

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА КОМПАУНДИРОВАНИЯ БЕНЗИНОВ С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОМПЬЮТЕРНОЙ МОДЕЛИРУЮЩЕЙ СИСТЕМЫ «COMPOUNDING»**

В.Ю. Малецкий, И.М. Долганов, И.О. Долганова

Научный руководитель - доцент И.М. Долганов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

Современный завод по переработки нефти не может обойтись без такого процесса, как компаундирование товарных бензинов. Данный процесс позволяет получить бензины с высоким октановым числом, которые отвечают требованиям ГОСТ Р 51866-2002 (ЕН 228-2004) [2]. Оптимизация процесса компаундирования осложняется из-за наличия обширного числа вовлекаемых компонентов. Известно, что различные частицы (молекулы и атомы) взаимодействуют друг с другом, из-за этого свойства каждого отдельного компонента могут отличаться от свойств в смеси. Следовательно, детонационная стойкость - это неаддитивная величина. Причиной таких отклонений является наличие межмолекулярных связей в бензинах.

В отделении химической инженерии Инженерной школы природных ресурсов Томского политехнического университета установлена связь, которая объясняет отклонение октановых чисел смешения, учитывая межмолекулярное взаимодействие на основе эмпирических данных – уравнения (1,2) и была выведено выражение для расчета октанового числа смеси (3):

$$B = \frac{1}{100} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=2}^n B_i B_j c_i c_j, \quad (1)$$

$$B_i = \alpha \left(\frac{D_i}{D_{\max}} \right)^n, \quad (2)$$

$$\text{ОЧ}_{\text{см}} = \sum_{i=1}^n (\text{ОЧ}_i \cdot c_i) + B, \quad (3)$$

где c_i – концентрация углеводородов в смеси; α и n – кинетические параметры, которые определяют зависимость интенсивности межмолекулярных взаимодействий от дипольного момента D ; B_i , B_j – величины, которые характеризуют склонность к межмолекулярному взаимодействию i -й и j -й молекул; D_{\max} – максимальный дипольный момент; $\text{ОЧ}_{\text{см}}$ – октановое число смешения бензинов.

С помощью компьютерной программы Compounding, разработанной в отделении химической инженерии ТПУ производился подбор рецептур бензинов с октановыми числами 92, 95, 98 и 80 и рассчитывалась их себестоимость. Программа позволяет определять октановые числа бензинов, учитывая при этом межмолекулярные взаимодействия углеводородов, по сравнению с коммерческими программами, которые существуют на рынке, а именно: Refinery and Petrochemical Modeling System (RPMS), Aspen PIMS, Blend Ratio Control, Blend Optimization and Supervisory System (BOSS) в которых, не учитывается неаддитивность октановых чисел смешения.

Точно установив октановое число смешения каждого потока, можно вычислить оптимальное соотношение потоков, используемых в процедуре смешения бензинов, это позволяет снизить экономические затраты, а также позволяет сэкономить временной ресурс и избежать вероятности производства некачественных партий бензина. В базе данных моделирующей компьютерной системы Compounding есть вся необходимая информация по октановым числам для индивидуальных углеводородов, которые присутствует в составе бензина.

Таблица 1

Результаты подбора рецептур бензинов с ОЧ 92,95,98,80

Компоненты	АИ-92		АИ-95		АИ-98		АИ-80	
	1	2	1	2	1	2	1	2
Гидроочищенный БКК	31,7	31,7	26,9	26,9	10,5	10,7	40,7	40,7
КТ-1 Крекинг	13,5	13,5	13,2	13,2	11,1	11,1	10,7	11,2
Л-35-11-1000 Риформат	22	18,8	20	20,3	22,3	22	0	0
Л-35-11-600 Риформат	7,7	3,2	7,4	7,1	7,9	8	10,5	10
Концентрант толуола	0	1,2	1,8	0	4,8	4,2	0	0
Изомалк-2 Изомеризат	6,9	7	5	5	11	11	0,1	0
Изопентан	5,1	5,3	5	5	11,7	12	8,2	8,2
Алкилбензин	7,4	8,5	12,9	12,9	13,7	13,7	0	0
Метил-трет-бутиловый эфир	0	0	2,8	4,5	7	7,3	0	10
АВТ-10 фр.нк.62	1,1	2,5	0,8	1,5	0	0	9,8	9,9
С-100 КПА фр.62-85	1,1	2,9	1,1	0,5	0	0	10	9,7
Рафинат КРА С400	1	2,5	1,1	1,1	0	0	10	10,3
Н-бутан	2,5	2,9	2	2	0	0	0	0

Был выполнен подбор рецептур для АИ-92, АИ-95, АИ-98 и АИ-80 с целью уменьшения их себестоимости. Таких показателей можно достичь, понижая содержания дорогостоящих составляющих. Каждый из вариантов

соответствует ГОСТ Р 51866-2002. Рецептурой с наиболее низкой стоимостью для бензина с октановым числом 92 является вариант 1 и составляет 18015 рублей; для бензина с октановым числом 95 – 1 вариант и составляет 19617 рублей; для бензина с октановым числом 98 – 2 вариант и составляет 23055 рублей; а для бензина с октановым числом 80 – 2 вариант и составляет 15598 рублей. Такого результата можно достичь, если использовать преимущественно потоки с относительно низкой стоимостью, таких как крекинг КТ-1 и ГО БКК.

Таблица 2

Показатели качества бензинов

Характеристики автомобильного бензина	АИ-92		АИ-95		АИ-98		АИ-80		Требуемый показатель
	1	2	1	2	1	2	1	2	
Содержание бензола, % объем.	1	0,8	0,9	0,9	0,8	0,8	0,8	0,8	Не превышая 1
Содержание олефиновых углеводородов, % объем.	11,19	11,2	9,8	9,9	5	5	13,2	13,3	Не превышая 18
Массовая доля серы, мг/кг	10	10	9	9	7	7	9	10	Не превышая 10
Содержание ароматических углеводородов, % объем.	34,94	30,8	33,7	31,9	34,1	33,37	20,7	20,56	Не превышая 35
Давление насыщенных паров, кПа	66,91	68,5	63,37	63,85	57,29	57,85	54,79	54,93	Не превышая 100
Себестоимость, руб/т	18015	18062	19617	19936	23075	23055	15634	15598	

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 18-73-00086 «Разработка научных основ процессов приготовления моторных топлив на основе учета химического реагирования компонентов при каталитическом превращении и компаундировании».

Литература

1. Киргина М. В., Сахневич Б. В., Иванчина Э. Д., Чеканцев Н. В. Разработка модуля автоматизированной обработки данных хроматографического анализа для повышения эффективности процесса компаундирования товарных бензинов / Известия Томского политехнического университета. – 2014 – Т 324. – №3 – С127–135.
2. ГОСТ Р 51866-2002 (ЕН 228 – 2004). Топлива моторные. Бензин неэтилированный. Технические условия.
3. Maylin M.V., Kirgina M.V., Sviridova E.V., Sakhnevich B.V., Ivanchina E.D. Calculation of gasoline octane numbers taking into account the reaction interaction of blend components // Procedia Chemistry. – 2014. – Vol. 10. – pp. 477-484.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА КАТАЛИТИЧЕСКОЙ ДЕПАРАФИНИЗАЦИИ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА

Е.Н. Маужигунова, Н.С. Белинская, Н.Е. Белозерцева

Научный руководитель - научный сотрудник Н.С. Белинская

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

Дизельное топливо является важнейшим крупнотоннажным продуктом нефтепереработки, которое обеспечивает функционирование транспортных средств различных отраслей народного хозяйства. Основными потребителями дизельного топлива являются сельскохозяйственная техника, железнодорожный транспорт, а также водный транспорт. Кроме того, данный вид топлива используется для легковых автомобилей.

Для России в связи с особенностями климатических условий и географического положения особое значение имеет производство зимних и арктических марок дизельного топлива с соответствующими низкотемпературными и экологическими характеристиками [2,3]. Помимо этого, ежегодно увеличивается доля переработки тяжелых и высокосернистых нефтей с высоким содержанием парафинов, которые имеют высокую температуру замерзания.

Наиболее эффективным методом производства зимнего и арктического видов дизельного топлива является применение технологий, основанных на уменьшении концентрации алканов нормального и слабо разветвленного строения в топливе (процессы депарафинизации). В настоящее время эти процессы широко применяются в производстве зимнего и арктического дизельных топлив [4]. Исходя из этого, актуальным является исследование