

Рис. 1. Влияние температуры на октановое число алкилата

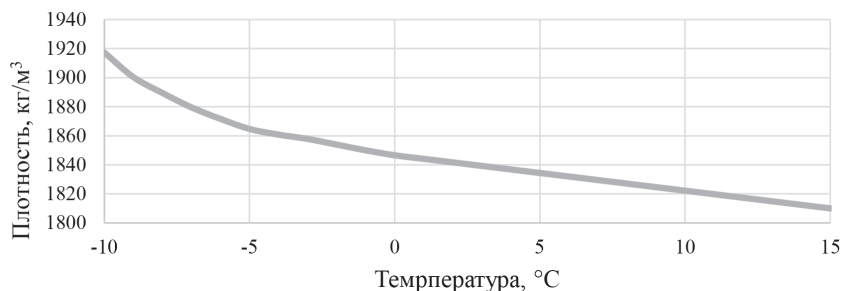


Рис. 2. Температурная зависимость плотности для серной кислоты

Таким образом, повышение температуры негативно сказывается на скорости образования разветвлённых парафинов C_8 и снижает концентрацию катализатора, что также отрицательно влияет на качество получаемого продукта. При этом следует отметить, что при повышенной температуре вязкость и плотность кислоты снижается, увеличивается качество диспергирования углеводородов в дисперсионной среде. На Рисунке 2 приведена температурная зависимость плотности для серной кислоты.

При повышенных температурах из-за снижения вязкости и плотности серной кислоты уменьшаются затраты на перемешивание реакционной массы.

При снижении температуры в реакторе алкилирования с 8 до -2 °C возрастает скорость образования целевых продуктов, при этом затраты на перемешивание возрастают на 4,2 %, в свою очередь, октановое число возрастает всего на 2,6 пункта, стоит также учитывать, что при снижении температуры возрастает расход хладагента.

Список литературы

1. Meyers R. A. *Handbook of petroleum refining processes (edition 3)* / R. A. Meyers. – New York: McGraw-Hill, 2003.
2. Ivanchina E. D., Ivashkina E. N., Dolganova I. O., Chuzlov V. A, Kopycheva U. N., Ivancin N. R. *Predictive Modeling of the Kinetics of Deactivation of Liquid-Phase Alkylation of Hydrocarbons Processes. Petroleum and Coal*, 2021. – 63 (2). – 447–454.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПИРОЛИЗА МЕТАНА

А. А. Котельников

Научный руководитель – к.т.н., доцент ОХИ И. М. Долганов

ФГАОУ ВО Национальный исследовательский Томский политехнический университет»
634050, Россия, г. Томск, проспект Ленина, дом 30, aak220@tpu.ru

В современном мире экологически чистое топливо – это то, к чему стремятся мировые лидеры в сфере производства энергоресурсов. Водородная энергетика хорошо зарекомендовала

себя и имеет многолетний опыт использования в различных сферах деятельности [1].

Пиролиз метана – один из энергоэффективных способов получения чистого водорода с ми-

Таблица 1. Основные параметры для составления модели

Реакция	Предэкспоненциальный множитель	Энергия активации, Дж/моль
$2\text{CH}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + 2\text{H}_2$	$5 \cdot 10^{10}$	-364 008
$\text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2$	$9 \cdot 10^7$	-288 696
$\text{C}_2\text{H}_2 \rightarrow 2\text{C} + \text{H}_2$	$1,78 \cdot 10$	-96 232

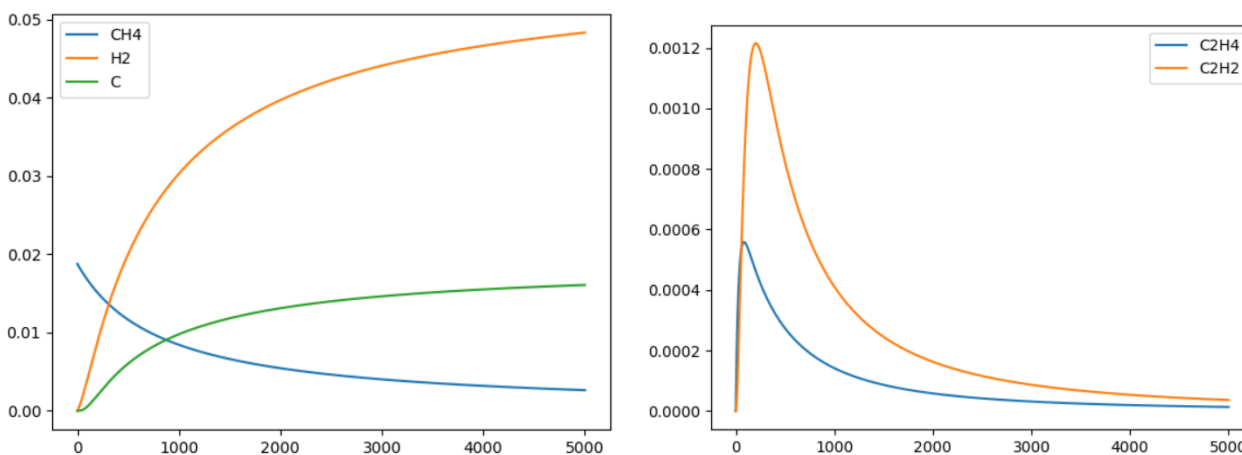
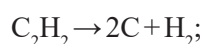
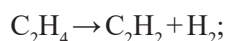


Рис. 1. Графики зависимости мольной концентрации веществ от времени реакции

нимальным экологическим ущербом. В процессе пиролиза метана в присутствии гетерогенных катализаторов образуется сажа и водород.

Моделирование процесса пиролиза необходимо для того, чтобы оптимизировать процесс пиролиза на гетерогенном катализаторе. Работа проводилась с целью повышения эффективности работы отечественных установок, а также с целью помощи при проектировании новых установок пиролиза метана.

Моделирование выполнялось в ПО Python. За основу работы была взята схема разложения метана Касселя [2]:



Для составления зависимости концентрации от времени реакции использовались уравнения скорости реакций (1–3), расчет констант скорости (5) и кинетические уравнения (6–10):

$$W_1 = k_1 \cdot \text{CH}_4^2; \quad (1)$$

$$W_2 = k_2 \cdot \text{C}_2\text{H}_4; \quad (2)$$

$$W_3 = k_3 \cdot \text{C}_2\text{H}_2; \quad (3)$$

где k_1, k_2, k_3 – константы скорости реакции, сек^{-1} ; W_1, W_2, W_3 – скорость реакции, $\text{моль}/(\text{л} \cdot \text{сек})$.

$$k_i = k_{0i} \cdot e^{\frac{E_{ai}}{RT}} \quad (4)$$

где k_i – константа скорости реакции, сек^{-1} ; k_{0i} – предэкспоненциальный множитель; E_{ai} – энергия активации, Дж/моль; R – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль · К); T – температура процесса, 1600 К.

Предэкспоненциальные множители были получены решением обратной кинетической задачи.

Результатом моделирования являются зависимости мольной концентрации веществ от времени нахождения реагентов в аппарате, которые представлены на графиках рисунка 1.

По данным зависимостям можно предположить, что модель составлена верно, так как концентрация водорода и углерода растет.

В будущем планируется доработка данной модели с целью оптимизации данного процесса, а именно: получение зависимостей концентраций и выхода продуктов от температуры процесса, а также от основных размеров реактора. Дополнительно рассматривается возможность моделирования других схем разложения метана, которые включают в себя более сложные химические превращения.

Список литературы

1. *Физико-химические аспекты конструирования возобновляемых источников энергии [Электронный ресурс]: Учебное пособие / А. П. Антропов, М. В. Лебедева, А. В. Рагуткин, и др. – М.: МИРЭФ – Российский технологический университет, 2019.*
2. *Артамонов А. Г., Володин В. М., Авдеев В. Г. Математическое моделирование и оптимизация плазмохимических процессов. – М.: Химия, 1989.*

ВЛИЯНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НА СВОЙСТВА ГИДРОГЕНЕЗАТА В ПРОЦЕССЕ ГИДРООЧИСТКИ СМЕСИ ДИЗЕЛЬНОГО И БИОТОПЛИВА

М. В. Кузьмичёва, М. С. Шмаргунова

Научный руководитель – младший научный сотрудник Р. А. Ваганов

ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет»
лаборатория биотопливных композиций ЛН-6

660041, Красноярск, пр. Свободный, 79, k-m-v4@yandex.ru

Актуальность

Современное состояние энергетической отрасли характеризуется активной нацеленностью на диверсификацию источников энергии, используемой в различных отраслях. Статистика последних двух десятилетий показывает, что существенную и все возрастающую роль в мировой энергетике начинают играть альтернативные источники энергии – биотоплива, основанные на использовании биоэнергии сырья различной природы. Тенденция к снижению углеродного следа заставляет отечественные нефтеперерабатывающие предприятия расширять сырьевую базу для процессов получения моторных топлив.

Цель работы: определить влияние технологических параметров на свойства гидрогенезата в процессе гидроочистки смеси дизельного и биотоплива.

Методология

Моделирование процесса гидроочистки смеси дизельного и биотоплива выполнено на лабораторной опытно-технологической установке проточного типа с неподвижным слоем катализатора (производство Vinci Technologies). Установка представляет собой настольный автоматизированный прибор на основе мини-реактора объемом до 10 мл и совмещенной с ним нагревательной печью, обеспечивающих работу при температурах до 550 °С и давлении до 300 атм (30 МПа). В реакторе загружено 5 мл ката-

лизатора гидроочистки ASCENT DC-2535 TL Criterion.

Сырье процесса гидроочистки – смесь дизельного и биотоплива, полученного на основе сырья из маслосемян рапса ярового, возделываемого в сибирском регионе, в соотношении 1 : 1. Объемная скорость подачи сырья 4 ч⁻¹ (20 мл/ч).

Вследствие наибольшего влияния на термодинамику и кинетику протекания реакций гидрообессеривания, гидродеазотирования, гидродеароматизации, насыщения непредельных углеводородов в качестве параметра регулирования процесса гидроочистки была выбрана температура. Условия проведения экспериментов представлены в таблице 1.

Для оценки эффективности протекания реакций в процессе гидроочистки произведен контроль физико-химических характеристик исходных компонентов сырья, сырьевой смеси и продуктов процесса.

Проведенная серия экспериментов позволяет сделать вывод об изменении физико-химических свойств гидрогенезата в зависимости от температуры процесса гидроочистки. Повышение температуры с 320 до 340 °С приводит сначала к уменьшению, а потом к повышению плотности гидрогенезата, к повышению, а затем снижению температуры застывания и уменьшению количества содержащейся серы.

В продолжение исследования планируется изучить изменение химического состава продуктов в зависимости от температуры и давления процесса.