

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования



«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Направление подготовки/профиль ___18.06.01 Химическая технология / 05.17.08
Процессы и аппараты химических технологий _____
Школа __института природных ресурсов _____
Отделение __химической инженерии _____

**Научный доклад об основных результатах подготовленной
научно-квалификационной работы**

Тема научного доклада
Математическое моделирование процесса гидроочистки атмосферного и вакуумного газойлей УДК 665.752:665.658.2:519.876

Аспирант

Группа	ФИО	Подпись	Дата
A4-52	Татаурщикова Антон Андреевич		

Руководитель профиля подготовки

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Белинская Н.С.	к.т.н.		

Руководитель отделения

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Короткова Е.И.	д.х.н.		

Научный руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Иванчина Э.Д.	д.т.н.		

Актуальность темы исследования

Процесс каталитической гидроочистки – процесс вторичной переработки нефтепродуктов с целью уменьшения количества серосодержащих соединений, негативно влияющих на катализаторы в последующих после гидроочистки процессах, а также с целью улучшения качеств перерабатываемого моторного топлива. Как любой другой процесс вторичной переработки нефтепродуктов, процесс гидроочистки дизельного топлива включает множество гетерокаталитических реакций, протекающих одновременно на поверхности катализатора. С целью оптимизации процесса гидроочистки разрабатываются математические модели, позволяющие найти оптимальные технологические параметры при определённых условиях с максимальным выходом продукта. Так называемая агрегация различных серосодержащих соединений в гомологические группы производится для формализации математической модели и, следовательно, оптимизации количества рассчитываемых значений материального и теплового баланса для различных реакционных соединений. Тем не менее, любая математическая модель должна сохранять достаточную прогностическую силу. Кроме того, модель должна оставаться чувствительной к изменениям состава сырья на протяжении рабочего цикла установки гидроочистки. Поэтому в настоящее время важна проработка возможных средств моделирования данного процесса – это позволит сократить экономические затраты на гидроочистку и одновременно улучшить качество гидроочищенного продукта на выходе.

Степень разработанности проблемы исследования

С 1980-х годов, требования к характеристикам производимого дизельного топлива в мире довольно часто ужесточались для достижения экологических целей, помимо обеспечения совместимости со стандартами на дизельные двигатели. Самым строгим ограничением, согласно текущим спецификациям, обнародованным на Калифорнийском совете США по воздушным ресурсам (CARB), является ограничение на содержание серы, ароматические соединения, полициклические ароматические углеводороды (ПАУ) и некоторые другие примеси в топливе. Поскольку проблемы вредных выбросов и экологического состояния воздуха сохраняют свою актуальность, продолжается продвижение всё более жёстких стандартов с целью дальнейшего сокращения выбросов от дизельных двигателей. К 2010 году на дорогах уровни содержания серы в дизельном топливе снижены до 15 ppm в США или даже 10 ppm в Европейском Союзе. Предложенные правила будут распространять эти требования практически на все дизельные двигатели.

Цель и задачи

Основная цель данного исследования заключается в математическом моделировании реактора гидроочистки с учетом каталитических закономерностей превращения СС, включающих сульфиды, бензотиофены (БТ) и дибензотиофены (ДБТ), как наиболее трудноудаляемые СС [2]. Основная задача исследовательской работы – выбор и оптимизация конструкции реактора, формулирование идей, касающихся увеличения качества гидроочищенного дизельного топлива.

Научная новизна

Большинство существующих на данный момент математических моделей гидроочистки вакуумных газойлей являются стохастическими и разработаны без учёта физико-химических (термодинамических) закономерностей, лежащих в основе процесса. Например, во многих моделях не рассчитываются и не берутся в учёт такие термодинамические параметры, как конкретные значения энергий Гиббса и энтальпий для отдельных реакций. Тем самым, научная новизна данной исследовательской работы заключается в разработке математической модели гидроочистки и её программной реализации, включая все стадии данного исследовательского процесса:

- 1) Проведение лабораторного эксперимента с целью выявления термодинамических закономерностей протекания реакций
- 2) Составление кинетической схемы реакций с отсеиванием незначимых маршрутов и параметров
- 3) Разработка системы дифференциальных уравнений согласно закону действующих масс (материального баланса) и термодинамики (теплового баланса), представляющих собой в совокупности математическую модель
- 4) Программная реализация математической модели и исследование с её помощью влияния технологических параметров на протекание процесса.
- 5) Поиск оптимальных значений параметров процесса и формирование рекомендаций по оптимизации.

Теоретическая и практическая значимость

Экспериментальные данные лабораторной установки были использованы в качестве основы для разработанной математической модели, включая хроматографический анализ, а также технологический регламент исследуемой установки.

Разработанная математическая модель вместе с программным комплексом могут послужить в целях оптимизации процесса и улучшения качества продукта гидроочистки.

Методология и методы исследования

Основной метод исследования – математическое моделирование процесса с учётом термодинамических параметров и законов протекания химических реакций. Разработанная компьютерная моделирующая система включает в себя нестационарную модель гидроочистки. Входными данными модели являются: состав сырья, технологические параметры (давление, расход сырья, температура), степень дезактивации катализатора. В числе выходных параметров: прогноз активности катализатора, выход продукта и глубина гидроочистки.

Положения, выносимые на защиту

1. Математическая модель гидроочистки вакуумного газойля, с помощью которой возможен расчёт и поиск оптимальных параметров проведения процесса. Модель учитывает влияние состава сырья, коксообразование на поверхности катализатора, технологические параметры;
2. Результаты расчёта дезактивации отечественного и зарубежного катализаторов гидроочистки ГДК-202 и HR-538 соответственно;
3. Результаты и графики влияния состава сырья и технологических параметров на процесс, а также рекомендации, целью которых является увеличение продолжительности работы катализатора без значимых потерь активности.

Апробация

Результаты данного исследования представлены на Международной научно-практической конференции «CHEMREACTOR-22» (г.Лондон, 19-23 сентября, 2016 г).

Публикации

По теме научно-квалификационной работы за период с 2014 по 2018 год опубликовано 18 работ, в том числе 3 в журналах из списка ВАК, 6 зарегистрировано в базах Scopus и Web of Science.

Структура и объём работы

В научно-квалификационной работе представлены введение, пять глав, выводы, три приложения, список литературных источников из 140 пунктов. Работа изложена на 149 страницах машинописного текста, содержит 56 рисунков, 29 таблиц.

ВЫВОДЫ

Расчет любых химико-технологических процессов на основе детерминированных математических моделей значительно ускоряет разработку и внедрение новых типов катализаторов и совершенствование самого процесса гидроочистки дизельного топлива. Разработанный программный комплекс способствует поиску оптимальных значений процесса и улучшению качества гидроочищенного продукта.