. 2. Technological block diagram of the catalytic cracking

В зависимости от технологического оформления процесса каталитического крекинга и типа используемого катализатора в качестве сырья процесса применяют как вакуумный газойль, так и смеси, содержащие вакуумный и атмосферные газойли, газы, деасфальтизаты, остаточные фракции и др., а также легкий газойль с установок коксования.

На типовой установке каталитического крекинга С-200, входящей в состав комплекса глубокой переработки нефтяного сырья типа КТ-1/1, сырье контактирует в нижней части лифт-реактора с катализатором, поступающим непрерывно из регенератора. В восходящем потоке катализатора сырье крекируется после разделения продуктов крекинга с катализатором в отстойной зоне реактора, катализатор поступает на отпарку в зону десорбции, а продукты крекинга – в ректификационную колонну для разделения. Жирный газ и нестабильный бензин поступают на установку газодифракционного (ГФУ), где происходит их разделение на сухой газ, пропан-пропиленовую (ППФ), бутан-бутиленовую (ББФ) фракции и стабильный бензин. В качестве компонентов сырья установок ГФУ могут быть вовлечены газы и бензины с установок гидроочистки и термических процессов.

Большинство установок каталитического крекинга работают по топливному варианту, где целевым продуктом процесса является бензиновая фракция с октановым числом 91,5–93,5 пунктов. Бензин каталитического крекинга является высокооктановым компонентом товарного бензина, доля которого составляет 30–40 % мас.

Для достижения требуемой конверсии сырья и качества продуктов крекинга основные параметры процесса при каталитическом крекинге вакуумного газойля могут изменяться в широком диапазоне (табл. 1).

Таблица 1. Технологический режим работы установок каталитического крекинга типа КТ-1/1, С-200

Table 1. Technological mode of operation of catalytic cracking units of type KT-1/1, C-200

Основные рабочие параметры лифт-реактора и регенератора Main operating variables of the riser and regenerator	Значение Values
Расход сырья в лифт-реактор, м <sup>3</sup> /ч Feedstock consumption to riser, m <sup>3</sup> /h	147,9–390,0
Температура сырья на входе в реактор Feedstock temperature, °C	256,3–321,4
Температура процесса/Cracking temperature, °C	510,0–532,0
Расход водяного пара в лифт-реактор, кг/ч Water vapor consumption to riser, kg/h	4418,6–9419,7
Температура пара на распыл сырья, кг/ч Temperature of water vapor to riser, kg/h	324,7–341,8
Расход шлама в лифт-реактор, м <sup>3</sup> /ч Slips consumption to riser, m <sup>3</sup> /h	5,3–25,0
Давление в реакторе, кгс/см <sup>2</sup> Pressure in reactor, kgf/cm <sup>2</sup>	1,0–1,6
Температура регенерированного катализатора Temperature of regenerated catalyst, °C	655,1–695,8
Давление в регенераторе, кгс/см <sup>2</sup> Pressure in regenerator, kgf/cm <sup>2</sup>	1,2–1,6
Кратность циркуляции катализатора, T <sub>кат</sub> /T <sub>сырья</sub> Catalyst-to-oil ratio, tons <sub>cat</sub> /tons <sub>feed</sub>	4,0–10,0

#### Экспериментальная часть

Для разработки математического описания многостадийного производства высокооктанового бензина

необходимо провести глубокий анализ процессов гидрокрекинга, каталитического крекинга и риформинга, в соответствии с приведенной выше схемой (рис. 1), от изучения термодинамических закономерностей процесса до описания полного производственного процесса.

Термодинамические расчеты являются основой для кинетического описания процессов. Они показывают вероятность протекания той или иной химиче-

ской реакции, т. е. вероятность реакций превращения сырья в продукт [8, 9].

Важным этапом моделирования процессов многостадийного производства моторных топлив является выбор уровня формализации механизма реакций или составление схемы превращений углеводородов. Для процессов глубокой переработки вакуумного газойля (гидрокрекинг и каталитический крекинг) справедлива группировка углеводородов по гомологическим группам (рис. 3, 4).

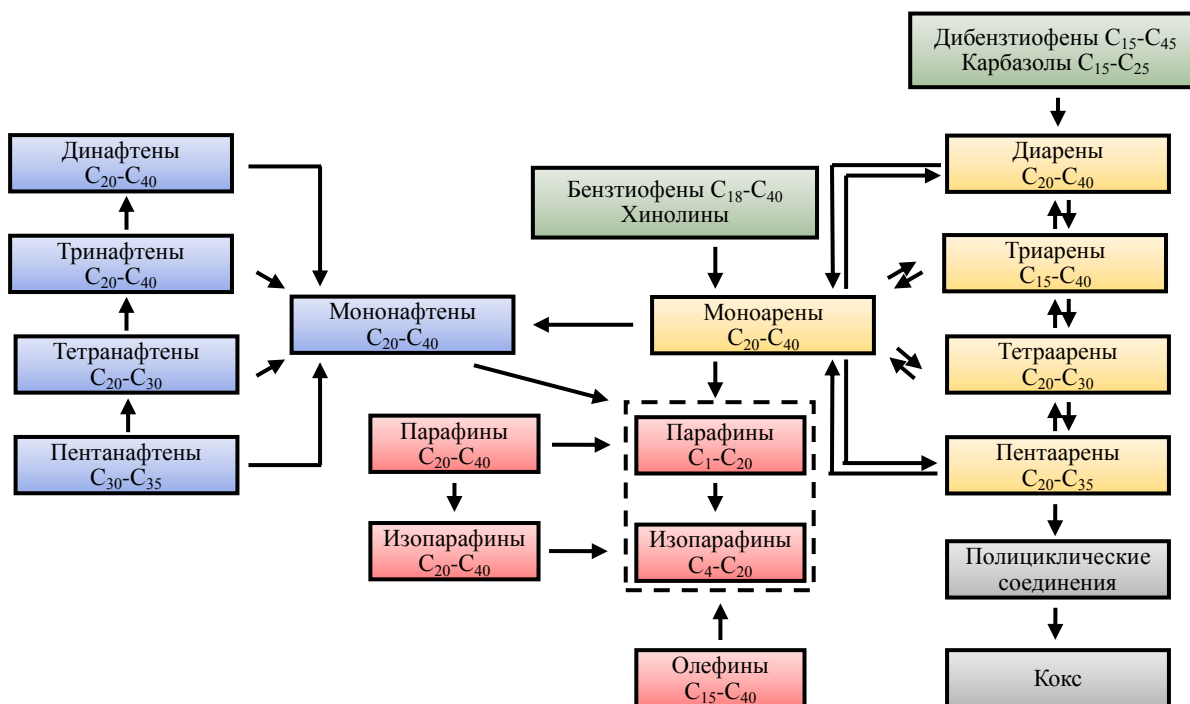


Рис. 3. Схема превращения групп углеводородов в процессе гидрокрекинга

Fig. 3. Scheme of hydrocarbons conversion during hydrocracking

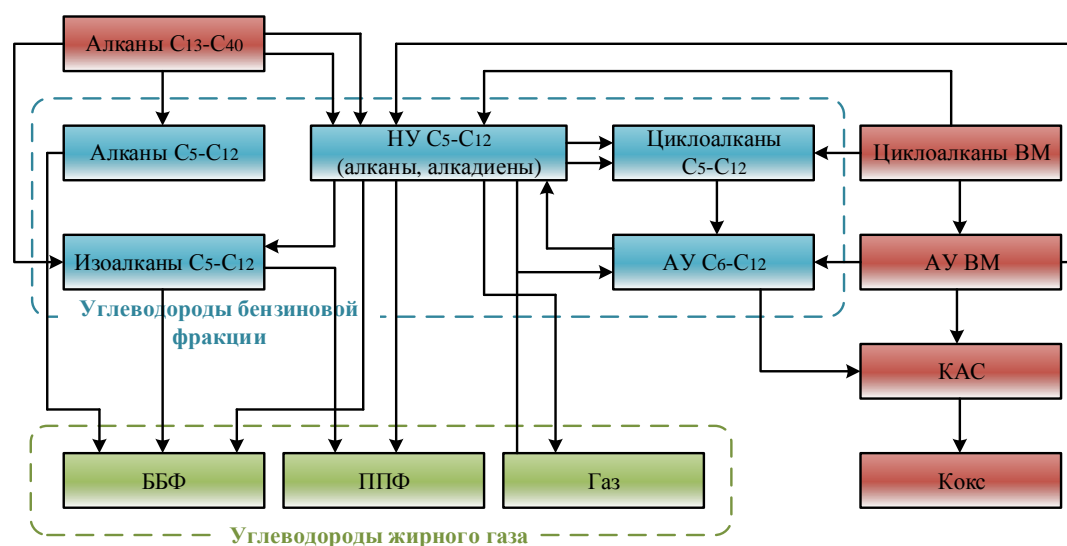


Рис. 4. Схема превращений углеводородов в процессе каталитического крекинга в интервале температур начала реакции (537–575 K): АУ – ароматические углеводороды; ВМ – высокомолекулярные углеводороды сырья, легкого и тяжелого газойля; ППФ – пропан-пропиленовая фракция; ББФ – бутан-бутиленовая фракция; НУ – алкены и алкадиены; КАС – конденсирование нафтенно-ароматические соединения с гетероатомами

Fig. 4. Scheme of conversion of hydrocarbons of the catalytic cracking at initial reaction temperature (537–575 K): АУ – arenas; ВМ – high-molecular hydrocarbons of raw materials, light and heavy gas oil; ППФ – propane-propylene fraction; ББФ – butane-butylene fraction; НУ – alkenes and alkadienes; КАС – condensation of naphthenic-aromatic compounds with heteroatoms

Система кинетических уравнений, построенная на основании реакционной схемы процесса каталитического крекинга, учитывает возможность протекания как прямых, так и обратных реакций и корректируется на каждом шаге расчета. Определение кинетически необратимых стадий осуществляется по величине текущего химического сродства реакций (1).

$$A_{rij} = -\Delta_r G_{ij} = \mu_i - \mu_j > RT, \quad (1)$$

где  $A_{rij}$  – текущее значение химического сродства реакции, Дж/моль;  $R$  – универсальная газовая постоянная – 8,314 Дж/(моль·К);  $T$  – текущая температура, К;  $\Delta_r G_{ij}$  – текущее значение потенциала Гиббса, Дж/моль;  $\mu_i$  и  $\mu_j$  – текущее значение химического потенциала, Дж/моль.

На первом этапе расчёта на основании результатов термодинамического анализа реакций процесса при температуре начала реакции определено, что кинетически необратимых стадий нет (рис. 4). Далее для каждой стадии цепочки химических превращений осуществляется расчет текущего химического сродства в зависимости от концентраций участников превращений и текущей температуры и проверяется условие необратимости реакций. В случае если величина химического сродства какой-либо стадии в текущий момент времени больше  $RT$  (или  $A_{rij}/RT \geq 1$ ), реакция считается кинетически необратимой (константа скорости обратной реакции равна нулю). И наоборот,

если химическое сродство меньше  $RT$  (или  $A_{rij}/RT \leq 1$ ), стадия не является кинетически необратимой.

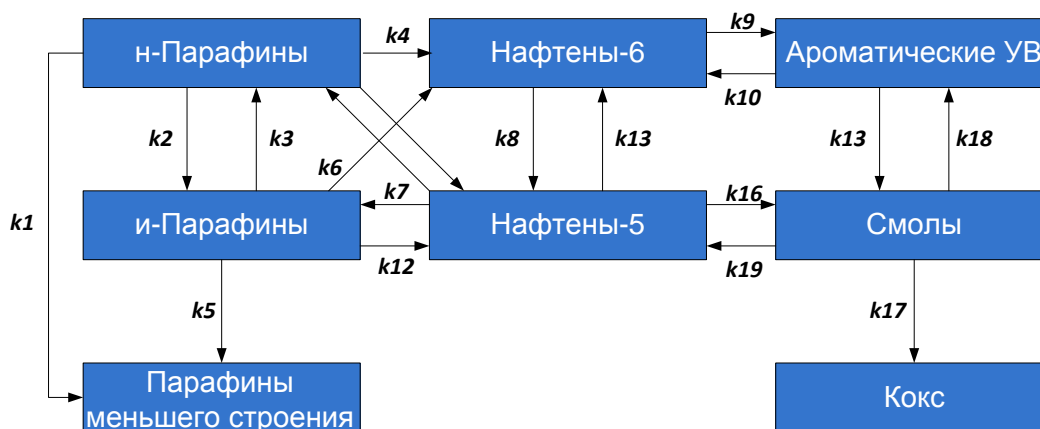
В табл. 2 представлен фрагмент базы данных по составам сырья каталитического крекинга и гидрокрекинга, сформированной на основе лабораторных исследований, которые используются в качестве входных данных в модели процессов.

**Таблица 2.** Содержание смол, насыщенных и ароматических углеводородов в сырье процессов глубокой переработки нефти, % мас.

**Table 2.** Content of resins, saturated and aromatic hydrocarbons in the feedstock of deep oil refining processes, % wt.

Содержание Content	Сырье гидро- крекинга Hydrocracking feedstock	Сырье каталити- ческого крекинга Catalytic cracking feedstock
Насыщенные углеводороды Saturates	47,4–49,2	57,4–74,6
Ароматические углеводороды Aromatics	40,6–41,7	23,2–38,8
Смолы/Resins	10,3–10,9	2,1–4,7

В процессе риформинга, в отличие от гидрокрекинга и каталитического крекинга, необходимо представлять превращения углеводородов не в виде групповых компонентов, а индивидуально (рис. 5). Это также справедливо и для процесса изомеризации.



**Рис. 5.** Схема превращений углеводородов в процессе каталитического риформинга: н-Парафины, и-Парафины – парафиновые углеводороды нормального и изо-строения; Нафтенy-5, Нафтенy-6 – нафтенyе углеводороды пяти- и шестичленного строения, соответственно; Ароматические УВ – ароматические углеводороды; Смолы – непредельные промежуточные продукты уплотнения

**Fig. 5.** Scheme of hydrocarbon transformations in the process of catalytic reforming: н-Парафины, и-Парафины – paraffin hydrocarbons of normal and iso-structure; Нафтенy-5, Нафтенy-6 – naphthenic hydrocarbons of five- and six-membered structure, respectively; Ароматические УВ – aromatic hydrocarbons; Смолы – unsaturated seal intermediates

Данные схемы превращений разработаны на основе полученных экспериментальных исследований о составе сырья и продуктов с учетом термодинамических расчетов.

На основе представленных схем превращений построены кинетические модели процессов гидрокрекинга, каталитического крекинга и риформинга, а также уравнения их материальных и тепловых балансов.

#### Общий вид уравнений материального и теплового балансов

Несмотря на разный уровень формализации механизма протекания реакций для гидрогенизационных процессов (гидрокрекинг, риформинг), составление уравнений материального и теплового баланса подчиняется единым закономерностям (2):

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{dC_i(x, \tau)}{d\tau} &= \sum_{m=1}^p k_m(x) C_i(x, \tau) + \sum_{m=1}^p k_m(x) C_i(x, \tau) C_{H_2} + \\ &+ \sum_{s=1}^n C_{H_2} \int_{x_i}^b k_m(x) C_s(x', \tau) v_m(x, x') dx' \\ \frac{dT(\tau)}{d\tau} &= -\frac{1}{C_p^m} \sum_{j=1}^n \Delta_r H_{T_j}^{\circ} \int_{x_i}^b k_j(x') C_j(x') dx', \end{aligned} \right. \quad (2)$$

где  $C_i(x, \tau)$ ,  $k_m(x)$  – функции распределения содержания углеводородов и констант скоростей реакций;  $\tau$  – время пребывания реагентов в зоне реакции, с;  $v_m(x, x')$  – функции распределения вероятностей разрыва связей при гидрокрекинге парафиновых углеводородов;  $C_p^m$  – теплоемкость смеси, Дж/моль·К;  $T(\tau)$  – изменение температуры в ходе процесса, К;  $\Delta_r H_{T_j}^{\circ}$  – стандартная энтальпия  $j$ -й реакции, кДж/моль;  $x$  – число атомов углерода в молекуле углеводорода;  $I$  – количество групп углеводородов (парафины, изопарафины, циклоалканы, ароматические, смолы, кокс).

Уравнение материального баланса гидрогенизационного процесса описывает как реакции, идущие без участия водорода (первое слагаемое), так и реакции с участием водорода (второе слагаемое). Третье слагаемое описывает реакции гидрокрекинга парафиновых углеводородов.

Математическая модель процесса каталитического крекинга построена на основе формализованной кинетической схемы превращений веществ. В качестве гидродинамического режима движения реакционной смеси и частиц катализатора (с размером от 70–90 мкм) выбрана модель реактора идеального вытеснения. На примере одиночной шарообразной частицы было показано, что скорость газа значительно превышает скорость, достаточную для взвешивания твердых частиц. Данное предположение подтверждено расчетами фактической скорости движения потока и скорости начала псевдооживления, критерия Архимеда, критерия Рейнольдса с поправкой на порозность потока, теплообмена частиц со средой, критерия Нуссельта и Пекле [9].

С учетом вышеперечисленных допущений, а также допущения о квазигомогенности математическую модель лифт-реактора каталитического крекинга можно представить системой дифференциальных уравнений материального и теплового баланса реактора идеального вытеснения с начальными условиями:  $\tau=0$ ,  $C_i=C_{i0}$ .  $T_0=T_{n.p.}$  Материальный баланс отражает изменения концентрации реагирующих веществ по времени контакта, тепловой баланс – изменение температуры в реакционной зоне (3):

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{dC_i}{d\tau} &= \sum_{j=1}^{18} (\pm \psi \cdot (\vec{W} - \vec{W}))_j; \\ \rho_{cm} c_p^m \frac{dT}{d\tau} &= \sum_{j=1}^{18} (\pm \psi \cdot ((\Delta_r H_T^{\circ}) \cdot \vec{W})_j - ((\Delta_r H_T^{\circ}) \cdot \vec{W})_j), \end{aligned} \right. \quad (3)$$

где  $C_i$  – концентрации  $i$ -й группы углеводородов, моль/м<sup>3</sup>;  $j$  – порядковый номер реакции;  $\tau$  – время контакта, с;  $\psi$  – параметр дезактивации катализатора, учитывающий влияние кокса, никеля и ванадия;  $\Delta_r H_T^{\circ}$ ,

$\Delta_r H_T^{\circ}$  – стандартная энтальпия химической реакции, кДж/моль;  $\vec{W}$  и  $\vec{W}$  – скорость реакции в прямом и обратном направлениях, моль/(с·м<sup>3</sup>);  $\rho_{cm}$ ,  $c_p^m$  – плотность и теплоемкость потока, кг/м<sup>3</sup>, кДж/кг·К;  $T$  – температура потока, К.

Для нагрева сырья до температуры крекинга и компенсации эндотермического эффекта процесса основным теплоносителем выступает катализатор. Уравнение теплового баланса позволяет рассчитать температуру теплового равновесия сырья и катализатора  $T_p$  с учетом разбавления сырья водяным паром (4):

$$G_{кат} c_{кат} (T_{кат} - (T_p + 1)) = G_c c_{pc} (T_p + T_c), \quad (4)$$

где  $c_{кат}$  – теплоемкость катализатора, кДж/кг·°С;  $T_p$  – температура теплового равновесия сырья и катализатора, °С;  $G_{кат}$  – расход катализатора, кг/ч;  $T_{кат}$  – температура катализатора, °С;  $c_{pc}$  – теплоемкость сырья, кДж/кг·°С;  $G_c$  – расход сырья, кг/ч;  $T_c$  – температура сырья, °С.

Условное время интенсивного теплообмена между сырьем и катализатором составляет менее 0,2 % от высоты реакционной зоны. Величина  $T_p$  представляет собой начальную температуру реакции, так как принято допущение, что тепловое равновесие наступает до начала реакции [9].

Системы дифференциальных уравнений были решены с использованием численных методов Рунге–Кутты 4-го порядка, уравнения теплового баланса учитывают тепловые эффекты реакций и перенос тепла между катализатором и газо-сырьевой смесью (в случае каталитического крекинга).

Верификация разработанных математических моделей проводилась путем сопоставления результатов расчетов с экспериментальными данными, полученными с промышленных установок различных НПЗ. Погрешность расчетов варьируется от 5 до 10 %, что не превышает погрешности экспериментальных методов определения состава и расхода компонентов, выходной температуры газо-продуктовых смесей из каталитических реакторов.

## Результаты

Результаты проведенных исследований позволяют оценить и спрогнозировать влияние состава перерабатываемого сырья (рис. 6) на качественные и количественные характеристики компонентов товарного продукта.

На основании данных, представленных в табл. 3, можно сделать вывод о том, что использование сырья различного состава приводит к получению продукта с различным октановым числом, выходом, а также содержанием ароматических углеводородов.

Одной из количественных характеристик риформата является его выход, который, так же как и другие параметры, зависит от сырья. Максимальным выходом будет обладать риформат переработки сырья с повышенным содержанием нафтеновых углеводородов, так как данные компоненты быстрее всего вступают в реакции с образованием веществ с высокими



значениями октановых чисел. В данном случае наибольшим из представленных выходом (90,61 % мас.) обладает риформат переработки образца сырья 4. Наименьшее количество риформата (81,32 % мас.) образуется при переработке образца 2, что соответствует максимальному количеству предельных углеводородов в составе, которые способствуют снижению выхода риформата и ароматических веществ соответственно.

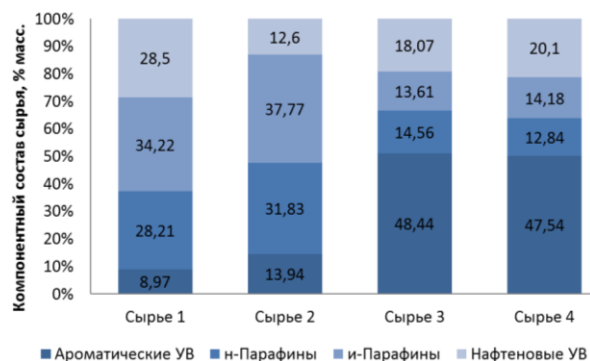


Рис. 6. Компонентный состав исследуемых образцов сырья

Fig. 6. Component composition of the studied samples of raw materials

Таблица 3. Характеристики риформата, полученные при исследовании образцов различного состава сырья

Table 3. Characteristics of the reformat obtained during the study of samples of various raw materials

Характеристика Properties	Объем переработанного сырья, т Volume of converted feedstock, tons				
	31572	58178	85982	113150	132458
Сырье 1/Feedstock 1					
Выход риформата, % мас. Yield of reformat, % wt.	87,74	87,61	87,67	87,55	87,31
Ароматические УВ, % мас. Aromatics, % wt.	63,70	63,80	63,69	63,74	63,75
Кокс, % мас./Coke, % wt.	0,17	0,32	0,47	0,62	0,71
Октановое число по исследовательскому методу/RON	95,80	95,90	95,80	95,80	95,80
Сырье 2/Feedstock 2					
Выход риформата, % мас. Yield of reformat, % wt.	81,32	81,43	81,53	81,06	87,31
Ароматические УВ, % мас. Aromatics, % wt.	58,52	58,06	57,87	57,92	58,05
Кокс, % мас./Coke, % wt.	0,30	0,55	0,76	1,03	1,19
ОЧИМ/RON	93,60	93,40	93,30	93,30	93,40
Сырье 3/Feedstock 3					
Выход риформата, % мас. Yield of reformat, % wt.	89,91	90,01	90,05	89,97	89,77
Ароматические УВ, % мас. Aromatics, % wt.	83,33	82,92	82,83	82,91	83,09
Кокс, % мас./Coke, % wt.	0,34	0,62	0,89	1,16	1,32
ОЧИМ/RON	104,10	103,90	103,80	103,90	104,00
Сырье 4/Feedstock 4					
Выход риформата, % мас. Yield of reformat, % wt.	90,61	90,71	90,75	90,67	90,48
Ароматические УВ, % мас. Aromatics, % wt.	83,49	83,11	83,01	83,09	83,26
Кокс, % мас./Coke, % wt.	0,33	0,60	0,86	1,12	1,26
ОЧИМ/RON	104,30	104,10	104,10	104,10	104,20

Основной качественной характеристикой товарных бензинов, которые получают путем компаундирования составных потоков, является октановое число. Катализат, полученный путем риформирования бензиновой фракций, является одним из таких потоков, а, следовательно, его качество также определяет значение октанового числа. На основании проведенных исследований можно сделать вывод, что переработка сырья с содержанием парафиновых углеводородов свыше 50 % мас. (сырье 2) приводит к получению продукта с октановым числом 93,6 пунктов по исследовательскому методу. В то время как использование сырья, богатого циклическими углеводородами с относительно низким содержанием предельных углеводородов (сырье 4), приводит к образованию риформата с октановым числом 104,3 пункта, что говорит о большей эффективности процесса.

Сырье 1 и 3 можно сравнить по темпу коксонакопления. Повышенное содержание ароматических углеводородов в составе способствует более интенсивному коксообразованию на катализаторе с 0,34 до 1,32 % мас.

В технологии каталитического крекинга при оптимизации теплового процесса по топливному или нефтехимическому варианту важно учитывать состав и склонность сырья к образованию кокса. Разработанная модель процесса каталитического крекинга позволяет прогнозировать режимы работы реактора технологии крекинга, реализованной по топливному и нефтехимическому вариантам, при вовлечении в переработку сырья различного состава для увеличения выхода целевых продуктов и стабильной работы катализатора.

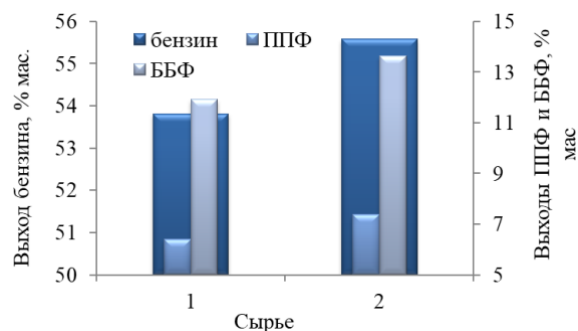
На рис. 7, 8 показано влияние составов сырья (табл. 4) на выход целевых продуктов и кокса при постоянной температуре крекинга 528 °С.

Таблица 4. Результаты лабораторных исследований сырья каталитического крекинга

Table 4. Results of laboratory studies of catalytic cracking feedstock

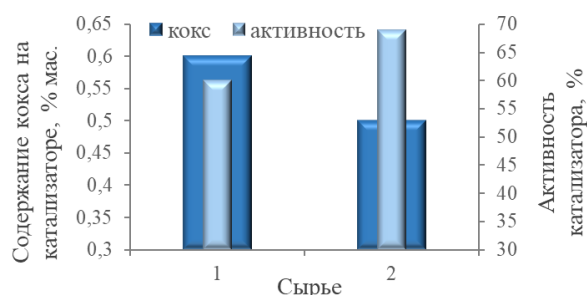
Свойство/состав Property/composition	Сырье 1 Feedstock 1	Сырье 2 Feedstock 2
Плотность при 15, г/см <sup>3</sup> Density at 15, g/sm <sup>3</sup>	0,892	0,888
Молекулярная масса, г/моль Molecular weight, g/mol	342,1	331,3
Насыщенные УВ, % мас. Saturates, % wt.	63,2	68,5
Ароматические УВ, % мас. Aromatics, % wt.	34,1	29,9
Смоли, % мас./Resins, % wt.	2,7	1,6

Применение модели показало, что при переработке Сырья 2 с более низким содержанием ароматических углеводородов и смол содержание кокса на катализаторе ниже на 0,15 % мас., вследствие этого активность катализатора при переработке такого сырья выше на 6,7 % относительно Сырья 1. Суммарный выход легких олефинов и бензина выше на 4,9 % мас., чем при переработке Сырья 1, что соответствует 156,2 т/сут.



**Рис. 7.** Влияние типа сырья на выход бензина и легких олефинов (расчет по модели) при прочих равных условиях

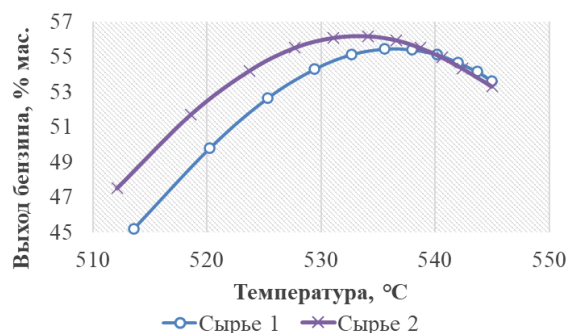
**Fig. 7.** Effect of the type of raw materials on the yield of gasoline and light olefins (calculated by the model), other things being equal



**Рис. 8.** Влияние типа сырья на содержание кокса на катализаторе и его активность (расчет по модели) при прочих равных условиях

**Fig. 8.** Effect of the type of raw material on the content of coke on the catalyst and its activity (calculated by the model), other things being equal

При прогнозировании выхода целевого продукта на всем температурном диапазоне определено, что выход бензина проходит через экстремум для каждого сырья, при этом температуры достижения максимального выхода бензина различаются в зависимости от состава сырья (рис. 9, 10).

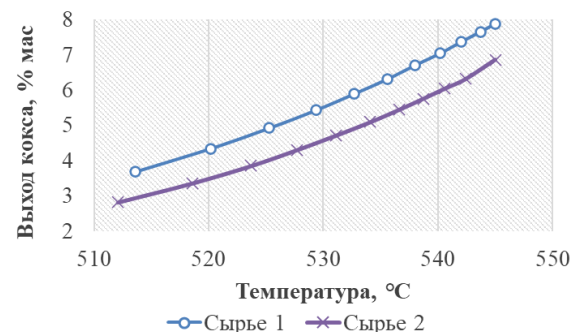


**Рис. 9.** Влияние состава сырья и температуры крекинга на выход бензина (расчет по модели)

**Fig. 9.** Influence of raw material composition and cracking temperature on gasoline yield (model calculation)

Максимальный выход бензина (55,4 и 56,5 % мас. для Сырья 1 и 2, соответственно) достигается при 536 и 534 °C, что объясняется углеводородным составом. Выход кокса при переработке Сырья 2 ниже на 1,3 %

мас. Для достижения температуры крекинга (534 °C – для Сырья 2) кратность циркуляции катализатора необходимо поддерживать на уровне 5,9–10  $T_{кат}/T_{сырья}$  и 6,8–11  $T_{кат}/T_{сырья}$  при снижении температуры сырья с 340 до 240 °C и температуры регенерированного катализатора с 705 до 655 °C.



**Рис. 10.** Влияние состава сырья и температуры крекинга на выход кокса (расчет по модели)

**Fig. 10.** Influence of raw material composition and cracking temperature on coke yield (model calculation)

При дальнейшем повышении температуры выход бензина снижается вследствие крекирования углеводородов, входящих в его состав, с образованием газов крекинга. Вместе с тем конверсия сырья может ограничиваться как производительностью регенератора по коксу, а также обратимой и необратимой дезактивацией катализатора, например, при переработке тяжелого высокоароматизированного сырья, так и термохимическими показателями процесса окисления кокса и избыточным газообразованием при переработке легкого низкачественного сырья. В таком случае основными регулирующими параметрами процесса будут не только параметры кратности циркуляции катализатора, расхода и температуры сырья, но и расход шлама в лифт-реактор для увеличения или снижения нагрузки по коксу.

В данном случае для указанных типов сырья топливный режим достигается без каких-либо существенных ограничений, нефтехимический режим при переработке Сырья 1 ограничен температурой 540 °C вследствие интенсивного коксообразования при более высоких температурах.

В табл. 5 представлен состав бензина крекинга, используемый для решения задачи оптимизации показателей качества товарных бензинов при смешении потоков каталитического крекинга.

При повышении температуры процесса каталитического крекинга на 15 °C наблюдается повышение выхода бензина на 157 т/сут, а его октанового числа – на 0,6 пунктов по исследовательскому методу. Следовательно, можно сделать предположение о том, что полученный поток бензина крекинга будет более ценен для процесса компаундирования и может быть вовлечен в большей степени в рецептуры для получения высокооктановых товарных бензинов.

Для определения оптимальных рецептур смешения при компаундировании потоков с учетом изменения углеводородного состава перерабатываемого сы-



рья и режимов в процессах риформинга, каталитического крекинга, изомеризации совместно использовались разработанные математические модели процессов, реализованные в виде отдельных программных модулей. Выполнены прогнозные расчеты оптимальных рецептур смешения. В табл. 6 представлены основные параметры других потоков, входящих в рецептуру получаемого бензина. Результаты расчета представлены в табл. 7, 8.

Как видно из приведенных результатов расчета, вовлечение потока каталитического крекинга в рецептуры бензинов увеличивается. Так как себестоимость данного потока ниже по сравнению с остальными потоками (кроме прямогонных бензинов), это ведет к повышению экономической эффективности производства товарных бензинов. Себестоимость полученных бензинов снижается на величину от 0,2 до 0,9 %.

Предыдущие расчеты проведены с учетом вовлечения потока бензиновой фракции – продукта установки каталитического крекинга – при использовании относительно тяжелого вида сырья. Далее проведены аналогичные исследования для продукта каталитического

крекинга при использовании более легкого сырья (табл. 9).

**Таблица 5.** Состав бензина каталитического крекинга (расчет по модели)

**Table 5.** Composition of the catalytic cracking gasoline (model calculation)

Группа углеводородов Hydrocarbons group	Состав бензиновой фракции, % мас. Composition of gasoline fraction, % wt.		Относительная погрешность, % мас. Relative error, wt. %
	до оптимизации (Продукт 1) Before optimization (Product 1)	после оптимизации (Продукт 2) After optimization (Product 2)	
Парафины/Paraffins	3,87	3,18	± не более 3 ± not more than 3
Изопарафины/Izoparaffins	33,32	34,21	
Олефины/Olefins	23,22	19,20	
Нафтенy/Naphthenes	9,36	9,02	
Ароматические УВ Aromatics	30,23	34,39	

**Таблица 6.** Основные параметры других потоков, входящих в рецептуру получаемого бензина

**Table 6.** Main parameters of other flows included in the formulation of the resulting gasoline

Параметр/Parameter	Значение/Value											
Поток/Flow	1*	2*	3*	4*	5*	6*	7*	8*	9*	10*	11*	12*
ОЧИМ/RON	49,4	60,4	125	93,6	59,3	96,6	89,2	90,7	91,47	103,8	93,96	117
ОЧММ/MON	45,8	55,6	110	90,1	54,9	93,9	80,6	87,9	89,33	94,57	86,01	104
Давление насыщенных паров, кПа Equilibrium vapour pressure, kPa	19,4	24,6	40,3	355,4	34,2	46,4	54,8	63,7	140,6	23,76	34,47	7,15
Плотность, кг/м <sup>3</sup> /Density, kg/m <sup>3</sup>	683,1	713,8	717,5	559,8	716,3	678,6	722,4	639	601,9	793,8	771,9	854,7
Вязкость, сПа/Viscosity, sPa	29,9	42,8	25,9	15,7	41,7	35,4	42,11	29,3	18,44	52,41	47,18	47
Н-парафины, %мас./Nparaffins, % wt.	22,9	19,8	0	100	25,1	5,12	4,45	0,54	5,206	4,1	9,86	0
Изо-парафины, % мас./Izo-paraffins, % wt.	61,2	21,3	0	0	28,5	94,9	31,36	93,8	94,79	10,3	23,46	0
Нафтенy, % мас./Naphthenes, % wt.	13,9	57,3	0	0	41,5	0	13,41	5,49	0	1,20	1,48	0
Олефины, % мас./Olefins, % wt.	1,4	0	0	0	0,03	0	26,87	0	0	0	0	0
Бензол, % мас./Benzene, % wt.	0	1,4	0	0	0,3	0	0,70	0	0	2,10	2,1	0
Ароматика, % мас./Aromatics, % wt.	0,5	1,5	0	0	5,04	0	23,77	0,06	0	80,6	63,3	100
Сера, % мас./Sulfur compounds, % wt.	0	0	0	0	0	0	0,001	0	0	0	0	0
* 1 – Бензин (КПА С400 Рафинат)/Gasoline (KPA C400 Rafinate) 2 – Бензин (КПА С-100 фр.62-85)/Gasoline (KPA C-100 fr.62-85) 3 – МТБЭ/MTBE 4 – Н-бутан/N-butane 5 – Прямогонный бензин (АВТ-10 фр.нк.62)/Straight-run gasoline (AVT-10 fr.IBP.62) 6 – Алкилбензин/Alkylgasoline 7 – Гидроочищенный бензин каталитического крекинга/Hydrotreated gasoline from catalytic cracking unit 8 – Изомеризат установки Изомалк-2/Izomerizate from Izomulk-2 unit 9 – Изопентан/Izopentane 10 – Риформат установки Л-35-11-1000/Reformate from L-35-11-1000 11 – Риформат установки Л-35-11-600/Reformate from L-35-11-600 12 – Толуол концентрат/Toluene concentrate												

**Таблица 7.** Влияние состава потока каталитического крекинга на товарные качества получаемого бензина

**Table 7.** Influence of the composition of the catalytic cracking flow on the commercial qualities of the resulting gasoline

Параметр/Parameter	Продукт 1/Product 1			Продукт 2/Product 2		
ОЧИМ/RON	92	95	98	92	95	98
ОЧММ/MON	85	88	91	85	88	91
Давление насыщенных паров, кПа/Equilibrium vapour pressure, kPa	61,69	58,07	55,05	61,29	57,69	54,83
Содержание бензола, % мас. Benzene content, % wt.	0,99	0,91	0,82	1,00	0,94	0,84
Содержание ароматики, % мас. Aromatic content, % wt.	34,01	35,00	34,76	34,73	35,00	34,53
Содержание олефинов, % мас. Olefins content, % wt.	12,02	10,29	5,57	11,96	9,73	5,08
Содержание серы, % мас. Sulfur compounds content, % wt.	0,0003	0,0003	0,0001	0,0003	0,0003	0,0001

**Таблица 8.** Оптимальные рецептуры смешения потоков

**Table 8.** Optimal formulation of the mixing flows

Параметр Parameter	Продукт 1/Product 1, %			Продукт 2/Product 2, %		
	Бензин, ОЧИМ/Gasoline, RON			Бензин, ОЧИМ/Gasoline, RON		
	92	95	98	92	95	98
Гидроочищенный бензин каталитического крекинга Hydrotreated gasoline from catalytic cracking unit	32,7	26,9	11,1	34,1	26,5	10,8
Бензин каталитического крекинга/Catalytic cracking gasoline	13,8	13,2	11,1	14,4	13,5	11,4
Риформат установки Л-35-11-1000/Reformate from L-35-11-1000	21,4	20,9	22,3	22,3	20,9	22,3
Риформат установки Л-35-11-600/Reformate from L-35-11-600	7,5	7,1	7,9	5,6	7,1	7,9
Толуол концентрат/Toluene concentrate	0	3,3	5,8	0	2,7	5,1
Изомеризат установки Изомалк-2/Izomerizate from Izomulk-2 unit	6,9	5	11	6,9	5	11
Изопентан/Izopentane	5,1	5	11,5	5,1	5	11,5
Алкилбензин/Alkylgasoline	6,9	12,9	12,8	5,6	12,9	13,5
МТБЭ/MTBE	0	2,5	6,5	0	2,9	6,6
Прямогонный бензин (АВТ-10 фр.нк.62) Straight-run gasoline (AVT-10 fr.IBP.62)	1,1	0,4	0	1,2	0,5	0
Бензин (КПА С-100 фр.62-85)/Gasoline (KPA C-100 fr.62-85)	1,1	0,4	0	1,2	0,5	0
Бензин (КПА С400 Рафинат)/Gasoline (KPA C400 Rafinate)	1,0	0,4	0	1,1	0,5	0
Н-бутан/N-butane	2,5	2	0	2,5	2	0

**Таблица 9.** Состав бензиновой фракции каталитического крекинга (при переработке легкого сырья)

**Table 9.** Composition of the gasoline fraction of catalytic cracking (in the processing of light raw materials)

Группа углеводородов Hydrocarbons group	Состав бензиновой фракции, % мас. Composition of gasoline fraction, % wt.	
	до оптимизации (Продукт 1) before optimization (Product 1)	после оптимизации (Продукт 2) after optimization (Product 2)
Парафины/Paraffins	4,20	3,73
Изопарафины/Izoparaffins	35,19	35,22
Олефины/Olefins	22,60	20,00
Нафтенy/Naphthenes	9,59	9,22
Ароматические УВ Aromatics	28,41	31,83

В табл. 10, 11 представлены результаты расчетов, показывающие влияние состава потока бензиновой фракции каталитического крекинга на рецептуру и товарные качества получаемого товарного бензина при использовании более легкого сырья на установке крекинга.

При повышении температуры процесса каталитического крекинга на 15 °С при переработке более легкого сырья выход бензина повышается на 143 т/сут и его октановое число увеличивается на 0,4 пункта по исследовательскому методу. Таким образом, полученный поток бензина крекинга из легкого сырья также будет ценен для процесса компаундирования и может быть вовлечен в рецептуры для получения высокооктановых товарных бензинов.

**Таблица 10.** Влияние состава потока каталитического крекинга на товарные качества получаемого бензина

**Table 10.** Influence of the composition of the catalytic cracking flow on the commercial qualities of the resulting gasoline

Параметр/Parameter	Продукт 1/Product 1			Продукт 2/Product 2		
	92	95	98	92	95	98
ОЧИМ/RON	92	95	98	92	95	98
ОЧММ/MON	85	88	91	85	88	91
Давление насыщенных паров, кПа/Equilibrium vapour pressure, kPa	61,73	58,13	55,04	61,76	57,83	54,89
Содержание бензола, % мас./Benzene content, % wt.	1	0,91	0,82	1	0,92	0,83
Содержание ароматики, % мас./Aromatic content, % wt.	34,14	34,97	34,74	34,14	35,00	34,52
Содержание олефинов, % мас./Olefins content, % wt.	11,94	10,19	5,48	12,07	9,81	5,15
Содержание серы, % мас./Sulfur compounds content, % wt.	0,0003	0,0003	0,0001	0,0003	0,0003	0,0001

**Таблица 11.** Влияние состава потока каталитического крекинга на рецептуру получаемого бензина

**Table 11.** Influence of the composition of the catalytic cracking flow on the formulation of the resulting gasoline

Параметр Parameter	Продукт 1/Product 1, %			Продукт 2/Product 2, %		
	Бензин, ОЧИМ/Gasoline, RON			Бензин, ОЧИМ/Gasoline, RON		
	92	95	98	92	95	98
Гидроочищенный бензин каталитического крекинга Hydrotreated gasoline from catalytic cracking unit	32,7	26,5	11,1	34,1	26,2	10,7
Бензин каталитического крекинга/Catalytic cracking gasoline	13,8	13,5	11,1	14,4	13,9	11,3
Риформат установки Л-35-11-1000/Reformate from L-35-11-1000	21,7	20,9	22,3	20,8	20,9	22,3
Риформат установки Л-35-11-600/Reformate from L-35-11-600	7,6	7,1	7,9	7,2	7,1	7,9
Толуол концентрат/Toluene concentrate	0	3,4	6	0	3	5,4
Изомеризат установки Изомалк-2/Izomerizate from Izomulk-2 unit	6,9	5	11	6,9	5	11
Изопентан/Izopentane	5,1	5	11,5	5,1	5	11,5
Алкилбензин/Alkylgasoline	6,7	12,9	12,6	6,1	12,9	13,2
МТБЭ/MTBE	0	2,6	6,6	0	2,8	6,7
Прямогонный бензин (АВТ-10 фр.нк.62) Straight-rungasoline (AVT-10 fr.IBP.62)	1	0,3	0	0,9	0,4	0
Бензин (КПА С-100 фр.62-85)/Gasoline (KPA C-100 fr.62-85)	1	0,3	0	0,9	0,4	0
Бензин (КПА С400 Рафинат)/Gasoline (KPA C400 Rafinate)	0,9	0,3	0	0,9	0,4	0
Н-бутан/N-butane	2,5	2	0	2,5	2	0

Как видно из приведенных выше результатов расчетов, существует возможность увеличения доли потока бензиновой фракции каталитического крекинга в рецептуру приготовления товарного бензина. Себестоимость производства моторного топлива в этом случае снижается на величину от 0,1 до 1,0 %.

#### Заключение

Применение инженерных математических моделей процессов нефтепереработки позволяет снизить процент вовлечения дорогостоящих компонентов (присадки, добавки) в производстве товарных бензинов за счёт увеличения доли риформата и бензина каталитического крекинга в составе смесового топлива, что дает возможность значительно увеличить экономическую эффективность: себестоимость полученных бензинов снижается на величину от 0,1 до 1,0 %.

Прогнозировать состав бензинов с заданными свойствами можно при использовании компонентов, для которых известны характеристики: октановые числа, выход, содержание ароматических углеводо-

родов и бензола, олефинов и серы. Эффективность топлива зависит как от свойств отдельных компонентов, так и от свойств топливных композиций, которые определяются химическим взаимодействием углеводородов как на стадии каталитических превращений в процессах риформинга, изомеризации, каталитического крекинга и гидрокрекинга, так и на стадии компаундирования.

Расчёт рецептур товарных бензинов с использованием инженерных моделей с учётом изменения состава перерабатываемого сырья позволяет получать моторные топлива, полностью соответствующие современным экологическим стандартам при снижении себестоимости готовой продукции за счёт экономии расхода дорогостоящих потоков, а также уменьшения запаса по показателям качества (октановое число бензинов, содержание в их составе серы, ароматических углеводородов).

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-71-10015-П, <https://rscf.ru/project/19-71-10015/>.*

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Aspen HYSYS. URL: <https://www.aspentech.com/en/products/engineering/aspen-hysys> (дата обращения 30.07.2022).
2. Honeywell. URL: <https://www.honeywell.com/us/en> (дата обращения 30.07.2022).
3. ProSimPlus. URL: <https://www.prosim.net/produit/prosimplus-simulation-optimisation-procede-industriel/> (дата обращения 30.07.2022).
4. Lara P., Sanchez M., Villalobos J. Enterprise modeling and operational technologies (OT) application in the oil and gas industry // Journal of Industrial Information Integration. – 2020. – V. 19. – № 100160. – P. 1–15.
5. A framework for assessing capability in organisations using enterprise models / M. Romero, W. Guedria, H. Panetto, B. Barafort // Journal of Industrial Information Integration. – 2022. – V. 27. – № 100297. – P. 1–20.
6. Vernadat F. Enterprise modelling: research review and outlook // Computers in Industry. – 2020. – V. 122. – № 103265. – P. 1–22.
7. Deep hydrodesulfurization of gas oils with high sulfur content: experiment and kinetic modeling / P.V. Aleksandrov, S.I. Reshetnikov, G.A. Bukhtiyarova, A.S. Noskov // Chemical Engineering Journal. – 2022. – V. 446. – Pt. 3. – 137059. – P. 1–11.
8. Mathematical modeling of diesel autothermal reformer geometry modifications / S.V. Zazhigalov, V.A. Shilov, V.N. Rogozhnikov, D.I. Potemkin, V.A. Sobyatin, A.N. Zagoruiko, P.V. Snytnikov // Chemical Engineering Journal. – 2022. – V. 442. – Pt. 1. – 136160. – P. 1–10.
9. Multi-criterion optimization of a catalytic reforming reactor unit using a genetic algorithm / R.Z. Zainullin, K.F. Koledina, I.M. Gubaidullin, A.N. Zagoruiko, R.I. Faskhutdinova // Catalysis in Industry. – 2020. – V. 12. – № 2. – P. 133–140.
10. Дюсембаева А.А., Вершинин В.И. Моделирование каталитического риформинга: влияние вариаций кинетических параметров на ожидаемый состав продуктов // Кинетика и катализ. – 2019. – Т. 60. – № 1. – С. 129–135.
11. CFD modeling of the coke combustion in an industrial FCC regenerator / B. Amblard, R. Singh, E. Gbordzoe, L. Raynal // Chemical Engineering Science. – 2016. – V. 170. – P. 731–742.
12. Idris M.N., Burn A. CFD Modelling gas-solid flows in CFB/FCC riser reactors: simulation using Kinetic Theory of Granular Flow (KTGF) in a fully developed flow situation // The 100 years of American institute of chemical engineers (AIChE): AIChE 2008 Annual International Conference. – USA, 2008. – P. 1–19.
13. Моделирующие программы для нефтяной и газовой промышленности. URL: <https://www.interface.ru/home.asp?artId=39512&ysclid=17u5c1ub6e624884384> (дата обращения: 09.09.2022)
14. RTSim разработчик компьютерных тренажеров для нефтегазового сектора. URL: <https://rtsim.ru/about?ysclid=17u5ppg1lx755380894> (дата обращения: 09.09.2022)
15. Аэрогаз. Программный комплекс AEROSYM – замена Aspen HYSYS. URL: <http://aerogas.ru/aerosym.html> (дата обращения: 09.09.2022)
16. Modeling of motor gasoline components complex production / E. Ivanchina, V. Chuzlov, E. Ivashkina, G. Nazarova, A. Tyumentsev, E. Vymyatnin // Catalysis Today. – 2020. – V. 347. – P. 211–218.
17. Formation of the component composition of blended hydrocarbon fuels as the problem of the multi-objective optimization / E.D. Ivanchina, E.N. Ivashkina, V.A. Chuzlov, N.S. Belinskaya, A.Y. Dementyev // Chemical Engineering Journal. – 2020. – V. 383. – 121283. – P. 1–9.
18. Mathematical modeling and optimization of semi-regenerative catalytic reforming of naphtha / E. Ivanchina, E. Chernyakova, I. Pchelintseva, D. Poluboyartsev // Oil and Gas Science and Technology. – 2021. – V. 76. – P. 1–12.
19. Murzin D.Y. Chemical reaction technology. 2nd ed. – Berlin, Germany: De Gruyter, 2022. – 638 p.
20. Modeling, simulation, and optimization for producing ultra-low sulfur and high-octane number gasoline by separation and conversion of fluid catalytic cracking naphtha / Y. Zhang, M. Liu, L. Zhao, S. Liu, J. Gao, C. Xu, M. Ma, Q. Meng // Fuel. – 2021. – V. 299. – № 120740. – P. 1–12.
21. A hybrid deep learning and mechanistic kinetics model for the prediction of fluid catalytic cracking performance / F. Yang, C. Dai, J. Tang, J. Xuan, J. Cao // Chemical Engineering Research and Design. – 2020. – V. 155. – P. 202–210.

*Поступила: 10.08.2022 г.*

*Прошла рецензирование: 24.01.2023 г.*

#### Информация об авторах

**Ивашкина Е.Н.**, доктор технических наук, профессор отделения химической инженерии Инженерной школы природных ресурсов Национального исследовательского Томского политехнического университета.

**Кокшаров А.Г.**, начальник установки ООО «КИНЕФ».

**Иванчина Э.Д.**, доктор технических наук, профессор отделения химической инженерии Инженерной школы природных ресурсов Национального исследовательского Томского политехнического университета.

**Чузлов В.А.**, кандидат технических наук, доцент отделения химической инженерии Инженерной школы природных ресурсов Национального исследовательского Томского политехнического университета.

**Назарова Г.Ю.**, кандидат технических наук, доцент отделения химической инженерии Инженерной школы природных ресурсов Национального исследовательского Томского политехнического университета.

**Чернякова Е.С.**, кандидат технических наук, доцент отделения химической инженерии Инженерной школы природных ресурсов Национального исследовательского Томского политехнического университета.

**Долганов И.М.**, кандидат технических наук, доцент отделения химической инженерии Инженерной школы природных ресурсов Национального исследовательского Томского политехнического университета.

UDC 66.01

## ENGINEERING MODELS OF OIL REFINING: INCREASING THE EFFICIENCY OF MULTI-STAGE GASOLINE PRODUCTION

**Elena N. Ivashkina**<sup>1</sup>,  
ivashkinaen@tpu.ru

**Anton G. Koksharov**<sup>2</sup>,  
antonk11@mail.ru

**Emiliya D. Ivanchina**<sup>1</sup>

**Vyacheslav A. Chuzlov**<sup>1</sup>,  
chuva@tpu.ru

**Galina Y. Nazarova**<sup>1</sup>,  
silko@tpu.ru

**Ekaterina S. Chernyakova**<sup>1</sup>,  
sharova@tpu.ru

**Igor M. Dolganov**<sup>1</sup>,  
dolganovim@tpu.ru

<sup>1</sup> National Research Tomsk Polytechnic University,  
30, Lenin avenue, Tomsk, 634050, Russia.

<sup>2</sup> KINEF LLC,  
1, Entuziastov road, Kirishi, 187110 Russia.

**The relevance** of this study is caused by the need for import substitution of software in the field of design, modeling and optimization of the gas and oil processing. Almost all software for modeling used at oil and gas entities are the developments of the USA, Canada, Great Britain and other countries. In the current conditions of sanctions risks on using imported software for modeling technological processes, the development and rapid adaptation of engineering mathematical models of all basic oil refining processes are an extremely urgent task. These models will further become the basis of Russian import-substituting software products. Over the course of 30 years, the National Research Tomsk Polytechnic University has been researching the processes of the motor fuels production. On the basis of these studies the reliable mathematical models have been developed for technologies such as catalytic reforming of gasoline, isomerization of the hydrocarbons pentane-hexane fraction, catalytic cracking of vacuum distillate and mixed petroleum feedstock, hydroprocessing of petroleum fractions, compounding of high-octane gasolines, and others. Distinctive features of the developed mathematical models are related to following: firstly, they are built on the basis of real industrial data on the operation units at various refineries and, secondly, they take into account the main fundamental physical and chemical laws of reaction mechanisms, the catalyst deactivation as well as the macrokinetic factors of motor fuel production processes. The solution of multicriteria problem of optimizing the technology of preparation of motor fuels (gasoline and diesel fuels) is possible using the method of mathematical modeling on a physical and chemical basis. This approach takes into account the thermodynamics and kinetics of hydrocarbon conversions on the catalyst surface, as well as the non-stationarity of the processes due to coking, aging and poisoning by harmful impurities of the catalyst, changes in the chemical composition of the feedstock.

**The aim** of this study is to develop the technical solutions aimed at improving the efficiency of multi-stage gasoline production using the engineering models of oil refining processes.

**The method** of the research is based on using the mathematical modelling method for multi-stage processes of petroleum feedstock refining. The group and individual composition of various petroleum fractions determined by chromatographic methods, were used as an initial data.

**Results.** The effect of the component composition of the processed feedstock of catalytic reforming on the qualitative and quantitative properties of the components of commercial gasoline was estimated and predicted. The use of the catalytic cracking model showed that when processing the feedstock with a lower content of aromatic hydrocarbons and resins the coke content on the catalyst is lower by 0,15 wt. This leads to increasing the catalyst activity and the desired product yields by 6,7 % and 4,9 wt. % in comparison with the feedstock with higher content of resins and aromatics. The maximum gasoline yield for two types of the feedstocks (55,4 and 56,5 % wt.) which is achieved at 536,0 and 534,0 °C was determined according to their hydrocarbon compositions. The predictive calculations with an assessment of how the composition of the catalytic cracking gasoline influences the formulation and commercial quality of the commercial gasoline using the lighter catalytic cracking feedstock, were performed. The possibility of increasing the amount of the catalytic cracking gasoline into the commercial gasoline formula is shown. The cost of motor fuel production in this case is reduced from 0,1 to 1,0 %.

### Key words:

engineering models, catalytic reforming, catalytic cracking, gasoline, optimization, efficiency improvement.

*The research was supported by RSCF according to the research project no. 19-71-10015-II.*

### REFERENCES

1. Aspen HYSYS. Available at: <https://www.aspentech.com/en/products/engineering/aspen-hysys> (accessed 30 July 2022).
2. Honeywell. Available at: <https://www.honeywell.com/us/en> (accessed 30 July 2022).
3. ProSimPlus. Available at: <https://www.prosim.net/produit/prosimplus-simulation-optimisation-procede-industriel/> (accessed 30 July 2022).
4. Aleksandrov P.V., Reshetnikov S.I., Bukhtiyarova G.A., Noskov A.S. Deep hydrodesulfurization of gas oils with high sulfur content: experiment and kinetic modeling. *Chemical Engineering Journal*, 2022, vol. 446, P. 3, no. 137059, pp. 1–11.
5. Lara P., Sanchez M., Villalobos J. Enterprise modeling and operational technologies (OT) application in the oil and gas industry. *Journal of Industrial Information Integration*, 2020, vol. 19, no. 100160, pp. 1–15.
6. Romero M., Guedria W., Panetto H., Barafort B. A framework for assessing capability in organisations using enterprise models. *Journal of Industrial Information Integration*, 2022, vol. 27, no. 100297, pp. 1–20.
7. Vernadat F. Enterprise modelling: research review and outlook. *Computers in Industry*, 2020, vol. 122, no. 103265, pp. 1–22.



8. Zazhigalov S.V., Shilov V.A., Rogozhnikov V.N., Potemkin D.I., Sobyatin V.A., Zagoruiko A.N., Snytnikov P.V. Mathematical modeling of diesel autothermal reformer geometry modifications. *Chemical Engineering Journal*, 2022, vol. 442, P. 1, no. 136160, pp. 1–10.
9. Zainullin R.Z., Koledina K.F., Gubaidullin I.M., Zagoruiko A.N., Faskhutdinova R.I. Multi-criterion optimization of a catalytic reforming reactor unit using a genetic algorithm. *Catalysis in Industry*, 2020, vol. 12, no. 2, pp. 133–140.
10. Dyusembaeva A.A., Vershinin V.I. Modeling catalytic reforming: the effect of variations in kinetic parameters on the expected composition of products. *Kinetics and catalysis*, 2019, vol. 60, no. 1, pp. 129–135. In Rus.
11. Amblard B., Singh R., Gbordzoe E., Raynal L. CFD modeling of the coke combustion in an industrial FCC regenerator. *Chemical Engineering Science*, 2016, vol. 170, pp. 731–742.
12. Idris M.N., Burn A. CFD modelling gas-solid flows in CFB/FCC riser reactors: simulation using Kinetic Theory of Granular Flow (KTGF) in a fully developed flow situation. *The 100 years of American institute of chemical engineers (AIChE): AIChE 2008 Annual International Conference*. USA, 2008, pp. 1–19.
13. *Simulation programs for the oil and gas industry*. Available at: <https://www.interface.ru/home.asp?artId=39512&ysclid=l7u5c1ub6e624884384> (accessed 9 September 2022).
14. *RTSim developer of computer simulators for the oil and gas sector*. Available at: <https://rtsim.ru/about?ysclid=l7u5ppg1lx755380894> (accessed 9 September 2022).
15. Aerogaz. *The AEROSYM software package is a replacement for Aspen HYSYS*. Available at: <http://aerogas.ru/aerosym.html> (accessed 9 September 2022).
16. Ivanchina E., Chuzlov V., Ivashkina E., Nazarova G., Tyumentsev A., Vymyatnin E. Modeling of motor gasoline components complex production. *Catalysis Today*, 2020, vol. 347, pp. 211–218.
17. Ivanchina E.D., Ivashkina E.N., Chuzlov V.A., Belinskaya N.S., Dementyev A.Y. Formation of the component composition of blended hydrocarbon fuels as the problem of the multi-objective optimization. *Chemical Engineering Journal*, 2020, vol. 383, no. 121283, pp. 1–9.
18. Ivanchina E., Chernyakova E., Pchelintseva I., Poluboyartsev D. Mathematical modeling and optimization of semi-regenerative catalytic reforming of naphtha. *Oil and Gas Science and Technology*, 2021, vol. 76, pp. 1–12.
19. Murzin D.Y. *Chemical Reaction Technology*. 2<sup>nd</sup> ed. Berlin, Germany, De Gruyter, 2022. 638 p.
20. Zhang Y., Liu M., Zhao L., Liu S., Gao J., Xu C., Ma M., Meng Q. Modeling, simulation, and optimization for producing ultra-low sulfur and high-octane number gasoline by separation and conversion of fluid catalytic cracking naphtha. *Fuel*, 2021, vol. 299, no. 120740, pp. 1–12.
21. Yang F., Dai C., Tang J., Xuan J., Cao J. A hybrid deep learning and mechanistic kinetics model for the prediction of fluid catalytic cracking performance. *Chemical Engineering Research and Design*, 2020, vol. 155, pp. 202–210.

Received: 10 August 2022.  
Reviewed: 24 January 2023.

#### Information about the authors

**Elena N. Ivashkina**, Dr. Sc., professor, National Research Tomsk Polytechnic University.

**Anton G. Koksharov**, head of the installation of KINEF LLC.

**Emiliya D. Ivanchina**, Dr. Sc., professor, National Research Tomsk Polytechnic University.

**Vyacheslav A. Chuzlov**, Cand. Sc., associate professor, National Research Tomsk Polytechnic University.

**Galina Y. Nazarova**, Cand. Sc., associate professor, National Research Tomsk Polytechnic University.

**Ekaterina S. Chernyakova**, Cand. Sc., associate professor, National Research Tomsk Polytechnic University.

**Igor M. Dolganov**, Cand. Sc., associate professor, National Research Tomsk Polytechnic University.