

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ГИДРООЧИСТКИ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА С УЧЕТОМ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ

Е. Р. Буцыкина, К. Н. Туралин
 Научный руководитель – к.т.н., доцент Н. И. Кривцова

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет
 г. Томск, пр. Ленина 30, erk3@tpu.ru*

В процессе гидроочистки азотсодержащие соединения являются наиболее распространенными ядами в силу их сильной адсорбционной способности на каталитических центрах. Из-за своей основной природы они адсорбируются на кислотных участках катализатора, тем самым препятствуя протеканию ключевых реакций процесса гидроочистки – реакциям десульфуризации.

Таким образом, учет превращений азотсодержащих соединений при разработке математической модели процесса гидроочистки по-

зволяет иметь более широкое представление о протекании процесса.

Цель работы разработать математическую модель процесса гидроочистки дизельного топлива с учетом превращения сера- и азотсодержащих соединений.

Для реакций гидрогенолиза серо- и азотсодержащих соединений был проведен расчет термодинамических параметров на программном комплексе GAUSSIAN. Термодинамический анализ показал, что реакционная способность сернистых соединений уменьшается в ряду: сульфид > тиофен > бензотиофен > дибензотио-

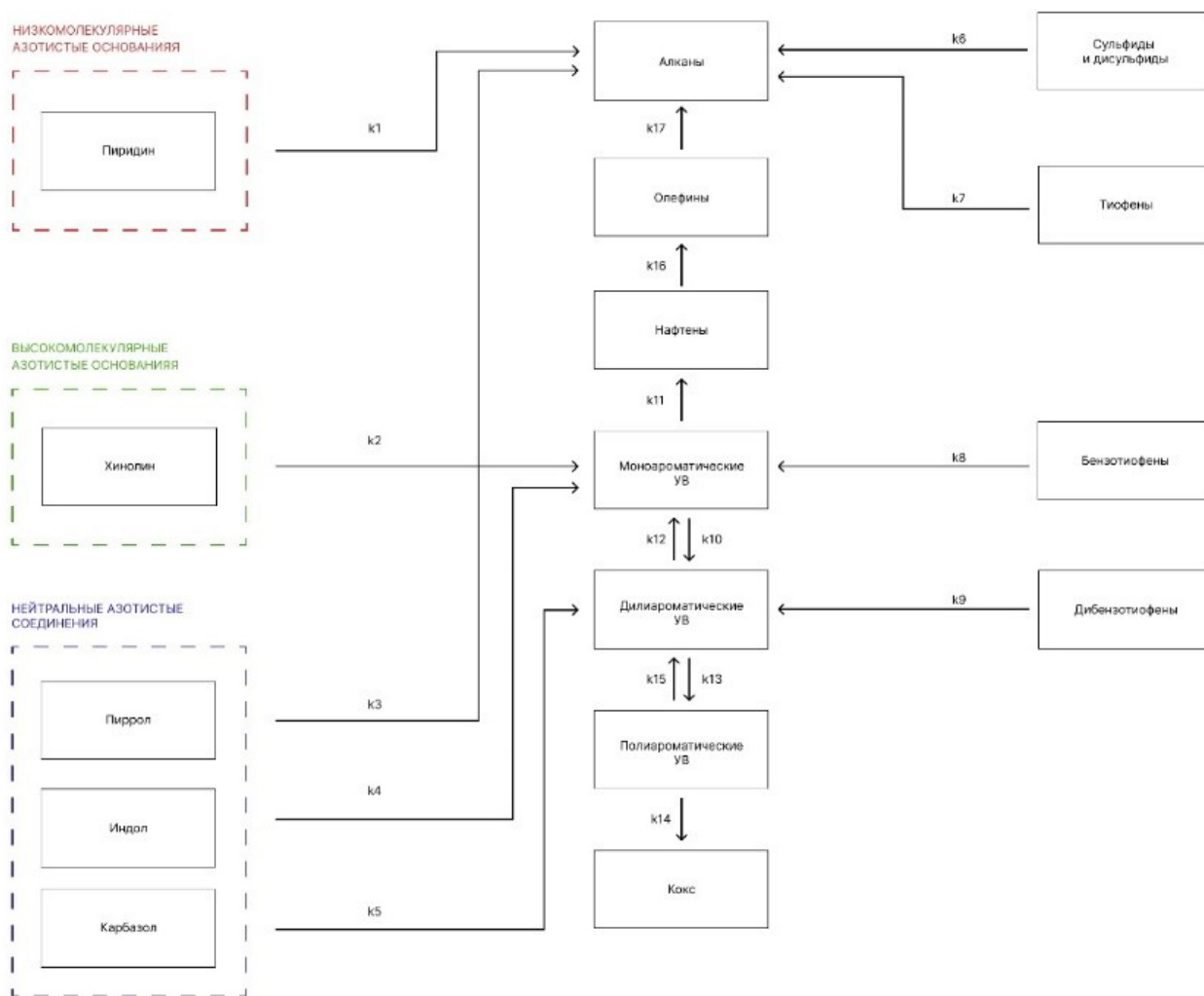


Рис. 1. Формализованная схема превращений веществ в процессе гидроочистки дизельного топлива

фен, что соответствует увеличению их стабильности; реакционная способность азотистых соединений увеличивается в ряду: индол < хинолин < изохинолин < пиридин < пиррол, что соответствует уменьшению их стабильности.

Определение общего азота определяли по ASTM D 5762. Определение основного азота (азотистые основания) методом потенциометрического титрования. Выделение азотсодержащих соединений из образца дизельного топлива проводили по методике описанной в литературе [1].

Определение общего содержания серы осуществляли по ГОСТ Р 51947. Анализ образца на индивидуальные группы сернистых соединений проводили с использованием Хроматографа «Кристалл-200М».

Исходя из полученных экспериментальных данных для дизельной фракции принято следующее распределение серосодержащих сое-

динений: 16 % – сульфиды, дисульфиды; 68 % – бензотиофены и 16 % – дибензотиофены, азотсодержащих соединений: 64 % – пиррол, индол и карбазол; 18 % – пиридин; 18 % – хинолин.

На основе проведенных термодинамических расчетов и литературных данных была принята следующая формализованная схема превращений:

Математическая модель, записанная согласно формализованной схеме процесса, представлена системой дифференциальных уравнений материального баланса:

$$\frac{dC_i}{dt} = \sum_{j=1}^n W_j$$

где W_j – скорость j -ой химической реакции, записанная согласно закону действующих масс, моль/с; n – количество химических реакций; C_i – концентрация i -того компонента, моль; t – время реакции, с.

Список литературы

1. Н. Н. Герасимова, Е. Ю. Коваленко, С. С. Яновская, В. П. Сергун, Т. А. Сагаченко, Р. С. Мин // *Известия Томского политехнического университета*, 2009. – Т. 314. – № 3. – С. 127–131.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТВЕРДОФАЗНОГО ПРОЦЕССА АЛКИЛИРОВАНИЯ ИЗОБУТАНА ОЛЕФИНАМИ

С. Е. Вакалова

Научный руководитель – доцент ОХИ ИШПР ТПУ В. А. Чузлов

*Томский политехнический университет
г. Томск, пр. Ленина, 30, vakalova-s@yandex.ru*

Технология алкилирования изобутана олефинами является ключевой технологией, служащей для производства высокооктанового компонента бензина – алкилата. Широкое распространение получили промышленные способы алкилирования, в которых в качестве катализатора используют серную либо плавиковую кислоты [1]. Помимо высокой токсичности, негативного влияния на окружающую среду и высокой коррозионной активности, применение жидких кислот в процессе алкилирования приводит к получению опасных побочных продуктов, таких как кислоторастворимые масла и тяжелые полимеры. Тенденции совершенствования процесса алкилирования изобутана олефинами направлены на изучение твердофазных кислотных катализаторов процесса [1]. Целью работы является создание математической мо-

дели технологии твердофазного алкилирования изобутана олефинами.

Для создания математической модели твердофазного алкилирования были поставлены следующие задачи:

1. Проведение термодинамического анализа, позволяющего установить возможность и направление протекания реакций;
2. Проведение кинетического анализа, необходимого для получения кинетических уравнений, отражающих взаимосвязь скорости протекания процесса и концентрации реагирующих веществ;
3. Определение механизма диффузии с целью учета коэффициентов диффузии при создании математической модели;
4. Разработка математической модели реакторного блока;