ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА СЕРНОКИСЛОТНОГО АЛКИЛИРОВАНИЯ ИЗОБУТАНА ОЛЕФИНАМИ ПУТЕМ РАЗРАБОТКИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

@ И.А. Арефьев, Л.В. Еникеева, М.Р. Агзамова

Purgonga@gmail.com, leniza.enikeeva@yandex.ru

УДК 66.011

DOI: 10.33184/mnkuomsh2t-2021-10-06.54.

На основе литературного анализа возможных схем химических превращений, механизма процесса и литературных данных построена математическая модель реакторного блока процесса и определены кинетические параметры, протекающих реакций. Проведены расчёты по поиску оптимального соотношения изобутан:олефин в сырье для увеличения выхода целевых и снижения выхода побочных продуктов процесса сернокислотного алкилирования.

Ключевые слова: алкилирование, математическая модель, кинетическая модель, химическая реакция.

Optimization of the process of sulfuric acid alkylation of isobutane with olefins by developing a mathematical model

Based on the literary analysis of possible schemes of chemical transformations, the mechanism of the process and the literary data, a mathematical model of the reactor unit of the process is constructed and the kinetic parameters of the reactions are determined. Calculations are carried out to find the optimal ratio of isobutane:olefin in raw materials to increase the yield of target and reduce the yield of by-products of the sulfuric acid alkylation process.

Keywords: alkylation, mathematical model, kinetic model, chemical reaction.

В связи с общемировым ужесточением эксплуатационных, а также экологических характеристик автомобильного топлива увеличилось количество процессов, которые повышают степень переработки нефти, и способствуют увеличению октанового числа бензинов. Международные

Арефьев Илья Александрович, аспирант Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН (Уфа, Россия); Arefyev Ilya Alexandrovich (Institute of Petrochemistry and Catalysis, Russian Academy of Sciences, Ufa, Russia)

Еникеева Лениза Васимовна, к.ф.-м.н. Новосибирский национальный исследовательский государственный университет (Новосибирск, Россия), УГНТУ (Уфа, Россия); Enikeeva Leniza Vasimovna (Novosibirsk National Research State University, Novosibirsk Russian, Ufa state oil technical University Ufa, Russia)

Агзамова Миляуша Раиловна, магистр УГНТУ (Уфа, Россия); Agzamova Milyausha Railovna (Ufa state oil technical University Ufa, Russia)

и отечественные нормативы существенно ограничивают содержание ароматических углеводов, бензола, олефинов и серы в топливе.

В середине XX века на этапе проектирования большинства промышленных технологических установок, глубокому изучению механизма процессов уделялось недостаточно внимания. В настоящее же время развитые информационные технологии, привели к созданию универсальных программных комплексов, позволяющих более подробно подойти к изучению химизма протекающих реакций и разрабатывать модели промышленных процессов, с помощью которых можно отслеживать текущую деятельность и заложить основы для интенсификации процесса [1,2].

Поскольку любая математическая модель химико-технологических процессов строится на физико-химической основе, для успешного моделирования процесса необходимо детализированное изучение химизма и составление подробной кинетической модели с наиболее полным учетом термодинамических и кинетических закономерностей целевых и побочных реакций [3,4]. На языке Python был написан программный код для построения кинетической модели процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами, задача решалась использованием неявного метода Рунге-Кутты метода Радо – II А пятого порядка (Radau 5). Для определения констант скоростей реакций, был выбран метод GeneticAlgorithmBase. Решение обратной кинетической задачи определяется функционалом:

$$F = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M |x_{ij}^{exp} - x_{ij}^{calc}| \quad (1)$$

где N - количество параметров оптимизации, M - количество опытов, x_{ij}^{exp} - экспериментальное значение, x_{ij}^{calc} - расчетное значение.

Количество параметров оптимизации составило 15 (n= 15).

Методом DifferentialEvolutionBase проведены расчёты по поиску оптимального соотношения изобутан:олефин в сырье. Согласно литературе необходимо, чтобы соотношение изобутан:олефин находилось в пределах (6-10):1. Это связано с тем, что избыток изобутана интенсифицирует целевые реакции алкилирования и подавляет протекание побочных, но при этом через чур большой избыток изобутана может способствовать протеканию побочных реакций самоалкилирования.

Литература

1. Zainullin R.Z., Koledina K.F., Akhmetov A.F., Gubaidullin I.M. Kinetics of catalytic reforming of gasoline // Kinetics and catalysis. 2017. — Т. 59, № 3. — 292-303 p..
2. Зернов П.А., Мурзин Д.Ю., Парпуц О.И., Кузичкин Н.В. Моделирование процесса алкилирования изобутана бутиленами в аппарате реакционно-

ректификационного типа // Химия и химические технологии. 2014. Т. 57, № 9. —100-104 с

3. *Сминько, М.Г.* Теоретические основы химической технологии. 2007. — Т. 41, № 1.С. 16.

4. *Cao P., Zheng, Sun L. W., Zhao L.* Multiscale Modeling of Isobutane Alkylation with Mixed C4 Olefins Using Sulfuric Acid as Catalyst // Industrial and Engineering Chemistry Research. 2019