

тверждается снижением интенсивности деформационных колебаний C–C (730 см^{-1} , $780\text{--}900\text{ см}^{-1}$), валентных C–C в ароматических структурах (1620 см^{-1}) и симметричных и ассиметричных валентных колебаний C–H ($2770\text{--}3010\text{ см}^{-1}$) [3]. Полоса в области 1030 см^{-1} относится к валентным колебаниям S=O и на ИК-спектрах СМАК и СМАС ее интенсивность снижается, подтверждая окисление асфальтенов в ходе плазменной обработки с выделением соответствующих газообразных продуктов SO_2 , H_2S [4].

Методом лазерной дифракции было изучено распределение частиц по размерам исследуемых образцов. Анализ проводили в водной суспензии

(0,12 % олеат натрия). Средний диаметр частиц в образцах составил АК – $104,4\text{ мкм}$, AS – $18,8\text{ мкм}$, СМАК – $88,2\text{ мкм}$, СМАС – $2,0\text{ мкм}$. Было показано, что при обработке более крупных частиц асфальтенов, получают более крупные частицы углеродного материала.

По итогам исследования была подтверждена возможность получения углеродных материалов из нефтяных отходов и установлено влияние состава исходных асфальтенов на получаемый продукт.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 22-13-20016) в СурГУ и ТПУ.

Список литературы

1. Petrova Yu. Yu., Frantsina E. V., Grin'ko A. A., Pak A. Ya., Arkachenkova V. V., and Povalyaev P. V. // *Materials Today Communication*, 2022. – V. 33. – P. 25.
2. Пак А. Я., Поваляев П. В., Францина Е. В., Гринько А. А., Петрова Ю. Ю., Аркаченкова В. В. // *Известия ТПУ. Инжиниринг георесурсов*, 2022. – Т. 333. – № 12. – С. 19.
3. Socrates G. *Infrared and Raman characteristic group frequencies: tables and charts*. Chichester: Wiley, 2001. – 347 p.
4. Asemani M., Rabbani A. // *Geosciences J.*, 2015. – P. 1–12.

РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА ГИДРООЧИСТКИ СЫРЬЯ КАТАЛИТИЧЕСКОГО КРЕКИНГА

С. Б. Аркенова, Е. Ф. Гриценко

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

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, arkenova19@gmail.com

Гидроочистка является одним из фундаментальных процессов в нефтеперерабатывающей промышленности с технико-экономической и экологической точек зрения и требует постоянного усовершенствования (разработка цифровых двойников, поиск новых, эффективных катализаторов) [1, 2]. Данный процесс позволяет снизить количество выбрасываемых в атмосферу оксидов серы, азота и ароматических соединений при сжигании топлива, что актуально в свете ужесточения экологического законодательства.

Одним из эффективных способов прогнозирования поведения работы технологического процесса является метод математического моделирования. Модели реакторов для описания процессов гидроочистки часто ограничиваются изучением производительности в лабораторном

масштабе. Большинство этих исследований учитывают условия, типичные для промышленных процессов, чтобы сообщить о тенденциях и поведении модельных решений. Однако воспроизводимость промышленных данных по-прежнему является недостатком существующих моделей, особенно прогнозирующих фазовые изменения.

Целью данной работы является разработка трехфазной кинетической модели процесса гидроочистки сырья каталитического крекинга.

Трехфазный каталитический реактор представляет собой цилиндр, в котором присутствует три фазы: газ, жидкость и твердое тело (катализатор представляет собой твердую фазу). Газ и жидкость движутся параллельно вниз через неподвижный слой катализатора.

Материальный баланс модели описывается системой следующих уравнений [3]:

$$\frac{\varepsilon_G}{RT_G} \frac{\partial p_i^G}{\partial t} = -\frac{u_G}{RT_G} \frac{\partial p_i^G}{\partial z} - k_i^L a_L \left(\frac{p_i^G}{H_i} - C_i^L \right) \quad (1)$$

$$\varepsilon_L \frac{\partial C_i^L}{\partial t} = -u_L \frac{\partial C_i^L}{\partial z} - k_i^S a_S (C_i^L - C_i^S) \quad (2)$$

$$\varepsilon_S \frac{\partial C_i^S}{\partial t} = -k_i^S a_S (C_i^L - C_i^S) \pm v_i r_i \quad (3)$$

где ε_j – объемная доля j-фазы; R – универсальная газовая постоянная; T – температура, К; t – время, с; z – координата вдоль реактора, см; u_j – скорость j-фазы, см/с; p_i^G – парциальное давление i-компонента в газовой фазе, МПа; C_i^j – концентрация i-компонента в j-фазе, моль/см³; H_i – постоянная Генри; r_i – скорость химической реакции. Произведение $k_i^j a_j$ описывает массоперенос между фазами.

Энергетический баланс модели описывается с помощью системы из следующих уравнений [3]:

$$\varepsilon_G \rho_G c_{pG} \frac{\partial T_G}{\partial t} = -u_G \rho_G c_{pG} \frac{\partial T_G}{\partial z} - h_{GL} a_L (T_G - T_L) \quad (4)$$

$$\varepsilon_L \rho_L c_{pL} \frac{\partial T_L}{\partial t} = -u_L \rho_L c_{pL} \frac{\partial T_L}{\partial z} - h_{LS} a_S (T_L - T_S) \quad (5)$$

$$\varepsilon_S \rho_S c_{pS} \frac{\partial T_S}{\partial t} = -u_S a_S (T_L - T_S) + \sum_i v_i r_i (-\Delta H_R) \quad (6)$$

Список литературы

1. Казаков М. О., Надеина К. А., Климов О. В., [и др.] // *Катализ в промышленности*, 2016. – Т. 16. – № 6. – С. 85–93.
2. Воробьев А. М., Белинская Н. С., Афанасьева Д. А. [и др.] // *Катализ в промышленности*, 2022. – Т. 22. – № 5. – С. 40–52.
3. Mederos F. S., Ancheyta J. // *Applied Catalysis A: General*, 2007. – V. 332. – P. 8–21.

АППАРАТУРНОЕ ОФОРМЛЕНИЕ УСТАНОВКИ СЕРНОКИСЛОТНОГО АЛКИЛИРОВАНИЯ ИЗБУТАНА ОЛЕФИНАМИ

Д. Е. Балабашкина

Научный руководитель – к.х.н., доцент О. В. Хабибрахманова

Самарский государственный технический университет в г. Новокуйбышевске
446200, Самарская область, г. Новокуйбышевск, ул. Миронова 5, chemicaluniversity@mail.ru

Сырьевыми потоками промышленного производства мото- и авиа-алкилатов являются изобутановая и бутан-бутиленовая фракции, содержащие в своём составе инертный для реакции сернокислотного алкилирования изобутана олефинами компонент – н-бутан [1–2]. В соот-

где ρ_j – плотность j-фазы, г/см³; c_{pj} – удельная теплоемкость j-фазы, Дж/(г·К); ΔH_R – теплота реакции, Дж/моль. Произведение $h_j a_j$ описывает теплоперенос между фазами.

В модели тепло- и массообмен происходят между газовой и жидкой фазами, и между жидкой и твердой. Тепло- и массообмена между жидкой и газовой фазой нет.

В процессе эксплуатации катализатор теряет свою активность в следствие побочных процессов коксообразования. Образующийся кокс оседает на поверхности катализатора и блокирует его активные центры. Накопление кокса моделируется следующим образом:

$$C_{\text{кокс } i,j} = C_{\text{кокс } i,j-1} + K_{\text{коксообразования}} \cdot C_{\text{смоли } i,j}$$

где i – координата длины реактора, j – координата по времени.

С повышением концентрации кокса значение активности катализатора уменьшается в соответствующей точке реактора:

$$A_i = A e^{-a C_{\text{кокс } i,j}}$$

Таким образом, разработанная модель позволит спрогнозировать изменение концентраций веществ в продуктовой смеси реактора гидроочистки с учетом накопления кокса и дезактивации катализатора.

ветствии с Техническими условиями ТУ 0272-024-00151638-99 [3] содержание н-бутана в изобутановой фракции в зависимости от марки фракции составляет 0,7–20 % мас. Его присутствие уменьшает полезный реакционный объём реактора алкилирования, а при разделении ком-