

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;

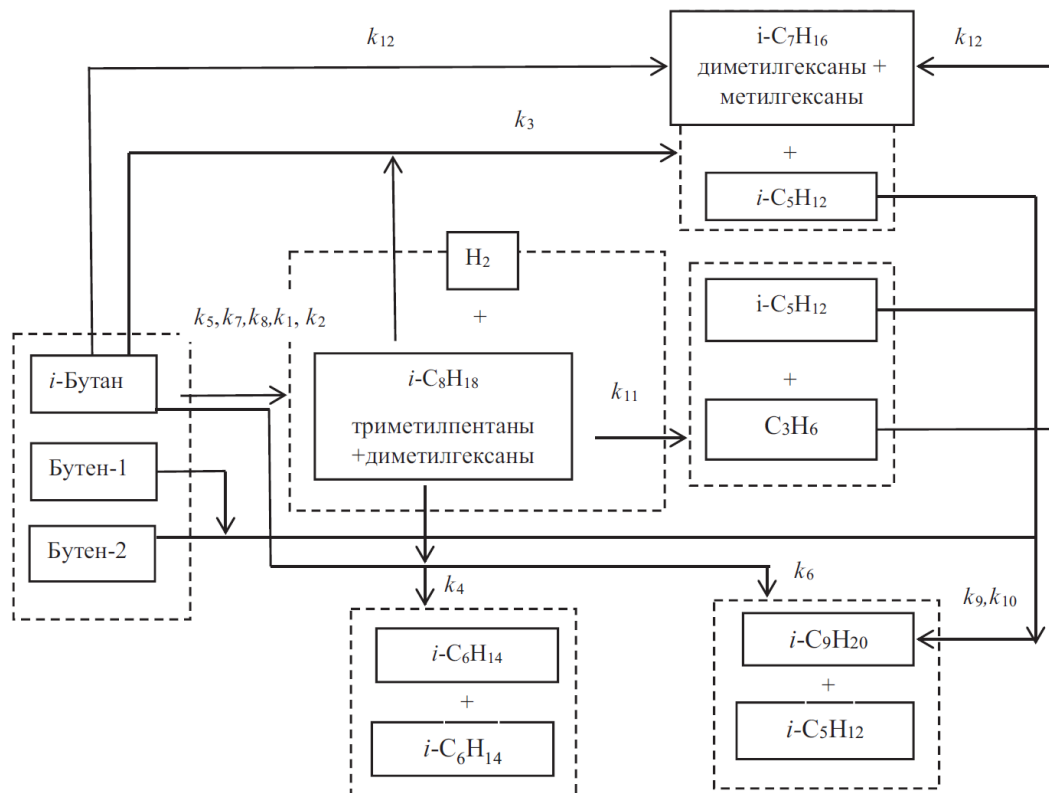


Рис. 1. Схема превращений углеводородов

5. Разработка математической модели блока ректификации;

6. Валидация полученных математических моделей путем сравнения результатов расчетов на данных моделях с результатами пробегла промышленной установки.

В качестве исходных параметров в работе использованы условия реализации процесса, приведенные в литературных данных [3]: тем-

пература протекания процесса 40–120 °С, давление – 2 МПа.

На рисунке 1 представлена формализованная схема превращений [3].

Разработанная модель может быть использована как инструмент для управления промышленным процессом алкилирования и при проектировании новых установок твердофазного алкилирования. Так же модель может служить основой для создания тренажеров и цифровых двойников процесса алкилирования.

Список литературы

1. Алкилирование. Исследования и промышленное оформление процесса / Под ред. Л. Ф. Олбрайта и А. П. Голдсби. – М.: Химия, 1982. – 366 с.
2. Гарифзянов Г. Ф., Башкирцева Н. Ю., Ибрагимова Д. А., Петров С. М., Ибрагимов Р. К., Ганачевская М. Б. Тенденции в разработке катализаторов алкилирования изобутанаолефинами // Вестник Казанского технологического университета, 2016.
3. Разработка кинетической модели процесса алкилирования изобутана олефинами на цеолитсодержащих катализаторах / Н. А. Руднев, Е. Ф. Трапезникова, С. Р. Хафизова [и др.] // 2018. – № 4 (608). – С. 16–19. – EDN XWPTWX.