

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ПРОЦЕССА НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ИЗОМЕРИЗАЦИИ Н-ГЕКСАНА НА СУЛЬФАТНО-ЦИРКОНИЕВЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ

Казанцев К.В.^а, Бикметова Л.И.^а, Джикия О.В.^а, Смоликов М.Д.^{а,б}, Бельий А.С.^{а,б}

^аФедеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем переработки углеводородов Сибирского отделения Российской академии наук, Омск

^бФедеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Омский государственный технический университет»

Изомеризация легких алканов является одним из основных процессов, используемых для получения высокооктановых компонентов экологически чистых моторных топлив. В настоящее время наиболее широко используемыми катализаторами для этого процесса являются анион-модифицированные оксиды металлов, такие, как сульфатированный диоксид циркония. Такие катализаторы позволяют проводить изомеризацию алканов при низких температурах, что обеспечивает высокий выход наиболее ценных продуктов изомеризации – сильноразветвленных алканов (диметилбутанов).

Задача сопоставления их активности со способами приготовления и их составом является довольно сложной. Общепринятым является сравнение конверсии и выхода изомеров на катализаторах в одинаковых условиях протекания процесса, с другой стороны, очевидно, что эти параметры нелинейно зависят от скоростей протекания реакций изомеризации.

Таким образом, важной является задача оценки кинетических параметров реакции изомеризации, которые затем могут быть связаны с количеством и силой активных центров на поверхности катализатора, что позволит уточнить существующие закономерности синтеза высокоэффективных катализаторов изомеризации.

Основным параметром, влияющим на эффективность расчета констант скорости в сложных системах, является затрачиваемое время. Большинство применяемых методов для решения таких задач являются стохастическими, то есть используют определенное случайное распределение точек поиска по пространству решений.

Одним из методов, используемых для моделирования кинетических параметров различных реакций, является метод роя частиц [1, 2]. Данный метод показывает хорошие результаты в моделировании кинетики гомогенных каталитических реакций, в то же время он может быть использован и для моделирования поведения гетерогенных каталитических систем.

В данной работе была сделана попытка использования метода роя частиц для моделирования кинетики процесса изомеризации н-гексана. Для этого предварительно необходимо было выбрать параметры метода – коэффициенты, влияющие на его скорость и сходимость метода. На основе предложенной модели процесса изомеризации и нескольких случайных наборов констант скорости реакций были рассчитаны модельные концентрации изомеров гексана для нескольких значений объемной скорости подачи сырья, после чего с различными параметрами метода роя частиц решалась обратная задача кинетики. Было показано, что оптимальный выбор параметров метода позволяет определить константы скорости реакций изомеризации с относительной ошибкой не более 5 %. Выбранные параметры в дальнейшем использовались для решения обратной кинетической задачи по результатам реального эксперимента.

Для попытки решения реальной задачи был выбран модельный сульфатно-циркониевый катализатор, проявляющий высокую стабильность в условиях эксперимента. Были проведены испытания в реакции изомеризации н-гексана при различных значениях объемной скорости подачи сырья. В результате решения обратной кинетической задачи

были установлены константы скорости реакций изомеризации для данного катализатора и показана возможность оценки его активности на основании расчетных данных.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 16-43-550196 p_a).

Литература

1. Parfenova L.V., Balaev A.V., Gubaidullin I.M., Pechatkina S.V., Abzalilova, L.R., Spivak S.I., Khalilov L.M., Dzhemilev U.M. Kinetic Model of Olefins Hydroalumination by HAlBu_2^1 and AlBu_3^1 in Presence of Cp_2ZrCl_2 Catalyst, Int. J. Chem. Kinet., 2007, v.39, No 6, p.333-339.
2. Chatterjee A, Siarry P. Nonlinear inertia weight variation for dynamic adaptation in particle swarm optimization. Computers and Operations Research, 2006, 33(3): 859-871.