

сырье для получения технического углерода. Также реализация данной инициативы позволит увеличить глубину переработки сырья, даст воз-

можность импортозамещения используемых материалов и окажет положительное воздействие на окружающую среду.

### Список литературы

1. Лебедева М.А., Машуков В.И., Головки А.К. // *Химия в интересах устойчивого развития*, 2012. – №20. – С. 633–638.
2. Мухина Т.Н., Лесохина Г.Ф., Колеснико-

ва Т.А., Цеханович М.С. *Состав и переработка тяжелых смол пиролиза : тематический обзор.* – М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1979. – 77 с.

## НЕСТАЦИОНАРНОЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПИРОЛИЗА БЕНЗИНОВОЙ ФРАКЦИИ

А.А. Бунаев, И.О. Долганова, И.М. Долганов  
 Научный руководитель – к.т.н., научный сотрудник ОХИ И.О. Долганова

ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»  
 634034, Россия, г. Томск, пр. Ленина, д. 43а, aurbunaev@gmail.com

Основным процессом производства олефинов для полимерной промышленности является пиролиз углеводородов. Однако, его проведение осложнено образованием отложений кокса: это приводит к прогару змеевиков, а также уменьшению выхода целевых продуктов.

Решением этой проблемы видится создание нестационарной математической модели, в основе которой лежит схема реакций, представленная на рисунке 1.

Таким образом, на первом этапе рассчитываются константы скоростей всех реакций:

$$K_j = K_{0j} \cdot \frac{P_0}{T^2} \cdot \exp\left(\frac{-E_j}{RT}\right), j \in \{1...172\}$$

Для расчета изменений концентраций компонентов складываются скорости соответствующих реакций, в которых присутствует конкретный компонент, умноженные на его стехиометрический коэффициент:

$$\frac{dC_i}{dt} = \sum a_{ij} \cdot K_j \cdot \prod C_j^{a_{ij}}$$

Однако, для расчета концентрации кокса применяется другая формула [1]:

$$\frac{dC_{\text{кокса}}}{dt} = K_8 C_{\text{кокса}} - \exp(0,023 \cdot C_{\text{кокса}} - 1) \cdot G^{0,8} \cdot G^{0,8} \cdot (D - 2 \cdot \delta)^{-1,8}$$

Модель была использована, чтобы симулировать пиролиз смеси, состав которой представлен в таблице 1.

**Таблица 1.** Состав сырья пиролиза

Группа компонентов по длине углеродной цепи	Сумма концентраций, моль/л
C <sub>4</sub>	0,44
C <sub>5</sub>	1,67
C <sub>6</sub>	7,7

В результате была получена динамика концентраций целевых продуктов в течение процесса – рисунок 2.

Достижение определенного пика, сменяющегося уменьшением концентрации связано с усилением побочных процессов. Это можно наблюдать на рисунке 3, где толщина слоя кокса заметно увеличивается ближе к концу.

Тем не менее, на данный момент количество кокса, выраженное в том или ином виде, является единственным компонентом, меняющимся с течением времени. В дальнейшем планируется создать динамику и для остальных компонентов.

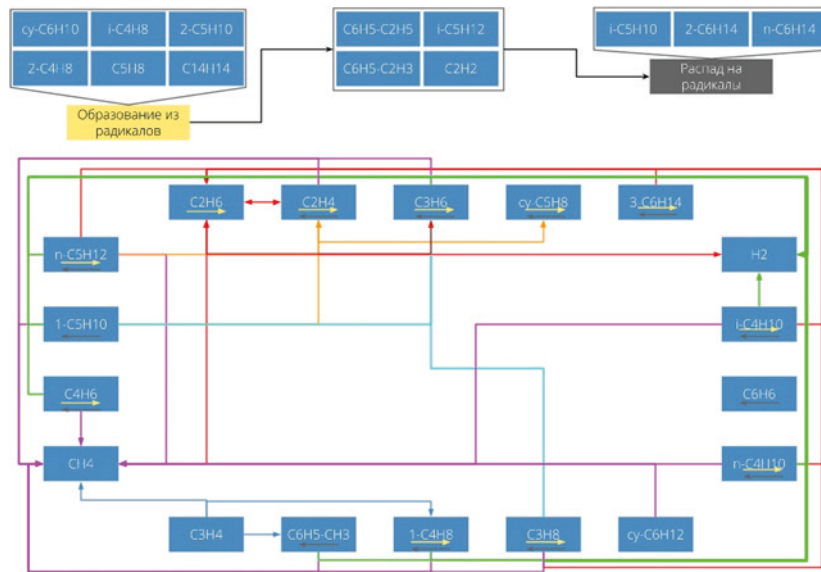


Рис. 1. Схема реакций

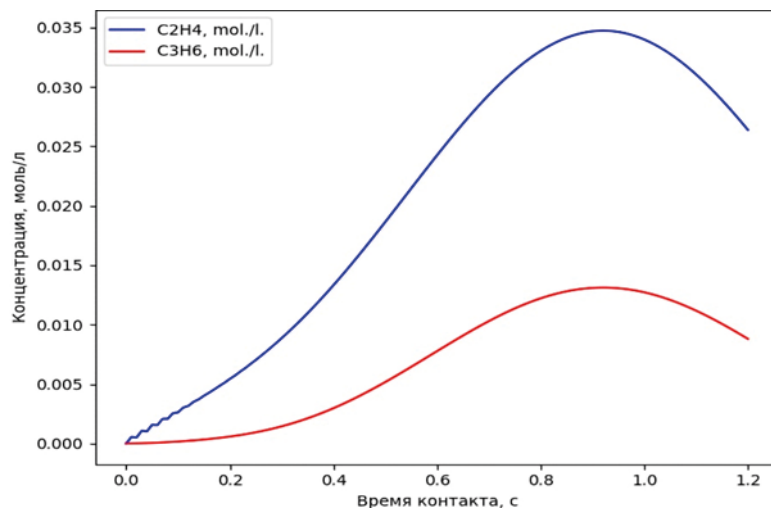


Рис. 2. Динамика концентраций этилена и пропилена

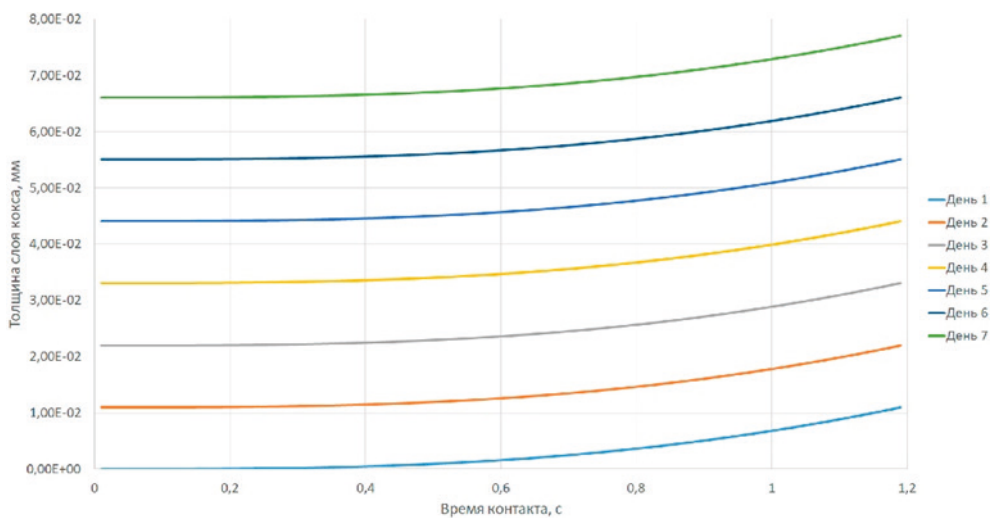


Рис. 3. Накопление кокса в змеевике пиролиза в течение нескольких дней

### Список литературы

1. Fernandez-Baujín J.M., Solomon S.M. New reactor design offers benefits // *Oil Gas J.*, 1976. – V. 74. – P. 94–95.

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЦЕОФОРМИНГА СТАБИЛЬНОГО ГАЗОВОГО КОНДЕНСАТА

Р.А. Быков, М.В. Киргина

Научный руководитель – к.т.н., доцент М.В. Киргина

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
Россия, 634050, г. Томск, проспект Ленина, дом 30, [mr.barotap@yandex.ru](mailto:mr.barotap@yandex.ru)

Одним из перспективных процессов получения высокооктановых компонентов бензина является процесс переработки стабильных газовых конденсатов на цеолитных катализаторах (цеоформинг).

К основным положительным сторонам данного процесса относится высокая селективность, стабильность проведения процесса и высокая активность катализатора [1]. Помимо ряда положительных аспектов, цеолитные катализаторы обладают и отрицательными, такими как: достаточно высокая крекирующая способность и быстрая дезактивация. Правильный выбор оптимальных технологических параметров даст возможность использовать только положительные стороны цеолитов, избегая отрицательные. Математическая модель позволит упростить переход на промышленные масштабы реализации процесса и облегчит внедрение на действующих производствах [2].

Целью данной работы является разработка математической модели превращения стабильного газового конденсата в условиях, при которых реализуется процесс, используя опыт промышленных установок цеоформинга.

Для достижения поставленной цели были проанализированы хроматограммы стабильного газового конденсата и продуктов его переработки на цеолите при температурах 375 °С, 400 °С и 425 °С, давлении 0,25 МПа, объемной скорости подачи сырья 2 ч<sup>-1</sup>.

Для создания математической модели был проведен термодинамический анализ реакций, протекающих в исследуемом процессе. Был произведен термодинамический расчет параметров реакций при помощи квантово-химических методов расчёта. Результаты расчетов приведены в таблице 1.

Далее на основании литературных источников и термодинамических расчетов реакций

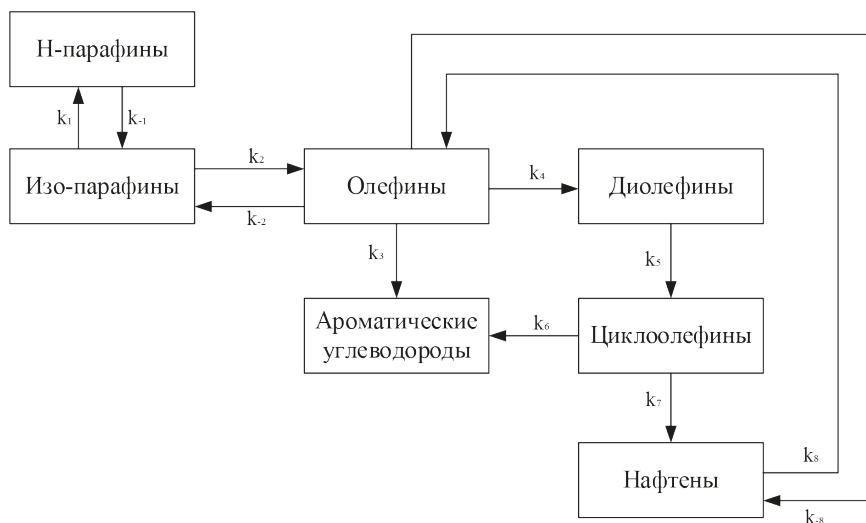


Рис. 1. Формализованная схема превращений стабильного газового конденсата на цеолитном катализаторе:  $k_1$ – $k_8$  – константы скоростей прямых реакций;  $k_{-1}$ ,  $k_{-2}$ ,  $k_{-8}$  – константы скоростей обратных реакций