

УДК 665.6/.7  
МРНТИ 61.51.01

DOI: <https://doi.org/10.54859/kjogi108790>

Получена: 07.10.2024.

Одобрена: 29.11.2024.

Опубликована: 31.12.2024.

## Оригинальное исследование

# Интеграция термо-, гидродинамических, кинетических факторов в математическом моделировании процесса каталитического риформинга

Г.Ж. Сейтенова<sup>1</sup>, Р.М. Дюсова<sup>2</sup>, Е.А. Жакманова<sup>3</sup>, Я. Сергеевс<sup>2</sup>, М. Борашова<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Ассоциация производителей и потребителей нефтегазохимической продукции (Нефтегазохимическая Ассоциация), г. Астана, Казахстан

<sup>2</sup>Торайгыров Университет, г. Павлодар, Казахстан

<sup>3</sup>Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, г. Астана, Казахстан

<sup>4</sup>Атырауский университет нефти и газа им. С. Утебаева, г. Атырау, Казахстан

## АННОТАЦИЯ

**Обоснование.** Интеграция различных факторов, влияющих на технологические процессы нефтеперерабатывающей промышленности, является ключом к повышению эффективности и устойчивости этой отрасли. В условиях изменяющегося рынка и ужесточения экологических требований важно постоянно обновлять подходы, разрабатывать инновационные решения и оптимизировать производственные процессы для достижения наилучших результатов.

**Цель.** Целью исследования является объединение термодинамических, кинетических и гидродинамических аспектов в единую модель, а также её валидация на основе экспериментальных данных и реальных условий эксплуатации, чтобы обеспечить точность и надёжность предсказаний модели.

**Материалы и методы.** Основные методы исследования включают статистический анализ данных, моделирование процессов и экспериментальные исследования на различных стадиях технологического цикла.

**Результаты.** В результате работы были выявлены ключевые параметры, которые оказывают наибольшее влияние на качество конечного продукта и эффективность производства. Кроме того, предложены рекомендации по оптимизации производственных процессов с учётом полученных данных.

**Заключение.** Основные выводы исследования заключаются в том, что интеграция различных факторов позволяет значительно улучшить показатели производства и снизить затраты на переработку сырья. Исследование подчеркивает важность комплексного подхода к управлению производственными процессами в нефтеперерабатывающей промышленности, что может быть полезно для дальнейшего развития отрасли. Разработанная модель может быть использована для обучения персонала в области моделирования технологических процессов, обладает интуитивным интерфейсом и не требует глубоких знаний в программировании, что делает её идеальной для начальной подготовки специалистов.

**Ключевые слова:** математическое моделирование, каталитический риформинг, топливо, повышение эффективности, оптимизация, термодинамика, гидродинамика, кинетика.

## Как цитировать:

Сейтенова Г.Ж., Дюсова Р.М., Жакманова Е.А., Сергеевс Я., Борашова М. Интеграция термо-, гидродинамических, кинетических факторов в математическом моделировании процесса каталитического риформинга // Вестник нефтегазовой отрасли Казахстана. 2024. Том 6, №4. С. 112–121. DOI: <https://doi.org/10.54859/kjogi108790>.

UDC 665.6/.7

CSCSTI 61.51.01

DOI: <https://doi.org/10.54859/kjogi108790>

Received: 07.10.2024.

Accepted: 29.11.2024.

Published: 31.12.2024.

## Original article

# Integration of Thermo-, Hydrodynamic, and Kinetic Factors in the Mathematical Modeling of the Catalytic Reforming Process

Gayni Zh. Seitenova<sup>1</sup>, Rizagul M. Dyussova<sup>2</sup>, Yekaterina A. Zhakmanova<sup>3</sup>, Yakobs Sergeevs<sup>2</sup>, Moldir Borashova<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Association of Producers and Consumers of Petrogaschemical Products (Petrogaschemical Association), Astana, Kazakhstan

<sup>2</sup>Toraighyrov University, Pavlodar, Kazakhstan

<sup>3</sup>Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

<sup>4</sup>Atyrau University of Oil and Gas, Atyrau, Kazakhstan

## ABSTRACT

**Background:** The integration of various factors affecting processes in oil refining is crucial for enhancing both the efficiency and sustainability of the industry. In a changing market and increasingly stringent environmental regulations, it is essential to continuously update approaches, develop innovative solutions, and optimize production processes to achieve the best possible outcomes.

**Aim:** The study aims to integrate thermodynamic, kinetic and hydrodynamic aspects into a unified model, and to validate the outcome based on experimental data and real-world operating conditions to ensure the accuracy and reliability of model predictions.

**Materials and methods:** The primary research methods include statistical data analysis, process modeling, and experimental studies at various stages of the production cycle.

**Results:** The study identified the key parameters that significantly impact the quality of the final product and production efficiency. Furthermore, it offers recommendations for optimizing production processes based on the data obtained.

**Conclusion:** The study concludes that integrating various factors can significantly enhance production performance and reduce refining costs. The study emphasizes the importance of an integrated approach to the management of production processes in the oil refining industry, which can facilitate the further development of the industry. The model created can be utilized for training personnel in process simulation. With its user-friendly interface, it requires no extensive programming knowledge, making it well-suited for the initial training of specialists.

**Keywords:** *mathematical modeling; catalytic reforming; fuel; efficiency improvement; optimization; thermodynamics; hydrodynamics; kinetics.*

## To cite this article:

Seitenova GZ, Dyussova RM, Zhakmanova YA, Sergeevs Y, Borashova M. Integration of Thermo-, Hydrodynamic, and Kinetic Factors in the Mathematical Modeling of the Catalytic Reforming Process. *Kazakhstan journal for oil & gas industry*. 2024;6(4):112–121. DOI: <https://doi.org/10.54859/kjogi108790>

ӨЖ 665.6/.7  
FTAХР 61.51.01

DOI: <https://doi.org/10.54859/kjogi108790>

Қабылданды: 07.10.2024.

Мақұлданды: 29.11.2024.

Жарияланды: 31.12.2024.

## Түпнұсқа зерттеу

# Каталитикалық риформинг процесін математикалық модельдеудегі термо-, гидродинамикалық, кинетикалық факторлардың интеграциясы

Г.Ж. Сейтенова<sup>1</sup>, Р.М. Дюсова<sup>2</sup>, Е.А. Жакманова<sup>3</sup>, Я. Сергеевс<sup>2</sup>, М. Борашова<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Мұнай-газ-химия өнімдерін өндірушілер мен тұтынушылар қауымдастығы (Мұнай-газ-химия қауымдастығы), Астана қаласы, Қазақстан

<sup>2</sup>Торайғыров Университеті, Павлодар қаласы, Қазақстан

<sup>3</sup>Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана қаласы, Қазақстан

<sup>4</sup>С. Өтебаев атындағы Атырау мұнай және газ университеті, Атырау қаласы, Қазақстан

## АННОТАЦИЯ

**Негіздеу.** Мұнай өңдеу өнеркәсібінің технологиялық процестеріне әсер ететін әртүрлі факторлардың интеграциясы осы саланың тиімділігі мен тұрақтылығын арттырудың кілті болып табылады. Өзгермелі нарық пен экологиялық талаптардың қатаңдауы жағдайында ең жақсы нәтижеге қол жеткізу үшін тәсілдерді үнемі жаңартып отыру, инновациялық шешімдерді әзірлеу және өндірістік процестерді оңтайландыру маңызды.

**Мақсаты.** Біздің зерттеуіміздің мақсаты - термодинамикалық, кинетикалық және гидродинамикалық аспектілерді біртұтас модельге біріктіру, сонымен қатар модель болжамдарының дәлдігі мен сенімділігін қамтамасыз ету үшін эксперименттік мәліметтер мен нақты пайдалану жағдайларына негізделген валидация.

**Материалдар мен әдістер.** Зерттеудің негізгі әдістеріне статистикалық деректерді талдау, процестерді модельдеу және технологиялық циклдің әртүрлі кезеңдеріндегі эксперименттік зерттеулер жатады.

**Нәтижелері.** Жұмыс нәтижесінде түпкілікті өнімнің сапасы мен өндіріс тиімділігіне үлкен әсер ететін негізгі параметрлер анықталды. Сонымен қатар, алынған деректерді ескере отырып, өндірістік процестерді оңтайландыру бойынша ұсыныстар ұсынылған.

**Қорытынды.** Зерттеудің негізгі қорытындылары әртүрлі факторларды біріктіру өндіріс көрсеткіштерін айтарлықтай жақсартуға және шикізатты өңдеу шығындарын азайтуға мүмкіндік береді. Зерттеу мұнай өңдеу өнеркәсібіндегі өндірістік процестерді басқарудың кешенді тәсілінің маңыздылығын көрсетеді, бұл саланы одан әрі дамыту үшін пайдалы болуы мүмкін. Өзірленген модельді технологиялық процестерді модельдеу саласында персоналды оқыту үшін пайдалануға болады, интуитивті интерфейске ие және бағдарламалауда терең білімді қажет етпейді, бұл оны мамандарды бастапқы даярлау үшін өте қолайлы етеді.

**Негізгі сөздер:** математикалық модельдеу, каталитикалық риформинг, отын, тиімділікті арттыру, оңтайландыру, термодинамика, гидродинамика, кинетика.

## Дәйексөз келтіру үшін:

Сейтенова Г.Ж., Дюсова Р.М., Жакманова Е.А., Сергеевс Я., Борашова М. Каталитикалық риформинг процесін математикалық модельдеудегі термо-, гидродинамикалық, кинетикалық факторлардың интеграциясы // Қазақстанның мұнай-газ саласының хабаршысы. 2024. 6 том, №4. 112–121 б.

DOI: <https://doi.org/10.54859/kjogi108790>.

## Введение

Производство нефтепродуктов остаётся актуальным в мире, несмотря на сдвиг к использованию альтернативных, экологически чистых источников энергии. Для устойчивого развития страны необходимо принимать меры для оптимизации существующих предприятий, производящих нефтепродукты (префективность, энергосбережение, ресурсоэффективность, декарбонизация, эффективная эксплуатация и варианты чистой ликвидации).

В Казахстане три крупных нефтеперерабатывающих предприятия. Согласно годовому отчету АО НК «КазМунайГаз» за 2022 г. нефтеперерабатывающие (далее – НПЗ) и нефтехимические (далее – НХЗ) заводы Казахстана имеют следующие индексы Нельсона: Атырауский НПЗ – 13,9, Павлодарский НХЗ – 10,5, Шымкентский НПЗ – 8,2. Современные НПЗ США и Европы имеют индекс Нельсона свыше 15, при этом в рыночных условиях смогут выжить НПЗ с индексом Нельсона не ниже 10 [1].

Для повышения мощности и глубины переработки эффективно используется метод математического моделирования. Этот подход помогает решать задачи рационального использования углеводородных ресурсов, прогнозирования состава продуктов и планирования, а также оптимизации работы действующих нефтеперерабатывающих установок с целью увеличения ресурсоэффективности и энергосбережения. Применение математических моделей в нефтехимической промышленности предоставляет возможность не только разрабатывать, но и оптимизировать технологические режимы эксплуатации как для нового, так и для действующего оборудования. Это позволяет гибко адаптировать установки к изменяющемуся составу сырья, обеспечивая стабильность производственных процессов и повышение их эффективности.

Современные модели процесса каталитического риформинга объединяют несколько подходов для более точного описания. Кинетические модели позволяют предсказывать изменение состава продукта на основе реакционных механизмов, но для достижения полной картины процесса их необходимо сочетать с гидродинамическими и термодинамическими моделями. Например, для реакторов с неподвижным слоем катализатора важно учитывать распределение температуры и давления, что делает интеграцию гидродинамики и теплопередачи в модель крайне важной.

Каталитический риформинг – это процесс с высокой экзотермичностью реакций, что требует точного контроля над температурным режимом реактора. Неравномерное распределение температуры может привести к снижению активности катализатора, деградации продукта или даже повреждению оборудования.

Целью нашего исследования является объединение термодинамических, кинетических и гидродинамических аспектов в единую модель, а также её валидация на основе экспериментальных данных и реальных условий эксплуатации, чтобы обеспечить точность и надёжность предсказаний модели.

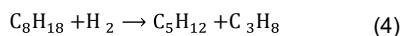
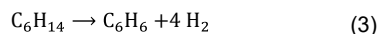
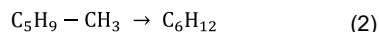
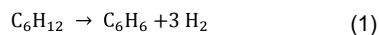
При создании математической модели каталитического риформинга критически учитывались термодинамические параметры (температура, давление, состав исходных реагентов), кинетические параметры (коэффициенты скорости реакций, механизмы реакций и энергия активации) и гидродинамические параметры (скорость потока, распределение скорости и поведение потока). Также учитывались катализаторные параметры (тип, состав и активная поверхность катализатора), параметры реактора (тип, размер и форма) и теплообмен. Все эти факторы влияют на точность модели и эффективность предсказаний для оптимизации процесса.

## Материалы и методы исследования

Объект исследования – установка каталитического риформинга, производительность которой составляет 1000 тыс. т/г.

Каталитический риформинг представляет собой сложный химический процесс, включающий в себя множество реакций, благодаря которым существенно изменяется углеводородный состав бензиновых фракций. Основная цель процесса – ароматизация бензинов. Достигается она путём дегидрогенизации шестичленных нафтен и дегидроциклизации парафинов:

- дегидрогенизация шестичленных нафтен (1);
- дегидрогенизация пятичленных нафтен (2);
- дегидроциклизация парафинов (3);
- гидрокрекинг парафинов (4).



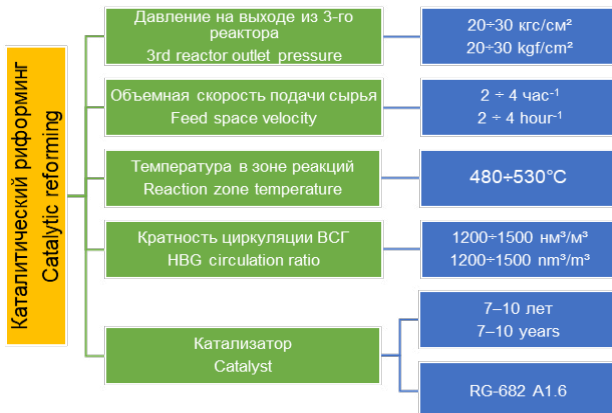
Помимо этого, процесс включает реакции изомеризации, крекинга и гидроочистки, которые также влияют на состав и качество продуктов. В результате всего комплекса реакций увеличивается выход ароматических углеводородов (далее – УВ), таких как бензол, толуол и ксилол. Поскольку основные реакции риформинга требуют тепла, важным аспектом процесса является поддержание высокой температуры для обеспечения стабильности и эффективности каталитических преобразований.

Параметры работы установки каталитического риформинга представлены на рис. 1. Тяжёлая бензиновая фракция, используемая в качестве сырья, поступает из кубовой части сплиттера нефти секции на вход сырьевых насосов блока риформинга, а затем направляется на смешение с водородсодержащим газом (рис. 2).

**Математическое моделирование процесса каталитического риформинга**

На первом этапе были использованы результаты экспериментальных исследова-

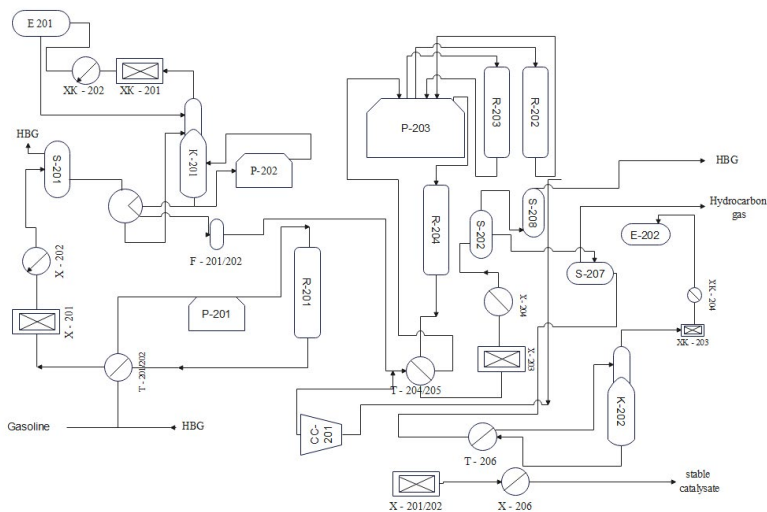
ний, зафиксированные методом газовой хроматографии [2–5]. Данные по технологическому режиму установки были взяты с завода (табл. 1). Математическое моделирование химико-технологических процессов представляет собой мощный инструмент для анализа и оптимизации технологических систем через серию комплексных компьютерных расчётов. Этот метод позволяет оперативно получить детализированное описание работы проектируемого оборудования, а также выявить основные закономерности исследуемого процесса, что способствует дальнейшей его оптимизации. В основе этого подхода



**Рисунок 1. Параметры работы установки каталитического крекинга**

**Figure 1. Operating parameters of the catalytic cracking unit**

ВСГ / HBG – водородсодержащий газ / hydrogen-bearing gas; RG-682 A1.6 – катализатор риформинга / reforming catalyst



**Рисунок 2. Установка каталитического риформинга**  
**Figure 2. Catalytic Reforming Unit**

R – реактор / reactor; P – печь / furnace; S – сепаратор / separator; T – теплообменник / heat exchanger; F – фильтр / filter; CC – компрессор циркуляционного газа / cycled gas compressor; K – стабилизационная колонна / stabilizer; E – ёмкость орошения / reflux drum; XK – холодильник-конденсатор / condenser cooler; X – холодильник / cooler; HBG – водородсодержащий газ / hydrogen-bearing gas.

лежит разработка математической модели, выбор эффективных алгоритмов для её решения, а также создание программного обеспечения, обеспечивающего точные и оперативные расчёты.

На этапе построения модели для процессов каталитического риформинга первостепенной задачей является определение ключевых химических реакций и механизмов их протекания. Важно учитывать термодинамические, кинетические и гидродинамические параметры, такие как энтальпия, энтропия, энергия Гиббса и степень превращения вещества, а также активность катализатора, применяемого в реакторе.

Каталитический риформинг значительно трансформирует углеводородный состав бензиновых фракций, увеличивая содержание ароматических УВ благодаря ряду каталитических реакций. Эти реакции включают дегидрирование циклогексана и его производных, изомеризацию и последующее дегидрирование производных циклопентана, а также дегидроциклизацию парафинов. Дополнительные важные реакции, такие как гидрокрекинг, гидрогенолиз и изомеризация УВ, оказывают существенное влияние на конечный состав продуктов. Для предотвращения образования кокса процесс часто проводят при высоком давлении водорода, используя движущийся слой катализатора, что обеспечивает его непрерывную регенерацию и стабильность работы системы [6, 7].

Термодинамический анализ реакций осуществляется для оценки вероятности протекания каждой стадии процесса. При этом рассчитываются значения энергии Гиббса (5), константы равновесия реакций, энтальпия и энтропия реакций (6):

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \tag{5}$$

$$\ln(K_p) = -\frac{\Delta G}{RT} \tag{6}$$

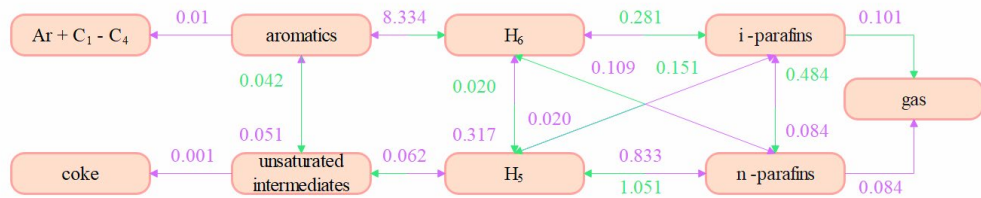
где  $G$  – свободная энергия Гиббса, кДж/моль;  $H$  – Энтальпия, Дж/моль;  $T$  – температура, К;  $S$  – энтропия, Дж/К;  $K_p$  – стандартная константа равновесия;  $R$  – универсальная газовая постоянная, 8,314 Дж/(моль·К).

Термодинамическое моделирование включает расчёты распределения температуры по длине реактора и по всему объёму катализаторного слоя. Это требует решения уравнений теплообмена в комбинации с уравнениями состояния вещества, чтобы определить равновесие фаз и изменение состояния катализатора при различных температурах.

Разработанная система включает 69 групповых компонентов. Математическая модель представляет собой комбинацию, основанную на ранее предложенных моделях. Она описывается системой из 70 диф-

**Таблица 1. Технологические параметры установки каталитического риформинга**  
**Table 1. Technological Parameters of the Catalytic Reforming Unit**

№	Параметры Parameters	Давление, атм Pressure, atm	Температура, °С Temperature, °C	Перепад температур, °С Temperature difference, °C
1	Реактор R-202 / Reactor R-202	20	498,4	60
2	Реактор R-203 / Reactor R-203	20	498,7	25
3	Реактор R-204 / Reactor R-204	20	498,5	10
4	Объём переработанного сырья, т Processed feed volume, tons	637171		
5	Расход ВСГ, м³/ч HVG consumption, m³/hour	194603		
6	Влажность ВСГ, ppm / HVG humidity, ppm	15,0		
7	Серы в гидрогенизате, ppm Sulfur in hydrogenate, ppm	0,10		
8	Расход сырья, м³/ч Feed consumption, m³/hour	130,0		



**Рисунок 3. Цепочка превращений УВ в процессе каталитического риформинга, учитывающая константы скорости химических реакций**  
**Figure 3. Hydrocarbon transformation chain in the catalytic reforming process, taking into account the rate constants of chemical reactions**



ференциальных уравнений (69 уравнений для групп компонентов и одно уравнение для температуры), представленных уравнениями (7–8) и (9). Численное решение данной системы осуществлено с использованием многошагового метода, реализованного в специально разработанной компьютерной программе. Схема реакций была разработана на основе экспериментальных данных по составу сырья и продуктов с учетом термодинамических расчетов [8–9] (рис. 3).

На основе предложенных схем превращений были разработаны кинетические модели процесса, а также составлены уравнения материальных и тепловых балансов. Путём решения обратной кинетической задачи были рассчитаны значения констант скоростей реакций. Константа скорости реакции  $k_i$  подчиняется зависимости Аррениуса (7):

$$k_i = A_i \cdot \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) \quad (7)$$

где  $A_i$  – предэкспоненциальный фактор (частота столкновений);  $E_a$  – энергия активации.

Для описания поведения потоков газа и жидкости в реакторе используются уравнения Навье-Стокса (8):

$$\rho = \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \cdot \nabla v\right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 v + f \quad (8)$$

где  $\rho$  – плотность жидкости, кг/м<sup>3</sup>;  $v$  – вектор скорости потока, м/с;  $p$  – давление, Па;  $\mu$  – динамическая вязкость, Па·с;  $f$  – внешние силы (например, гравитация).

Для моделирования теплообмена в каталитическом риформинге необходимо использовать уравнение теплопередачи (9):

$$\partial T / \partial t + v \cdot \nabla T = k / (\rho C_p) \nabla^2 T + Q / (\rho C_p) \quad (9)$$

где  $k$  – коэффициент теплопроводности, Вт/м·К;  $C_p$  – теплоемкость, Дж/кг·К;  $Q$  – источник тепла, Вт/м<sup>3</sup> (например, теплота реакции).

В реакторах с неподвижным слоем катализатора потоки газа или жидкости описаны через модели конвективно-дисперсионного переноса (10):

$$u \frac{\partial C_i}{\partial z} = D_{ax} \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} + R_i \quad (10)$$

где  $u$  – средняя скорость потока вдоль оси реактора, м/с;  $D_{ax}$  – осевой коэффициент дисперсии.

Учёт процесса дезактивации при эксплуатации платиносодержащих катализаторов риформинга вследствие закоксовывания кислотных и металлических центров осуществляется при построении модели через функцию дезактивации (11–12):

$$K'_{jm} = K_{jm} \cdot F_m \quad (11)$$

$$K'_{jk} = K_{jk} \cdot F_k \quad (12)$$

где  $K_{jm}$ ,  $K_{jk}$  – константы скоростей стадий, протекающих на металлических и кислотных центрах закоксованного катализатора, соответственно;  $F_m$ ,  $F_k$  – функции дезактивации металлических и кислотных центров катализаторов.

После идентификации пиков и определения массового содержания УВ в образцах с использованием программы Aktiv на основе базы данных компонентов автоматически создаются файлы для дальнейших расчетов. После формирования этих расчетных файлов с помощью программы и доступных технологических данных проводится расчет ключевых характеристик процесса каталитического риформинга.

## Результаты и обсуждение

Для проверки адекватности расчёта были взяты 10 нефтяных фракций с различными групповым и компонентным составом (рис. 4). Как видно из данного рисунка, содержание н-парафинов в пробах варьируется от 21,58% до 31,55%. В экспериментах №4, 5 и 9 их содержание наибольшее по сравнению с другими экспериментами. Высокое содержание н-парафинов обеспечивает увеличение выхода продукта с высоким октановым числом, т.к. н-парафины легко преобразуются в ароматические УВ.

Доля изо-парафинов колеблется от 18,71% до 26,63%. Они менее реакционноспособны, однако их присутствие способствует улучшению октанового числа конечного продукта через процессы изомеризации и циклизации.

Содержание нафтенов колеблется от 26,95% до 44,5%, что благоприятно для процесса риформинга, т.к. они легко преобразуются в ароматику, повышая октановое число.

Содержание ароматических УВ варьируется от 7,11% до 26,6%. Это говорит о том, что исходное сырьё уже обладает некоторыми свойствами высокого октанового числа, однако нужно следить за уровнем коксообразования.

Сырьё с высоким содержанием нафтенов является наиболее ценным для процесса риформинга, поскольку нафтеновые УВ превращаются в ароматические соединения с более высокой селективностью по сравнению с парафиновыми.

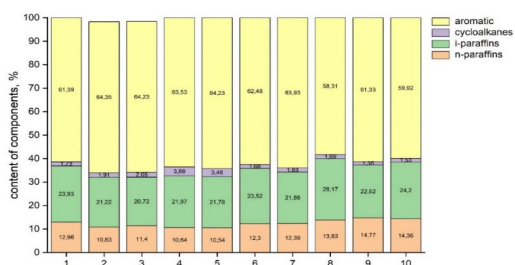


Рисунок 4. Расчётные составы сырья каталитического риформинга

Figure 4. Calculated compositions of the catalytic reforming feedstock

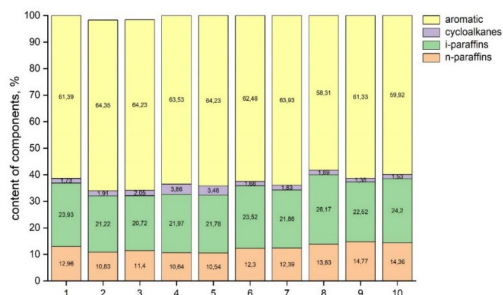


Рисунок 5. Расчётные составы катализата каталитического риформинга

Figure 5. Calculated compositions of the catalytic reforming catalyst

На рис. 5 представлены данные в процентном содержании различных компонентов в 10 образцах продукта каталитического риформинга – катализата. Ароматические соединения составляют наибольшую долю во всех образцах, варьируясь от 58,31% (№9) до 64,35% (№2). Содержание циклоалканов минимально по сравнению с другими компонентами и варьируется от 1,84% (№1) до 3,86% (№4). Содержание изопарафинов колеблется между 20,72% (№ 3) и 26,17% (№8), что делает их вторым по значимости компонентом после ароматических УВ. Содержание нормальных парафинов варьируется от 10,54% (№5) до 14,36% (№ 10).

Диаграмма демонстрирует преобладание ароматических УВ в составе всех образцов углеводородных смесей с меньшей долей изопарафинов и нормальных парафинов и минимальной долей циклоалканов.

Для оценки точности математической модели были проведены сравнения расчётных и экспериментальных данных 10 исследуемых образцов (табл. 2). Указаны погрешности прогнозирования ΔX. Абсолютная погрешность моделирования определяется как разница между расчётными и фактическими данными

процесса. Допустимые пределы погрешности регламентируются отраслевыми стандартами. Для расчётов, выполненных с помощью программного обеспечения для моделирования процесса каталитического риформинга, погрешность не превышает 3%, что подтверждает адекватность модели и высокую точность воспроизведения технологического процесса.

**Заключение и выводы**

В результате проведённого исследования была успешно интегрирована математическая модель, объединяющая термодинамические, кинетические и гидродинамические аспекты нефтеперерабатывающего процесса. Модель была верифицирована на основе экспериментальных данных и условий реальной эксплуатации, что позволило достичь высокой точности и надёжности. Абсолютная погрешность не превышает 3%. Также для оценки адекватности исследовались 10 образцов сырья, различных по составу и преобладанию групп парафиновых, нафтеновых или ароматических УВ.

Полученные результаты подтвердили, что комплексный подход к моделированию обеспечивает более глубокое понимание процесса и эффективное управление им, что в свою

Таблица 2. Сравнение между расчётными и экспериментальными значениями показателей каталитического риформинга

Table 2. Comparison between calculated and experimental values of catalytic reforming parameters

№	n-paraffins			i-paraffins			cyclo-alkanes – 5			cyclo-alkanes – 6			aromatics		
	X0	X	ΔX	X0	X	ΔX	X0	X	ΔX	X0	X	ΔX	X0	X	ΔX
1	12,95	11,62	0,7	23,93	23,23	0,7	1,72	1,85	0,13	1,01	1,4	0,39	61,39	61,34	0,05
2	12,66	10,85	1,81	21,53	20,52	1,01	1,71	2,22	0,51	1,18	1,45	0,27	63,92	63,83	0,09
3	13,31	10,67	2,64	21,01	20,47	0,54	1,74	2,26	0,52	1,3	1,79	0,49	63,64	63,65	0,01
4	14,36	12,39	1,97	24,2	24,47	0,27	1,08	1,55	0,47	0,44	0,85	0,41	59,91	59,89	0,02
5	10,65	11,55	0,9	21,97	21,18	0,79	3,35	1,77	1,58	0,51	1,5	0,99	63,53	63,59	0,06
6	10,54	10,68	0,14	21,79	21,95	0,16	2,94	1,43	1,51	0,51	1,82	1,31	64,22	64,19	0,03
7	12,29	10,95	1,34	23,54	23,42	0,12	0,76	1,26	0,5	0,93	1,25	0,32	62,48	62,54	0,06
8	12,39	10,87	1,52	21,86	21,5	0,36	1,86	1,79	0,07	0,97	1,54	0,57	63,93	63,94	0,01
9	14,76	12,7	2,06	22,53	22,76	0,23	1,86	1,98	0,12	0,52	0,92	0,4	61,33	61,25	0,08
10	13,83	14,32	0,49	26,17	24,54	1,63	1,29	1,5	0,21	0,4	0,54	0,14	58,31	58,23	0,08



очередь способствует оптимизации и улучшению его характеристик.

Данная модель может быть эффективно использована для обучения персонала в области моделирования технологических процессов. Программа отличается простотой в применении: технологическая схема уже разработана и включает готовый шаблон для ввода необходимых исходных данных.

## ДОПОЛНИТЕЛЬНО

**Источник финансирования.** Данное исследование финансируется в рамках проекта «Жас ғалым» AP19175752 «Научно-техническое обеспечение энергосбережения и ресурсоэффективности технологии приготовления высокооктановых бензинов и ароматических углеводородов» AP23487495 «Повышение ресурсоэффективности и энергосбережения технологии приготовления продуктов нефтепереработки методом гибридного моделирования» (Грант № «BR24992883 Создание научно-технологического парка нефтехимии и полимерных материалов для предоставления услуг, и внедрения прикладных результатов НИР в приоритетные сектора экономики страны»).

**Конфликт интересов.** Авторы декларируют отсутствие явных и потенциальных конфликтов интересов, связанных с публикацией настоящей статьи.

**Вклад авторов.** Все авторы подтверждают соответствие своего авторства международным критериям ICMJE (все авторы внесли существенный вклад в разработку концепции, проведение исследования и подготовку статьи, прочли и одобрили финальную версию перед публикацией). Наибольший вклад распределён следующим образом: Сейтенова Г.Ж. – концепция исследования; Дюсова Р.М. – анализ полученных данных; Жакманова Е.А. – сбор и обработка данных, написание текста; Сергеевс Я. – сбор и обработка данных, иллюстрации; Борашова М. – сбор и обработка данных.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. kmg.kz [интернет]. АО НК «КазМунайГаз». Годовой отчет за 2022 год [дата обращения: 27.07.2024]. Доступ по ссылке: <https://ar2022.kmg.kz/ru>.
2. astm.org [интернет]. ASTM D6730-01(2011) Содержание индивидуальных компонентов в топливах для двигателей внутреннего сгорания [дата обращения: 18.08.2024]. Доступ по ссылке: <https://www.astm.org/d6730-01r11.html>.
3. astm.org [интернет]. ASTM D2427-06 Содержание легких углеводородов в бензинах [дата обращения: 20.06.2024]. Доступ по ссылке: <https://www.astm.org/d2427-06r19.html>.
4. astm.org [интернет]. ASTM D4052 Плотность [дата обращения: 18.08.2024]. Доступ по ссылке: <https://www.astm.org/standards/d4052>.
5. astm.org [интернет]. ASTM D86 Фракционный состав [дата обращения: 27.07.2024]. Доступ по ссылке: <https://www.astm.org/standards/d86>.
6. Сейтенова Г.Ж., Дюсова Р.М., Бурумбаева Г.Р. Математическое моделирование процессов нефтепереработки как метод ресурсосбережения и энергоэффективности // Научно-технический журнал «Нефть и газ». 2023. №1 (133). С. 144–154. doi: [10.37878/2708-0080/2023-1.13](https://doi.org/10.37878/2708-0080/2023-1.13).
7. Zainullin R.Z., Zagoruiko A.N., Koledina K.F., et al. Multi-Criterion Optimization of a Catalytic Reforming Reactor Unit Using a Genetic Algorithm // Catalysis in petroleum refining industry. 2020. Vol. 12. P. 133–140. doi: [10.1134/S2070050420020129](https://doi.org/10.1134/S2070050420020129).
8. Smith J.M., Van Ness H.C., Abbott M.M., Swihart M.T. Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics. 9th ed. New York : McGraw Hill Education, 2022.

В отличие от программного обеспечения Aspen HYSYS, используемого в АО НК «КазМунайГаз», которое может представлять сложность для начинающих пользователей, предложенная модель обладает более интуитивным интерфейсом и не требует глубоких знаний в программировании или моделировании, что делает её идеальной для начальной подготовки специалистов.

## ADDITIONAL INFORMATION

**Funding source.** This research is funded under the "Zhas Galym" project AP19175752 "Scientific and technical support for energy saving and resource efficiency of the technology for preparation of high-octane gasoline and aromatic hydrocarbons", AP23487495 "Enhancing resource efficiency and energy saving in the technology for producing oil refining products through hybrid modeling" (Grant No. "BR24992883 Creation of a scientific and technological park for petrochemicals and polymer materials to provide services and implement applied research results in priority sectors of the country's economy").

**Competing interests.** The authors declare that they have no competing interests.

**Authors' contribution.** All authors made a substantial contribution to the conception of the work, acquisition, analysis, interpretation of data for the work, drafting and revising the work, final approval of the version to be published and agree to be accountable for all aspects of the work. The greatest contribution is distributed as follows: Gaini Zh. Seitenova – research conceptualization; Rizagul M. Dyussova – analysis of obtained data; Yekaterina A. Zhakmanova – data collection and processing, writing the text; Yakobs Sergeevs – data collection and processing, illustrations; Moldir Borashova – data collection and processing.

9. Ivanchina D., Chuzlov V.A., Ivanchin N.R., et al. Frame-Production Model of Petroleum Feedstocks Catalytic Processing for the Representation of Knowledge about Process // *Petroleum and Coal*. 2021. Vol. 63, Issue 3. P. 668–673.

## REFERENCES

1. kmg.kz [Internet]. АО НК «КазМунайГаз». Годовой отчет за 2022 год [cited 2024 Jul 27]. Available from: <https://ar2022.kmg.kz/ru>.
2. astm.org [Internet]. ASTM D6730-01(2011) Standard Test Method for Determination of Individual Components in Spark Ignition Engine Fuels by 100 Metre Capillary (with Precolumn) High-Resolution Gas Chromatography [cited 2024 Aug 18]. Available from: <https://www.astm.org/d6730-01r11.html>.
3. astm.org [Internet]. ASTM D2427-06 Standard Test Method for Determination of C2 through C5 Hydrocarbons in Gasolines by Gas Chromatography (Withdrawn 2023) [cited 2024 Jun 20]. Available from: <https://www.astm.org/d2427-06r19.html>.
4. astm.org [Internet]. ASTM D4052 Standard Test Method for Density, Relative Density, and API Gravity of Liquids by Digital Density Meter [cited 2024 Aug 18]. Available from: <https://www.astm.org/standards/d4052>.
5. astm.org [Internet]. ASTM D86 Standard Test Method for Distillation of Petroleum Products and Liquid Fuels at Atmospheric Pressure [cited 2024 Jul 27]. Available from: <https://www.astm.org/standards/d86>.
6. Seitenova GZ, Dyussova RM, Brumbayeva GR. Matematicheskoye modelirovaniye processov neftepererabotki kak metod resursosberezheniya i energoeffektivnosti. *Oil & Gas*. 2023;1(133):144–154. doi: [10.37878/2708-0080/2023-1.13](https://doi.org/10.37878/2708-0080/2023-1.13). (In Russ).
7. Zainullin RZ, Zagoruiko AN, Koledina KF, et al. Multi-Criterion Optimization of a Catalytic Reforming Reactor Unit Using a Genetic Algorithm. *Catalysis in petroleum refining industry*. 2020;12:133–140. doi: [10.1134/S2070050420020129](https://doi.org/10.1134/S2070050420020129).
8. Smith JM, Van Ness HC, Abbott MM, Swihart MT. *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics*. 9th ed. New York: McGraw Hill Education; 2022.
9. Ivanchina D, Chuzlov VA, Ivanchin NR, et al. Frame-Production Model of Petroleum Feedstocks Catalytic Processing for the Representation of Knowledge about Process. *Petroleum and Coal*. 2021;63(3):668–673.

## ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

**Сейтенова Гайни Жумагалиевна**

ORCID [0000-0001-6202-3951](https://orcid.org/0000-0001-6202-3951)

e-mail: [gainiseitenova@gmail.com](mailto:gainiseitenova@gmail.com).

**\*Дюсова Ризагуль Муслимовна**

ORCID [0000-0003-3083-5255](https://orcid.org/0000-0003-3083-5255)

e-mail: [rizagul.dyussova@gmail.com](mailto:rizagul.dyussova@gmail.com).

**Жакманова Екатерина Андреевна**

ORCID [0000-0003-0545-5912](https://orcid.org/0000-0003-0545-5912)

e-mail: [ekaterina.zakmanova1998@gmail.com](mailto:ekaterina.zakmanova1998@gmail.com).

**Сергеевс Якобс**

ORCID [0009-0009-2090-9143](https://orcid.org/0009-0009-2090-9143)

e-mail: [sergeevs\\_yakobs@mail.ru](mailto:sergeevs_yakobs@mail.ru).

**Молдир Борашова**

Cand. Sc. (Engineering)

ORCID [0009-0009-2842-0078](https://orcid.org/0009-0009-2842-0078)

e-mail: [moldirborasheva1992@gmail.com](mailto:moldirborasheva1992@gmail.com).

## AUTHORS' INFO

**Gaini Zh. Seitenova**

ORCID [0000-0001-6202-3951](https://orcid.org/0000-0001-6202-3951)

e-mail: [gainiseitenova@gmail.com](mailto:gainiseitenova@gmail.com).

**\*Rizagul M. Dyussova**

ORCID [0000-0003-3083-5255](https://orcid.org/0000-0003-3083-5255)

e-mail: [rizagul.dyussova@gmail.com](mailto:rizagul.dyussova@gmail.com).

**Yekaterina A. Zhakmanova**

ORCID [0000-0003-0545-5912](https://orcid.org/0000-0003-0545-5912)

e-mail: [ekaterina.zakmanova1998@gmail.com](mailto:ekaterina.zakmanova1998@gmail.com).

**Yakobs Sergeevs**

ORCID [0009-0009-2090-9143](https://orcid.org/0009-0009-2090-9143)

e-mail: [sergeevs\\_yakobs@mail.ru](mailto:sergeevs_yakobs@mail.ru).

**Moldir Borashova**

Cand. Sc. (Engineering)

ORCID [0009-0009-2842-0078](https://orcid.org/0009-0009-2842-0078)

e-mail: [moldirborasheva1992@gmail.com](mailto:moldirborasheva1992@gmail.com).

\*Автор, ответственный за переписку/Corresponding Author