

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ИЗОМЕРИЗАЦИИ ГЕПТАНОВОЙ ФРАКЦИИ
Копычева У.Н.

Научный руководитель доцент В.А. Чузлов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

Ключевой продукт нефтеперерабатывающей индустрии – это товарные бензины, они занимают более 30 % потребительского рынка. Повестка ESG диктует тренд на повышение экологичности выпускаемой продукции, поэтому важно усовершенствовать действующие процессы и создавать новые технологии, соответствующие современным требованиям рынка. Одним из таких процессов является каталитическая изомеризация компонентов C_7 - C_8 , инновационная технология, направленная на выпуск экологически чистых и высокооктановых компонентов товарного бензина. В данном процессе, в качестве сырья, используется фракция $62-105^{\circ}C$ ($70-105^{\circ}C$), продуктом являются разветвлённые углеводороды C_7 - C_8 , имеющие высокое значение октанового числа. Технология изомеризации гептан-октановой фракции не имеет промышленной реализации в России, поэтому необходимо создать математическую модель нового производства, для его изучения, анализа, оптимизации и масштабирования.

Исходными данными для создания модели являются данные с лабораторной установки каталитической изомеризации фракции C_7 . Концептуальная схема промышленного процесса представлена на рис. 1. Продукты данного процесса имеют низкое содержание ароматических компонентов в своем составе.

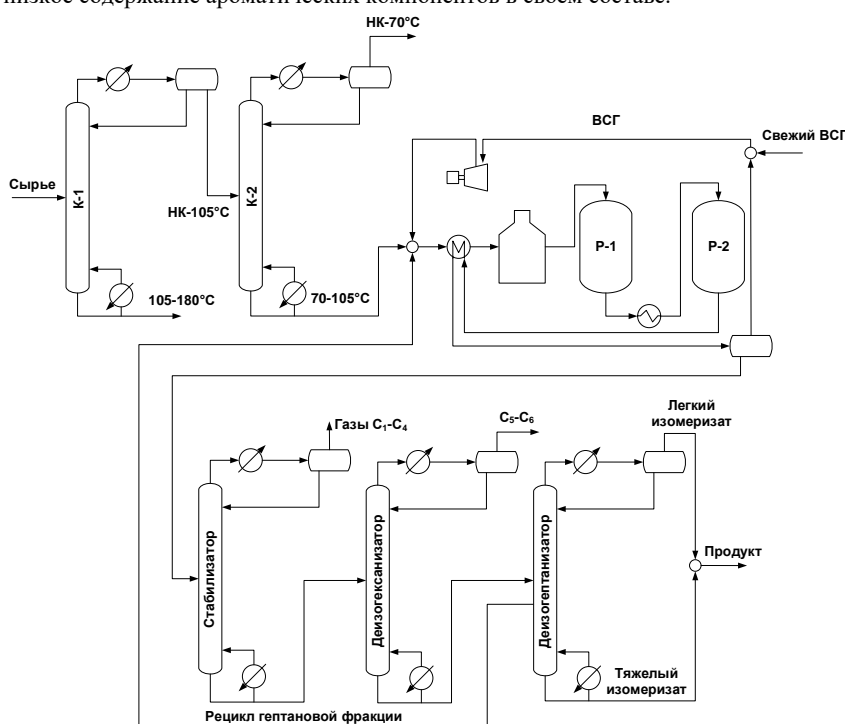


Рис. 1. Концептуальная схема технологического процесса изомеризации гептановой фракции

Технологическая установка включает в себя блок ректификации гидроочищенного сырья, реакторный блок и блок стабилизации изомеризата. Среднее октановое число продуктовой фракции равно 82 пункта.

Ректификационная колонна K-1 служит для отделения фракции НК-105 °С из сырьевого потока, поступающего с блока гидроочистки. Дистиллят с колонны K-1 поступает на разделение в ректификационную колонну K-2, где кубом колонны выделяется фракция 70-105 °С. После смешения с ВСГ и рециркулирующим потоком, гептановая фракция поступает в реакторный блок, который включает в себя два последовательно расположенных реактора изомеризации. После рекуперации тепла, изомеризат-сырец направляется на блок стабилизации. Данный блок включает в себя колонну-стабилизатор для выделения легких газов C_1 - C_4 , колонну-деизогексанизатор и колонну-деизогептанализатор, где происходит разделение малоразветвленных компонентов и продуктового изомеризата.

В основу математической модели входит формализованная схема химических реакций, протекающих в моделируемом технологическом процессе. При составлении перечня химических реакций, учитывается термодинамика процесса каталитической изомеризации компонентов C_7 и данные аналитического контроля, полученные с лабораторной установки.

Математическая модель процесса изомеризации гептановой фракции представлена системой дифференциальных уравнений, описывающие реактор идеального вытеснения. В модели учтены уравнения материального и теплового баланса. Программная реализация модели выполнена на языке программирования высокого уровня. Кинетические параметры предложенной математической модели были определены решением обратной кинетической задачи.

СЕКЦИЯ 8. ХИМИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ ПЕРЕРАБОТКИ МИНЕРАЛЬНОГО И УГЛЕВОДОРОДНОГО СЫРЬЯ

Сходимость разработанной модели процесса каталитической изомеризации гептановой фракции была оценена путем сопоставления расчетных данных, полученных в результате моделирования, и набора данных аналитического контроля с лабораторной установки (рис. 2).

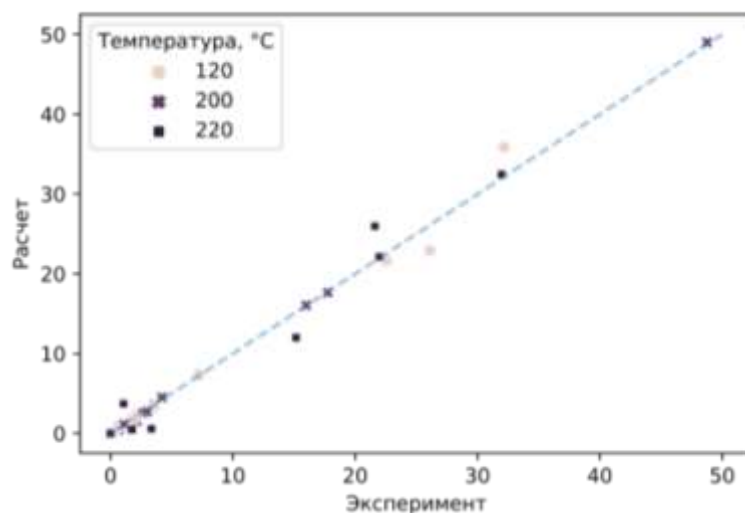


Рис. 2. Оценка адекватности разработанной модели

По результатам анализа расчетных и экспериментальных данных, абсолютное отклонение расчетных значений компонентного состава продукта не превышает 5 %, что позволяет применять разработанную математическую модель для исследования процесса изомеризации C_7 . В дальнейшем модель может быть также использована при масштабировании технологии.

В разработанной математической модели возможно проводить цифровые эксперименты для подбора оптимального режима, а также возможно оценить влияния варьируемых параметров на качество получаемого изомеризата, например: компонентного состава сырья, температурного профиля в реакционной зоне, давления и соотношения ВСГ/углеводороды.

На основании проведенных исследований в математической модели сформированы рекомендации для повышения эффективности технологического процесса:

1. Если в составе сырья более 50 % масс. компонентов C_7+ , то рекомендуется поддерживать температуру в реакторе изомеризации в интервале 185–190 °С для снижения скорости побочных реакций гидрокрекинга, при этом повышается конверсия, увеличивая октановое число по исследовательскому методу до 87 пунктов;

2. Для сырьевого потока, включающего в 35–45 % масс. компонентов C_6 рекомендуется повышение температуры до 210 °С с целью увеличения конверсии $n-C_6$ в разветвленные изомеры. Для данного типа сырья повышение температуры процесса приводит к незначительному снижению выхода изомеризата, однако прирост октанового числа составляет примерно 2 пункта по исследовательскому методу.

3. Сырье с содержанием ароматических и нафтеновых компонентов в диапазоне 20–25 % масс. требует ведение процесса изомеризации при повышенных температурах (215–225 °С), это позволяет интенсифицировать реакции превращения нафтенов в изо-алканы.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации МК-2911.2022.4.

Литература

1. Ахметов С.А. Технология глубокой переработки нефти и газа: Учеб. Пособие для ВУЗов. - Уфа: Изд. - «Гилем», 2002. - 672 с.
2. Ахметов С. А. и др. Технология, экономика и автоматизация процессов переработки нефти и газа // М.: Химия. – 2005. – Т. 736. – С. 6.
3. Шакун А. Н., Федорова М. Л. Способ изомеризации легких бензиновых фракций, содержащих C_7 - C_8 парафиновые углеводороды. – 2011.