

Молодежная научная школа «Переработка углеводородного сырья: катализаторы, технологии, цифровизация», посвященная 85-летию со дня рождения профессора А. В. Кравцова

РАЗРАБОТКА ПОДХОДА К МОДЕЛИРОВАНИЮ ГИДРОГЕНИЗАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕРАБОТКИ НЕФТЯНОГО СЫРЬЯ

Н. С. Белинская

Томский политехнический университет
634050, Томск, пр. Ленина, 30, belinskaya@tpu.ru

В данный момент существуют различные математические модели, описывающие процессы углубленной и глубокой гидропереработки углеводородного сырья, основой которых являются групповые схемы превращений различной степени детализации (группировка осуществляется по фракциям или по классам углеводородов – учитываются парафины, нафтены, ароматические соединения) [1].

Недостатком таких моделей является невозможность применения их для прогнозирования низкотемпературных свойств получаемых в данных процессах дизельных топлив. Для прогнозирования низкотемпературных свойств дизельных топлив необходимо знать массовое содержание *n*-парафинов с различным числом

атомов углерода в молекуле в их составе, особенно *n*-парафинов с длинной цепью, т. к. они в наибольшей степени определяют способность топлива не застывать при низкой температуре.

В данной работе предложен подход к разработке детальных математических моделей гидрогенизационных процессов, таких как гидродепарафинизация дизельных топлив и гидрокрекинг вакуумного газойля, основанный на учете закономерностей распределения массового содержания *n*-парафинов и их реакционной способности в целевой реакции.

Для численного описания в модели распределения массового содержания *n*-парафинов в сырье и продукте предложена методика, которая

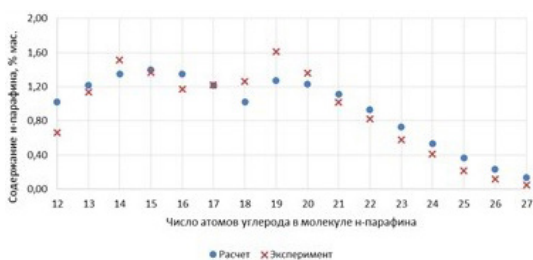


Рис. 1. Сравнение расчетных и экспериментальных значений массового содержания *n*-парафинов по числу атомов углерода в молекуле в сырье процесса депарафинизации

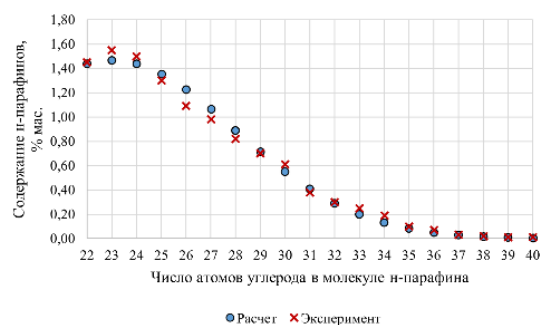


Рис. 2. Сравнение расчетных и экспериментальных значений массового содержания *n*-парафинов по числу атомов углерода в молекуле в вакуумном газойле

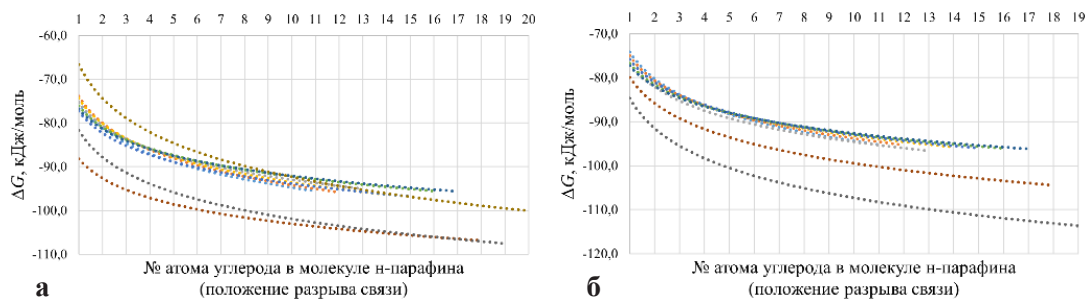


Рис. 3. Изменение энергии Гиббса в ходе реакции гидрокрекинга *n*-парафинов C_{22} – C_{40} при разрыве связи в различном положении

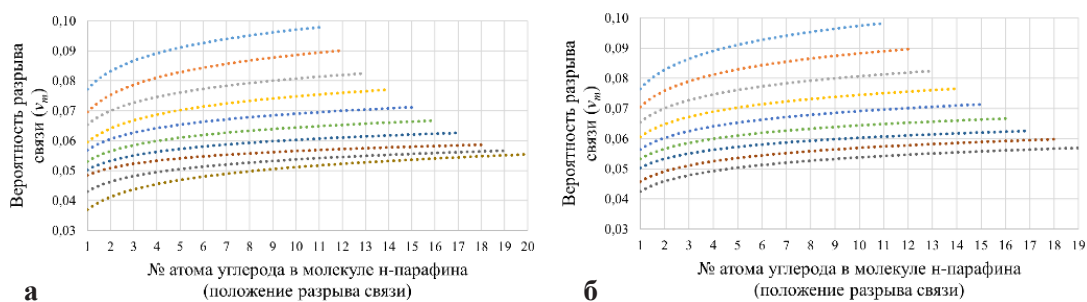


Рис. 4. Вероятность разрыва связи в различном положении в ходе реакции гидрокрекинга *n*-парафинов C_{22} – C_{40}

показала высокую сходимость расчетных и экспериментальных данных (рис. 1, рис. 2).

Также разработана методика, позволяющая учесть термодинамическую вероятность протекания реакций гидрокрекинга *n*-парафинов с различной длиной цепи и в различном положении разрыва C–C связи в молекуле.

На рис. 3, рис. 4: а) для молекул с четным количеством атомов углерода в молекуле; б) для молекул с нечетным количеством атомов углерода в молекуле.

Численно термодинамическая вероятность протекания реакций гидрокрекинга *n*-парафинов с различной длиной цепи и в различном положении разрыва C–C связи в молекуле реа-

лизована в модели в виде матрицы вероятности разрыва связей.

Разработанные на основе предложенного подхода математические модели гидрогенизационных процессов представляют собой системы уравнений материального и теплового баланса, учитывающие реакции, без участия водорода, реакции, в которых водород принимает участие и реакции гидрокрекинга *n*-парафинов и могут применяться для прогнозирования и оптимизации выхода и низкотемпературных свойств дизельного топлива.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-73-00216, <https://rscf.ru/project/22-73-00216/>.

Список литературы

1. Белинская Н. С., Афанасьева Д. А., Быкова В. В., Костень М. С. // *Технологии нефти и газа*, 2021. – № 4. – С. 10–15.