МОДЕЛЬ РАСЧЕТА ПРИРОСТА ЦЕТАНОВОГО ЧИСЛА ДИЗЕЛЬНЫХ ФРАКЦИЙ ПРИ ВВЕДЕНИИ ПРОМОТОРА ВОСПЛАМЕНЕНИЯ С УЧЕТОМ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

А.А. Бердникова, М.В. Майлин, Е.В. Франция
Научный руководитель – к.т.н., н.с. Е.В. Франция

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

В настоящее время интерес к регионам Арктики возрастает, что связано с таянием морского арктического льда. Данное событие открывает новые возможности для государства в виде производства энергии, добычи ранее недоступных минеральных ресурсов, развития судоходства [1]. Для освоения региона необходимо применение техники, работающей на дизельном топливе (ДТ). Одним из главных показателей (ДТ) является цетановое число (ЦЧ). Для достижения заданных показателей необходимо вводить промоторы воспламенения. При добавлении цетаноповышающей присадки к ДТ на ЦЧ оказывает влияние, как углеводородный состав, так и межмолекулярные взаимодействия. В связи с этим, необходимо точно регулировать концентрацию вводимой присадки.

Объектами исследования в данной работе были выбраны: дизельное топливо, цетаноповышающая присадка (ЦПП) – изопропилнитрат.

Методами исследования были: прибор «SHATOH-300», позволяющий определять ЦЧ ДТ; математическая модель, созданная на основании исследований группового состава ДТ, а также квантово-химических расчетов, позволяющая рассчитывать прирост ЦЧ, в зависимости от концентрации вовлекаемой ЦПП [2].

$$ЦЧ_{ПОЛ} = ЦЧ_{ИСХ} + E^{Н–ПАР}_{ВЗАИМ} \cdot (1 - e^{1-A \cdot x}) \cdot W_{Н–ПАР} +$$

$$+ E^{И–ПАР}_{ВЗАИМ} \cdot (1 - e^{1-B \cdot x}) \cdot W_{И–ПАР} + E^{НАФТЕН}_{ВЗАИМ} \cdot$$

$$\cdot (1 - e^{1-C \cdot x}) \cdot W_{НАФТЕН} + E^{АРОМ}_{ВЗАИМ} \cdot (1 - e^{1-D \cdot x}) \cdot$$

$$\cdot W_{АРОМ} - \pm E^{РЕЗ}_{ВЗАИМ} \cdot (1 - e^{1-F \cdot x}) \pm K \cdot (1 - e^{1-H \cdot x})$$

где A, B, C, D, F – коэффициенты, описываемые термодинамической вероятностью протекания реакции образования радикала углеводорода:

$$A, B, C, D, F = -\frac{\Delta G_{РЕАК}}{RT}$$

$\Delta G_{реак}$ – среднее значение энергии Гиббса для реакции образования УВ радикала соответствующей группы, Дж/моль. Энергия Гиббса реакции (для коэффициента F) определялась как сумма значений энергий Гиббса парафинов (П) минус сумма нафтенов и ароматики.

К – коэффициент, равный отношению суммы нафтенов (Н) и ароматики (Ар) к сумме парафинов (П). Для ДТ, содержание П и Ар в которых более 60 и 20 % масс. соответственно, коэффициент К равен отношению суммы П к сумме Н и Ар. Знак «±» зависит от содержания П в ДТ, если содержание н-парафинов не превышает 55 %, используется знак «+», иначе – знак «–»; Н – коэффициент, равный отношению содержания н-парафинов к Ар.

$E^{Н–ПАР}_{ВЗАИМ}$, $E^{И–ПАР}_{ВЗАИМ}$, $E^{НАФТЕН}_{ВЗАИМ}$, $E^{АРОМ}_{ВЗАИМ}$ – энергии взаимодействия соответствующих групп углеводородов с ЦПП, кДж/моль.

$$\left| E^{РЕЗ}_{ВЗАИМ} = E^{Н–ПАР}_{ВЗАИМ} + E^{И–ПАР}_{ВЗАИМ} - (E^{НАФТЕН}_{ВЗАИМ} + E^{АРОМ}_{ВЗАИМ}) \right|$$

(Если содержание Ар не превышает 20 %, используется знак «+», иначе – знак «–»). С использованием данной модели был рассчитан прирост ЦЧ образца ДТ, при добавлении присадки 1 % об, характеристики которого приведены в таблице 1.

Прирост ЦЧ составил 3 единицы. При сравнении с ЦЧ, определенным с помощью прибора, погрешность составила 0,16, что не превышает 1. Данный факт подтверждает применимость данной модели для расчета прироста ЦЧ.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (Проект №18-79-00095)

Таблица 1. Характеристика дизельного топлива

Содержание н-парафинов, % мас.	37,17
Содержание и-парафинов, % мас.	26,04
Суммарное содержание парафинов, % мас.	63,22
Содержание нафтенов, % мас.	18,26
Содержание ароматики, % мас.	18,53
Концентрация присадки, % мас.	1,21
Плотность, кг/м^3	838,20
Цетановое число	50,00
Прирост цетанового числа	3,00

в Национальном исследовательском Томском политехническом университете в рамках Программы повышения конкурентоспособности Национального исследовательского Томского политехнического университета.

Список литературы

1. *Упасак Б., Грейз Г.М. Оценка и перспективы арктической стратегии России // World science: problem and innovations, 2019.– С.22–25.*
2. *Maylin M.V., Frantsina E.V., Grinko A.A. Development of a mathematical model for calculating the cetane number of diesel fractions based on their hydrocarbon composition and intermolecular interactions of mixture components // Combustion Science and Technology, 2019 (DOI: 10.1080/00102202.2019.1684909)*

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ПРОДУКТОВ ОБЛАГОРАЖИВАНИЯ ПРЯМОГОННОГО ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА НА ЦЕОЛИТЕ

И.А. Богданов, А.А. Алтынов, М.В. Киргина
Научный руководитель – доцент М.В. Киргина

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

Обеспечение отдаленных территорий качественным дизельным топливом является важнейшей задачей, стоящей перед отечественной нефтяной промышленностью, поскольку на данный момент в стоимости топлива, реализуемого в подобных районах, значительную часть составляют затраты на его транспортировку. Решение данной задачи также осложнено необходимостью поставок именно низкозастывающих топлив, так как в большинстве своем отдаленные районы характеризуются достаточно суровым климатом.

Существующие процессы улучшения низкотемпературных свойств дизельных топлив, в частности, каталитическая депарафинизация требуют использования дорогостоящего катализатора, содержащего благородные металлы, а также водородосодержащего газа, что делает использование этого процесса целесообразным только на достаточно крупных НПЗ, и не решает вопроса затрат на транспортировку топлива.

Перспективным направлением в решении данной задачи видится использование малотоннажных установок для производства низкозастывающих дизельных топлив, работающих без водородосодержащего газа и с использованием цеолитов в качестве катализаторов.

Целью данной работы стало исследование влияния температуры на характеристики продуктов облагораживания прямогонного дизельного топлива на цеолите.

Для оценки влияния температуры на характеристики получаемых продуктов авторами работы на лабораторной каталитической установке был реализован процесс облагораживания дизельного топлива при следующих технологических условиях:

Таблица 1. Характеристики сырьевой дизельной фракции и полученных продуктов

Характеристика		Дизельная фракция	Продукт 1	Продукт 2
Температура помутнения	°С	–4	<–70	<–70
ПТФ		–5	–51	–58
Температура застывания		–16	<–70	<–70
Плотность при 15 °С	кг/м^3	836,5	835,0	851,0
Кинематическая вязкость при 20 °С	мм^2/с	4,148	2,167	2,828
Содержание серы	мг/кг	3911	3741	3442

ПТФ – предельная температура фильтруемости.