

Katalitikus hidrokrakkolás matematikai modellezése és megoldómódszerek vizsgálata

Mathematical modelling of catalytic hydrocracking and investigation of solution methods

BALOGH László^{1,*}, HORVÁTH Dominik², TOMASEK Szabina², EGEDY Attila¹,
BÁRKÁNYI Ágnes¹

¹ Faculty of Engineering, Research Centre of Biochemical, Environmental and Chemical Engineering, Department of Process Engineering, University of Pannonia, Egyetem u. 10, Veszprém, H-8200, Hungary

² Faculty of Engineering, Research Centre of Biochemical, Environmental and Chemical Engineering, MOL Department of Hydrocarbon and Coal Processing, University of Pannonia, Egyetem u. 10, Veszprém, H-8200, Hungary

* Elérhetőség: balogh.laszlo@mk-uni.pannon.hu

ABSTRACT

The mathematical modelling of hydrocracking and similar processes is not a trivial task. If we try to approach the problem traditionally, the massive number of components causes an inconvenience. So the given equation system is complicated to solve and even more challenging to identify the parameters. If we use the approach of pseudocomponents, the accuracy of the model increases only with the number of pseudocomponents, and it is difficult to identify which component comes from which. To address these issues, we can utilise a population balance equation (PBE). The PBE can be defined based on a readily measurable property (for example, carbon number or boiling point), with the distribution changing over time (in the case of a tube reactor, the distribution changes depend on the reactor length). During hydrocracking, components with high carbon numbers are “broken down” into components with lower carbon numbers. Therefore, a descriptive population balance equation contains only a fracture term; the consequence of this is that the task is to solve a partial-integro-differential equation. On the one hand, solving these equations is more complicated compared to an ordinary differential equation. However, on the other hand, the model's parameter requirement is significantly lower. Our examination aims to determine the optimal solution method and to identify a correlation between the unit parameters and model parameters.

Keywords: hydrocracking, population balance model, invers problem solution

ÖSSZEFOGLALÓ

A hidrokrakkolás és a hozzá hasonló eljárások modellezése nem triviális feladat. Ha hagyományos úton próbáljuk megközelíteni a problémát, abba a nehézségbe ütközünk, hogy a komponensek nagy száma miatt nehezen megoldható és identifikálható egyenletrendszer kapunk. Abban az esetben, ha pszeudokomponenseket feltételezünk a modell pontossága a paraméterek számának növekedésével javul csak, valamint nehéz azonosítani, melyik pszeudokomponens reakciójából melyik pszeudokomponens keletkezik. Ezen problémák áthidalására alkalmazható folytonos eloszlást feltételező populációs mérleg egyenlet, mely valamilyen könnyen mérhető tulajdonság (pl.: szénatomszám vagy forráspont) eloszlás idő (csőreaktor esetén hely) szerinti változására írható fel. A hidrokrakkolás során a nagy szénatomszámú komponensek kisb

szénatomszámú komponensekké „törnek össze”. Tehát a leíró populációs mérleg egyenletnek törési tagot kell tartalmazzon, így a feladat egy parciális integro-differenciálegyenlet megoldásává változik. Ez egyrészt nehézség egy közösleges differenciál egyenletrendszer megoldásához képest, viszont az identifikáció paraméter igénye jelentősen csökken. A vizsgálatok során egyrészt a megfelelő megoldómódszer kiválasztása a cél, másrészt, hogy kapcsolatot találjunk a modell paraméterei és a fizikai rendszer üzemeltetési paraméterei között.

Kulcsszavak: hidrokrakkolás, populációs mérleg modell, inverz probléma megoldás