**​​ Математическое моделирование и оптимизация реакторного блока процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции**

Фасхутдинова Роза Ильфатовна, аспирант Института нефтехимии и катализа, ассистент кафедры информационные технологии и прикладная математики ФГБОУ ВО УГНТУ

E-mail: roza\_fask@mail.com.

Одним из наиболее динамически развивающихся процессов для производства ВО компонентов бензина является каталитическая изомеризация. В качестве объекта исследования выбрана промышленная установка КИ пентан-гексановой фракции. Основное отличие разрабатываемой модели заключается в том, что в данной модели подробно рассмотрены реакции гидрокрекинга компонентов реакционной смеси с образованием метана, этана, пропана и бутанов для прогнозирования составов углеводородных газов и ВСГ после реакторного блока. В условиях дороговизны и опасности проведения натурных экспериментов исследование процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции целесообразно проводить средствами математического моделирования.

Технологический процесс подразумевает под собой непрерывную подачу реакционной смеси в реактор через слой катализатора. Скорости реакций, входящие в кинетическую модель, были записаны согласно закону действующих масс. Математическая модель представляет собой задачу Коши, учитывающую скорость потока сырья в реакторе и изменение температуры, так как необходимо учитывать неизотермический характер технологического процесса. Также учитывается изменение мольного расхода реакционной смеси за счет протекания химических превращений.

Прямая задача решалась одноитерационным методом Розенброка 3-го порядка точности, а обратная задача решалась генетическим алгоритмом. В ходе решения прямой и обратной задачи получены 96 параметров кинетики, 48 предэкспоненциальных множителей и 48 энергий активации.

 Состав индивидуальных компонентов на выходе из последнего реактора и перепады температур во всех реакторах соответствуют промышленным данным, поэтому можно утверждать об адекватности модели. Погрешность определения концентраций углеводородов в среднем составила 3,5%.

На основе разработанной модели была выполнена многокритериальная оптимизации условий эксплуатации процесса, направленной на увеличение содержания высокооктановых компонентов в смеси − изопентана, изогексанов;

увеличение селективности и конверсии н-пентана и н-гексана; снижение выхода продуктов гидрокрекинга − метана, этана, пропана и бутанов. Был подобран оптимальный режим.