

УДК 065.63

А.В.КРАВЦОВ, Э.Д.ИВАНЧИНА, А.А.НОВИКОВ, П.И.КОВАЛЬ, И.Ю.ЗЕЛЕНКО, Н.В.УШЕВА, О.Е.МОЙЗЕС,
С.Г.МАСЛОВ, Д.А.БАЖЕНОВ

РАЗРАБОТКА НАУЧНЫХ ОСНОВ, МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ ТЕХНОЛОГИИ ПЕРЕРАБОТКИ ГОРЮЧИХ ИСКОПАЕМЫХ

Сибирский регион России является уникальной кладовой всех видов горючих ископаемых – твердых, жидких и газообразных. По мере их открытия и вовлечения в хозяйственный оборот ставились задачи по их исследованию с целью расширения сырьевой базы для углехимической и нефтегазохимической промышленности на востоке страны. При этом значительный вклад в решение проблем коксохимии при создании третьей металлургической базы страны в Кузбассе, научно-технических задач при становлении и развитии нефтегазохимического комплекса Западной Сибири внесли работы преподавателей и научных сотрудников кафедры химической технологии топлива, организованной в институте в 1929 г.

В 1961 г. при кафедре химической технологии топлива была создана проблемная лаборатория по комплексному использованию горючих ископаемых Западной Сибири, в которой под руководством профессора С.И.Смольянинова успешно выполнялись работы по оценке сырьевых и товарно-технологических свойств нефтей, газов, газовых конденсатов и твердых горючих ископаемых (торфов, углей) новых месторождений Сибирского региона [1,2].

Концентрация усилий всей страны закономерно привела к тому, что к концу 70 – началу 80-х годов были в основном открыты, изучены и введены в эксплуатацию основные месторождения углеводородного сырья в Западной Сибири и естественно встал вопрос о создании новых и развитии действующих предприятий нефтеперерабатывающей и нефтегазохимической промышленности региона.

Соответственно перед учеными, в том числе и нашей кафедрой, объективно встали вопросы по созданию новых и повышению эффективности действующих технологий переработки горючих ископаемых. Учитывая, что к этому времени на кафедре химической технологии топлива (ХТТ) методически и в кадровом аспекте была уже отработана уникальная система совместной подготовки дипломированных специалистов по «Химической технологии топлива» и «Химической кибернетике», появилась реальная возможность начать решение задач по широкому внедрению в промышленность по переработке всех видов горючих ископаемых новых информационных технологий, научной основой которых является теория искусственного интеллекта.

Реально это преследует постановку и параллельное решение в нашей отрасли двух принципиальных задач:

- разработку информационно-моделирующих (ИМС) или интеллектуальных систем (ИС) для моделирования, оптимизации и прогнозирования промышленной технологии переработки горючих ископаемых (ГИ);
- совершенствование системы подготовки инженеров-химиков за счет широкого внедрения в процесс образования методологии математического моделирования.

В итоге активно входящее сейчас в мир управления производством компьютерное моделирование с применением искусственного интеллекта становится эффективным инструментом в руках грамотного инженера [3,4].

Вместе с тем выполненный анализ показал, что использование систем, базирующихся на групповых и статистических моделях химических процессов, ведет к закономерному снижению точности прогнозных технологических расчетов, а значит, и к «загрублению» итоговых результатов.

В последние пять лет получили развитие нейронные сети в качестве новейших представителей интеллектуальных систем, активно использующихся в прогнозировании малоизученных либо очень сложных химико-технологических процессов [5]. Тем не менее каждый из вышеперечис-

ленных методов имеет, кроме несомненных достоинств, крупный недостаток — отсутствие физико-химического подхода в используемых моделях.

Наш многолетний опыт со всей определенностью позволяет утверждать, что успех применения метода математического моделирования и искусственного интеллекта для расчета и прогнозирования производственных технологий переработки горючих ископаемых определяется, в первую очередь, правильностью и глубиной наших знаний о механизме протекания реакций, условиями термодинамического равновесия и количественными кинетическими закономерностями с оценкой макрокинетических осложнений.

Приведем, в качестве примера, нашу методику и результаты моделирования некоторых, разнотипных по технологическому оформлению, процессов переработки ГИ, полученный с участием ведущих научных сотрудников и преподавателей кафедры ХТТ.

Переработка углеводородного сырья на платиновых катализаторах



Рис. 1. Этапы построения и использования интеллектуальной системы

Разработка интеллектуальных систем для этих процессов представляет собой последовательную совокупность этапов формирования адекватной схемы механизма многокомпонентного процесса с последующим его кинетическим описанием, на базе которого формируется нестационарная обобщенная модель контактных аппаратов и всей химико-технологической системы в целом, позволяющая не только оперативно оценить оптимальные режимы процессов производства бензинов на данном сырье, но и прогнозировать активность платинового катализатора в течение межрегенерационного периода и общего срока его службы, решать задачу комплексной переработки нефтяного сырья на НПЗ и модернизации действующих промышленных установок (рис.1) [3].

Первый этап — формирование механизма этого многокомпонентного процесса осуществляется путем агрегирования компонентов в «группы», что позволяет упростить его без потери чувствительности к составу сырья. Так, в «группу» iC_7 были объединены диметил-

пентаны, триметилбутаны, метилгексаны, которые содержатся в сырье и продуктах в значительных количествах. Группа C_8 содержит диметилгексаны, триметилгексаны, метилгептаны и т.д. В ДМЦП включены циклопарафины $C_7 - C_8$. Агрегирование на указанном уровне наиболее полно

отвечает различию в значениях детонационной стойкости автомобильных бензинов или октанового числа. В итоге математическая модель, с помощью которой рассчитывается уровень активности катализатора, учитывает изменение состава сырья. Таким образом, на основе рассмотрения детального механизма превращения углеводородов на Pt-катализаторах предложен критерий формализации и сформирован формализованный механизм, учитывающий раздельное превращение моно- и дизамещенных алканов (рис. 2). При этом показано, что при расчете комплексных технологий производства бензинов с использованием разработанной ИС необходимо учитывать концентрации индивидуальных углеводородов с учетом их реакционной способности.

Механизм превращения углеводородов на Pt-содержащих катализаторах

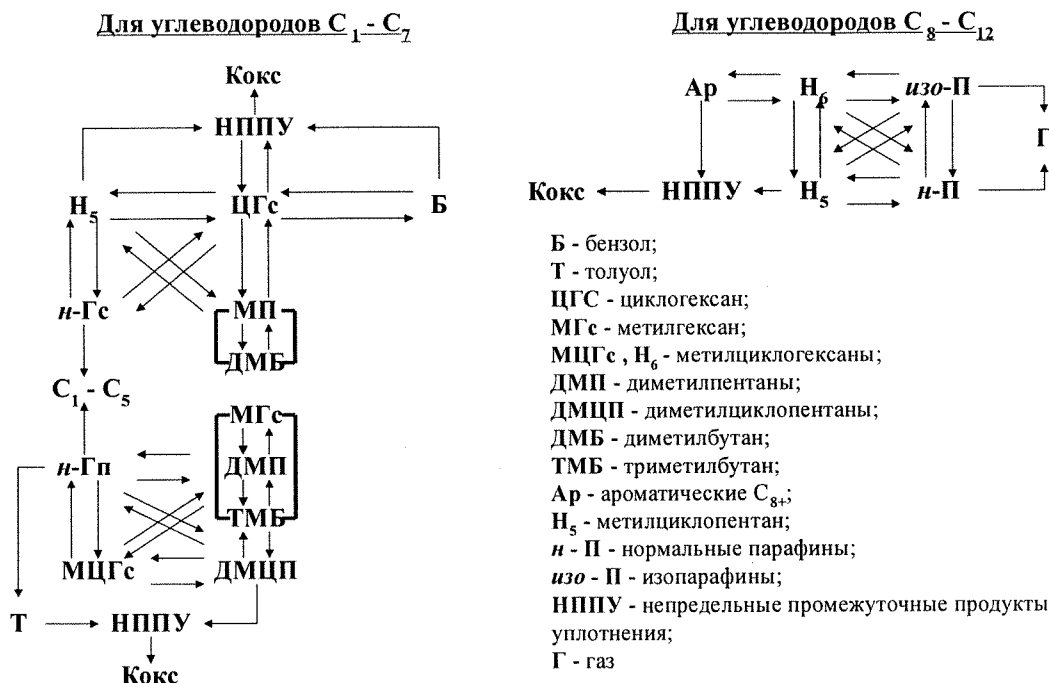


Рис. 2. Обобщенный механизм превращения углеводородов на платиносодержащих катализаторах

Очевидно, что любая формализация механизма превращения углеводородов должна производиться с учетом реакционной способности веществ (компонентов смеси). Реакционная способность углеводородов, в конечном итоге, зависит от энтропийных и энтальпийных характеристик, которые определяются характером связей в молекулах и их энергиями. Кинетические параметры превращения углеводородов определяющим образом будут зависеть от природы применяемых катализаторов. Так, если при использовании Pt/Al₂O₃ катализаторов предэкспоненциальные множители и энергии активаций реакций риформинга рассматриваются как монотонные функции от длины углеводородной цепи, то на платиноцеолитных катализаторах наблюдается клеточный эффект зависимостей кинетических параметров и коэффициентов диффузии от числа атомов углерода в молекуле углеводорода [6,7].

На втором этапе необходимо совместное описание основного механизма и реакций дезактивации катализатора, что позволяет рассматривать работу промышленных процессов в динамике [8, 9]. Третий этап – составление моделей контактного аппарата, проведение расчетов конкретных промышленных установок, оценка адекватности математических моделей реальным процессам с учетом временного фактора [7,9].

Четвертый этап – расчеты комплексных технологий переработки углеводородного сырья с оптимизацией не только выходных технологических параметров, но и технико-экономических показателей ХТС [10].

Пятый этап моделирования сложных технологических процессов – прогнозирование эффективных режимов функционирования предприятий в течение длительного периода времени с учетом изменяющегося исходного состава сырья и активности катализатора [11].

Таким образом, при прогнозировании производственного процесса, как системы совокупных явлений, вся информация, полученная на лабораторных и промышленных установках, постепенно накапливается, обогащается и реализуется в виде обобщенной математической модели ХТС данного промышленного процесса.

Разработанные на этой основе интеллектуальные системы уже нашли практическое применение и показали высокую эффективность при решении сложных научно-технических задач действующего производства и в обучении инженеров-технологов (рис.3).



Рис. 3. Основные направления применения ИС для решения технологических задач и обучения специалистов

В связи с отсутствием универсальных экспериментальных методов сравнительной оценки катализаторов риформинга и изомеризации углеводородов бензиновой фракции впервые предложен метод тестирования промышленных катализаторов с использованием разработанных интеллектуальных систем [12]. Предложенный подход обеспечивает также количественную оценку влияния факторов старения, отравления и блокировки коксовыми отложениями при постоянно меняющемся углеводородном составе сырья. При этом тестирование отечественных и импортных промышленных катализаторов риформинга и изомеризации бензиновых фракций на основании технологических и экономических данных показало объективность предложенного метода (табл. 1, рис. 4).

На рис. 4 приведены результаты сравнительной оценки технологических показателей известных в мире катализаторов риформинга бензиновых фракций – R-56 фирмы ЮОПИ (США) и RG-482 фирмы «Прокатализ» (Франция).

На основе ИС разработана и внедрена на ряде НПЗ компьютерная программа «Советчик технолога», позволяющая проводить экспресс-оценку текущей активности катализатора с последующей стабилизацией и оптимизацией технологии производства бензинов, что позволило увеличить выход высокооктановых бензинов, а значит, и улучшить экономические показатели производства (табл.2).

Таблица 1

Выход продуктов на алюмоплатиновом и платиноцеолитных катализаторах в зависимости от состава сырья

Состав	Выход на Pt-цеолитном Kt (СИ-1), % вес.		Выход на Pt-цеолитном Kt компании «SUD CHEMIE», % вес.		Выход на Pt / Al ₂ O ₃ Kt фирмы «Линда», % вес.	
	Сырье 2	Сырье 1	Сырье 3	Сырье 1	Сырье 2	Сырье 1
n-C ₅	17,75	24,44	11,88	16,6	10,05	12,37
i-C ₅	34,46	54,08	28,02	32,4	48,2	69,46
C ₆ H ₁₂	6,21	3,88	11,61	9,18	8,42	5,26
2,2-ДМБ	7,47	2,14	8,58	8,75	10,52	3,46
2,3-ДМБ	3,85	1,29	2,85	3,45	3,84	1,13
МП	21,29	10,8	22,06	16,28	11,96	5,19
n-C ₆	6,32	2,35	8,22	10,32	4,63	1,29
бензол	0,17	0,11	0,18	0,25	0,34	0,22
CH ₄	0,78	0,31	0,12	0,28	1,0	1,01
C ₂ H ₆	0,47	0,12	0,3	0,2	0,31	0,19
C ₃ H ₈	0,26	0,09	0,25	0,18	0,2	0,16
C ₄ H ₁₀	0,54	0,14	2,23	0,57	0,06	0,03
i-C ₄ H ₁₀	0,44	0,23	3,7	1,54	0,47	0,22

Примечание.

Сырье 1 – сырье для установки «Пенекс» с Pt / Al₂O₃ Kt фирмы «Линда».

Сырье 2 – сырье для установки с Pt Kt СИ-1.

Сырье 3 – сырье для установки «CRC ISOM» с Pt-цеолитным Kt компании «SUD CHEMIE».

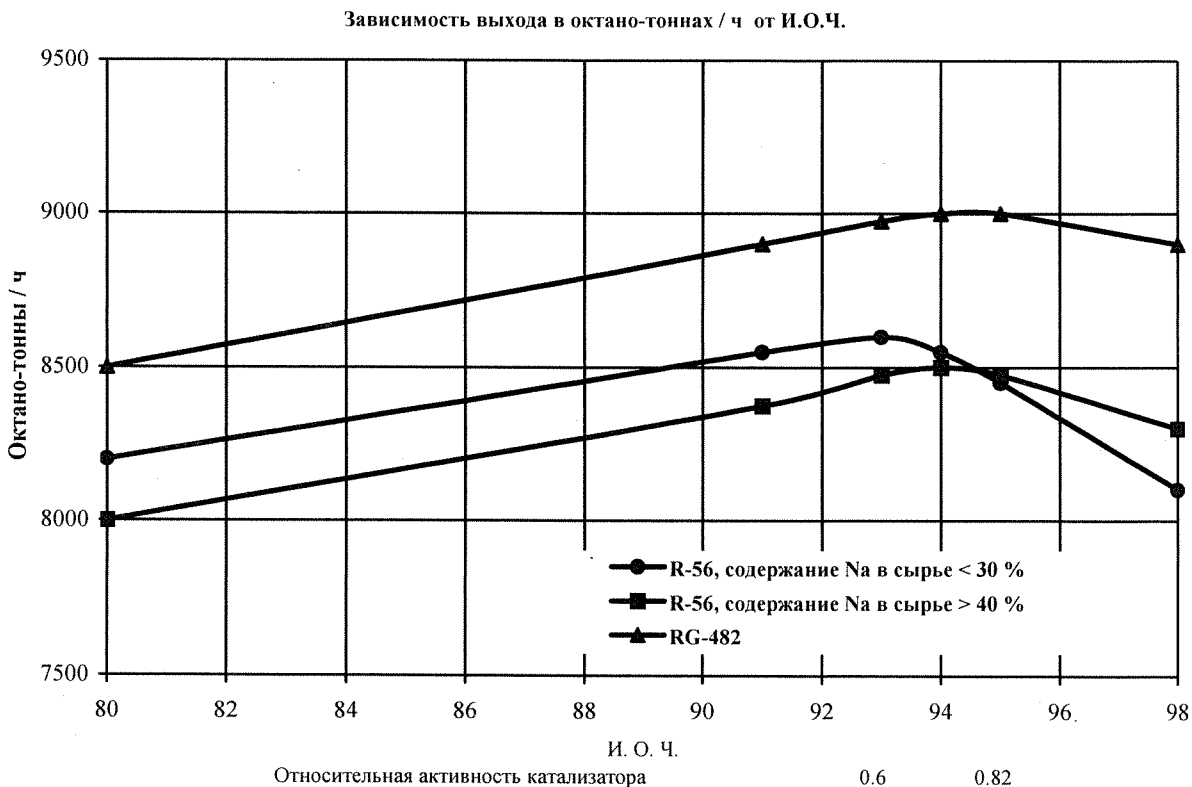


Рис. 4. Зависимость выхода в октано-тоннах / ч от И.О.Ч.

Технико-экономическое обоснование эффективности применения метода компьютерного прогнозирования активности катализаторов риформинга

Среднее О.Ч. риформата	Увеличение выхода в октано-тоннах/ч	Потери за счет нестабильной работы установки риформинга *	
		дол. в час	дол. в год
85.0	129.5	760	6219840

*Цена 1 тонны риформата 500 дол. США (по данным фирмы «Прокатализ»)

Одновременно нами разработана, с учетом механизма межмолекулярного взаимодействия углеводородов и присадок, компьютерная модель для компаундирования товарных бензинов, позволяющая объединить на заводе технологическую и производственную стадии. Эта система находится на стадии промышленной апробации.

Процессы гидрирования монооксида углерода

Процессы на основе синтез-газа являются одними из широко изученных и применяемых способов переработки углеводородного сырья и, в частности, природного газа в ценные продукты химической и нефтехимической промышленности.

Совершенствование существующей технологии промышленных процессов опирается на большой массив данных, накопленных в мировой практике лабораторных испытаний и промышленной эксплуатации синтезов на основе СО и Н₂. Наиболее эффективным в решении этих проблем является сейчас метод математического моделирования – формирование иерархических детерминированных математических моделей процессов гидрирования СО и их использование в компьютерном анализе, оптимизации и проектировании промышленных технологий [4].

Таким образом, целью настоящей работы явился физико-химический анализ процессов синтеза метанола и углеводородов на основе природного газа, систематизация представлений о механизме и кинетике этих реакций на различных катализаторах, формирование иерархических детерминированных математических моделей с последующей разработкой на этой основе многофункциональных компьютерных комплексов для оперативного решения проблем, связанных с созданием оптимальных промышленных технологий.

Детальный механизм реакций гидрирования СО был нами сформулирован исходя из общепризнанной сейчас точки зрения о глубокой химической сущности катализа при рассмотрении взаимодействия монооксида углерода и водорода с активными центрами катализатора [13]. При этом показано, что основным фактором, определяющим селективность реакций гидрирования монооксида углерода, является форма активации молекул СО и Н₂, определяемая природой и степенью восстановления атома металла – катализатора, структурой активного центра и характером взаимодействия с промоторами, а также внешними условиями синтеза, в первую очередь, температурой и давлением в системе.

Так, в случае восстановленной поверхности при наличии у центрального атома металла-катализатора некомпенсированных *d*-электронов при адсорбции СО обеспечивается образование поверхностных карбонильных структур с эффективным отрицательным зарядом и разрыхленной связью С – О, гидрирование которой приводит в конечном итоге к образованию углеводородных структур – протеканию синтеза Фишера-Тропша.

При уменьшении степени восстановления окисных катализаторов активация монооксида углерода происходит с упрочением С – О-связи и образованием диполя с эффективным положительным зарядом. При наличии в этом случае кинетически обоснованной лимитирующей стадии – растворения водорода в приповерхностном слое катализатора, гидрирование можно представить как насыщение активным водородом низкочастотной связи Ме – СО с последующей десорбцией продукта синтеза – метанола.

Низкотемпературный синтез метанола реализован сейчас в промышленности в основном в крупнотоннажных агрегатах типа М-300 и М-750 с использованием Zn – Cu – Al-катализаторов, которые, как известно [14], легко перевосстанавливаются в условиях синтеза с образованием металлических центров донорного типа, адсорбирующих СО с образованием поверхностных карбонильных структур и, следовательно, реализующих, наряду с основной – образованием метанола, побочную реакцию – синтез Фишера-Тропша. Подавление реакции образования углеводородов осуществляется путем добавления в синтез-газ до 8 % об. CO₂, выступающего, по-видимому, в качестве ингибиторов перевосстановленных центров металла-катализатора. Это позволило нам на первом этапе исследования провести моделирование технологии синтеза метанола с учетом механизма и кинетики только основных реакций на каждой стадии промышленного производства.

В целом промышленное производство метанола на основе природного газа – это химико-технологическая схема, включающая конверсию природного газа и синтез метанола, с прямыми связями по свежему синтез-газу и обратными по отдувочным газам синтеза метанола, сжигаемым в межтрубном пространстве печей конверсии.

На основе этапного физико-химического анализа процесса конверсии природного газа и синтеза (СО+Н₂), построения иерархических математических моделей печей конверсии и реактора синтеза были разработаны компьютерные модули «Конверсия» и «Синтез», которые были сведены, с учетом прямых и обратных связей между ними, в единый компьютерный комплекс анализа и оптимизации технологии крупнотоннажного производства метанола на основе природного газа [15,16].

Оптимизация технологического режима

С помощью этого комплекса проведен компьютерный анализ и оптимизация технологического режима печей конверсии и реакторного блока синтеза метанола.

Конверсия природного газа. Задача анализа и оптимизации технологического режима печей конверсии формулировалась следующим образом: минимизировать содержание остаточного метана в синтез-газе для заданного состава и массового потока природного газа в условиях жестких ограничений по максимальной температуре стенки трубы и ресурсам топочного природного газа.

Основной оптимизирующий фактор в этом случае – $G_{т.пр.г}$ – нагрузка по топливному природному газу. Критерий оптимальности – C_{CH_4} – содержание остаточного метана в конвертированном газе. Ограничение: максимальная температура стенки (T_{max}) не должна превышать некоторого предельно допустимого значения ($T_{доп}$).

ВЛИЯНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НА ПОКАЗАТЕЛИ ПРОЦЕССА КОНВЕРСИИ

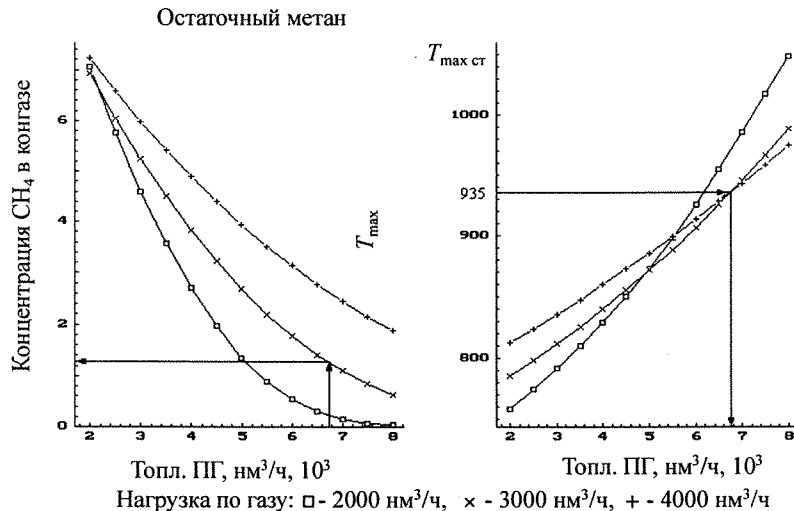


Рис. 5. Влияние изменения расхода топливного природного газа на показатели работы печи конверсии (данные реальной эксплуатации от 17.10.95)

Тип поставленной задачи однофакторной оптимизации определяет метод ее решения: перебор значений расхода топливного природного газа при фиксированных значениях всех остальных параметров до тех пор, пока максимальная температура стенки не станет равной предельно допустимой.

Результаты расчетов для одного из вариантов данных реальной эксплуатации печей конверсии представлены на рис.5; рекомендуемая нагрузка по топливному природному газу соответствует наименьшему значению C_{CH_4} , при котором максимальная температура стенок труб равна предельно допустимому значению.

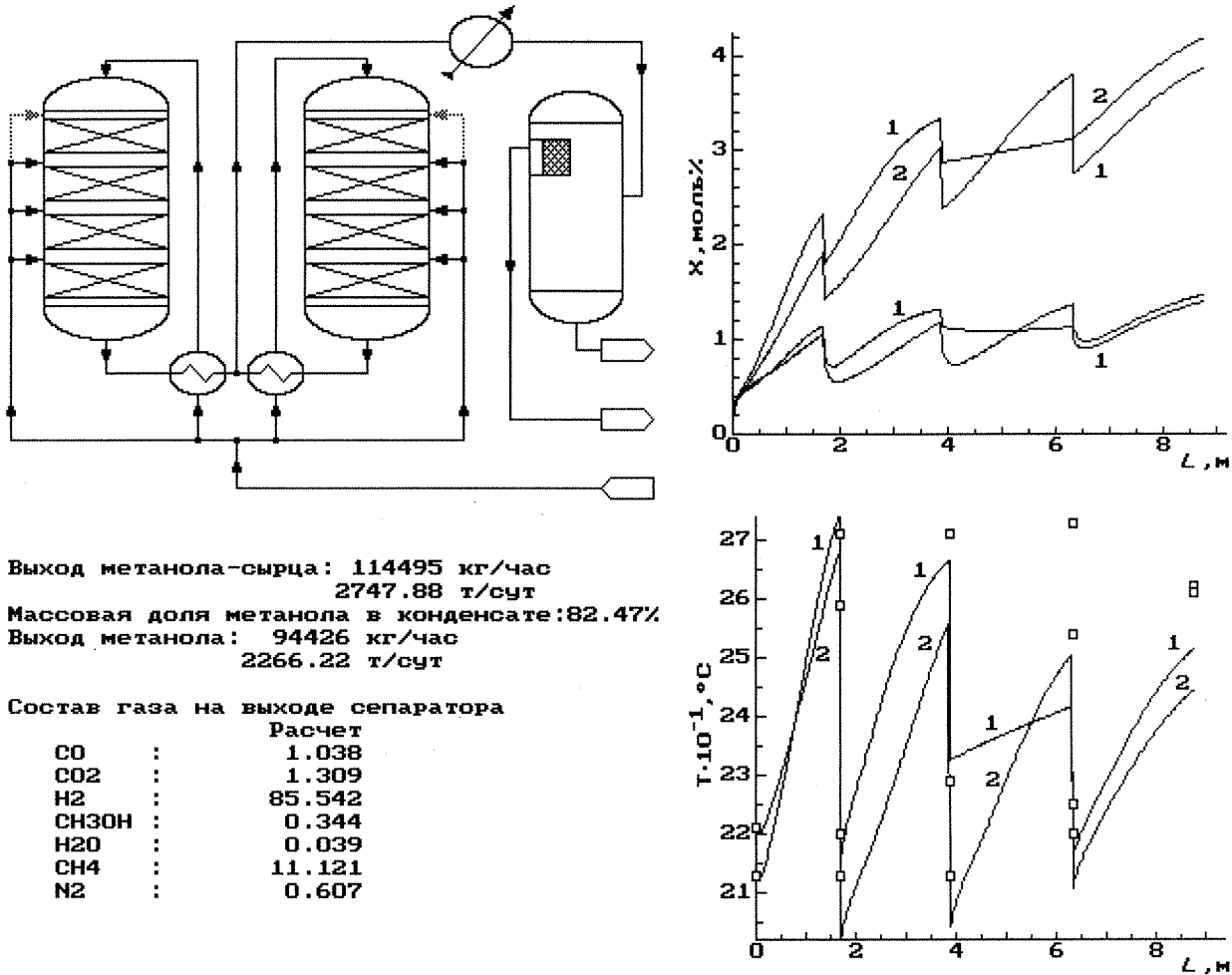


Рис. 6. Расчет реакторного блока синтеза метанола
(данные реальной эксплуатации от 29.11.94, оптимальный профиль температур)

Реакторный блок синтеза метанола. Задача анализа и оптимизации технологического режима реакторного блока синтеза метанола формулировалась следующим образом: для данного, фиксированного по составу и массовому расходу, потока свежего синтез-газа определить технологические параметры синтеза, при которых выход метанола-сырца G_{mc} максимален:

$$G_{mc}(P, V_{ц}, T_{вх\ ij}, K, T_c) \Rightarrow \max,$$

где P – давление в циркуляционном контуре; $V_{ц}$ – объемная скорость циркулирующего газа; $T_{вх\ ij}$ – температура на входе в слой j реактора i , функция скорости процесса синтеза и распределения потоков синтез-газа по слоям катализатора, $j = 1, \dots, 4$, $i = 1, 2$; K – коэффициент распределения потоков между реакторами; T_c – температура в сепараторе.

В реальных задачах часть этих факторов может выводиться в группу контролируемых, но не регулируемых параметров: например, P и $V_{\text{ц}}$, поддерживаемые на значениях, определяемых нагрузкой по исходному синтез-газу, T_c – поддерживаемая на уровне, определяемом работой воздушных холодильников.

Из термодинамического анализа синтеза метанола следует, что для текущей активности катализатора должен существовать оптимальный температурный профиль по слоям катализатора, при котором выход продукта – метанола-сырца – максимален. Таким образом, в типовой задаче

Критерий оптимальности – выход метанола-сырца ($G_{\text{CH}_3\text{OH}}$).

Оптимизирующие факторы: T_{ij} $i = 1, 2, j = 1 - 4$.

Ограничения: $200 < T_{ij} < 270$.

В решении этой многофакторной задачи применена эффективная оптимизационная процедура «Нерегулярный симплекс», введенная в вычислительный комплекс в виде отдельного модуля.

На рис.6 приведены результаты решения оптимизационной задачи на основе одного из вариантов данных реальной эксплуатации реакторного блока. Коррекция по результатам компьютерной оптимизации расхода байпасных потоков и изменение, таким образом, T_{ij} позволяет в данном случае увеличить выход метанола-сырца на 1 325 кг/ч, т.е. на 1,2 %.

Совместный анализ. Общая формулировка основной задачи анализа и оптимизации технологии производства метанола в целом формулируется следующим образом: определить технологические параметры работы отделений конверсии и синтеза, соответствующие максимуму выхода метанола на единицу использованного сырья – природного газа:

$$k = G_{\text{мс}} \cdot H_{\text{м}} / (G_{\text{пр.г}} + G_{\text{т.пр.г}}) \Rightarrow \max,$$

где $G_{\text{мс}}$ – выход метанола-сырца, кг/ч; $H_{\text{м}}$ – массовая доля метанола в метаноле-сырце, % мас.; $G_{\text{пр.г}}$ – природный газ на конверсию, $\text{нм}^3/\text{ч}$; $G_{\text{т.пр.г}}$ – топливный природный газ, $\text{нм}^3/\text{ч}$.

В работе был проведен анализ влияния температурного режима печи конверсии на эффективность работы производства в целом. Отмечено, что увеличение расхода топливного природного газа до определенного предела (до $10000 \text{ нм}^3/\text{ч}$) приводит к более полной переработке исходного сырья и в целом степень переработки природного газа в метанол k увеличивается до максимума с 1.195 до $1.235 \text{ кг}_{\text{мет}}/\text{м}^3_{\text{пр.г}}$.

На основании приведенного анализа можно рекомендовать, в частности, углубленную проработку проекта по направленному изменению состава исходного метаносодержащего газа с целью повышения эффективности производства метанола.

Реконструкция технологии синтеза метанола

Компьютерный анализ позволил получить количественные характеристики процесса синтеза метанола в двухстадийной схеме на основе крупнотоннажных агрегатов М-750.

Показано, что при использовании двухстадийной схемы (катализатор ICI 52-1, проектные данные) существенно уменьшается общий объем катализатора (с 264 м^3 до $\sim 150 \text{ м}^3$) при практически неизменной производительности установки в целом.

Жесткие условия работы катализатора в проточных реакторах первой стадии (значительное удаление состава смеси от равновесного, интенсивное выделение тепла) требуют его повышенной, по сравнению с традиционно используемыми катализаторами, термостабильности.

Большие возможности в этом направлении связаны с использованием ультрадисперсных катализаторов, полученных электрофизическими, в том числе плазмохимическими методами. Проведенное комплексное исследование плазмохимических катализаторов (ПХК) позволило получить и рекомендовать к использованию образцы контактов с высокой термостабильностью.

Результаты компьютерного анализа двухстадийной схемы синтеза метанола – проточный реактор (термостабильный ПХК) + циркуляционный контур (катализатор ICI 51-2) и рекомендуемый технологический режим ее работы приведены в табл.3.

Таблица 3

Параметры работы проточного реактора двухстадийной схемы синтеза метанола

Параметры	ВХОД	ВЫХОД	
		ICI 51-2	ПХК
Расход синтез-газа, Нм ³ ·ч	346156	235708	243500
Содержание СО, мол.%	14,6	7,8	8,1
Содержание СО ₂ , мол.%	7,5	9,7	9,3
Температура, °С	220	250	247
Выход метанола-сырца, кг/ч		50427	48350
Доля метанола, мас.%		95	93

Разработка моделирующей системы процесса пиролиза углеводородов

Типичным представителем гомогенных некаталитических реакций является пиролиз большого спектра углеводородных фракций в трубчатых печах.

Математические модели такого многокомпонентного процесса, построенные с учетом детального механизма, являются чрезвычайно громоздкими и нуждаются в разумном агрегировании, то есть переходу к моделям с таким числом переменных (концентраций компонентов), когда упрощается расчет, но не теряется чувствительность к составу сырья. Как и в предыдущих случаях, был выполнен анализ детального механизма, но для условий гомогенного пиролиза различного углеводородного сырья и развиты идеи агрегирования [17]. Сформированный оптимальный механизм (177 реакций 53 компонента) применим для описания пиролиза бензинов (нефтяных, газоконденсатных рафинатов). Полученные системы реакций и компонентов представлены в табл. 4. Эти механизмы обеспечивают достаточную информативность при разработке математических моделей для решения широкого диапазона задач в прикладных расчетах.

Таблица 4

Факторы, определяющие размерность механизма	Требования к размерности	Количество реакций R и компонентов K в механизме
Область применения математического описания:		
а) научно-исследовательские работы	max $R-K$	$R=303, K=60$
б) покомпонентный расчет пиролиза	$R-K$	
в) оптимизационные задачи	$R-K$	
- функция концентрации целевых продуктов;		$R=177, K=53$
- функция – концентрационные поля стабильных компонентов.		$R=44, K=37$
Температура:		$R=177, K=53$
- с повышением температуры		
$T=793$ К	$R-K$	$R=129, K=51$
$T=1073$ К		$R=142, K=52$
Время контакта:		
с увеличением τ	$\downarrow R-K$	
$\tau = 0,3$ с		$R=77, K=49$
$\tau = 0,5$ с		$R=55, K=49$
Состав сырья:		
а) этан – пропан		$R=36, K=13$
б) фр.С4		$R=84, K=36$
в) ШФЛУ		$R=118, K=41$
г) бензин		$R=177, K=53$

($\uparrow\downarrow$) – увеличение и уменьшение количества исследуемых параметров.

Система кинетических уравнений по всем участвующим компонентам формируется специальным компьютерным модулем на основании списка реакций и компонентов.

Численные значения кинетических констант для каждой элементарной реакции оценены с помощью унифицированной методики [18].

В итоге каждая модель кинетики состоит из определенного числа реакций (файл **reaction.dat**), компонентов (файл **compon.dat**) и системы обыкновенных дифференциальных уравнений – ОДУ (файл **diffun**). Так, модель кинетики пиролиза этан-пропановых фракций основана на механизме 36 элементарных и 13 компонентов и представляет собой систему из 13 ОДУ. Модель пиролиза ШФЛУ включает 118 реакций, 41 компонент и систему из 41 ОДУ. Модель пиролиза бензинов имеет 177 реакций, 53 компонента и представляет собой систему из 53 ОДУ.

Сравнение экспериментальных и расчетных данных показывает (табл.5), что расхождение значений по основным компонентам не превышает 10%, и это подтверждает адекватность разработанных моделей кинетики гомогенного пиролиза широкого спектра газообразных и жидких углеводородов.

Таблица 5

Экспериментальные и расчетные данные по выходу продуктов пиролиза бензиновой фракции н.к.-180°С ($T = 1023 \text{ К}$, $P = 1,4 \text{ атм}$, $\tau = 0,45\text{с}$)

Компоненты	Состав, мас.%		
	Сырье	Эксперимент	Расчет
H ₂	-	0.91	0.87
CH ₄	-	13.40	10.51
<i>n</i> -P _{5,11}	30.06	4.14	4.54
<i>m</i> -P _{5,11}	20.10	1.81	1.71
<i>d</i> -P _{5,11}	20.11	-	0.27
Hf	23.41	0.52	1.44
C ₂ H ₄	-	25.60	26.49
C ₃ H ₆	-	16.50	17.70
C ₄ H ₈	-	7.60	7.30
Ol _{5,11}	-	1.45	1.48
C ₂ H ₂	-	0.50	0.85
C ₄ H ₆	-	5.17	4.69

Для расчета печей пиролиза необходимо иметь конструктивные параметры змеевиков, их количество в печи, нагрузки по сырью, режимные параметры, состав пиролизруемой фракции, а также выбрать из нашего банка модель кинетики пиролиза, соответствующего сырью [19].

Проверка моделей печей на адекватность выполнялась по промышленным данным с установки ЭП – 300 завода «Этилен» Томского нефтехимического комбината (табл.6).

Таблица 6

Сравнение экспериментальных и расчетных выходов продуктов пиролиза бензинов печи SRT – 2

Основные компоненты	Бензиновая фракция Сургутского завода моторных топлив		Бензиновая фракция Ачинского НПЗ	
	Эксп.	Расч.	Эксп.	Расч.
1	2	3	4	5
H ₂	0,79	0,84	0,84	0,80
CH ₄	14,25	11,10	14,10	11,08
C ₂ H ₆	3.09	4.38	4.64	4.98
C ³ H ⁸	0.45	0.12	0.66	0.11
<i>n</i> -C ⁴ H ¹⁰	0.43	0.46	0.52	0.48
IC ⁴ H ¹⁰	0.07	0.01	0.05	0.03
<i>n</i> -P ⁵	0.73	1.75	2.50	2.98
<i>m</i> -P ⁵	1.22	0.83	2.53	1.64

Продолжение табл. 6

1	2	3	4	5
$d-P^5$	0.00	0.00	0.00	0.00
C^2H^4	21.63	22.90	25.52	26.28
C_3H_6	14.08	13.01	18.21	17.35
C_4H_8	4.44	5.72	6.81	4.78
Бутадиен	5,48	5,61	5,21	5,38
Бензол	6,23	6,50	7,05	8,05
Толуол	5,53	4,48	2,57	2,84
Ксилол	0,00	0,17	0,00	0,29
Ацетилен	0,43	0,96	0,37	0,87
ΣC^5+	21,15	20,76	8,42	12,06
$T_{\text{вых}}, K$	1093	1093	1093	1093

При этом результаты сходимости, допустимые величины критерия Фишера и среднеквадратичной ошибки по целевым продуктам позволяют сделать вывод об адекватности разработанных моделей кинетики пиролизных печей типа SRT – 1 и SRT – 2 и пригодности их для прикладных расчетов.

На основании этих компьютерных комплексов нами была сформулирована информационно-моделирующая система (ИМС) блока печей пиролиза, которая представлена на рис.7

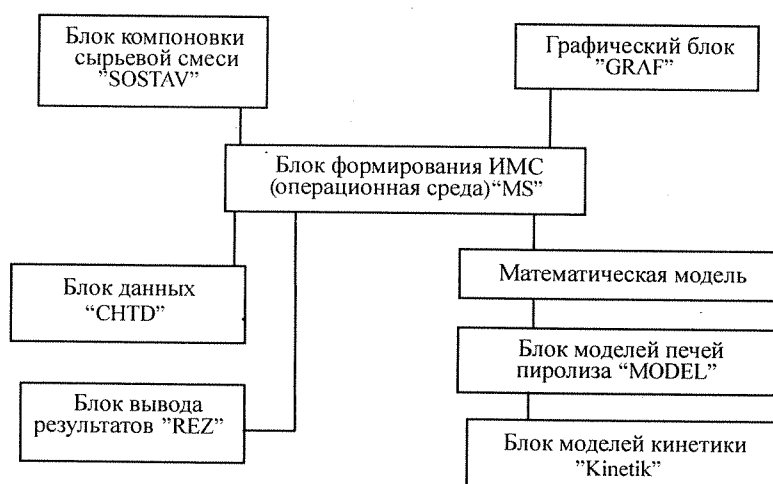


Рис.7. Структура ИМС блока печей пиролиза

С использованием разработанной ИМС выполнены прогнозные расчеты материального баланса пиролизного производства ТНХК при использовании в качестве сырья пиролиза нефти Омского, Ачинского и Сургутского НПЗ, их смесей, а также при компоновке исходного сырья с добавлением ШФЛУ и бутан-бутиленовой фракции. Эти технологические расчеты и исследования подтвердили хорошую чувствительность созданных моделей к составу сырья и изменению технологического режима, а также их прогнозирующую способность при решении широкого круга производственных задач.

Информационно-моделирующая система технологии первичной подготовки нефти

Технологическую основу установок первичной подготовки нефти (УПН) на промысле составляют массообменные процессы – сепарация, каплеобразование, обезвоживание и обессоливание [20].

Сепарация по своей физико-химической сущности является сложным многокомпонентным процессом, при описании которого использовались основные уравнения, характеризующие фазовое равновесие в системах газ – жидкость, а также формулы по расчету физико-химических свойств газа и жидкости при различных значениях технологических параметров и уравнения для расчета газового фактора и ряда других величин [21].

Для определения влияния обводненности нефти на распределение компонентов между газовой и жидкой фазами в математическое описание нами были введены зависимости для расчета констант фазового равновесия воды в системе газ – нефть – вода, полученные на основании обработки

данных о парциальных давлениях водяных паров с учетом растворимости воды в нефти [22, 23]. В итоге был разработан модуль расчета процесса сепарации сложной многокомпонентной системы при первичной подготовке нефти, позволяющий определить материальные потоки нефти и газа, газовый фактор, влагосодержание, физико-химические параметры потоков, давление насыщенных паров, составы газовой и жидкой фаз и учесть влияние основных технологических параметров процесса: температуры, давления, обводнённости, состава пластовой нефти, количества ступеней сепарации на ход процесса.

Известно, что при первичной подготовке нефти одним из основных этапов является процесс обезвоживания, включающий стадии каплеобразования и отстаивания.

В каплеобразователе происходит разрушение бронирующих оболочек с использованием химических реагентов и увеличение размеров капель воды, взвешенных в водонефтяной эмульсии. При разработке математического описания процесса каплеобразования были использованы известные методики [20, 24, 25], в которых предложено рассматривать процесс разрушения водонефтяных эмульсий, состоящим из двух этапов: массообмена и коалесценции. На первом этапе завершаются массообменные процессы и разрушение бронирующих оболочек, на втором – укрупнение капель до заданных размеров с последующим расслоением потоков.

С целью учета количества вводимого деэмульгатора на процесс разрушения эмульсии нами получена зависимость, отражающая влияние концентрации химического реагента на поверхностное натяжение. Входными параметрами расчета каплеобразователя являются выходные потоки модуля процесса сепарации; производительность установки, обводненность, физико-химические характеристики выходных потоков, а также концентрация химического реагента.

Разработанный модуль процесса каплеобразования позволяет определять значения следующих параметров: максимальный размер взвешенных при данных условиях капель, линейные скорости потоков, конструктивные размеры аппарата: длину и диаметр массообменной и коалесцирующей секций.

Так как в ИМС, в соответствии с технологией процессов, формируется структурная схема их взаимодействия (рис.8), то это обуславливает взаимосвязь входных и выходных потоков различных модулей. Поэтому выходные характеристики расчета процесса каплеобразования являются исходными данными для расчета процесса отстаивания, основным из которых является максимальный диаметр капель.

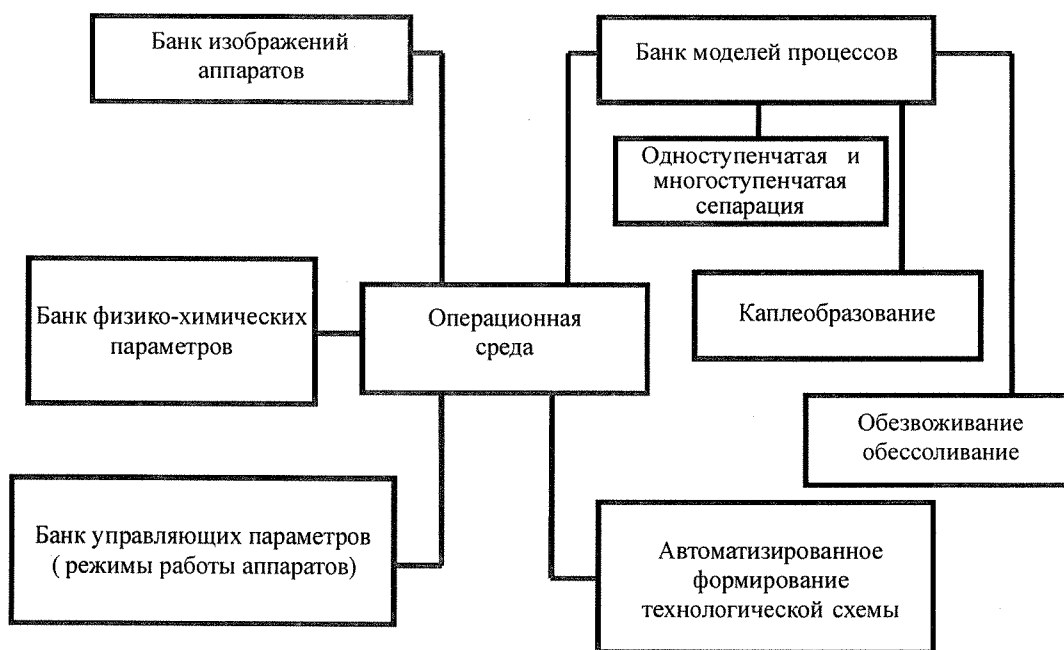


Рис.8. Структура информационно-моделирующей системы расчета процессов первичной подготовки нефти

Математическое описание процесса отстаивания основывается на известных законах осаждения капель воды под действием силы тяжести, а также различного рода эмпирических и полуэмпирических уравнениях, описывающих физико-химические свойства материальных потоков как функции технологических параметров процесса обезвоживания нефти [20 – 24].

В результате расчетов по математической модели отстойника определяются: обводненность нефти, физико-химические свойства эмульсии, время и скорость осаждения, материальный баланс системы.

При разработке математических моделей и проверке их на адекватность были использованы экспериментальные данные, полученные с месторождений ОАО «Томскнефть»: Лугинецкого, Игольско-Талового, Западно-Полуденного. Кроме того, нами проведены исследования физико-химических свойств нефти и состава газа на установке первичной подготовки нефти Васюганского НГДУ.

На разработанной информационно-моделирующей системе исследовано влияние различных параметров: температуры, давления, числа сепараторов в установке, физико-химических свойств сырья, обводненности, концентрации химического реагента на технологические показатели установок первичной подготовки нефти. В табл. 7 и 8 приведены результаты расчета процесса сепарации на примере нефти Лугинецкого месторождения. Проведены исследования по влиянию различных технологических условий и обводненности нефти (рис. 9 и 10) на выходные параметры потоков в процессе сепарации: выход нефти и газа, газовый фактор, влагосодержание газа, давление насыщенных паров. Рост обводненности нефти ведет к увеличению содержания влаги в газе. С увеличением температуры также растет влагосодержание газа, а повышение давления приводит к его снижению.

Таблица 7

Результаты расчета процесса сепарации (месторождение Лугинецкое; давление по сепараторам, МПа: 0.40 0.30 0.105; температура по сепараторам, °С: 10 10 10; молекулярная масса остатка, г/моль: 176.9; плотность остатка, кг/м³: 830.2; газосодержание, м³/т: 186.6)

Вещество	Молярная концентрация, %					
	Нефть пластовая	Нефть после сепарации	Газ в сумме	Газ на ступенях разгазирования		
				1	2	3
CO ₂	1.13	0.09	2.04	2.04	2.32	1.91
Азот	0.60	0.00	1.12	1.14	0.61	0.14
CH ₄	44.87	0.36	83.91	84.22	77.54	55.46
C ₂ H ₆	3.19	0.85	5.24	5.13	7.72	15.44
C ₃ H ₈	3.62	2.85	4.30	4.18	6.58	14.79
<i>i</i> -C ₄	1.37	1.79	1.00	0.98	1.55	3.60
<i>n</i> -C ₄	2.29	3.42	1.30	1.27	2.02	4.71
<i>i</i> -C ₅	1.30	2.41	0.33	0.32	0.51	1.20
<i>n</i> -C ₅	1.64	3.15	0.31	0.30	0.49	1.15
Остаток	39.99	85.08	0.44	0.43	0.68	1.62

Таблица 8

Исследование влияния свойств нефтей на процесс разгазирования

Месторождение	Молярная масса остатка	Плотность нефтяного остатка	Многократная сепарация					
			Условия сепарирования		Газовый фактор на ступенях разгазирования, м ³ /т			Суммарный газовый фактор, м ³ /т
			<i>T</i> , °С	<i>P</i> , МПа	1	2	3	
Игольско-Таловое	217.1	866.6	10:10:10	0.38:0.1:0.06	85.5	9.5	6.3	101.3
Западно-Полуденное	306.8	881.5	15:10:15	0.25:0.15:0.105	24.5	0.4	0.2	25.1
Лугинецкое	176.9	840.5	10:10:10	0.4:0.3:0.105	173.1	0.8	2.1	176.0

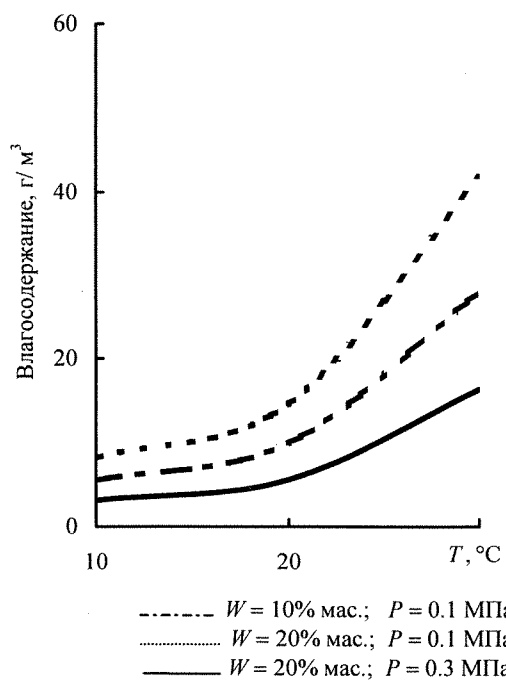


Рис.9. Зависимость влагосодержания в газе от температуры, давления P и обводненности нефти W

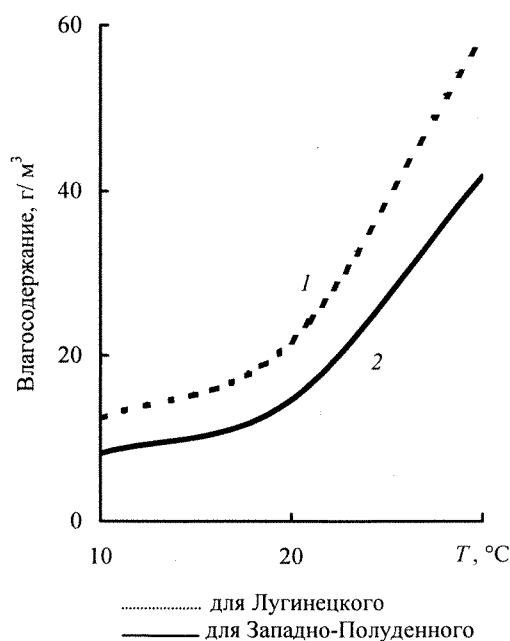


Рис.10. Зависимость влагосодержания в газе от температуры $P = 0.1$ МПа, $W = 20\%$ для Лугинецкого (1) и Западно-Полуденного (2) месторождений

В табл.9 приведены основные результаты расчета процесса каплеобразования для нефти Лугинецкого месторождения. Показано, что увеличение количества реагента ведет к уменьшению максимального размера капель, уменьшаются длина массообменной и коалесцирующей секций, время процесса массообмена. С ростом обводненности нефти максимальный диаметр капель увеличивается. Так, для Лугинецкого месторождения с двухкратным разгазированием ($T_1 = 10^\circ\text{C}$, $P_1 = 240000$ Па; $T_2 = 15^\circ\text{C}$, $P_2 = 180000$ Па) при обводненности нефти 5 – 30 %, мас. диаметр капли увеличивается с 0.052 до 0.066.

Таблица 9

Основные показатели процесса каплеобразования при различных значениях концентрации реагента

Показатели	Реагент, % мас.		
	0.0015	0.0025	0.0035
Максимальный размер капель, см	0.135	0.0236	0.0056
Линейная скорость в массообменной секции, м/с	5.95	5.31	4.82
Линейная скорость в коалесцирующей секции, м/с	0.82	1.49	2.45
Диаметр массообменной секции, м	0.088	0.094	0.098
Диаметр коалесцирующей секции, м	0.24	0.18	0.14
Длина массообменной секции, м	43.55	41.41	39.97
Длина коалесцирующей секции, м	143.5	9.42	3.12

При исследовании процесса отстаивания показано, что с повышением обводненности нефти и соответственно плотности и вязкости водонефтяной эмульсии, поступающей в отстойник, увеличивается теоретическая пропускная способность аппарата. Кроме того, следует отметить, что при постоянной производительности с увеличением обводненности нефти на входе в отстойник, в частности от 5 до 40 %, обводненность на выходе растет незначительно: с 0.1 до 0.98 % мас., что свидетельствует о высокой эффективности процесса обезвоживания.

Одним из управляющих параметров процесса отстаивания является относительная высота водяной подушки. Как показали наши исследования, существует минимальное значение обводнен-

ности нефти на выходе из отстойника при оптимальном соотношении высоты водяной подушки и радиуса – 0.47, что согласуется с результатами исследования, приведенными в работах [20,25]. При этом данное соотношение остается постоянным при различной обводненности нефти на входе в аппарат. Исследование влияния физико-химических свойств нефтей на процесс обезвоживания (табл.10) показало, что для нефтей, имеющих большие значения вязкости и плотности, процесс отделения воды протекает менее эффективно.

Таблица 10

Влияние свойств нефтей на процесс обезвоживания на установке первичной подготовки нефти (производительность УПН 1101000 т/год; исходная обводненность 24.5 % мас.; объём отстойника 200 м³; температура в отстойнике 40°С)

Показатели	Нефть		
	Западно-Полуденная	Лугинецкая	Лугинецкая промышленная
На входе в отстойник:			
Плотность эмульсии, кг/м ³	888.0	847.6	842.2
Вязкость эмульсии:	13.48		
- динамическая, мПа·с		3.59	2.99
- кинематическая, мм ² /с	15.17	4.23	3.55
Пропускная способность отстойника, м ³ /с	8.443·10 ⁻²	2.954·10 ⁻²	3.956·10 ⁻²
Необходимое количество параллельно работающих отстойников	1	2	2
Нагрузка на каждый отстойник, м ³ /с	4.059·10 ⁻²	1.958·10 ⁻²	1.799·10 ⁻²
Скорость осаждения, м/с	6.430·10 ⁻⁴	3.101·10 ⁻⁴	2.849·10 ⁻⁴
Время пребывания, мин	67.4	139.75	152.09
На выходе из отстойника:			
Обводненность нефти, % мас.	2.66	0.9	0.36
Плотность нефти при 20°С, кг/м ³	867.9	811.9	803.6
Вязкость нефти при 20°С:			
- динамическая, мПа·с	21.77	2.94	2.46
- кинематическая, мм ² /с	25.08	3.62	3.06

Разрабатываемые математические модули и, в конечном итоге, информационно-моделирующая система предназначены для расчета и прогнозирования режимов работы установок первичной подготовки нефти. С целью апробации математических моделей нами были проведены обследования промышленных установок: НГДУ «Лугинецкнефть» и «Васюганскнефть». В табл.11 приведены результаты расчетов материального баланса установки первичной подготовки нефти НГДУ «Лугинецкнефть». Сравнение расчетных материальных потоков с экспериментальными значениями показало удовлетворительное совпадение по выходу нефти, газа, подтоварной воды, что подтверждает возможность практического использования разработанных моделей.

Таблица 11

Материальный баланс установки первичной подготовки нефти

Показатели	Расход, кг/ч	Плотность, кг/м ³	Температура, °С
На вход блока сепараторов	131071.43	642.46	10.00
Газ из блока сепараторов	28946.86	0.87	15.00
Разгазированная нефть	102124.57	822.21	15.00
Нефть из отстойника	99847.19	811.87	40.00
Дренажная вода	2277.38	992.00	40.00
Газ из концевой сепаратора	529.57	1.56	40.00
Нефть в товарный парк	99317.62	805.92	40.00

Информационно-моделирующая система имеет модульную структуру с удобным для пользователя интерфейсом (система меню, диалоговый ввод данных с клавиатуры и магнитных носителей, получение результатов расчетов как в электронной форме, так и в печатном виде, вывод графических изображений на экран). Каждый модуль ИМС может работать в автономном режиме, моделируя отдельные процессы первичной подготовки нефти.

Разработанная ИМС ориентирована на конкретные задачи Западно-Сибирского региона, адаптирована к составам нефтей данного региона, имеет компактную структуру, включает модули основных процессов первичной подготовки нефти и в настоящее время используется для проведения технологических расчетов при проектировании УПН на новых нефтяных месторождениях.

Кинетические аспекты и математическое моделирование низкотемпературного термолиза торфа

Изучение процессов термолиза твердых горючих ископаемых (ТГИ), в т.ч. и торфа, начинается, как правило, с исследования кинетики образования газообразных, жидких и твердых продуктов термодеструкции органической массы в изотермических или температурно-программируемых условиях протекания реакций. Предложенный нами метод идентификации моделей процесса с независимыми стадиями позволил, используя результаты дериватографического исследования бурых углей, торфов и их групповых составляющих, рассчитать кинетические параметры реакций образования диоксида углерода, пирогенитической воды, метана, водорода и оксида углерода [26].

Вместе с тем групповые модели не отражают глубокой физико-химической сущности протекающих реакций, и мы видим дальнейшее развитие кинетического описания процессов термолиза ТГИ на основе концентраций функциональных псевдокомпонентов твердого остатка. При этом учитывается, что в ходе термического разложения в данном температурном интервале (20 – 450°C) в химических реакциях участвуют в основном периферийные функциональные группы макромолекул, а ароматическое ядро практически не изменяется. Вследствие этого, с определенной степенью приближения, можно записать реагирующий псевдокомпонент как совокупность функциональных групп, соединенных с ароматическим ядром.

В итоге механизм термической деструкции в общем случае был представлен реакциями всех первоначально существующих функциональных групп, а также промежуточных функциональных групп, образующихся в ходе термодеструкции. Помимо этого были учтены некоторые реакции групповых компонентов и некоторые известные реакции ВРВ-карамелизации, меланоидиновая конденсация и др. Всего механизм включает 246 реакций.

Расчет концентраций функциональных псевдокомпонентов выполнен с использованием пакета прикладных программ по данным ЯМР и ИКС с учетом результатов физико-химических методов анализа.

Расчет основных термодинамических параметров реакций построен на «правилах аддитивности» свойств групп и выполнен с использованием созданной компьютерной программы.

На основании этого составлена неизотермическая модель кинетики термолиза псевдокомпонентов, учитывающая химические и физико-химические особенности процесса:

$$\frac{dR_i}{dT} = \frac{\sum k_{j1} \cdot \prod R_m^{n_1} - \sum k_{j2} \cdot \prod R_i^{n_2}}{b} + \sum \Delta R_{i,j1} - \sum \Delta R_{i,j2},$$

где R_i – концентрация i -го компонента; R_m – концентрация m -го компонента; n_1, n_2 – порядок реакции; K_{j1}, K_{j2} – константы скоростей реакций; b – скорость нагрева; $\sum \Delta R_{i,j1}$ – сумма i -го компонента за счет перехода функциональных групп в реакциях образования; $\sum \Delta R_{i,j2}$ – сумма i -го компонента за счет перехода функциональных групп в реакциях расходования.

Эта модель дает возможность не только рассчитывать изменение концентраций реагирующих псевдокомпонентов, но и проследить изменение молекулярных масс групповых компонентов во всем температурном интервале.

При решении обратной кинетической задачи получены кинетические параметры, которые имеют следующие интервалы изменения – $E = 10,5 - 105$ кДж/моль; $k_0 = 10 - 4,5 \cdot 10^5$, причем реакции наиболее активных функциональных групп имеют низкие значения энергий активации, что определяет протекание их в низкотемпературной области, в то время как реакции образования пассивных компонентов типа остаточного угля имеют высокие значения E , что говорит о протекании их преимущественно в высокотемпературной области (табл. 12).

Таблица 12

Кинетические параметры реакций термоллиза торфа

Реакция (ЛГВ, Цел, ВРВ)	k_0	$E_{\text{акт}}$	Реакция (Бит, ФК, ГК)	k_0	$E_{\text{акт}}$
ЛГВ → Цел	4,00	29,31	ROH → RCH=CHR + H ₂ O	$1,69 \cdot 10^4$	98,39
Гидролиз легкогидролизуемых веществ	$4,50 \cdot 10^5$	10,47	2ROH → ROR + H ₂ O	$1,06 \cdot 10^4$	66,15
Гидролиз целлюлозы	$1,50 \cdot 10^5$	3,14	ROH + RCOOH → RCOOR + H ₂ O	$7,43 \cdot 10^3$	55,68
1-я стадия деструкции ЛГВ	$1,00 \cdot 10^4$	29,31	2ArOH → ROR + H ₂ O	$9,04 \cdot 10^3$	55,68
1-я стадия деструкции целлюлозы	$1,00 \cdot 10^4$	29,31	ROH + ArOH → ROR + H ₂ O	$9,49 \cdot 10^3$	65,73
2-я стадия деструкции ЛГВ	$7,00 \cdot 10^3$	37,68	RCH=CHR + ROH → ROR	$1,16 \cdot 10^4$	82,06
2-я стадия целлюлозы	$7,00 \cdot 10^3$	37,68	RCH=CHR + ArOH → ROR	$9,57 \cdot 10^3$	66,57
3-я стадия деструкции ЛГВ	$3,00 \cdot 10^3$	54,43	RCOOCOR + 2ROH → 2RCOOR + H ₂ O	$1,10 \cdot 10^4$	60,71
3-я стадия деструкции целлюлозы	$3,00 \cdot 10^3$	54,43	RCOOCOR + 2ArOH → 2RCOOR + H ₂ O	$1,01 \cdot 10^4$	66,99
$RCO_{\text{ВРВ}} + RNH_2 \rightarrow RNCR + H_2O$	$3,80 \cdot 10^2$	28,09	RCOOR + ROH → ROR + RCOOH	$1,18 \cdot 10^4$	78,71
$2ROH_{\text{ВРВ}} + RCO \rightarrow R' + CO_2 + H_2O$	$4,35 \cdot 10^1$	49,82	RCOOR + ArOH → ROR + RCOOH	$1,12 \cdot 10^4$	76,62
$ROH_{\text{ВРВ}} + ROH \rightarrow ROR + H_2O$	$1,70 \cdot 10^3$	70,76	ROH → RCOR + H ₂	$1,64 \cdot 10^4$	94,20
$ArOH_{\text{ВРВ}} + ArOH \rightarrow ArOAr + H_2O$	$4,72 \cdot 10^1$	31,48	2RCOR → RCOOR	$6,44 \cdot 10^3$	41,87
$ROH_{\text{ВРВ}} + ArOH \rightarrow ArOR + H_2O$	$3,76 \cdot 10^3$	55,68	2RCOOH → RCOOCOR + H ₂ O	$1,21 \cdot 10^4$	73,69
$ArOH_{\text{ВРВ}} + ROH \rightarrow ArOR + H_2O$	$3,98 \cdot 10^1$	52,34	RCOOCOR → RCOR + CO ₂	$1,60 \cdot 10^4$	84,15
$ROH_{\text{ВРВ}} + RCOOH \rightarrow RCOOR + H_2O$	$5,63 \cdot 10^3$	48,99	RCOR → R + CO	$1,02 \cdot 10^4$	62,80
$ROH_{\text{ВРВ}} + O_2 \rightarrow R'COOH_{\text{ВРВ}} + H_2O$	$4,02 \cdot 10^1$	49,40	RCOOH → R + CO ₂	$1,37 \cdot 10^4$	80,81
$ROH_{\text{ВРВ}} + R=R \rightarrow R'OR$	$3,53 \cdot 10^3$	16,62	RCOOR → R + CO ₂	$1,70 \cdot 10^4$	107,60
$2ROH_{\text{ВРВ}} + RCOOCOR \rightarrow 2RCOOR + H_2O$	$1,41 \cdot 10^2$	69,92	R + CO + H ₂ → RCOR	$1,61 \cdot 10^4$	94,20
$ROH_{\text{ВРВ}} + RCOOR \rightarrow RCOOH + ROR$	$6,67 \cdot 10^3$	59,03	RCOR + H ₂ → ROH	$1,58 \cdot 10^4$	90,43
$RCOOH_{\text{ВРВ}} \rightarrow R_{\text{ВРВ}} + CO_2$	2,25	90,85	RCH=CHR + O ₂ + H ₂ → ROH + H ₂ O	$6,07 \cdot 10^3$	22,94
$RNH_{2\text{ВРВ}} + RCOOH \rightarrow RNHR + H_2O + CO_2$	$5,57 \cdot 10^2$	67,41	RCH=CHR → OY + 3H ₂	$1,59 \cdot 10^4$	79,97
$RNH_{2\text{ВРВ}} + RCOR \rightarrow R_2CNR + H_2O$	$3,57 \cdot 10^3$	33,54	ROR → ArOAr + 3H ₂	$1,56 \cdot 10^4$	96,30
$ROCOR_{\text{ВРВ}} \rightarrow R_{\text{ВРВ}} + CO_2$	$5,00 \cdot 10^{-3}$	62,80	ROR → RCOR + RCH=CHR	$1,59 \cdot 10^4$	83,74
			ROR + H ₂ → ROH + RCH=CHR	$6,04 \cdot 10^3$	51,08
			RCOR + RNH ₂ → RCNR + H ₂ O	$9,62 \cdot 10^3$	51,92
			RCOOH + RNH ₂ → RCNR + H ₂ O + CO	$1,23 \cdot 10^4$	56,94
			ROR → ROH + OY	$1,63 \cdot 10^4$	76,20
			ROR → ArOH + OY	$1,59 \cdot 10^4$	92,95
			ROCOR → R + CO ₂	$2,00 \cdot 10^2$	29,31
			R → OY	$2,02 \cdot 10^5$	86,67

Используя результаты расчета кинетических констант, выполнено моделирование процесса низкотемпературного термоллиза торфа и рассчитано изменение концентраций компонентов во всем температурном интервале исследования (рис.11) [27].

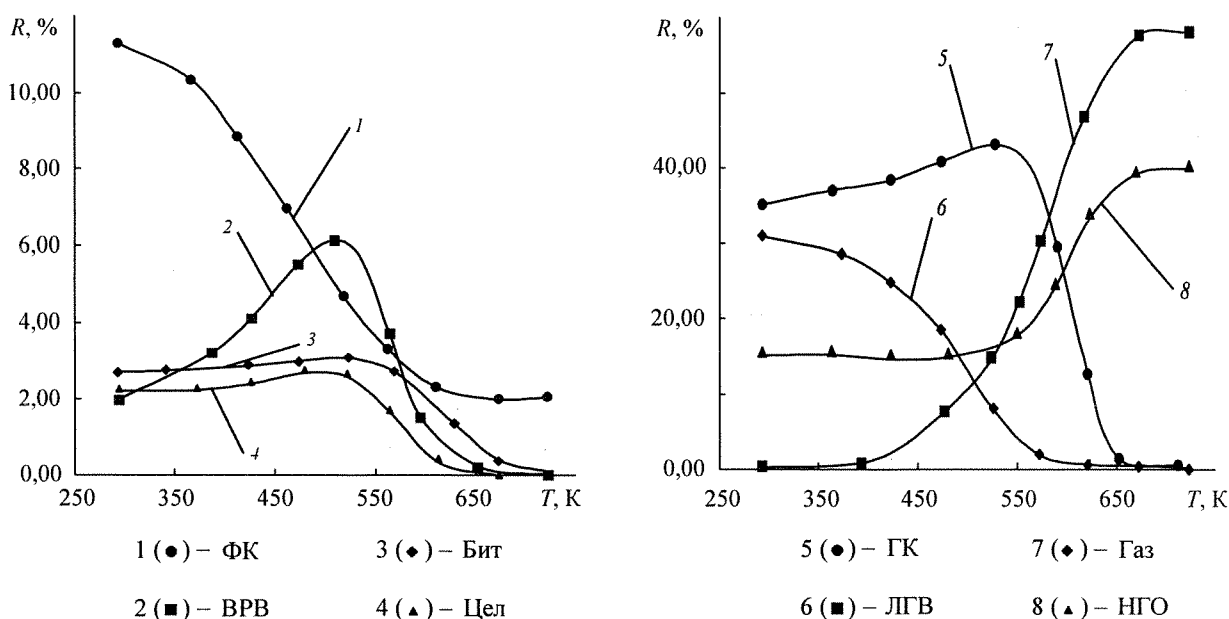


Рис.11. Изменение концентраций групповых составляющих осокового торфа (структурно-групповая модель)

Заключение

Выполненный анализ и проведенные исследования достаточно убедительно показывают, что развитие промышленной технологии переработки практически всех видов горючих ископаемых, повышение ее эффективности, оптимизация режимов и прогнозирование качества и свойств товарной продукции в ближайшие годы будут во многом определяться разработкой и внедрением информационно-моделирующих и интеллектуальных систем, в первую очередь, на физико-химической основе.

Разработанные и описанные выше ИМС и ИС уже используются для тестирования промышленных платиновых катализаторов риформинга и изомеризации в производстве высокооктановых бензинов, внедрены в качестве «Советчика технолога» при стабилизации технологических режимов на установках каталитического риформинга бензинов и крупнотоннажного производства метанола, компаундировании потоков в производстве товарных бензинов и оптимизации состава пиролизного сырья, выборе и оптимизации комплексной технологии производства товарных бензинов на НПЗ и подготовки нефти или газового конденсата на промысле, прогнозировании выхода продуктов в условиях низкотемпературного термолитического разложения твердых горючих ископаемых.

Особо следует отметить, что повышение качества подготовки студентов химико-технологических специальностей вузов быстро достигается при внедрении в учебный процесс компьютерных обучающих комплексов, созданных на основе интеллектуальных систем типовых процессов нефтегазохимической промышленности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Смольянинова Н.М., Страмковская К.К., Хорошко С.И., Смольянинов С.И. Нефти, газы и газовые конденсаты Томской области. - Томск: Изд-во Томск. ун-та, 1978. - 300 с.
2. Архипов В.С., Маслов С.Г., Инишева Л.И., Махантьева Л.С. Торфяные ресурсы Томской области и их использование. - Новосибирск: Изд-во СО РАСХН, 1995. - 87 с.
3. Кравцов А.В., Иванчина Э.Д. Интеллектуальные системы в химической технологии и инженерном образовании. - Новосибирск: Изд-во СО РАСХН, 1996. - 200 с.
4. Слинко М.Г. // Химическая промышленность. - 1995. - №7. - С.3-10.
5. McGreavy, Lu M.L., Wang X.Z., Kam E.K.T. // Chemical Engineering Science. - 1994. - V.49. - №24a.
6. Кравцов А.В., Иванчина Э.Д. // React. Rinet. Catal. Lett. - 1997. - V.30. - №12. - P.199-204.

7. Кравцов А.В., Москвин В.С., Иванчина Э.Д. // Информационный бюллетень стран СЭВ по химической промышленности. - 1984. - №11. - С.34-36.
8. Кравцов А.В., Иванчина Э.Д., Варшавский О.М., Мельчаков Д.А. // Химическая промышленность. - 1995. - №1. - С.34-37.
9. Кравцов А.В., Иванчина Э.Д. // ТОХТ. - 1996. - Т.30. - №5. - С.1-7.
10. Иванчина Э.Д., Кравцов А.В. - Томск, 1995. - 50 с. /Препринт СО РАН.
11. Kravtsov A.V. Ivanchina E.D. // Computer prediction of Pt-catalysts activity oil refining, Russian-Korean Seminar on Catalysis. - Novosib., 1995. - Pat. 2. - P.171-172.
12. Kravtsov A.V. Ivanchina E.D. // Computerized forecasting of the processes for benzine production, «Chem-reactor - 14». - 1998. - P.82-83.
13. Кравцов А.В. // Вопросы кинетики и катализа. - Иваново: Ивановский химико-технологический институт, 1980. - С.33-40.
14. Технология синтетического метанола / Под ред. М.М.Каравасва, В.Е.Леонова, И.Г.Попова. - М.: Химия, 1984. - 240 с.
15. Кравцов А.В., Новиков А.А., Коваль П.И. Компьютерный анализ технологических процессов. - Новосибирск: Наука, 1998. - 215 с.
16. Коваль П.И., Новиков А.А., Кравцов А.В. // Химическая промышленность. - 1995. - №3. С.139-145.
17. Сваровская Н.А., Кравцов А.В., Яблонский Г.С., Москвин В.С. - Новосибирск, 1984. - 60 с. /Препринт ИК СО РАН.
18. Сваровская Н.А., Кравцов А.В., Яблонский Г.С. - Новосибирск, 1986. - 26 с. /Препринт ИК СО РАН.
19. Кравцов А.В., Сваровская Н.А., Тризна А.Г., Зеленко И.Ю. // Химическая промышленность. - 1995. - №2. - С.36-38.
20. Тронов В.П. Промысловая подготовка нефти. - М.: Наука, 1977. - 271 с.
21. Технологические расчеты установок переработки нефти / Под ред. Танатарова. - М.: Химия, 1989. - 190 с.
22. Рид Р., Праустниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. - Л.: Химия, 1982. - 590 с.
23. Эмирджанов Р.Г., Лемберанский Р.А. Основы технологических расчетов в нефтепереработке и нефтехимии. - М.: Химия, 1989. - 192 с.
24. Медведев В.Ф. Сбор и подготовка неустойчивых эмульсий на промыслах. - М.: Недра, 1987. - 144 с.
25. Лутошкин Г.С. Сбор и подготовка нефти, газа и воды. - М.: Недра, 1983. - 224 с.
26. Кравцов А.В., Федоров А.Ф., Шишмина Л.В. - Томск, 1996. - 95 с. /Препринт ТПУ.
27. Кравцов А.В., Баженов Д.А., Тарновская Л.И., Маслов С.Г. // Химия твердого топлива. - 1996. - № 3. - С.73-80.