Name	ј ппф-рец-3	наК14/2изм	кубК-14/2изм	фрПРОПИЛЕ		ппф-рец-3	наК14/2изм	кубК-14/2изм	фрПРОПИЛЕН.
Vapour	0,9998	0,0000	0,0000	0,0000	Methane	0,000000	0,000400	0,000000	0,000555
Temperature [C]	30,15	42,00	29,71	21,17	Ethane	0,000000	0,000500	0,000000	0,000693
Pressure [kPa]	1100	1667	1090	1050	Propane	0,890546	0,267534	0,894441	0,008000
Molar Flow [kgmole/h]	456,8	140,0	495,8	101,0	i-Butane	0,002392	0,014707	0,006357	0,000000
Mass Flow [kg/h]	2,006e+004	6000	2,181e+004	4250	1-Butene	0,000168	0,001301	0,000522	0,000000
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	39,47	11,59	42,90	8,163	Propene	0,106894	0,715558	0,098680	0,990752
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-9,028e+004	-2,896e+004	-1,072e+005	3363					
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	177,0	134,0	164,8	94,62					
Heat Flow [kJ/h]	-4,124e+007	-4,054e+006	-5,317e+007	3,397e+005					
a				б					

Рис. 2. Значения технологических режимов (а) и компонентный состав потоков (b) колонны K-14/2изм-2 (pacneyamka в Honeywell UniSim Design)

порядка 0,03 % мас [4]. Разработанные модели технологических схем концентрирования пропилена из ППФ могут использоваться для оценки режимных и конструкционных параметров массообменных колонн и анализа достигаемых показателей процесса.

Список литературы

- Технические условия ТУ 0272-024-00151638-99 «Фракция пропан-пропиленовая марок А, Б, В. Технические условия» (с изменениями № 1-4)
- 2. Honeywell Unisim Design. User Guide, 2013.
- Specifications TU 0272-023-00151638-99 "Propane fraction. Specifications" (as amended № 1-4).
- Permanent Process Regulations of JSC "NOC" "Propylene Concentration Unit" № TR-39, 2022.

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОЦЕССА КРЕКИНГА НА КОНВЕРСИЮ РЕАКЦИИ ПОЛУЧЕНИЯ БУТИЛЕНА

С. К. Форутан

Научный руководитель – д.т.н., профессор Е. Н. Ивашкина

Отделение химической инженерии Инженерной школы природных ресурсов национального исследовательского Томского политехнического университета 634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, Foroutan.saba@hotmail.com

Годовой объем производства бутенов составляет около 132 млн т, и прогнозируется рост на 4 % в год. Изобутен в основном используется в качестве сырья для производства алкилатов, а также для производства высокооктановых добавок к бензиновым смесям, включая МТБЭ и ЭТБЭ. Около 30 млн т в год приходится на изобутен, произведенный на НПЗ посредством FCC [1, 2]. Поэтому оптимизация процесса каталитического крекинга для получения легких олефинов является важной задачей.

Цель работы – определить условия достижения максимально возможно выхода бутиленов в реакции крекинга октена. В качестве инструмента численного исследования выбран программный продукт Response Surface Central Composite Design, использующий расчетный модуль статистического моделирования DX-13. В данной работе была выбрана реакция вторичного крекинга $C_8H_{16} \rightarrow C_4H_8$, как основная реакция получения бутилена в FCC. Были проанализированы реакции с участием всех изомеров октена (1-октен, 1,2-диметилциклогексан, 1,3-диметилциклогексан, 1,4-диметилциклогексан, циклоктан, этилциклооктан и пропилциклопентан) и бутена (1-бутен, 2-бутен, 2-метилпропен). Исследования выполнены для рабочего диапазона изменения основных термобарических параметров: P – 0,78–1,6 бар (А), исходная концентрация реагента пропилциклопентана – 1,5–6,0 моль (В), исходная концентрация продукта 1-бутена – 1,5-6,0 моль (С) для T = 788–903 К.

ΔG реакции при 788К, 848К и 903К получено методом функциональных групп в предыдущей работе [3] и равно –2,06, –11,86, –20,64 кДж/моль соответственно. На данном этапе исследований были построены модели для расчета равновесной концентрации пропилциклопентана (реагент) и 1-бутена (продукт) с использованием расчетного инструмента DX-13. Оценка надежности моделей выполнена с использованием метода ANOVA. Полученные по моделям значения равновесных концентраций сравнивались с литературными данными и результатами расчетов классическими методами на основе уравнений (1–3):

$$lnK = \frac{-\Delta G}{RT} \tag{1}$$

$$\prod_{i} (\mathcal{Y}_{i})^{\theta_{i}} = \left(\frac{P}{P^{0}}\right)^{-\theta} K \tag{2}$$

$$y_i = \frac{n_i}{n}.$$
 (3)

В табл. 1 представлены полученные модели равновесных концентраций пропилциклопентана и 1-бутена при различных температурах.

Анализ моделей методом ANOVA позволяет проверить их достоверность с F-value и P-value < 0,05 на основе R² и adj. R². В таблице 3 показаны результаты анализа ANOVA с наивысшей точностью. Анализа показал, что полученные модели достоверно описывают значения равновесных концентраций в диапазоне изменения T = 788-903 K ($R^2 = 0.9992-1.000$).

Сравнение результатов, полученных на основе моделей и рассчитанных классическими методами показало, что построенные модели с высокой точностью описывают изменение равновесных концентраций в реакции вторичного крекинга $C_8H_{16} \rightarrow C_4H_8$. Погрешность расчетов не превышает 0,05 %. В таблице 2 приведены результаты численных исследований по влиянию исследуемых параметров (A, B, C) на равновесную концентрацию.

Можно сделать вывод, что на равновесную концентрацию 1-бутена значительное влияние оказывает давление процесса, в то время как температура оказывает лишь косвенное влияние. Только при высокой температуре порядка 903 К видно заметное влияние этого параметра на молярную концентрацию реагента.

Таблица 1. Модели равновесной концентрации исходных веществ и продуктов

Т, К	Равновесная концентрация про- пилциклопентана (%)	Равновесная концентрация 1-бутена (%)
788	9,3361 + 29,6017 A - 6,1291 A ²	90,6538 - 29,6017 A + 6,1291 A ²
848	1,0354 + 14,9297 A - 2,1712 A ²	$98,9545 - 14,9297 \text{ A} + 2,1712 \text{ A}^2$
903	$0,0353 + 6,2006 \text{ A} - 0,5523 \text{ A}^2 - 0,0005 \text{ B}^2$	$99,9569 - 6,2058 \text{ A} + 0,5545 \text{ A}^2 + 0,0006 \text{ B}^2$

Таблица 2. Влияние параметров процесса (температуры, давления и состава смеси) на равновесную концентрацию 1-бутена (Р_{ед})

788 K	P _{eq.b}	AB	AC	end of the second secon
903 K	P _{eq.b}	AB	end of the second secon	end of the second secon

Список литературы

- Gholami Z., Gholami F., Tisler Z., Hubasek J., Tomas M., Basiak M., Vakili M. (2022) Production of light olefins via Fischer-Tropsch process using iron-based catalysts: A review, Catalysts, 12, P. 174.
- Blay V., Louis B., Miravalles R., Yokoi T., Peccatiello K.A., Clough M., Yilmaz B. (2017) Engineering zeolites for catalytic cracking to light olefins, ACS Catalysis, 7, P. 6542–6566.

3. Ивашкина Е. Н., Форутан С. К. (2022) Термодинамический анализ реакций получения низших олефинов в технологии FCC на основе учета финкциональных групп в молекулах углеводородов и квантовой химии, Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов, Т. 333, 11, С. 101– 114.

ПЕРЕРАБОТКА ТЯЖЕЛОЙ ДИЗЕЛЬНОЙ ФРАКЦИИ НА ЦЕОЛИТНОМ КАТАЛИЗАТОРЕ

Е.С.Чебанова, И.А.Богданов, А.А.Алтынов Научный руководитель – ассистент ОХИ ТПУ И.А.Богданов Национальный исследовательский Томский политехнический университет

пр. Ленина 43a, esc14@tpu.ru

Соединениями, оказывающими наиболее значительное влияние на застывание дизельного топлива, являются н-парафины. Благодаря изменению строения парафинов, а именно получению изо-парафинов, а также их трансформации в другие классы органических соединений возможно улучшение низкотемпературных характеристик дизельного топлива. Такого рода процессы возможно реализовать с помощью цеолитных катализаторов. Важно, что технология получения низкозастывающего дизельного топлива на цеолитном катализаторе не требует затрат на дорогостоящие металлы и водородсодержащий газ [1].

Однако на цеолитных катализаторах активно протекают реакции крекинга, что увеличивает выход газообразных и легких углеводородных нецелевых продуктов. Одним из способов снижения выхода такого рода нецелевых продуктов является корректировка состава исходного сырья, используемого для переработки.

Данная работа посвящена исследованию и сравнению физико-химических свойств тяжелой дизельной фракции (начало кипения 240 °C) и продуктов её переработки на цеолитном катализаторе. Для исходного сырья и полученных продуктов согласно требованиям [2], были определены такие характеристики как плотность, вязкость, содержание серы, температура помутнения (Тп), температура застывания (Тз), предельная температура фильтруемости (ПТФ). Результаты представлены в таблице.

Результаты, приведенные в таблице, позволяют судить о том, что переработка тяжелой дизельной фракции на цеолитном катализаторе позволяет значительно улучшить такие характеристики, как ПТФ, Тз, Тп. Также полученный продукт содержит значительно меньше серы. Плотность дизельного топлива не выходит за рамки 833,5 кг/м³, следовательно, удовлетворяет установленным требованиям для арктического дизельного топлива, тоже самое можно сказать про кинематическую вязкость [2].

В работе [1], в качестве сырья использовалась широкая прямогонная дизельная фракция (пределы выкипания 134–342 °C). Температура отгона 10 % об. продукта, полученного при температуре процесса 375 °C составила 123 °C, 20 % об. составила 162 °C. В данной работе при использовании тяжелой дизельной фракции температура отгона 10 % об. продукта, полученного при температуре процесса 375 °C составила 135 °C, 20 % об. составила 159 °C. Кроме того выход жидкого продукта при использовании утя-

Tustingu T. Spusienne supastepherink nesoditon oppastin nipodyktob ee nepepastini				
Характеристика	Фракция 240 °С-к.к.	Продукт		
Плотность при 15 °С, г/см ³	0,830	0,824		
Плотность при 20 °С, г/см ³	0,827	0,821		
Кинематическая вязкость при 15 °C, мм ² /с	8,291	3,038		
Кинематическая вязкость при 20 °C, мм ² /с	7,144	2,692		
Содержание серы, мг/кг	924	340		
Тп, °С	-9	не мутнеет		
ПТФ, °С	-12	-61		
T3, °C	-19	не застывает при -80		

Таблица 1. Сравнение характеристик исходной фракции и продуктов ее переработки