

процесса окисления (вплоть до 8 часов) позволяет повысить степень конверсии СС до 92 %.

Групповой углеводородный состав исходного дистиллята и продуктов его окисления устанавливали с помощью жидкостно-адсорбционной хроматографии на силикагеле II степени активности по Брокману. Заполнение хроматографической колонки сорбентом производилось мокрым способом. Навеску образца смешивали с гексаном и равномерно распределяли по всей поверхности сорбента. Затем элюируя фракции насыщенных УВ н-гексаном и ароматических УВ смесью гексан : бензол (3:1 по объему) и смесью спирт : бензол (1:1 по объему). Контроль за разделением УВ различных классов осуществлялся по цветной формалитовой реакции (рис. 1).

Список литературы

1. Ахметов С.А., Ишимьяров М.Х., Кауфман А.А. *Технология переработки нефти, газа и твердых горючих ископаемых: учебное пособие.* – СПб.: Недра, 2009. – 828с.

Как видно из графика (рис. 1) содержание насыщенных УВ возрастает. Во время проведения процесса ОО происходит разрыв двойных связей, содержание ароматических УВ снижается.

Выводы

1) Окисление дизельной фракции при помощи окислительной смеси HCOOH и H_2O_2 с последующей адсорбционной очисткой позволяет удалять 75–92% СС, содержащихся во фракции.

2) При проведении ОО в период от 0 до 8 часов происходит увеличение содержания насыщенных УВ, оно составляет 17 % мас., конверсия ароматических УВ составляет 38,6 % мас.

РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ РАСЧЕТА ОКТАНОВЫХ ЧИСЕЛ СМЕШЕНИЯ

Ч.А. Батоева, А.М. Карпова

Научный руководитель – к.т.н., доцент М.А. Самборская

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, batoevach_95@mail.ru*

Октановое число (ОЧ) является одним из важных показателей качества автомобильных бензинов. В связи с ужесточением требований к качеству моторных топлив растет количество и номенклатура применяемых модификаторов, в том числе и октаноповышающих добавок, позволяющих улучшить эксплуатационные и технические характеристики топлив.

Современным инструментом расчета физико-химических и эксплуатационных свойств является моделирование свойств смеси на основе свойств компонентов, что позволяет прогнозировать качество товарных продуктов и осуществлять управление качеством в режиме реального времени [1].

Октановые числа смешения (ОЧС) оксигенатов не являются аддитивными характеристиками и зависят от количества добавки в смеси, концентраций и свойств других компонентов, что значительно усложняет задачу разработки

расчетных методов.

Целью данной работы был поиск закономерностей, описывающих изменение ОЧС октаноповышающих добавок в зависимости от свойств исходного бензина и концентрации добавки.

Объектами исследования служили образцы прямогонных бензиновых дистиллятов различных НПЗ, и ряд оксигенатов, таких как МТБЭ, изопропанол, изобутанол, этанол, этиленгликоль, амиловый и изоамиловый спирты.

Анализ результатов выполненных экспериментов позволил установить зависимость ОЧС октаноповышающих добавок от их содержания в смеси. Ряд результатов представлен на рисунках 1–2.

Следует отметить, что характер зависимости одинаков как для всех исследованных оксигенатов, так и для других типов добавок, в том числе и многокомпонентных.

Полученные зависимости позволят разра-

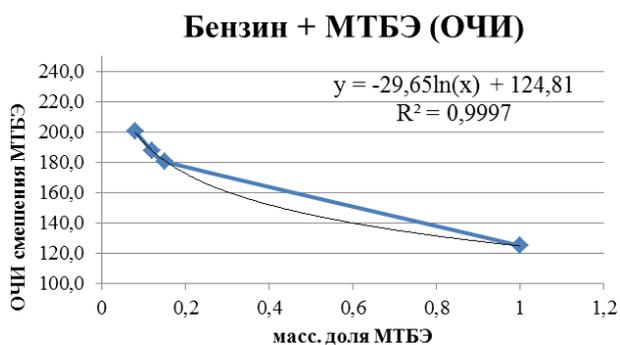


Рис. 1. Влияние концентрации МТБЭ на ОЧИ смешения

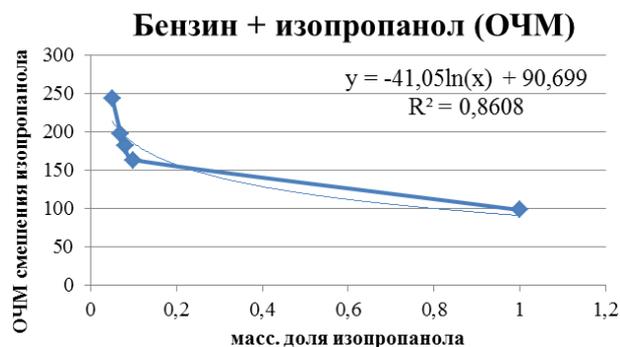


Рис. 2. Влияние концентрации изопропанола на ОЧМ смешения

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

В настоящее время в российской нефтепереработки 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-