

конверсия метана (15,1 %) наблюдается на катализаторе К-2 с микро-мезопористой структурой цеолита (рис. 1б), а минимальная (10,4 %) – на катализаторе К-1 с микропористой структурой цеолита (рис. 1а). Различия в каталитической активности и стабильности цеолитов связаны с их кислотными характеристиками, а также с разли-

чиями в морфологии цеолитных кристаллов и с разной пористостью.

Работа выполнена в рамках государственного задания Института химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, финансируемого Министерством науки и высшего образования Российской Федерации.

Список литературы

1. Budaev Zh. B., Korobitsyna L. L., Meshcheryakov E. P., Vosmerikov A. V. // *AIP Conference Proceedings*, 2020. – V. 2310. – P. 020045-1–020045-4.
2. Коробицына Л. Л., Арбузова Н. В., Восмериков А. В. // *ЖФХ*, 2013. – Т. 87. – № 6. – С. 1–4.

РАЗРАБОТКА НЕСТАЦИОНАРНОЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПИРОЛИЗА УГЛЕВОДОРОДНОГО СЫРЬЯ С УЧЕТОМ НАКОПЛЕНИЯ КОКСА

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»

г. Томск, пр. Ленина, д. 43а, 634034, aiurbunaev@gmail.com

Полимеры являются одним из основных компонентов почти любых промышленных изделий, а также товаров народного потребления. Сырьем же производства полимеров являются алкены, которые получают главным образом пиролизом углеводородного сырья. Тем не менее, данный процесс сопряжен с отложением кокса в змеевиках печей. Образование кокса приводит к уменьшению выходов целевых продуктов, и повышается вероятность возникновения аварий.

Целью данной работы является оптимизация процесса путем управления скоростью коксоотложения. Для этого необходима разработка нестационарной модели. Она основана на формализованной схеме превращений, представленной на рисунке 1.

Поскольку процесс протекает при высоких температурах, то преобладают реакции разложения, чем реакции насыщения и дециклизации. То есть, для любого K_j , для которого существует K_{-j} , $K_j \gg K_{-j}$.

Моделью сначала рассчитываются константы скоростей реакций в текущий момент времени, в рассматриваемой точке змеевика пиролиза:

$$K_{j,t,l} = K_{0j} \cdot \frac{P_{0,t,l}}{T_{t,l}^2} \cdot \exp\left(\frac{-E_j}{RT_{t,l}}\right), j \in \{1...172\}$$

Далее рассчитываются скорости реакций в заданной точке координатной плоскости, где осями являются астрономическое время и расстояние от входа в змеевик. Наконец, рассчитываются скорости изменения концентраций компонентов как суммы соответствующих реакций:

$$\frac{dC}{dt} + \frac{dC}{dl} \cdot u = \sum a_{ij} \cdot K_{j,t,l} \cdot \prod C_{i,t,l}^{a_{ij}}$$

Отсюда с помощью метода конечных разностей выводится явное выражение для расчета концентрации компонента в некоторой точке упомянутой координатной плоскости:



Рис. 1. Формализованная схема реакций процесса пиролиза

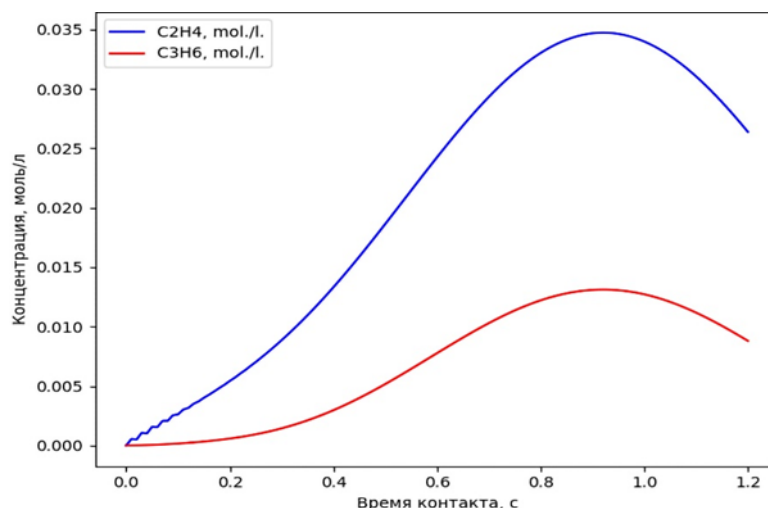


Рис. 2. Динамика концентраций этилена и пропилена

$$C_{ij} = \left(\frac{\Delta l}{u} \right) \cdot \left(\sum W - \frac{1}{\Delta t} \cdot C_{i-1,j+1} + \left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{u}{\Delta l} \right) \cdot C_{i-1,j} \right)$$

Расчет концентрации частиц кокса рассчитывается следующим образом [1]:

$$\frac{dC}{dt} + \frac{dC}{dl} \cdot u = \sum W - R_s$$

Здесь R_s является скоростью осаждения полиароматических веществ к пристеночной области змеевика пиролиза из реакционного потока:

$$R_s = \frac{0,023}{(0,25 \cdot \pi)^{0,8}} \cdot \left(\frac{G^{0,8} \cdot \mu^{0,2} \cdot \omega_{\text{масс.}}}{D^{1,8} \cdot Sc^{2/3} \cdot M_{\text{CM}}} \right)$$

Список литературы

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

Таким образом, с помощью имеющейся части реализуемой модели были рассчитаны изменения концентраций этилена и пропилена при прохождении потока по змеевику печи. Результаты представлены на рисунке 2. В виртуальном продуктовом потоке концентрации составили 0,027 моль/л для этилена и 0,008 моль/л для пропилена. Относительные погрешности по сравнению с регламентированными на одном из предприятий значений составляют 10 % и 20 % соответственно.

Большие значения погрешностей связаны с тем, что не до конца известны геометрические параметры змеевика на производстве, а также отсутствием механизма, учитывающего влияние слоя кокса на теплопередачу от сгорающего топлива к реакционной смеси.