РАСЧЕТ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПРОЦЕССА ГИДРИРОВАНИЯ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ

© Ш.Г. Загидуллин, К.Ф. Коледина

zagidullin-shamil@mail.ru, koledinakamila@mail.ru

УДК 517.977.58

DOI: 10.33184/mnkuomsh2t-2021-10-06.72.

В данной работе, посредством математического моделирования в программной среде MatLab, исследован процесс гидрирования полициклических ароматических углеводородов. Рассмотрена детализированная схема химических превращений с основными реакциями: гидрирование моноциклических ароматических углеводородов (бутил бензол), гидрирование бициклических ароматических углеводородов (нафталин, дифенил) и трициклических ароматических углеводородов (антрацен). Рассчитаны кинетические параметры: константы скоростей реакций, предэкспоненциальные множители, энергии активации. Получено удовлетворительное описание изменений концентраций в зависимости от времени контакта при разных температурах процесса.

Ключевые слова: энергия активации, кинетика, ароматические углеводороды, математическое моделирование

Calculation of the kinetic parameters of the hydrogenation process of polycyclic aromatic hydrocarbons

In this work, by means of mathematical modeling in the MatLab software environment, the process of hydrogenation of polycyclic aromatic hydrocarbons is investigated. A detailed scheme of chemical transformations with the main reactions is considered: hydrogenation of monocyclic aromatic hydrocarbons (butyl benzene), hydrogenation of bicyclic aromatic hydrocarbons (naphthalene, diphenyl) and tricyclic aromatic hydrocarbons (anthracene). Kinetic parameters were calculated: reaction rate constants, preexponential factors, activation energies. A satisfactory description of changes in concentrations depending on the contact time at different temperatures of the process has been obtained.

Работа выполнена по теме «Разработка новых теоретических подходов и программного обеспечения для моделирования сложных химических процессов и поиска соединений с заданными физико-химическими свойствами» (Регистрационный номер: АААА-А19-119022290011-6).

Загидуллин Шамиль Галиевич, аспирант, ИНК УФИЦ РАН (Уфа, Россия); Shamil Zagidullin, (Institute of Petrochemistry and catalysis RSA, Ufa, Russia)

Коледина Камила Феликсовна, к.ф.-м.н., н.с. ИНК УФИЦ РАН (Уфа, Россия), доцент УГНТУ (Уфа, Россия); Kamila Koledina (Institute of Petrochemistry and catalysis RSA, Ufa, Russia), Ufa State Petroleum Technological university, Ufa, Russia

Keywords: activation energy, kinetics, aromatic hydrocarbons, mathematical modeling

Рассмотрена технология получения реактивных топлив для сверхзвуковой авиации – гидрирование полициклических ароматических углеводородов, с целью детального изучения кинетики реакций на основе математического моделирования [1], поскольку данная задача является актуальным на сегодняшний день. Опыты для получения данного вида топлива проводились при разных технологических параметрах и на разных катализаторах: никель Ренея, АП-64, Никель на кизельгуре.

Для моделирования кинетики процесса, на основе полученных данных, применено математическое описание на базе закона действующих масс, что представляет собой систему дифференциальных уравнений. Решение системы уравнений, представляет собой прямую кинетическую задачу. Для восстановления кинетических параметров процесса была решена обратная кинетическая задача на основе экспериментальных данных. В работе для решения прямой задачи применяется многошаговый метод Гира переменного порядка. Численный метод Гира удовлетворяет требованию жесткой устойчивости [2].

При решении обратной кинетической задачи, как задачи однокритериальной оптимизации, на первом этапе применяется алгоритм глобальной оптимизации - генетический алгоритм. На втором этапе найденное решение уточняется алгоритмом локальной оптимизации - метод Хука-Дживса (patternsearch) [3].

Разработка методики многокритериальной оптимизации (МКО) процесса деароматизации на основе кинетической модели, позволит определять наилучшие условия проведения, в зависимости от критериев оптимальности (например, для более глубокого гидрирования – полного насыщения) [4]. Также применение разработанной кинетической модели можно применить и для других промышленных задач: расчет необходимого количества катализатора, габаритов реактора.

Литература

1. *Ахметов А.Ф., Ахметов А.В.* Реактивные топлива: свойства, марки, технологии получения.-Уфа: РИЦ УГНТУ, 2014.- 111 с.
2. *Gear C.V.* Numerical initial value problems in ordinary differential equations.- Englewood Cliffs: Pentice-Hall, 1971.- 252 P.
3. *Карпенко А.П.* Современные алгоритмы поисковой оптимизации. Алгоритмы, вдохновленные природой: учебное пособие.-Москва: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2014.- 446с с.
4. *Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Губайдуллин И.М.* Автоматизированная система идентификации условий проведения гомогенных и гетерогенных реакций в задачах многоцелевой оптимизации // Сиб. журн. вычисл. Математики / РАН Сиб. отделение. — Новосибирск, 2019. — Т.22, № 2 — С.137 — 151.