

**Казанский Федеральный Университет**

**Кафедра технологии нефти газа и углеродных материалов**

**Kazan Federal University,**

**Department of Oil gas and carbon materials technology**

**Анализ процесса изомеризация лёгких бензиновых фракций. Практикум  
по дисциплине: «Процессы и аппараты нефте- и газохимической  
переработки»**

**Analysis of the process of isomerization of light gasoline fractions. A  
workshop on the discipline: "Processes and devices of oil and gas chemical  
processing"**

**Нуруллин Арслан Рафаэлевич, Nurullin Arslan Rafaelevich<sup>1</sup>**

**Кемалов Руслан Алимович, Kemalov Ruslan Alimovich<sup>2</sup>**

**Кемалов Алим Фейзрахманович, Kemalov Alim Feizrahmanovich**

магистрант кафедры технологии нефти, газа и углеродных материалов<sup>1</sup>

кандидат технических наук, доцент кафедры технологии нефти, газа и углеродных  
материалов, Член Экспертного совета Российского газового общества (РГО),

и.о. руководителя группы «Водородная и альтернативная РГО, профессор РАЕ<sup>2</sup>  
доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой технологии нефти, газа и  
углеродных материалов, академик РАЕН

E-mail: arsil9898@mail.ru, kemalov@mail.ru, alim.kemalov@mail.ru

**Аннотация:** В статье представлен результат математического расчета параметров процесса изомеризации, таких, как материальный баланс, тепловой баланс, расчет реакторного блока и гидравлический расчет реактора. В работе приведен теоретический анализ и сравнение данных, полученных на промышленных установках процесса изомеризации. С помощью введенных математических расчетов изомеризации можно сравнить эффективность работы различных установок изомеризации и выбрать более подходящий вариант оптимизации процесса для данного сырья. В статье приведены примеры расчетов для схемы процесса изомеризации с производством 13888 кг/ч.

**Ключевые слова:** каталитическая активность, катализатор, риформинг, изомеризация, гидроизомеризация, октановое число, система компьютерного моделирования, товарный бензин

**Abstract:** The article presents the result of mathematical calculation of the parameters of the isomerization process, such as material balance, heat balance, calculation of the reactor block and hydraulic calculation of the reactor. The paper presents a theoretical analysis and comparison of data obtained at industrial installations of the isomerization process. With the help of the introduced mathematical calculations of isomerization, it is possible to compare the efficiency of the operation of various isomerization units and choose a more suitable option for optimizing the process for a given feedstock. The article provides examples of calculations for the scheme of the isomerization process with a production of 13888 kg / h.

**Keywords:** catalyst activity, catalyst, reforming, isomerization, hydroisomerization, octane number, computer simulation system, commercial gasoline.

## **1. ВВЕДЕНИЕ (introduction)**

Значение катализаторов и каталитических процессов в нефтепереработке и нефтехимии невозможно переоценить. Ведь именно они являются базой технического прогресса в важнейших областях обеспечения потребностей современного человеческого общества. Дело прежде всего в том, что нефть различных месторождений содержит обычно лишь от 5 до 20% легкокипящих фракций, соответствующих бензину. Потребность же в бензине при современном развитии автомобильного и авиационного транспорта огромна. Кроме того, моторные топлива, отогнанные непосредственно из нефти, обычно получают низкого качества. Применение же каталитического крекинга, каталитического риформинга и каталитической изомеризации в сочетании с другими современными методами переработки позволяет повысить выход высокооктановых бензинов до 75% от массы нефти. Моторные топлива также возможно получать при каталитическом гидрировании каменного угля с применением металлических катализаторов. Важно отметить все возрастающее значение гидрогенизационных процессов при производстве не только топлив, но

и высококачественных (высокоиндексных) масел. Последнее стало возможным за счет применения гидрокрекинга — гидроизомеризации сырья с повышенным содержанием парафиновых углеводородов высокой молекулярной массы (твердых парафинов, гачей от масляного производства и средних дистиллятов из высокопарафинистых нефтей). Повышение качества нефтепродуктов и углубление переработки нефти являются генеральными направлениями развития нефтеперерабатывающей промышленности и на более длительный срок.

Целевым назначением процессов каталитической изомеризации в современной нефтепереработке является получение высокооктановых изокомпонентов автобензинов или сырья нефтехимии, прежде всего изопентана для синтеза изопренового каучука [1].

## **2. Состав сырья, продукта.**

В качестве сырья используются низкооктановые компоненты нефти — фракции н. к. - 62 °С, рафинаты каталитического риформинга, содержащие в основном н-пентаны и н-гексаны и фракции С5 и С6, получаемые с ГФУ.

Выход целевого продукта — изомеризата с октановым числом 88—92 (исследовательский метод) — составляет 93—97% (масс.), который состоит из

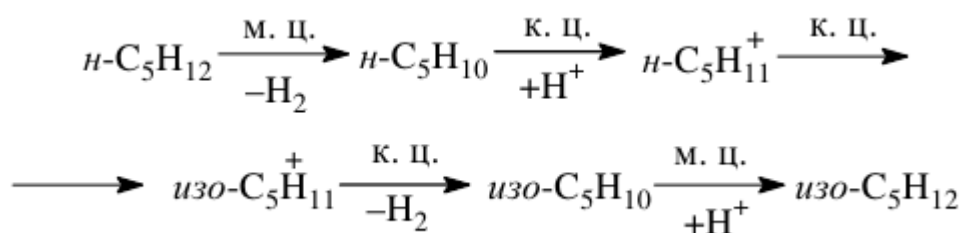
- изопентан (С5)
- смесь изомеризатов (С5-С7)

побочным продуктом процесса является сухой газ, используемый как топливный и пропан-бутановая фракция.

## **3. Основные превращения и химизм протекающих реакций.**

Реакции изомеризации парафинов являются обратимыми, протекают без изменения объема, с небольшим экзотермическим эффектом (6-8 кДж/моль). Поэтому термодинамическое равновесие зависит только от температуры: низкие температуры благоприятствуют образованию более разветвленных изомеров и получению, следовательно, изомеризата с более высокими октановыми числами. При этом равновесное содержание изомеров при данной температуре повышается с увеличением числа атомов углерода в молекуле н-парафина.

На бифункциональных катализаторах, обладающих дегидро-гидрирующей и кислотной активностями, изомеризация протекает по следующей схеме:



Вначале происходит дегидрирование *n*-парафина на металлических центрах катализатора. Образовавшийся олефин на кислотном центре превращается в карбоний-ион, который легко изомеризуется. Изомерные карбоний-ионы, возвращая протон кислотному центру катализатора, превращаются в соответствующие олефины, которые затем гидрируются на металлических центрах катализаторов изомеризации.

Активные центры, как металлические, так и кислотные, в отсутствие водорода быстро отравляются в результате закоксовывания катализатора.

Для подавления побочных реакций крекинга процесс проводят под повышенным давлением при циркуляции водородсодержащего газа.

#### 4. Принципиальная технологическая схема.

Поскольку степень превращения *C*<sub>5</sub>- и *C*<sub>6</sub>-алканов на высокотемпературном катализаторе типа ИП-66 составляет около 50 %, изомеризацию на промышленных установках осуществляют с ректификацией реакционной смеси и циркуляции непревращенного сырья. Исходное сырье изомеризации подвергают предварительной гидроочистке и осушке. Установка изомеризации состоит из двух блоков — ректификации и изомеризации. В блоке ректификации производят выделение изомеров из смеси исходного сырья и стабильного изомеризата. Реакторный блок состоит из двух параллельно работающих секций: в одной осуществляется изомеризация *n*-пентанов, а в другой — *n*-гексанов.

Принципиальная технологическая схема отечественной установки изомеризации бензиновой фракции ЛИ-150В приведена на рис. 1.1

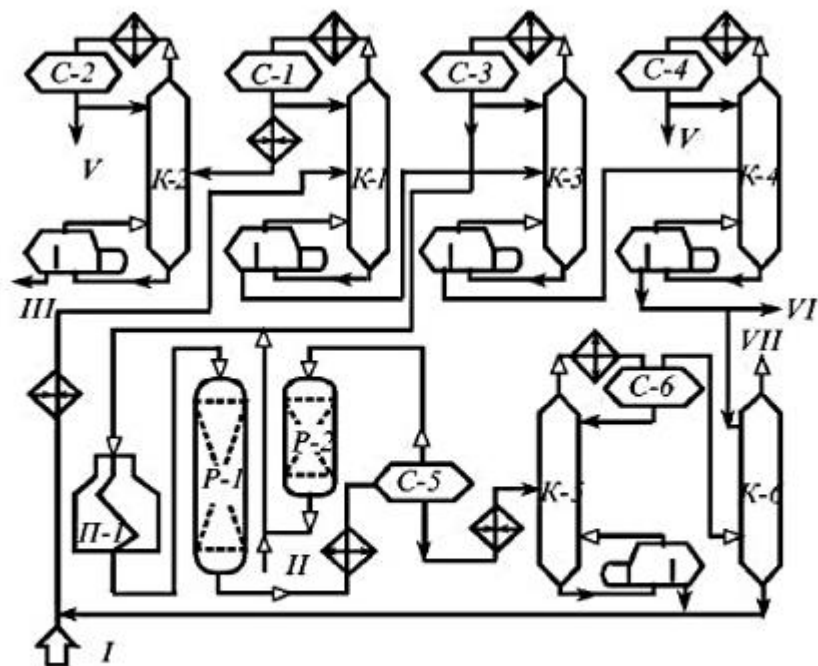


Рис. 1.1 Принципиальная технологическая схема установки изомеризации пентанов и гексанов: I — сырье; II — ВСГ; III — изопентановая фракция; IV — бутановая фракция; V — изогексановая фракция; VI — гексановая фракция на изомеризацию; VII — жирный газ

Смесь исходного сырья, рециркулирующего стабильного изомеризата и тощего абсорбента после подогрева в теплообменниках подают на разделение в колонну К-1, откуда сверху отбирают изопентановую фракцию, подвергающуюся дальнейшей ректификации в бутановой колонне К-2, где происходит отделение целевого изопентана от бутанов.

Нижний продукт колонны К-1 подают в пентановую колонну К-3. Нижний продукт этой колонны направляют на фракционирование в изогексановую колонну К-4, с верха которой отбирают второй целевой продукт процесса — изогексан.

Отбираемую с верха К-3 пентановую фракцию, содержащую около 91 % мас. н-пентана, смешивают с водородсодержащим газом и после нагрева в трубчатой печи П-1 до требуемой температуры направляют в реактор изомеризации со стационарным слоем катализатора Р-1.

Парогазовую смесь продуктов реакции охлаждают и конденсируют в теплообменниках и холодильниках и подают в сепаратор С-5, а циркулирующий ВСГ из С-5 после осушки в адсорбере Р-2 компрессором — на смешение с сырьем. Изомеризат после стабилизации в колонне К-5 направляют на ректификацию вместе с сырьем. Из газов стабилизации в абсорбере К-6

извлекают изопентан подачей части гексановой фракции, отбираемой из К-4. Балансовое количество гексановой фракции поступает в аналогичную секцию изомеризации (при низком содержании н-гексана в сырье его изомеризуют в смеси с н-пентаном).

Другой вид принципиальной технологической схемы блока изомеризации представлена на рисунке 1.2 [4].

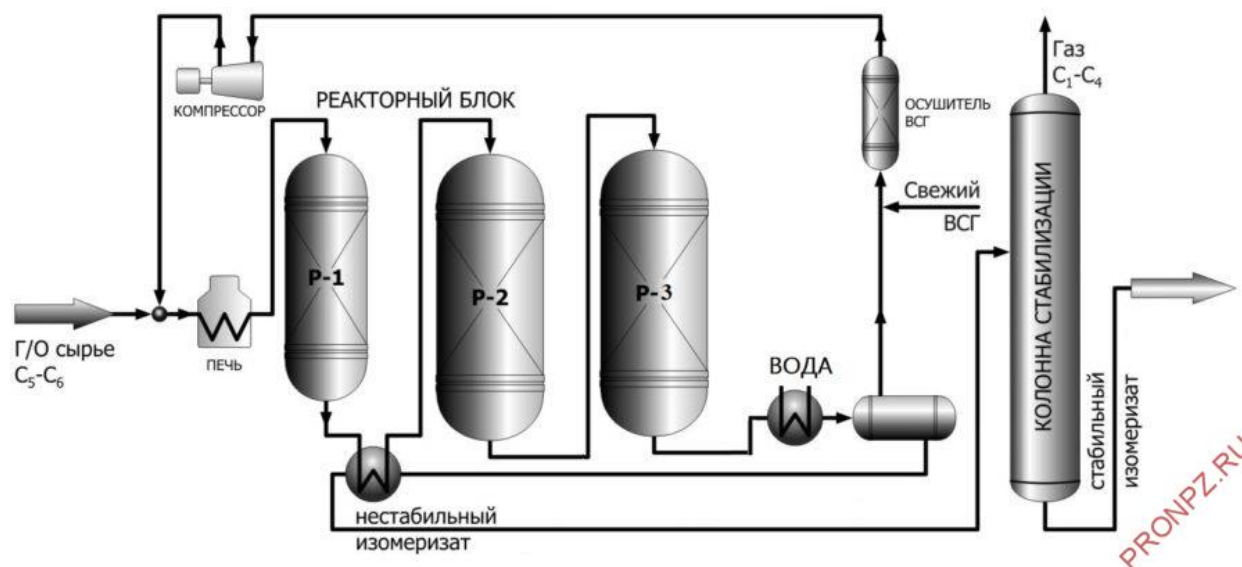


Рисунок 1.2 – Принципиальная технологическая схема блока изомеризации

Гидроочищенная фракция НК-70 °С выводится с низа отпарной колонны, отдавая часть тепла гидрогенизату в теплообменнике. На блок изомеризации фракция может подаваться при помощи насоса, либо под собственным давлением отпарной колонны. На блоке изомеризации получают высокооктановый компонент автобензина путем изомеризации.

Стабильный гидрогенизат после теплообменника смешивается с ВСГ.

Газосырьевая смесь, проходя через теплообменники нагревается до температуры 100-120 °С и далее поступает в печь, где приобретает температуру реакции 130-170 °С. При этом давление не должно быть ниже 27 кгс/см<sup>2</sup>, затем перемещается в три последовательно работающих реактора.

В реакторах на катализаторе происходит изомеризация. Этот процесс происходит в слое платинового катализатора на циркониевом носителе. В

России для изомеризации по технологии Изомалк-2 используется оксидно-циркониевый платиносодержащий катализатор СИ-2.

После реактора газопродуктовая смесь охлаждается до 40 °С, проходя через параллельно работающие аппараты воздушного охлаждения и водяного холодильника. Из холодильника смесь поступает в сепаратор высокого давления, где разделяется на водородосодержащий газ и нестабильный изомеризат. Для поддержания концентрации циркулирующего ВСГ предусмотрена подпитка системы свежим водородом на выходе из сепаратора.

Водородосодержащий газ с верха сепаратора перемещается на блок осушки циркулирующего ВСГ.

Нестабильный изомеризат в теплообменниках нагревается теплом от промежуточных потоков реакторов изомеризации до температуры 110 °С.

Верхний продукт, пройдя через охладители, поступает в рефлексную емкость. А углеводородный газ направляется в заводскую топливную сеть.

Жидкая головка стабилизации возвращается в колонну на орошение.

С низа колоны выводится стабильный изомеризат, который после охлаждения поступает в товарные парки на смешение автобензинов.

Водородсодержащий газ с сепараторов блока гидроочистки и изомеризации переходит на осушку в абсорбер осушителя. Этот процесс происходит при температуре от 40 °С до 45 °С и давлении не превышающем 26 кгс/см<sup>2</sup> на цеолитах NaX.

ВСГ проходит осушители снизу вверх для качественного удаления влаги.

## 5. Технологический расчет установки изомеризации

### 5.1. Расчет материального баланса блока и установки изомеризации

Производительность установки по сырью, кг/ч

$$G := 45000$$

Используемый катализатор - платиноцеолитный катализатор СИ-1

Температура - 260 °С

$$T := 260 + 273$$

Давление - 2 МПа

$$P := 2$$

Объемная скорость подачи сырья 1,5 ч<sup>-1</sup>

$$\omega := 1.5$$

Мольное отношение "водород: сырье" = 3:1

Плотность сырья  $\rho = 647 \text{ кг/м}^3$

$$\rho := 647$$

Молекулярная масса сырья  $M = 80 \text{ кг/кмоль}$

$$M := 80$$

Состав продуктов изомеризации представлен в таблице 2.1

Таблица 2.1 - Состав нестабильного изомеризата

Состав нестабильного изомеризата	
Компонент	%мас.
C <sub>1</sub> -C <sub>4</sub>	2.00
изо-пентан	29.58
n-пентан	17.40
циклопентан	2.50
2,2-диметилбутан	7.91
2,3-диметилбутан	3.92
2-метилпентан	11.96
3-метилпентан	9.67
n-гексан	6.54
метилциклопентан	7.19
бензол	-
циклогексан	1.33
C <sub>7</sub>	-
<b>Итого:</b>	<b>100.00</b>



Массовое содержание каждого компонента в процентах  
КОМПОНЕНТОВ

Название

$$X = \begin{pmatrix} 2 \\ 29.58 \\ 17.4 \\ 2.5 \\ 7.91 \\ 3.92 \\ 11.96 \\ 9.67 \\ 6.54 \\ 7.19 \\ 0 \\ 1.33 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} C_1 - C_4 \\ \text{изо - пентан} \\ \text{н - пентан} \\ \text{циклопентан} \\ 2,2 - \text{диметилбутан} \\ 2,3 - \text{диметилбутан} \\ 2 - \text{метилпентан} \\ 3 - \text{метилпентан} \\ \text{н - гексан} \\ \text{метилциклопентан} \\ \text{бензол} \\ \text{циклогексан} \\ C_7 \end{pmatrix}$$

По данным о составе продуктов рассчитываются отношения  $K$  массовых концентраций изомеров и углеводородов нормального строения для каждой группы алканов  $C_5$  и  $C_6$  (глубина изомеризации)

$$K := \frac{X_i}{X_n}$$

Для циклоалканов  $C_6$  - это отношение концентраций метилциклопентана и циклогексана; циклоалкан  $C_5$  не изомеризуется, и его количество остается неизменным.

## Расчет глубины изомеризации

Алканы C<sub>5</sub>

$$K_1 := \frac{X_2}{X_3} = 1.7$$

Алканы C<sub>6</sub>

$$K_2 := \frac{X_5}{X_9} = 1.209$$

$$K_3 := \frac{X_6}{X_9} = 0.599$$

$$K_4 := \frac{X_7}{X_9} = 1.829$$

$$K_5 := \frac{X_8}{X_9} = 1.479$$

Циклоалканы C<sub>6</sub>

$$K_6 := \frac{X_{10}}{X_{12}} = 5.406$$

Количество и состав продуктов изомеризации рассчитывается, исходя из суммарного содержания в сырье и в продуктах углеводородов и значений констант (глубины изомеризации), с учетом селективности (вклада побочных реакций). Состав сырья по группам компонентов приведен в таблице 2.2. [5].

Таблица 2.2 - Состав сырья по группам компонентов

Группа компонентов	Содержание, %мас.
C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub>	1,09
алканы C <sub>3</sub> H <sub>12</sub>	53,11
циклопентан	3,76
алканы C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	36,18
бензол	1,42
циклоалканы C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>	4,35
C <sub>7</sub>	0,09
<b>Итого:</b>	<b>100,00</b>

## Состав сырья по компонентам

$$X_c := \begin{pmatrix} \text{"№ п/п"} & \text{"Компоненты"} & \text{"Содержание, \%мас."} \\ 1 & \text{"изо-бутан"} & 0.02 \\ 2 & \text{"н-бутан"} & 1.07 \\ 3 & \text{"изо-пентан"} & 21.69 \\ 4 & \text{"н-пентан"} & 31.42 \\ 5 & \text{"циклопентан"} & 3.76 \\ 6 & \text{"2,2-диметилбутан"} & 0.39 \\ 7 & \text{"2,3-диметилбутан"} & 2.63 \\ 8 & \text{"2-метилпентан"} & 13.29 \\ 9 & \text{"3-метилпентан"} & 8.53 \\ 10 & \text{"н-гексан"} & 11.34 \\ 11 & \text{"метициклопентан"} & 3.73 \\ 12 & \text{"бензол"} & 1.42 \\ 13 & \text{"циклогексан"} & 0.62 \\ 14 & \text{"2,2-диметилпентан"} & 0 \\ 15 & \text{"2,3-диметилпентан"} & 0.02 \\ 16 & \text{"2-метилгексан"} & 0.02 \\ 17 & \text{"3-метил гексан"} & 0.03 \\ 18 & \text{"н-гептан"} & 0.01 \\ 19 & \text{"2,2,3-триметилбутан"} & 0 \\ 20 & \text{"3,3-диметил пентан"} & 0.01 \\ 21 & \text{"итого"} & 100 \end{pmatrix}$$

Расход каждого компонента, кг/ч

$$G_x := \frac{G}{100} \cdot \begin{pmatrix} 1.09 \\ 53.11 \\ 3.76 \\ 36.18 \\ 1.42 \\ 4.35 \\ 0.09 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 651.11 \\ 31725.15 \\ 2246.03 \\ 21612.05 \\ 848.23 \\ 2598.46 \\ 53.76 \end{pmatrix}$$

Название компонента

$$\begin{pmatrix} C_3 - C_4 \\ \text{алканы\_C5H12} \\ \text{циклопентан} \\ \text{алканы\_C6H14} \\ \text{бензол} \\ \text{циклоалканы\_C6H12} \\ C_7 \end{pmatrix}$$

В показанном примере принимается, что циклопентан и бутаны в процессе не подвергаются превращениям, бензол гидрируется нацело, селективность процесса составляет 98 %. Далее расчеты ведут поэтапно.

**1 этап. Расчет начинают с определения расхода компонентов сырья на побочные реакции и расхода продуктов гидрокрекинга.**

При принятой величине селективности процесса 98 % гидрокрекингу подвергается 2% от массы сырья, то есть  $59734,8 \cdot 0,02 = 1194,7$  кг/ч, в сырье крекируются все углеводороды  $C_7$  - 53,76 кг/ч, остальное количество  $1194,7 - 53,76 = 1140,94$  кг/ч приходится на алканы  $C_6$ .

$$G_T := 1194.7$$

Состав газов низкотемпературной изомеризации представлен в таблице 2.3

Таблица 2.3 - Состав газа низкотемпературной изомеризации

Компонент	Состав газов, %мас.
метан	1,8
этан	1,8
пропан	32,1
изо-бутан	53,6
н-бутан	10,7
<b>Итого:</b>	<b>100,0</b>

Количество образующихся в реакторе газов гидрокрекинга, кг/ч

$$G_{ГХ} := \frac{G_T}{100} \cdot \begin{pmatrix} 1.8 \\ 1.8 \\ 32.1 \\ 53.6 \\ 10.7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 21.505 \\ 21.505 \\ 383.499 \\ 640.359 \\ 127.833 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{метан} \\ \text{этан} \\ \text{пропан} \\ \text{изо - бутан} \\ \text{н - бутан} \end{pmatrix}$$

В гидроочищенном сырье представленного примера уже присутствуют углеводородные газы в количестве 651 кг/ч, в том числе изо-бутана - 0,02% и н-бутана - 1,07 %. Таким образом количество изобутана и н-бутана в сырье составит, кг/ч

$$G_{iC4H10} := \frac{X_{c_{2,3}} \cdot G}{100} = 11.947 \quad G_{nC4H10} := \frac{X_{c_{3,3}} \cdot G}{100} = 639.162$$

Общее количество газов в изомеризате составит, кг/ч

$$G_{Г0} := G_T + G_{nC4H10} + G_{iC4H10} = 1845.81$$

Состав газов изомеризации, кг/ч

$$G_{iC4H10o} := G_{iC4H10} + G_{ГХ4} = 652.306$$

$$G_{\text{HC4H10o}} := G_{\text{HC4H10}} + G_{\text{ГХ}_5} = 766.995$$

$$G_{\text{ГХО}} := \begin{pmatrix} G_{\text{ГХ}_1} \\ G_{\text{ГХ}_2} \\ G_{\text{ГХ}_3} \\ G_{\text{HC4H10o}} \\ G_{\text{HC4H10o}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 21.505 \\ 21.505 \\ 383.499 \\ 652.306 \\ 766.995 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{метан} \\ \text{этан} \\ \text{пропан} \\ \text{изо - бутан} \\ \text{н - бутан} \end{pmatrix}$$

**2 этап. Определяем количество и состав продуктов реакции изомеризации.**

**Количество n-алкана C5 или C6 в изомеризате определяется по формуле**

$$X_{\text{H-алкан}} := \frac{\sum C_n H_{2n}(\text{прод})}{1 + \sum K_i}$$

где  $\sum C_n H_{2n}(\text{прод})$  - суммарное количество в изомеризате алканов каждой группы, кг/ч

Количество изо-алканов C5 или C6 определяется по формуле

$$X_{\text{Изо-алкан}} := (X_{\text{H-алкан}}) \cdot K_1$$

Определяем содержание алканов C5 в изомеризате.

Пентаны не подвергаются крекингу, поэтому их суммарное количество в сырье и в продуктах одно и то же – 31725,15 кг/ч, из них в продуктах образуется н-пентан в количестве, кг/ч

$$X_{\text{нпентан}} := \frac{G_{x_2}}{1 + K_1} = 11750.06$$

тогда расход изо-пентана в изомеризате, кг/ч

$$X_{\text{ипентан}} := X_{\text{нпентан}} \cdot K_1 = 19975.1$$

Определяем содержание алканов C6 в изомеризате.

В сырье суммарное содержание гексанов составляет 21612,05 кг/ч, в продуктах с учетом расхода на крекирование их количество составит  $\sum C_6 H_{14}$ , кг/ч

из них н-гексан в количестве, кг/ч

$$G_{nC6H14} := \frac{G_{C6H14}}{1 + K_2 + K_3 + K_4 + K_5} = 3347.03$$

а изо-гексанов образуется, кг/ч

2 - метилпентан

$$G_{2МП} := G_{nC6H14} \cdot K_2 = 4048.16$$

3 - метилпентан

$$G_{3МП} := G_{nC6H14} \cdot K_3 = 2006.17$$

2,2 - диметилбутан

$$G_{22ДМБ} := G_{nC6H14} \cdot K_4 = 6120.86$$

2,3 - диметилбутан

$$G_{23ДМБ} := G_{nC6H14} \cdot K_5 = 4948.89$$

Определяем содержание нафтенос  $C_6$  в изомеризате.

В сырье общее содержание нафтенос  $C_6$  составляет 2598,46 кг/ч, в изомеризате к этому количеству добавится расход продукта гидрирования бензола - циклогексана (848,23 кг/ч), поэтому суммарное содержание нафтенос  $C_6$  в изомеризате составит, кг/ч

$$G_{C6H12} := G_{x_5} + G_{x_6} = 3446.7$$

Расход циклогексана в изомеризате определим из формулы, кг/ч

$$G_{ЦГ} := \frac{G_{C6H12}}{1 + K_6} = 538.041$$

Расход метилциклопентана составит

$$G_{МЦП} := G_{ЦГ} \cdot K_6 = 2908.66$$

Расход циклопентана в сырье и в продуктах составляет 2246,03 кг/ч.

**3 этап. После расчетов материальных потоков компонентов сырья и продуктов его превращения выполняются расчеты расходов СВСГ и ЦВСГ, вводимых в реакторы вместе с сырьем**

Как известно, процесс изомеризации проводят в присутствии водорода, который подается в зону реакции потоком циркулирующего водородсодержащего газа с концентрацией водорода не менее 75- 80% об. Некоторая часть подаваемого водорода безвозвратно расходуется на реакции гидрирования компонентов сырья и растворяется в продуктах. Для компенсации потерь водорода и поддержания его концентрации в ВСГ на заданном уровне в схеме циркуляции предусматривают постоянную подпитку потока свежим ВСГ. Концентрация компонентов СВСГ представлена в таблице 2.4

Таблица 2.4 - Компонентный состав СВСГ

Компонент	Концентрация,	
	%об.	%мас.
H <sub>2</sub>	83,6	29,8
CH <sub>4</sub>	9,8	27,9
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	4,2	22,5
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	2,0	15,7
i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	0,1	1,0
n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	0,3	3,1
<b>Итого:</b>	<b>100,0</b>	<b>100,0</b>

Концентрация компонентов ЦВСГ представлена в таблице 2.5

Таблица 2.5 - Компонентный состав ЦВСГ

Компонент	Концентрация,	
	%об.	%мас.
H <sub>2</sub>	81,0	27,2
CH <sub>4</sub>	12,4	33,4
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	4,5	22,7
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	1,6	11,8
i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	0,2	2,0
n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	0,3	2,9
<b>Итого:</b>	<b>100,0</b>	<b>100,0</b>

Массовый расход СВСГ рассчитывают, исходя из потребления 100%-ного водорода в процессе изомеризации, который составляет от 0,15 до 0,30 % от массового расхода сырья на входе в реактор.

Для нашего примера среднетемпературной изомеризации примем потребление водорода, равное 0,25% мас., т.е. расход свежего водорода на процесс составит, кг/ч

$$G_{H_2} := G \cdot \frac{0.25}{100} = 149.337$$

Массовая доля водорода в СВСГ из таблицы 3

$$y_{CH_2} := 0.298$$

Расход СВСГ при этом составит, кг/ч

$$G_{СВСГ} := \frac{G_{H_2}}{y_{CH_2}} = 501.131$$

Расход компонентов СВСГ, кг/ч

$$G_{СХ} := \begin{pmatrix} 29.8 \\ 27.9 \\ 22.5 \\ 15.7 \\ 1 \\ 3.1 \end{pmatrix} \cdot \frac{G_{СВСГ}}{100} = \begin{pmatrix} 149.337 \\ 139.816 \\ 112.754 \\ 78.678 \\ 5.011 \\ 15.535 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \text{водород} \\ \text{метан} \\ \text{этан} \\ \text{пропан} \\ \text{изобутан} \\ \text{н - бутан} \end{pmatrix}$$

Концентрация СВСГ в расчете на сырье

$$X_{СВСГ} := \frac{G_{СВСГ} \cdot 100}{G} = 0.839$$

Расход ЦВСГ в нашем примере определим, исходя из требуемого мольного соотношения «водород»: «сырье», равного 3:1.

$$\frac{N_{H_2}}{N_{сырье}} := 3$$

где  $N_{H_2}$  и  $N_{сырье}$  - мольные расходы водорода с ЦВСГ и сырья соответственно (кмоль/ч), откуда  $N_{H_2} = 3N_{сырье}$ .

$N_{сырье}$  определяют из соотношения:  $N_{сырье} = G/M_{сырье}$ , где  $M_{сырье}$  - молярная масса сырья.

$$M_{сырье} := 80 \quad M_{H_2} := 2$$

$$N_{сырье} := \frac{G}{M_{сырье}} = 746.685$$

$$N_{H_2} := 3 \cdot N_{сырье} = 2240.06$$



Массовый расход водорода в зону реакции при этом должен составить, кг/ч

$$\left[ G_{\text{H}_2}^{\text{ЦВСГ}} \right] := N_{\text{H}_2} \cdot M_{\text{H}_2} = 4480.11$$

Массовая доля водорода в ЦВСГ из таблицы 4

$$y_{\text{H}_2} := 0.272$$

Расход ЦВСГ определим по формуле, кг/ч

$$G_{\text{ЦВСГ}} := \frac{\left[ G_{\text{H}_2}^{\text{ЦВСГ}} \right]}{y_{\text{H}_2}} = 16470.99$$

Концентрация ЦВСГ в расчете на сырье, %

$$X_{\text{ЦВСГ}} := \frac{G_{\text{ЦВСГ}} \cdot 100}{G} = 27.574$$

Объемный расход ЦВСГ составит при этом,  $\text{нм}^3 / \text{ч}$

$$W_{\text{ЦВСГ}} := \frac{G_{\text{ЦВСГ}}}{M_{\text{ЦВСГ}}} \cdot 22.4$$

где 22,4 - молярный объем газа при нормальных условиях ( $\text{нм}^3/\text{кг} \cdot \text{моль}$ ),  $M_{\text{ЦВСГ}}$  - молярная масса ЦВСГ.

$$M_{\text{ЦВСГ}} := 6.2$$

$$W_{\text{ЦВСГ}} := \frac{G_{\text{ЦВСГ}}}{M_{\text{ЦВСГ}}} \cdot 22.4 = 59508.1$$

Требуемая кратность циркуляции ВСГ для обеспечения заданного молярного соотношения определится по формуле

$$K_{\text{ЦВСГ}} := \frac{W_{\text{ЦВСГ}}}{W_{\text{сырья}}}$$

где  $W_{\text{сырья}}$ ,  $\text{м}^3/\text{час}$  - объемный расход жидкого сырья

$$W_{\text{сырья}} := \frac{G}{\rho_c}$$

где  $\rho_c$  - плотность сырья,  $\text{кг}/\text{м}^3$

$$W_{\text{сырья}} := \frac{G}{\rho_c} = 92.326$$

$$K_{\text{ЦВСГ}} := \frac{W_{\text{ЦВСГ}}}{W_{\text{сырья}}} = 644.545$$

По завершении расчетов составляются материальные балансы реакторного узла с учетом СВСГ и ЦВСГ, пересчитывается материальный баланс колонны

стабилизации с учетом СВСГ, затем составляется материальный баланс блока изомеризации и установки с учетом потерь.

В состав продуктов переходит часть водорода СВСГ, остальное его количество расходуется на гидрокрекинг сырья (приблизительно 60 кг/ч в расчете по стехиометрии на образующийся пропан), углеводородные компоненты СВСГ соединяются с продуктами.

Расход газов стабилизации с учетом СВСГ, кг/ч    Название компонентов

$$\sum G_{гс} = 1011,48$$

Расход стабильного изомеризата с учетом СВСГ, кг/ч    Название компонентов

$$\sum G_{си} = 59224,45$$

Материальный баланс блока изомеризации представлен в таблице 2.6

Таблица 2.6 - Материальный баланс блока изомеризации

Статьи баланса	кг/ч	% мас.
Приход:		
Гидрогенизат	59734,8	100
СВСГ	501,13	0,84
- в т.ч. водород	149,38	0,25
Итого	60235,93	100,84
Расход:		
Стабильный изомеризат	59224,45	99,15
Газы стабилизации	1011,48	1,69
Итого	60235,93	100,84

Материальный баланс реактора с учетом ЦВСГ приведен в таблице 2.7

Таблица 2.7 - Материальный баланс реактора изомеризации

Статьи баланса	кг/ч	% мас.
Приход:		
Гидрогенизат	59734,8	100
СВСГ	501,13	0,84
ЦВСГ	16470,99	27,57
Итого	60235,93	128,41
Расход:		
Стабильный изомеризат	59224,45	99,15
Газы стабилизации	1011,48	1,69
ЦВСГ	16470,99	27,57
	60235,93	128,42

При составлении баланса установки учитывают дополнительно расход СВСГ и выход газов стабилизации в блоке гидроочистки. Для этого принимают расход 100%-ного водорода на блоке, обычно он составляет 0,2% на массу исходного сырья, для нашего примера расход 100%-ного водорода на блоке ГО составит, кг/ч

$$G_{H_2Г} := G \cdot \frac{0.2}{100} = 119.47$$

а СВСГ

$$G_{СВСГГ} := \frac{G_{H_2Г}}{0.298} = 400.905$$

Всего расход СВСГ на установке, кг/ч

$$G_{СВСГ} + G_{СВСГГ} = 902.036$$

Расход газов стабилизации на блоке ГО складывается из расхода углеводородных компонентов СВСГ и газов гидрокрекинга. Количество газов гидрокрекинга сырья при гидроочистке определяют, исходя из выхода гидрогенизата на блоке ГО, для нашего примера выход газов при гидроочистке составит  $100-99 = 1\%$  от массы исходного сырья, кг/ч

$$G_{Гсг} := \frac{G}{0.99} - G = 603.382$$

Суммарное количество газов стабилизации на блоке ГО будет равно, кг/ч

$$G_{СВ} := G_{СВСГГ} + G_{Гсг} = 1004.29$$

Всего количество газов стабилизации на установке составит, кг/ч.

$$\sum G_{Гс} + G_{СВ} = 2015.77$$

Далее считают статьи расхода с учетом потерь на установке, для нашего примера потери приняты в 0,4 % от массы исходного сырья.

Потери распределяют по продуктам пропорционально расходам.

Материальный баланс установки изомеризации приведен в табл. 2.8

Таблица 2.8 - Материальный баланс установки изомеризации

## Особенности расчета материального баланса блока изомеризации с рециклом

Вариант технологии «за проход» с рециклом не превращённого *n*-гексана. В таком варианте блок изомеризации дополняется узлом фракционирования продукта изомеризации. В узле фракционирования с помощью дополнительной ректификационной колонны из стабильного изомеризата выделяется фракция *n*-гексана, которая подается на смешение с гидроочищенным сырьем, т.е. возвращается в рецикл. Блок-схема установки представлена на рисунке 2.1

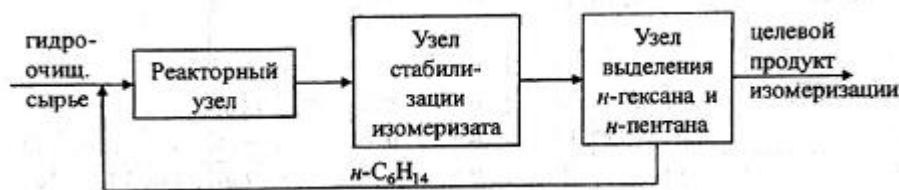


Рисунок 2.1 – Блок-схема установки

Для такого варианта после приведенного в примере расчета реакторного узла и колонны стабилизации без учета ВСГ выполняется расчет материального баланса колонны фракционирования. Колонна фракционирования является сложной колонной, в которой фракция *n*-гексана выводится боковым погонном. Для этого расчета принимаются допущения о долях отбора компонентов сырья колонны в верхний продукт и в боковой погон. Расчет приведен в табл. 2.10

Таблица 2.10 - Материальный баланс колонны ректификации

Компонент	Стаб. катализат		Доля отбора в	Доля отбора в	Дистиллят		Фракция <i>n</i> -гептана		Кубовый продукт	
	% мас.	кг/ч			% мас.	кг/ч	% мас.	кг/ч	% мас.	кг/ч
изо-бутан	0,22	130,46	1	0	0,26	130,46	0	0	0	0
<i>n</i> -бутан	0,92	536,9	1	0	1,06	536,9	0	0	0	0
изо-пентан	32,97	18976,3	1	0	37,41	18976,3	0	0	0	0
<i>n</i> -пентан	20,43	11750,0	1	0	23,16	11750,0	0	0	0	0
циклопентан	3,9	2246,03	1	0	4,43	2246,03	0	0	0	0
2,2-диметилбутан	7,04	6120,86	1	0	12,06	6120,86	0	0	0	0
2,3-диметилбутан	3,49	4948,89	1	0	9,76	4948,89	0	0	0	0

2-метилпентан	10,63	4048,16	1	0	7,98	4048,16	0	0	0	0
3-метилпентан	8,6	2006,17	0,9	0,1	3,56	1805,55	5,73	200,62	0	0
н-гептан	5,81	3347,03	0,05	0,9	0,33	167,35	85,97	301,2,33	5,04	167,35
метилциклопентан	5,06	2908,66	0	0,1	0	0	8,3	290,87	78,77	261,7,79
циклогексан	0,93	538,04	0	0	0	0	0	0	16,19	538,04
Итого	100	57557,59			100	50730,6	100	350,3,82	100	332,3,18

Выделенную фракцию соединяют с исходным сырьем реакторного узла, измененный состав сырья реакторов после 1 рецикла приведен в табл. 2.11

Таблица 2.11 - Состав и расход сырья по группам компонентов после 1 рецикла

Группа компонентов	Содержание % мас.	Расход, кг/ч
C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub>	1,03	651,11
ПУВ C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	50,17	31725,15
Циклопентан	3,55	2246,03
ПУВ C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	39,26	21612,05+200,62+3012,33
Бензол	1,34	848,23
НУВ	4,57	2598,46+290,87
C <sub>7</sub>	0,08	53,76
Итого	100	59734,8+3503,82

Исходя из полученного состава и расхода смесового сырья, выполняют расчет компонентного состава продуктов изомеризации и составляют материальный баланс реакторного узла. Затем выполняют расчеты материальных балансов колонн стабилизации и ректификации.

Далее выполняются циклические расчеты материальных балансов всех узлов до тех пор, пока массовый расход рецикловой фракции н-гексана не станет постоянным (+/-1 кг/час), т.е. пока не наступит стационарный режим работы блока изомеризации с рециклом.

Статьи баланса	кг/ч	% мас.
Приход:		
Гидрогенизат	60338,2	100
СВСГ	902,04	1,49
- в т.ч. водород	268,85	0,45
Итого	61240,24	101,49
Расход:		
Стабильный изомеризат	58983,12	97,75
Газы стабилизации	2015,77	3,34
- в т.ч. водород	241,35	0,4
	61240,24	101,49

## 5.2. Тепловой баланс реактора

На установках изомеризации используются адиабатические реакторы со стационарным слоем катализатора, в таких реакторах процесс осуществляется без принудительного подвода или отвода тепла из реакционной зоны. Тепло в реактор вносят потоки предварительно нагретых газо-сырьевых смесей. Дополнительно тепло привносится за счет экзотермического теплового эффекта химических реакций.

Выводится тепло с потоками газо-продуктовых смесей, дополнительно тепло уходит с тепловыми потерями от горячей поверхности реактора. Обязательным условием работы аппарата является равенство количеств тепла на входе и на выходе из реактора, т.е. условие теплового баланса:

$$Q_{\text{приход}} = Q_{\text{расход}}$$

Количество теплоты, которую несет материальный поток, определяется массовым расходом этого потока и его энтальпией (теплосодержанием) при температуре потока:

$$Q = G \cdot H \text{ (кДж/час)}$$

Теплоемкость сырья (кДж/кг·К) можно найти по формуле

$$C_{\text{сырья}} = \sum C_{pi} \cdot y_i$$

где  $C_{pi}$  – теплоемкость отдельных компонентов с учетом поправок на температуру и давление, кДж/кг·К;  $y_i$  – массовая доля каждого компонента в сырье.

Теплоемкость индивидуальных компонентов представлена в таблице 2.12

Таблица 2.12 - Теплоемкость индивидуальных компонентов

Вещество	$C_p$ , кДж/кг*К
Водород	14,53
Метан	3,05
Этан	2,7
Пропан	2,65
Бутан	2,6
Изобутан	2,6
Изопентан	2,6
Пентан	2,58
Циклопентан	2,2
2,2-диметилбутан	2,8
2,3-диметилбутан	2,8
2-метилпентан	2,85
3-метилпентан	2,85
Гексан	2,85
Метилциклопентан	2,5
Бензол	2,5
Циклогексан	2,45
Гептан	2,6

Теплоемкость сырья вычисляется по формуле, кДж/кг\*К

$$C_c = 2.6 \cdot 0.0002 + 2.6 \cdot 0.0107 + 2.6 \cdot 0.2169 \dots = 2.662$$

$$+ 2.58 \cdot 0.3142 + 2.2 \cdot 0.0376 + 2.8 \cdot 0.0039 + 2.8 \cdot 0.0263 + 2.85 \cdot 0.1329 + 2.85 \cdot 0.0853 \dots$$

$$+ 2.85 \cdot 0.1134 + 2.5 \cdot 0.0373 + 2.5 \cdot 0.0142 + 2.45 \cdot 0.0062 + 2.6 \cdot 0.0009$$

Энтальпия сырья рассчитывается по формуле, кДж/кг

$$H_c = C_c \cdot T = 1418.6$$

Относительная плотность сырья находится по уравнению

$$\rho_{15}^{15} = \rho + 5 \cdot a$$

где а - средняя температурная поправка, приведена в таблице 2.13

Таблица 2.13- Средняя температурная поправка для плотности жидких нефтепродуктов

$\rho_4^{20}$	$a$	$\rho_4^{20}$	$a$
0,7000–0,7099	0,000897	0,8500–0,8599	0,000699
0,7100–0,7199	0,000884	0,8600–0,8699	0,000686
0,7200–0,7299	0,000870	0,8700–0,8799	0,000673
0,7300–0,7399	0,000857	0,8800–0,8899	0,000660
0,7400–0,7499	0,000844	0,8900–0,8999	0,000647
0,7500–0,7599	0,000831	0,9000–0,9099	0,000633
0,7600–0,7699	0,000818	0,9100–0,9199	0,000620
0,7700–0,7799	0,000805	0,9200–0,9299	0,000607
0,7800–0,7899	0,000792	0,9300–0,9399	0,000594
0,7900–0,7999	0,000778	0,9400–0,9499	0,000581
0,8000–0,8099	0,000765	0,9500–0,9599	0,000567
0,8100–0,8199	0,000752	0,9600–0,9699	0,000554
0,8200–0,8299	0,000738	0,9700–0,9799	0,000541
0,8300–0,8399	0,000725	0,9800–0,9899	0,000522
0,8400–0,8499	0,000712	0,9900–1,0000	0,000515

При плотности 647 кг/м<sup>3</sup> температурная поправка составляет 0.00095

$$a := 0.00095$$

$$\left[ \rho_{15}^{15} \right] := \frac{\rho}{1000} + 5 \cdot a$$

$$\left[ \rho_{15}^{15} \right] = 0.652$$

Энтальпия сырья с поправкой на давление

Поправку на давление находим по значениям приведенных температуры и давления. Абсолютная критическая температура сырья находится по формуле, °С

$$t_{кр} = 1.05 \cdot t_{ср} + 160^{\circ}\text{C}$$

где  $t_{ср}$ - средняя температура кипения фракции, °С

$$t_{кр} := 1.05 \cdot \frac{20 + 68}{2} + 160 = 206.2$$

$$T_{кр} := t_{кр} + 273 = 479.2 \text{ К}$$

Приведенная температура равна

$$T_{пр} := \frac{T}{T_{кр}} = 1.112$$

Критическое давление сырья (МПа) вычисляем по формуле

$$P_{кр} := \frac{0.1 \cdot T_{кр} \cdot K^{\frac{1}{2}}}{M}$$

где



$$K := \frac{1.216 \cdot \left[ 273 + \frac{(20 + 68)}{2} \right]^{\frac{1}{3}}}{\left[ P_{15}^{15} \right]} = 12.722$$

$$P_{кр} := \frac{0.1 \cdot T_{кр} \cdot K}{M} = 7.62$$

Приведенное давление равно

$$P_{пр} := \frac{P}{P_{кр}} = 0.262$$

Для определения энтальпии при давлении выше 0.4 МПа вводится поправка, которая определяется по формуле, кДж/кг

$$\frac{\Delta I \cdot M_{ср}}{T_{кр}} := \frac{-4.4 \cdot P_{пр}^3}{T_{пр}^3}$$

$$\Delta I := \frac{T_{кр} \cdot (-4.4) \cdot P_{пр} \cdot 4.184}{M \cdot T_{пр}^3} = -21.033$$

Энтальпия сырья с поправкой на давление равна, кДж/кг

$$\left[ I_{п}^{270} \right] := H_c + \Delta I = 1397.57$$

Теплоемкость сырья, кДж/кг\*К

$$C_c := \frac{\left[ I_{п}^{270} \right]}{T} = 2.622$$

Теплоемкость ВСГ (кДж/кг·К) можно найти по формуле

$$C_{ВСГ} = \sum C_{pi} \cdot y_i$$

где  $C_{pi}$  – теплоемкость отдельных компонентов с учетом поправок на температуру и давление, кДж/кг·К;  $y_i$  – массовая доля каждого компонента в ВСГ.

Теплоемкость индивидуальных компонентов с учетом поправок на температуру и давление представлена в таблице 2.14

Таблица 2.14 Теплоемкость индивидуальных компонентов

Теплоёмкость	H <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>
$C_p, \text{кДж} / (\text{кг} \cdot \text{К})$ $C_p, \text{ккал} / (\text{кг} \cdot ^\circ\text{C})$	14,570 3,480	3,350 0,800	3,290 0,786	3,230 0,772	3,180 0,760

Состав циркулирующего ВСГ представлен в табл. 2.5

$$C_{\text{ВСГ}} := 0.272 \cdot 14.57 + 0.334 \cdot 3.35 + 0.227 \cdot 3.29 + 0.118 \cdot 3.23 \dots = 6.366 \\ + 0.02 \cdot 3.18 + 0.029 \cdot 3.18$$

Кроме аккумулированного сырья тепла, в реакционную зону «приходит» теплота экзотермических реакций изомеризации и гидрирования. Расчеты представлены в таблице 2.15

Таблица 2.15 - Тепловые эффекты реакций

Компонент	$\Delta_r H^\circ$		Расход компонента G, кг/ч	Теплота Q, кДж/ч
	кДж/моль	кДж/кг		
	Тепловой эффект изомеризации n-C <sub>5</sub> , C <sub>6</sub>			
изо-пентан	8	111,11	19975,1	2219433,36
2-метилпентан	7,1	82,56	4048,16	334216,09
3-метилпентан	4,4	51,16	2006,17	102635,66
2,2-диметилбутан	18,3	212,79	6120,86	1302457,8
2,3-диметилбутан	10,6	123,26	4948,89	610000,18
метилциклопентан	15	178,57	2908,66	519399,42
	Тепловой эффект гидрирования			
бензол	208,22	2669,47	848,23	2264324,54
Итого				7352467,05

Средняя теплоемкость реакционной смеси определяется по формуле

$$C_{\text{см}} := \frac{C_c \cdot 100 + 28.41 \cdot C_{\text{ВСГ}}}{128.41} = 3.45$$

Количество тепла, вносимое сырьем с теплотой реакции равняется, кДж/ч

$$Q := C_{\text{см}} \cdot T \cdot (G + G_{\text{СВСГ}} + G_{\text{ЦВСГ}}) + 7352467.05 = 148418782.45$$

Теплоемкость нестабильного изомеризата (кДж/кг·К) можно найти по формуле

$$C_{\text{сырья}} = \sum C_{pi} \cdot y_i$$

где  $C_{pi}$  – теплоемкость отдельных компонентов с учетом поправок на температуру и давление, кДж/кг·К;  $y_i$  – массовая доля каждого компонента в нестабильном изомеризате

Теплоемкость нестабильного изомеризата вычисляется по формуле, кДж/кг·К

$$C_{\text{и}} := 14.53 \cdot 0.001 + 3.05 \cdot 0.003 + 2.7 \cdot 0.002 + 2.65 \cdot 0.008 + 2.6 \cdot 0.011 + 2.60 \cdot 0.013 + 2.6 \cdot 0.332 \dots = 2.662 \\ + 2.58 \cdot 0.195 + 2.2 \cdot 0.037 + 2.8 \cdot 0.102 + 2.8 \cdot 0.082 + 2.85 \cdot 0.067 + 2.85 \cdot 0.033 \dots \\ + 2.85 \cdot 0.056 + 2.5 \cdot 0.048 + 2.45 \cdot 0.009$$

Энтальпия нестабильного изомеризата вычисляется по формуле, кДж/кг

$$H_{\text{и}} := T \cdot C_{\text{и}} = 1.419 \times 10^3$$

Теплоемкость нестабильного изомеризата с учетом поправкой на давление вычисляется по формуле, кДж/кг

$$H_{\text{ни}} := H_{\text{н}} + \Delta I = 1397.94$$

Теплоемкость нестабильного изомеризата с учетом поправкой на давление, кДж/кг\*К

$$C_{\text{ни}} := \frac{H_{\text{ни}}}{T} = 2.623$$

Средняя теплоемкость продуктов реакции определяется по формуле, кДж/кг\*К

$$C_{\text{пр}} := \frac{C_{\text{н}} \cdot 100 + 28.41 \cdot C_{\text{ВСТ}}}{128.41} = 3.451$$

По правилу теплового баланса, сколько тепла вошло, столько тепла и вышло, тогда температура нестабильного изомеризата на выходе из реактора равняется, К

$$T_{\text{в}} := \frac{Q}{C_{\text{пр}} \cdot (G + G_{\text{СВСТ}} + G_{\text{ЦВСТ}})} = 560.692$$

и в градусах цельсия, °С

$$t := T_{\text{в}} - 273 = 287.69$$

В реакторе происходит повышение температуры на 17,69 °С

В случаях прироста температуры больше, чем на 25°С рекомендуется охладить реакционную смесь по ходу ее движения в слое катализатора. Такое промежуточное охлаждение теоретически возможно в двух вариантах:

1) использование двух и более реакторов, при этом между реакторами монтируются межступенчатые холодильники (теплообменники), в которых реакционные смеси частично охлаждаются, отдавая тепло для предварительного нагрева газо-сырьевых смесей;

2) применение двух -(и более) секционных реакторов для организации межступенчатого ввода холодного ВСТ, при нагреве которого снимается избыток тепла. Однако этот вариант имеет существенные ограничения по суммарному количеству водорода в реакционной зоне: как известно, для процесса изомеризации большую роль играет поддержание оптимального мольного соотношения водорода к сырью в узком интервале значений для каждого типа и марки катализатора. В промышленности квенчинг реактора холодным ВСТ не применяют.

### 5.3. Расчёт реакторного блока

Объём паров смеси сырья и циркулирующего газа, проходящих через сечение реактора определяем по формуле [6]:

$$V_{см} = V_c + V_{всг}$$

где  $V_c$  - сырья,  $m^3/c$ ;  $V_{всг}$  - объём циркулирующего водородсодержащего газа,  $m^3/c$ .

Объём сырья рассчитывается по формуле,  $m^3/ч$

$$V_c := \frac{G}{\rho} = 92.326$$

Объём катализатора в реактора определяется по формуле,  $m^3$

$$V_k := \frac{V_c}{\omega} = 61.551$$

Объём паров сырья на входе в реактор определяется по формуле

$$V_c := 22.4 \cdot \frac{t_{ср} + 273}{273} \cdot \frac{0.1}{P} \cdot \frac{1}{3600} \cdot z \cdot \frac{G}{M_{ср}}$$

где  $G$  – расход сырья поступающего в реактор,  $кг/ч$ ;  $z$  – коэффициент сжимаемости;  $t_{ср}$  – средняя температура в реакторе,  $^{\circ}C$ ;  $M_{ср}$  – средняя молекулярная масса сырья;  $P$  – давление в реакторе,  $МПа$ .

$$z := 0.95 \qquad t_{ср} := \frac{270 + 300}{2} = 285$$

$$V_c := 22.4 \cdot \frac{t_{ср} + 273}{273} \cdot \frac{0.1}{P} \cdot \frac{1}{3600} \cdot z \cdot \frac{G}{M} = 0.451$$

Суммарный объём ВСГ ( $V_{всг}$ ) на входе в реактор определяют по формуле,  $m^3/c$

$$z := 1$$

$$V_{всг} := 22.4 \cdot \frac{t_{ср} + 273}{273} \cdot \frac{0.1}{P} \cdot \frac{1}{3600} \cdot \frac{(G_{свсг} + G_{цвсг})}{M_{ц}} \cdot z$$

где  $G_{свсг} + G_{цвсг}$  – расход ВСГ поступающего в реактор,  $кг/ч$ ;  $z$  – коэффициент сжимаемости, для газа значительно разбавленного водородом можно принять равным 1;  $t_{ср}$  – средняя температура в реакторе,  $^{\circ}C$ ;  $M_{ц}$  – средняя молекулярная масса ВСГ;  $P$  – давление в реакторе,  $МПа$ .

$$M_{ц} := 0.81 \cdot 2 + 0.124 \cdot 16 + 0.045 \cdot 30 + 0.016 \cdot 44 + 0.005 \cdot 58 = 5.948$$

$$V_{\text{ВСТ}} := 22.4 \cdot \frac{t_{\text{ср}} + 273}{273} \cdot \frac{0.1}{P} \cdot \frac{1}{3600} \cdot \frac{(G_{\text{СВСТ}} + G_{\text{ЦВСТ}})}{M_{\text{ц}}} \cdot z = 1.814$$

Находят секундный объем смеси паров сырья и ЦВСТ при температуре и давлении на входе в реактор, м<sup>3</sup>/с

$$V_{\text{см}} := V_{\text{с}} + V_{\text{ВСТ}} = 2.266$$

Находим сечение реактора по формуле, м<sup>2</sup>

$$F := \frac{V_{\text{см}}}{u}$$

где  $u$  – линейная скорость движения сырья, м/с

$$u := 0.35$$

$$F := \frac{V_{\text{см}}}{u} = 6.473$$

Находим диаметр реактора по формуле, м

$$d := \sqrt{\frac{4 \cdot F}{\pi}} = 2.871$$

Округляем диаметр реактора до 2.9 метра  $d := 2.9$

Находим новое сечение реактора по формуле, м<sup>2</sup>

$$F := \frac{\pi \cdot d^2}{4} = 6.605$$

Зная сечение аппарата и объем катализатора, определяем высоту слоя катализатора по формуле, м

$$h_{\text{кат}} := \frac{V_{\text{k}}}{F} = 9.318$$

Реактор заполняют катализатором на 2/3 высоты цилиндрической части аппарата. Высоту цилиндрической части реактора находим по формуле, м:

$$h_{\text{цил}} := \frac{h_{\text{кат}} \cdot 3}{2} = 13.978$$

Общую высоту реактора находим по формуле

$$H := h_{\text{цил}} + 2 \cdot h_{\text{дн}}$$

где  $h_{\text{дн}}$  – высота верхнего и нижнего днища, м.

$$h_{\text{дн}} := \frac{1}{2} \cdot d = 1.45$$

$$H := h_{\text{цил}} + 2 \cdot h_{\text{дн}} = 16.878$$

Общую высоту округляем до 16,9 м.  $H := 16.9$

## 5.4. Расчет гидравлического сопротивления реактора

Характеристика катализатора:

- насыпная плотность – 700 кг/м<sup>3</sup>;
- кажущаяся плотность – 1250 кг/м<sup>3</sup>;
- средний диаметр частиц – 1,75·10<sup>-3</sup> м

Порозность слоя вычисляют по формуле

$$E := 1 - \frac{700}{1250} = 0.44$$

Среднюю молекулярную массу смеси определяют по формуле

$$M_{\text{ср}} := \frac{G + G_{\text{СВСГ}} + G_{\text{ЦВСГ}}}{\frac{G}{M} + \frac{G_{\text{СВСГ}} + G_{\text{ЦВСГ}}}{M_{\text{ц}}}} = 21.307$$

По уравнению Фроста находим динамическую вязкость смеси, Па\*с:

$$\mu := (t_{\text{ср}} + 273) \cdot (6.6 - 2.25 \cdot \log(M_{\text{ср}})) \cdot 10^{-8} = 2.015 \times 10^{-5}$$

Средний диаметр частиц катализатора принимаем  $d_{\text{ч}} = 1,75 \cdot 10^{-3}$  м.

$$d_{\text{ч}} := 1.75 \cdot 10^{-3}$$

Общий объем смеси равен, м<sup>3</sup>/ч

$$V_{\text{см}} := V_{\text{см}} \cdot 3600 = 8156$$

Плотность реакционной смеси в условиях процесса определяем по формуле, кг/м<sup>3</sup>

$$\rho_{\text{см}} := \frac{G + G_{\text{СВСГ}} + G_{\text{ЦВСГ}}}{V_{\text{см}}} = 9.405$$

Линейная скорость потока равна, м/с

$$u := \frac{4 \cdot V_{\text{см}}}{3.14 \cdot d^2} \cdot \frac{1}{3600} = 0.343$$

Потерю напора в слое катализатора вычисляют по формуле, кг/м<sup>2</sup>

$$\Delta P := \left[ \frac{150 \cdot (1 - E)^2 \cdot 0.1 \cdot \mu \cdot u}{E^3 \cdot d_{\text{ч}}^2} + \frac{1.75 \cdot (1 - E) \cdot \rho \cdot u^2}{E^3 \cdot d_{\text{ч}} \cdot 9.81} \right] \cdot H = 14650.65$$

Гидравлическое сопротивление в МПа

$$\frac{\Delta P}{10^5} = 0.147$$

Таким образом, потеря напора катализатора не превышает предельно допустимых значений 0,2–0,3 МПа.

## **6. Экономическое обоснование процесса**

Достоинства:

Себестоимость изомеризатов примерно в 3 раза ниже, чем алкилатов. Причем процесс изомеризации имеет более обширную и на дежную сырьевую базу, чем алкилирование.

Смешивание изомеризата с другими компонентами товарных бензинов.

Высокий выход изомеризата.

Недостатки:

Высокая стоимость катализатора на основе платины и его высокая чувствительность к каталитическим ядам.

Невысокое число изомеризатов при схеме изомеризации «за проход», порядка 82-84 ОЧИМ. Для достижения более высоких показателей октанового числа применяются схемы с рециклами н-пентанов и н-гексанов, что несет за собой увеличение капитальных затрат при строительстве установки.

В перспективе процесс изомеризации может быть интенсифицирован применением низкотемпературных катализаторов, переводом ректификации на цеолитное или мембранное разделение.

## 7. Выводы (Conclusions)

Выполненные расчеты процесса изомеризации позволило нам понять следующее:

1. Какие фракции расходуются и что получится в процессе изомеризации (состав и расход сырья по группам компонентов, расход и состав газов гидрокрикинга, расход и состав газов изомеризации) результаты представлены в таблицах (3,4,5).

2. Материальный баланс реакторного блока имеет следующий состав: *i*-пентан, *n*-пентан, *i*-гексан, *n*-гексан, ВСГ и результат представлен в таблице 6.

3. Тепловой баланс реактора в результате расчета составил общее теплосодержание смеси на выходе из реактора ( $Q_{пр}$ ) 1200 мДж/ч, теплосодержание сырьевой смеси ( $Q_c$ ), поступающей в реактор 859 мДж/ч.

4. Гидравлический расчет реактора, в результате расчета составил перепад давления в слое катализатора  $\Delta P=0$ .

Анализ развития процесса изомеризации показал его стремительно возрастающую конкурентоспособность по сравнению с другими процессами, направленными на получение компонентов бензинов. При этом схемы проектируемых и реконструируемых процессов изомеризации преимущественно снабжены рециклом низкооктановых пентанов и гексанов, что связано с необходимостью получения автобензинов, соответствующих все более жестким стандартам.

Был рассчитан материальный баланс установки изомеризации технологии «за проход», в результате изомеризации было повышено октановое число на 7,4 единиц (на 10,3%). Был рассчитан тепловой баланс, тепловой баланс показал, что температура на выходе из реактора составила на 17,69 °С больше, чем температура сырья, необходимости в применении квенчинга или разделение реактора на несколько секций нет. В результате конструктивных расчетов получили диаметр и высоту реактора. Высота составляет 16,9 м., диаметр 2,9 м. Гидравлическое сопротивление реактора не превышает предельно допустимых значений, по этой причине размер катализатора и его загрузку менять не нужно.



## Библиография (Bibliography)

1. Ахметов С.А. Технология глубокой переработки нефти и газа: Учебное пособие для вузов. Уфа: Гилем, 2002. - 672 с.
2. ГОСТ 32513-2013. Топлива моторные. Бензин неэтилированный. Технические условия [Текст]. – Москва. Изд-во стандартов, 2015. - 14 с.
3. Ясакова Е.А., Ситдикова А.В., Ахметов А.Ф. Тенденции развития процесса изомеризации в России и за рубежом // Нефтегазовое дело. – 2010. № 7. – С. 1-19.
4. Установка каталитической изомеризации: ПроНПЗ [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://pronpz.ru/ustanovki/kat-izomerizatsiya.html>
5. Пильщиков В.А., Пимерзин Ал.А., Пимерзин А.А. Каталитическая изомеризация легких парафиновых углеводородов и легких бензиновых фракций: учебно-методическое пособие. - Самара: Самар, гос. техн. ун-т, 2016. - 55 с.
6. Солодова Н.Л., Терентьева Н.А. Гидроочистка топлив: учебное пособие. Казань: Изд-во Казан. гос. технол. ун-та, 2008.– 103 с.