

Программная реализация решения обратной кинетической задачи для процесса гидроочистки дизельного топлива

А.А. Татаурщиков, Н.И. Кривцова
Научный руководитель – д.т.н., профессор Э.Д. Иванчина

*Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, tataurshikov@yandex.ru*

В связи с возрастающей ролью процессов гидроочистки в нефтеперерабатывающей промышленности назревает необходимость разработки программных комплексов, реализующих математическую модель данного процесса.

Главной целью данного исследования является решение обратной кинетической задачи и расчёта энергии активации для процесса гидроочистки дизельного топлива с акцентом на динамике серосодержащих соединений: сульфидов, бензотиофенов и дибензотиофенов. Предварительный расчёт термодинамических параметров реакций, протекающих в данном процессе, позволил составить сокращённую кинетическую модель (рис. 1). Гомологи сернистых соединений объединены в псевдокомпоненты по значению изобарно-изотермического потенциала гидрирования.

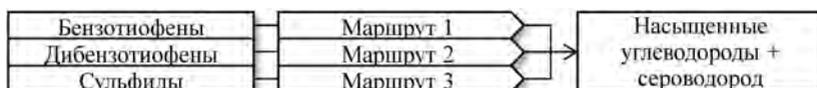


Рис. 1. Кинетическая схема гидрообессеривания

В рамках данного исследования на кафедре Химической Технологии Топлива и Химической Кибернетики разработана программа для решения обратной кинетической задачи. Данная программа, созданная с использованием сред программирования FreePascal и FreeBasic, позволяет рассчитать кинетические параметры на основе начальных и конечных концентраций компонентов, полученных в ходе эксперимента. Для решения системы уравнений математической модели используется метод сканирования [1]. В отличие от разработок в рамках предыдущих работ [2, 3] программа обеспечивает следующий функционал:

- 1) Задание начального приближения для искомых констант;
- 2) Задание точности определения констант, количества точек сканирования, а также времени контакта;
- 3) Формирование отчетов, включая эффективные константы скоро-

стей и профиль концентраций в реакторе, в виде файлов форматов «.txt» и «.csv» для дальнейшей обработки полученных данных в среде Microsoft Excel и подобных.

Разработанная программа использована при обработке экспериментальных данных, полученных на лабораторной установке в следующих условиях: давление водорода – 4 МПа; объёмное соотношение водород:сырьё – 400 : 1; объёмный расход сырья – 1,5 мл/сек; время пребывания сырья – 1/3 часа. Исходные данные представлены в таблице 1.

В таблице 2 представлены расчётные константы скоростей для основных компонентов.

Таблица 1. Концентрации компонентов (моль/л) в исходном сырье и продуктах при различных температурах

Компонент	Сырьё	Температура, °С		
		340	360	380
Сульфиды	0,006813	0,0005456	0,0005475	0,0004603
Бензотиофен	0,011688	0,0006878	0,0007375	0,0005850
Дибензотиофен	0,001125	0,0000938	0,0001113	0,0000866

Таблица 2. Константы скоростей превращения (ч^{-1}) и энергия активации

Компонент	Температура, °С			E_a , Дж/моль
	340	360	380	
Сульфиды	1,907	1,971	2,036	5429
Бензотиофен	2,191	2,153	2,114	4631
Дибензотиофен	1,877	1,907	1,937	2635

При выполнении расчётов относительная погрешность решения обратной кинетической задачи не превысила 0,5%. Наибольшее значение энергии активации наблюдается в процессе превращения сульфидов, что подтверждается данными литературных источников [4], т.к. низкомолекулярные сульфиды подвергаются гидрогенолизу в первую очередь.

Список литературы

1. Бояринов А.И. Методы оптимизации в химической технологии: учебное пособие.– М.: Химия, 1975.– 575 с.
2. Кривцова Н.И., Иванчина Э.Д., Татаурщикова А.А., Занин И.К. // Известия

- высш. уч. заведений: химия и хим. техн-я, 2014.– Т.57.– №11.– С.81–83.
3. Кривцова Н.И., Иванчина Э.Д., Ландль Ю.И., Татаурщиков А.А. // Известия ТПУ, 2013.– Т.322.– №3.– С.83–86.
4. Michael T. Klein et.al. Molecular modeling in heavy hydrocarbon conversions. Boca Raton, Florida: CRC Press, 2005.– P.264.

Анализ вариантов реконструкции УКПГ путем моделирования в среде Petro-SIM

Н.Л. Тулина

Научные руководители – к.т.н. В.А. Колмогорова; к.х.н. Н.В. Ушева

Томский политехнический университет

634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, Natasha1710@mail.ru

Потребность в реконструкции действующих установок промышленной подготовки газа и газового конденсата часто возникает в связи с изменением требований к качеству и условиям сдачи товарной продукции, а также из-за устаревания технологии и износа технологического оборудования. Для разработки вариантов реконструкции в настоящее

Таблица 1. Сравнительная таблица вариантов реконструкции УКПГ

Вариант	№1	№2	№3	№4
Исключенное оборудование	Т-02	Т-02	Нет	Нет
Дополнительное оборудование	Т-02/1, Т-5	Т-02/1, Т-5, Т-6	Т-02/1, Т-5; Кл-2А	Т-02/1, Т-5, Т-6; Кл-2А
Температура СОГ, °С	12,6	13,1	10,0	4,2
Давление СОГ, МПа (изб.)	7,5			
Точка росы СОГ по углеводородам, не более, °С	минус 12	минус 12	минус 10	минус 12
Точка росы СОГ по воде, °С	минус 42	минус 42	минус 38	минус 41
Наличие участков трубопровода с температурой ниже минус 60 °С	Минус 75 °С между Кл-1 и Т-02/1	Нет	Нет	Нет