

## Метод определения кинетики реакции гидрогенолиза пропана для реактора конверсии газового конденсата

Созонов М.В.<sup>1</sup>, Ельшев А.В.<sup>2</sup>, Зажигалов С.В.<sup>3</sup>, Харитонцев В.Б.<sup>4</sup>, Сибаа М.<sup>5</sup>

1 - Тюменский государственный университет, Физико-технический институт, Тюмень, Россия, *E-mail: m.v.sozonov@yandex.ru*; 2 - Тюменский государственный университет, Институт химии, Тюмень, Россия, *E-mail: a.v.elyshev@utmn.ru*; 3 - Новосибирский государственный университет, Механико-математический факультет, Новосибирск, Россия, *E-mail: s.v.zazhigalov@utmn.ru*; 4 -

Тюменский государственный университет, Институт химии, Тюмень, Россия, *E-mail: haritoncev86@mail.ru*; 5 - Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия, *E-mail: m.sibaa@utmn.ru*

Для проектирования эффективной установки конверсии газового конденсата в процессе гидрогенолиза требуются данные по кинетике реакций, необходимые для создания компьютерной модели каталитического реактора. Для этого на основе экспериментальных данных по гидрогенолизу пропана, одного из основных компонентов газоконденсата [1], на Ni-катализаторе в диапазоне температур 20–450 °С была построена компьютерная CFD-модель (CFD – Computational Fluid Dynamics) реактора и опробован метод поиска кинетических коэффициентов уравнения скорости реакции. Моделирование проводилось в COMSOL Multiphysics, подбор коэффициентов осуществлялся с помощью метода оптимизации Parameter Estimation, использующего метод наименьших квадратов для оценки параметров.

Полученные результаты показывают хорошее соответствие с экспериментом (рис.). Дальнейшее уточнение модели должно включать расчёт смесей с другим соотношением  $C_3H_8/H_2$  для более точного определения порядка реакции по пропану и водороду.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-73-10015, <https://rscf.ru/project/22-73-10015/>*

### Источники и литература

- 1) Мамонтова Ю. В., Мурыхныч Н. А. Нестабильный газовый конденсат: определение углеводородного состава методом газовой хроматографии без предварительного разгазирования пробы: преимущества и недостатки // Вестник Тюменского государственного университета. Экология и природопользование. 2014. № 5. С. 55-62.

### Иллюстрации

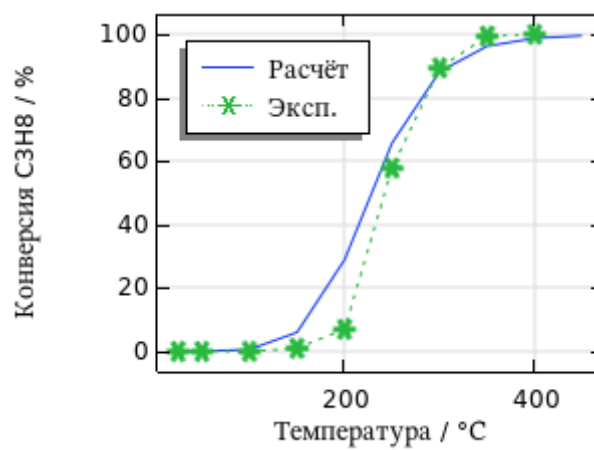


Рис. : Конверсия пропана в зависимости от температуры