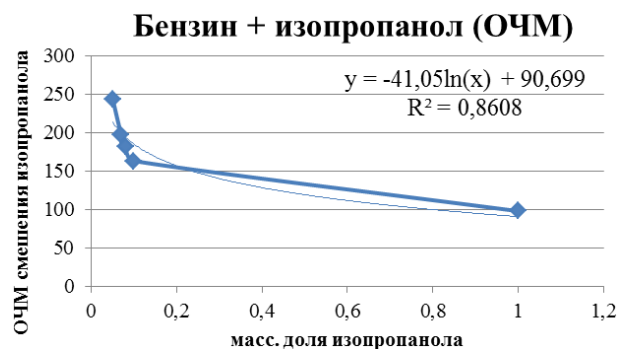


**Рис. 1.** Влияние концентрации МТБЭ на ОЧИ смешения



**Рис. 2.** Влияние концентрации изопропанола на ОЧМ смешения

ботать надежные методы определения октановых чисел, предложить оптимальные рецептуры

смешения для получения требуемой детонационной стойкости.

### Список литературы

1. Данилов А.М. Применение присадок в топливах. – СПб.: Химиздат, 2010. – 368с.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГИДРОКРЕКИНГА ВАКУУМНОГО ГАЗОЙЛЯ

Е.К. Бедарева

Научный руководитель – к.т.н., доцент Н.С. Белинская

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, [ekatbedr@gmail.com](mailto:ekatbedr@gmail.com)

В настоящее время в российской нефтепереработке наблюдается тенденция растущего спроса на процессы, связанные с переработкой высококипящих нефтяных фракций. Гидрокрекинг – наиболее распространенный вид крекинга, включающий в себя переработку высококипящих нефтяных фракций, таких как мазут, вакуумный газойль, реактивное и дизельное топливо. Повышение эффективности процесса гидрокрекинга методом математического моделирования является актуальной задачей [1].

Одним из начальных этапов разработки математической модели любого процесса переработки нефти является термодинамический анализ протекающих реакций [2]. Термодинамический анализ реакций при технологических условиях процесса позволяет оценить вероятность протекания, их обратимость или необратимость.

На основе термодинамического анализа составляется формализованная схема превращений углеводородов в процессе.

Кроме того, значения рассчитанных тепловых эффектов реакций используются в тепловом балансе процесса, а значения энергии Гиббса ре-

акций – для расчета констант обратных реакций в случае обратимых реакций [3].

Цель данной работы – расчет термодинамических показателей реакций процесса гидрокрекинга вакуумного газойля.

С использованием квантово-химических методов и программного пакета Gaussian были посчитаны основные термодинамические характеристики молекул реагентов, участвующих в реакциях гидрирования ароматических соединений, такие как энтальпия, энергия Гиббса и энтропия. Далее были рассчитаны термодинамические параметры реакций гидрирования ароматических соединений, протекающих в процессе гидрокрекинга вакуумного газойля, а именно изменение энтальпии, энтропии и энергии Гиббса.

Условия проведения процесса гидрокрекинга в промышленности, принятые в расчетах: температура 633 К и давление 158 атм.

Результаты расчетов представлены в таблице 1.

В результате расчетов термодинамических характеристик процесса гидрокрекинга вакуум-

**Таблица 1.** Реакции гидрирования ароматических соединений и основные термодинамические характеристики

№	Реакция	$\Delta H$ , кДж/моль	$\Delta S$ , Дж/моль·К	$\Delta G$ , кДж/моль
1	Бензол + 3·H <sub>2</sub> = Циклогексан	-248,03	-291,18	-63,71
2	Толуол + 3·H <sub>2</sub> = Метилциклогексан	-246,63	-296,62	-58,87
3	Этилбензол + 3·H <sub>2</sub> = Этилциклогексан	-242,24	-282,98	-63,11
4	О-ксилол + 3·H <sub>2</sub> = 1,2-диметилциклогексан	-240,14	-288,08	-57,79
5	М-ксилол + 3·H <sub>2</sub> = 1,3-диметилциклогексан	-244,47	-310,99	-47,61
6	П-ксилол + 3·H <sub>2</sub> = 1,4-диметилциклогексан	-245,25	-319,24	-43,17

ного газойля было выявлено, что все реакции протекают при данных условиях промышленного процесса (T=633 К и P=158 атм) и являются

обратимыми, так как изменение энергии Гиббса в ходе реакции меньше нуля.

### Список литературы

1. В.И. Топильников, М.Х. Сосна. *Моделирование процесса гидрокрекинга парафиновых углеводородов // Химия и технология топлив и масел, 2012.– №2.– С.34–38.*
2. Белинская Н.С., Францина Е.В. *Кинетическая модель процесса производства дизельных топлив // Модели, системы, сети в экономике, технике, природе и обществе, 2013.– №2(6).– С.145–149.*
3. Белинская Н.С. *Применение метода математического моделирования для поиска оптимальных технологических параметров процессов алкилирования бензола // Модели, системы, сети в экономике, технике, природе и обществе, 2013.– №1(5).– С.125–130.*

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЦЕТАНОПОВЫШАЮЩЕЙ ПРИСАДКИ НА КАЧЕСТВО ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА

А.А. Бердникова, М.В. Майлин

Научные руководители – к.т.н., доцент Н.С. Белинская; к.т.н., научный сотрудник Е.В. Францина

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, aab77@tpu.ru*

Дизельное топливо является одним из наиболее востребованных топлив для автомобильного транспорта [1]. Каждый клиент, в зависимости от региона, выбирает самые различные присадки к топливам, а они, в свою очередь, регламентированы по точности дозирования и по количеству ввода в топливо. В связи с этим, изготавливаются установки непосредственно под потребности и нужды заказчика, чтобы качественно реализовать компаундирование топлива.

При производстве дизельных топлив необходимо добавлять определенные присадки для улучшения его характеристик и достижения требуемого качества. Существуют следующие виды присадок: депрессорные, цетаноповышающие, противоизносные, депрессорно-диспергирующие, смазывающие, антистатические, антиокис-

лительные.

Цетаноповышающие присадки предназначены для улучшения воспламеняемости дизельных топлив в камере сгорания. В топливном балансе страны велика доля прямогонных дизельных фракций с высоким цетановым числом (ЦЧ). Плохой воспламеняемостью отличаются высокоароматизированные среднестиллятные фракции различного происхождения. Присадки добавляются в дизельные топлива из нефтей нафтенного основания, а также в топлива из газовых конденсатов, распространённые в местах нефтедобычи [2].

**Таблица 1.** Условия проведения процесса

Температура, К	Давление, атм	Расстояние между молекулами, Å
298	1	4