



федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования Национальный исследовательский Томский политехнический университет

КИРГИНА МАРИЯ ВЛАДИМИРОВНА

**СИСТЕМА МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ
ПРОИЗВОДСТВА БЕНЗИНОВ НА ОСНОВЕ
УЧЕТА РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ
УГЛЕВОДОРОДОВ СЫРЬЕВЫХ ПОТОКОВ И
АКТИВНОСТИ КАТАЛИЗАТОРА**

Томск-2014

● Актуальность работы

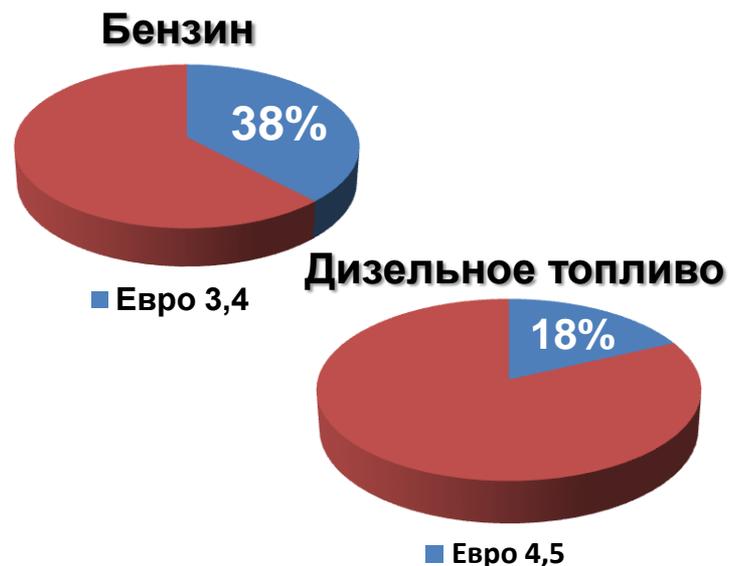
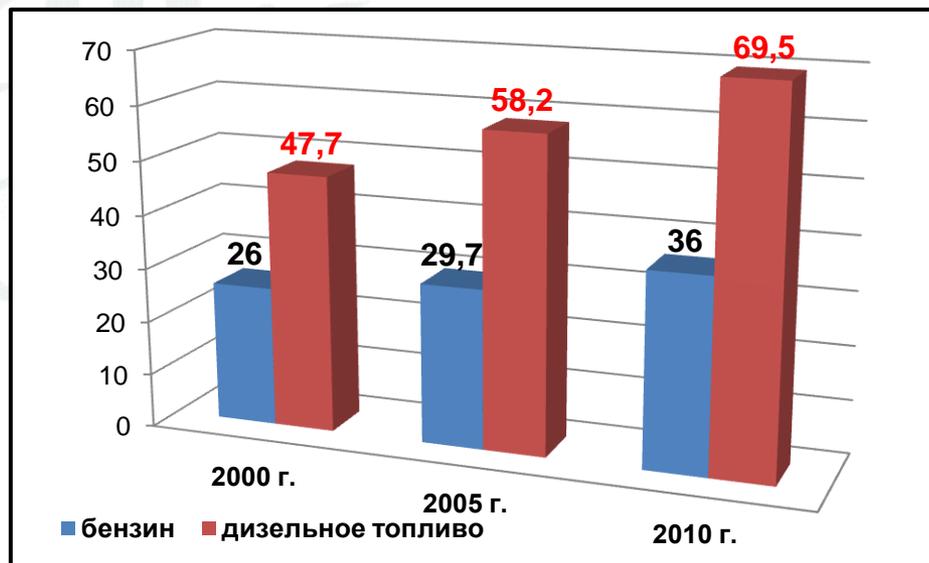


Рис. 1 Объем производимых моторных топлив, млн. тонн

- Объемы производства моторных топлив растут с каждым годом.
- Качество выпускаемых в России автомобильных бензинов существенным образом отстает от мирового.
- Основная задача, стоящая перед любым нефтеперерабатывающим предприятием – **повышение ресурсоэффективности производства бензинов.**

● Актуальность работы

- Процесс промышленного производства высокооктановых бензинов является комплексной, многостадийной технологией сложной для оптимизации.
- Решение подобных многокритериальных и многофакторных задач оптимизации наиболее эффективно может быть выполнено с использованием метода математического моделирования.

Ранее:

- разработана методика, позволяющая рассчитывать октановые числа бензинов с учетом межмолекулярных взаимодействий углеводородов бензиновой смеси;
- созданы математические модели для мониторинга и оптимизации процессов риформинга бензинов и изомеризации пентан-гексановой фракции.

● Актуальность работы

- Дальнейшие исследования показали, что для ресурсоэффективного ведения процесса этапы производства бензинов необходимо рассматривать совместно с учетом их сопряженности.
- Для оптимизации процесса приготовления бензинов **необходимо учитывать влияние углеводородного состава перерабатываемого сырья и активности катализаторов**, применяемых на стадиях получения бензиновых компонентов, на октановое число смесевго бензина.
- Оптимизировать и прогнозировать режимы работы аппаратов переработки сложных по составу углеводородных смесей возможно только на основе **комплексной математической модели**.
- Детонационная стойкость – основное эксплуатационное свойство бензина. Существующие математические методы расчета детонационной стойкости основаны на покомпонентном и групповом углеводородном составе топливной смеси. На сегодняшний момент детонационная стойкость многих индивидуальных углеводородов остается неизвестной, что затрудняет расчет октановых чисел смесей. Выполненные исследования показали, что **оценить детонационную стойкость молекулы возможно путем расчета энергии ее диссоциации**.

● Цели и задачи

Цель работы – повышение эффективности процессов производства бензинов разработкой и применением комплексной моделирующей системы на основе учета реакционной способности углеводородов сырьевых потоков и активности применяемых катализаторов.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие **задачи**:

1. Исследовать влияние реакционной способности углеводородов сырья процессов риформинга и изомеризации на детонационные свойства бензинов.
2. Исследовать влияние активности катализаторов, применяемых на стадиях получения бензиновых компонентов, на детонационные свойства бензинов.
3. Разработать математическую модель расчета октановых чисел индивидуальных углеводородов на основе расчета энергии диссоциации молекул.
4. Разработать комплексную моделирующую систему для оптимизации процессов производства бензинов на основе учета реакционной способности углеводородов в процессах риформинга и изомеризации, а также активности применяемых катализаторов.
5. Рассчитать оптимальные соотношения смешиваемых компонентов для приготовления бензинов с учетом реакционной способности углеводородов сырьевых потоков и активности применяемых катализаторов в процессах риформинга и изомеризации.

● На защиту выносятся

- Закономерности влияния реакционной способности углеводородов сырья процессов риформинга и изомеризации на детонационные свойства бензинов.
- Закономерности влияние активности катализаторов процессов производства компонентов смесевых бензинов на их детонационные свойства.
- Методика определения октановых чисел индивидуальных углеводородов на основе расчета энергии диссоциации молекул.
- Структура и основные блоки моделирующей системы для оптимизации процессов производства бензинов на основе учета реакционной способности углеводородов и активности применяемых катализаторов.
- Соотношения смешиваемых компонентов для приготовления бензинов, определяемые углеводородным составом перерабатываемого сырья в процессах риформинга и изомеризации, а также активностью применяемых катализаторов.

● Процесс промышленного производства бензинов

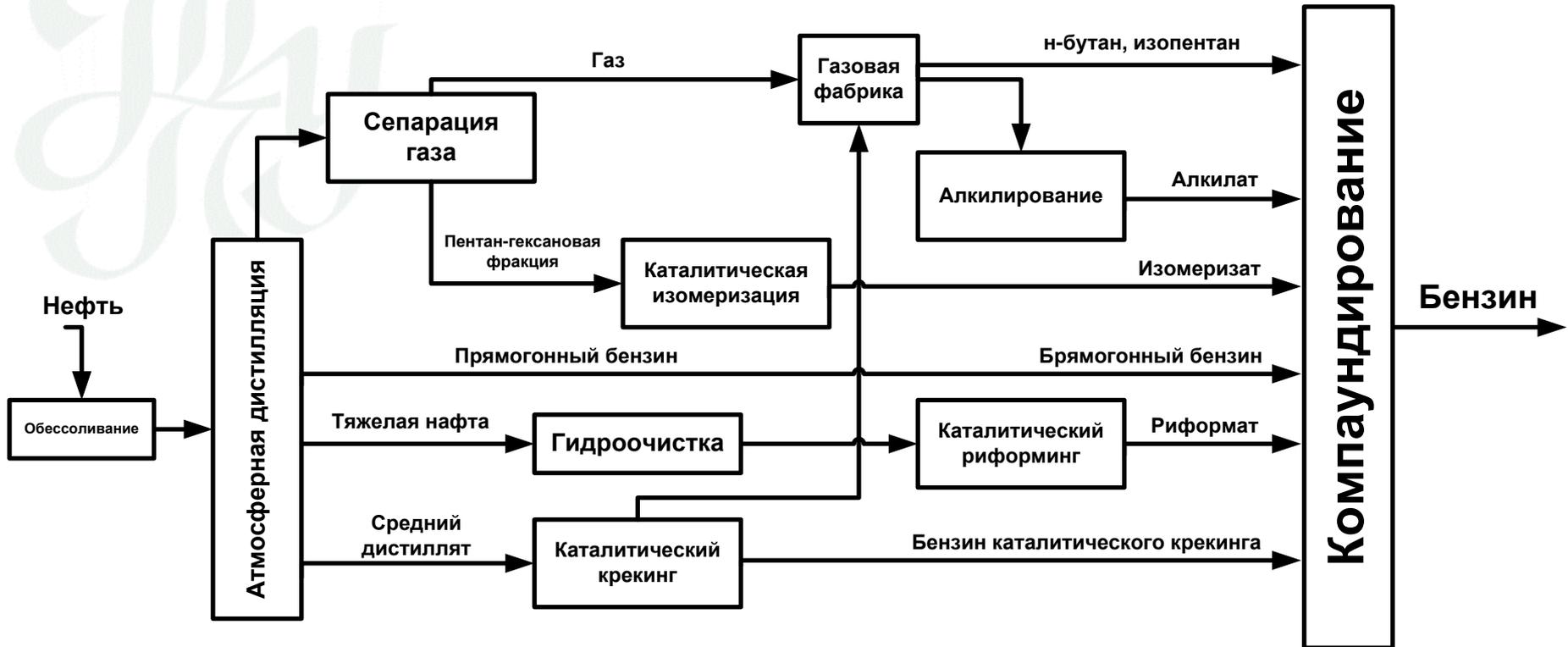


Рис. 2 Общая схема производства бензина на нефтеперерабатывающем предприятии

Процесс промышленного производства высокооктановых бензинов является сложной, многоступенчатой технологией, **наблюдается взаимосвязь явлений в процессах и аппаратах химической технологии** (риформинг, изомеризация, компаундирование и др.)

● Комплексная моделирующая система

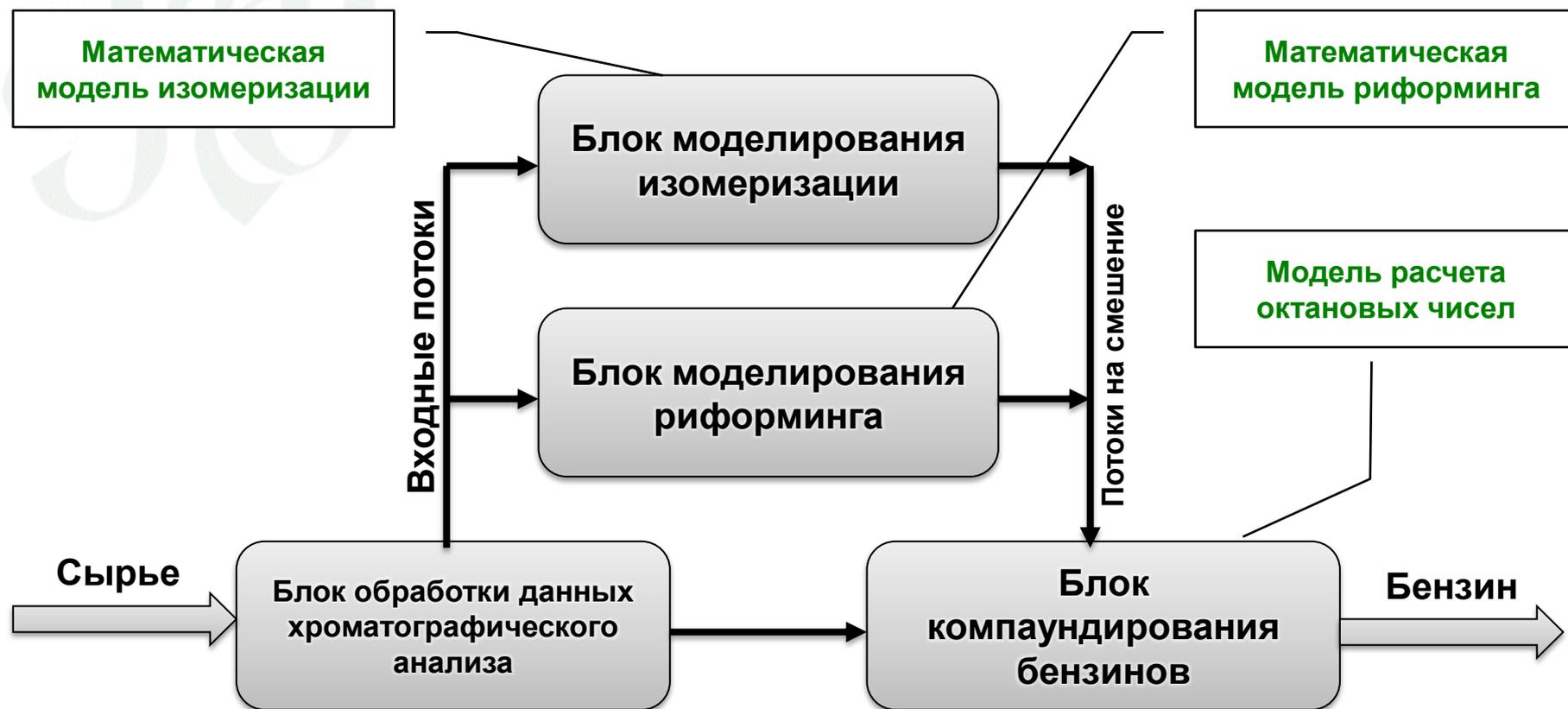


Рис. 3 Структура комплексной моделирующей системы

● Уровень детализации углеводородного состава (блок обработки хроматограмм)

Таблица 1 Структура блока обработки хроматограмм

Группы компонентов	Количество
н-парафины	10
изопарафины	39
олефины	32
нафтены	15
ароматические углеводороды	14
ИТОГО	110

Минимально необходимый уровень детализации для обеспечения высокой точности расчетов.

Агрегирование углеводородов в псевдокомпоненты на основе:

- близость структуры молекул,
- близость октановых чисел,
- близость реакционной способности.

Рис. 4 Пример обработки данных хроматографического анализа

Группа	Компоненты	мас. %	Компоненты после обработки хроматограммы	
A6	бензол ОЧИ = 120	0,992	→ бензол	} нельзя объединять
I6	2,2-диметилбутан ОЧИ = 93,4	1,805	→ 2,2-диметилбутан	
I6	2,3-диметилбутан ОЧИ = 102,8	1,490	→ 2,3-диметилбутан	
A9	1,2-метилэтилбензол	0,270	→ метилэтилбензолы	} можно объединять
A9	1,3-метилэтилбензол	0,758		
A9	1,4-метилэтилбензол	0,314		
I9	2-метилоктан	0,246	→ метилоктаны	} можно объединять
I9	3-метилоктан	0,292		
I9	4-метилоктан	0,198		

● Моделирование процессов риформинга и изомеризации

Математические модели процессов риформинга и изомеризации:

- базируются на нестационарных кинетических моделях данных процессов;
- учитывают изменение состава и объема перерабатываемого сырья;
- учитывают изменение активности применяемых катализаторов.

Изомеризация:

сырье – легкая прямогонная бензиновая фракция (н.к. – 62 С);

катализатор – Pt/SO₄-ZrO₂.

Риформинг:

со стационарным
слоем катализатора

с движущимся слоем
катализатора

Сырье

прямогонная бензиновая фракция

62-105 С

105-180 С

Катализатор

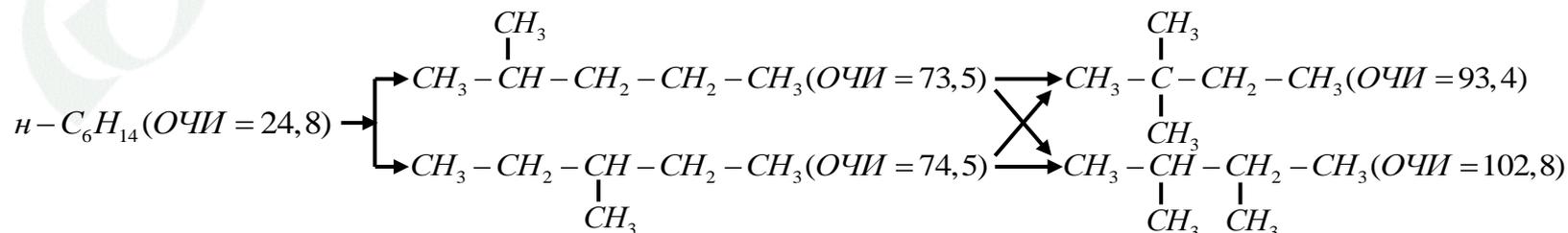
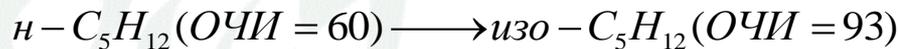
Pt-Re

Pt-Sn

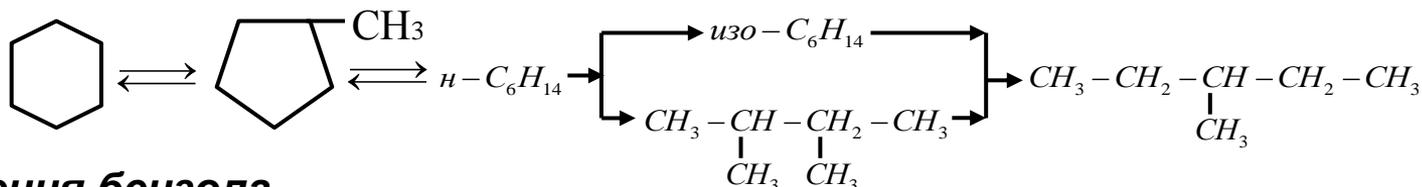
● Математическая модель процесса изомеризации

Основные реакции протекающие в ходе процесса изомеризации:

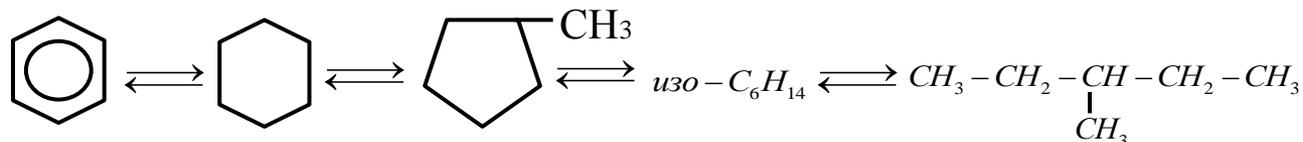
Изомеризация парафинов



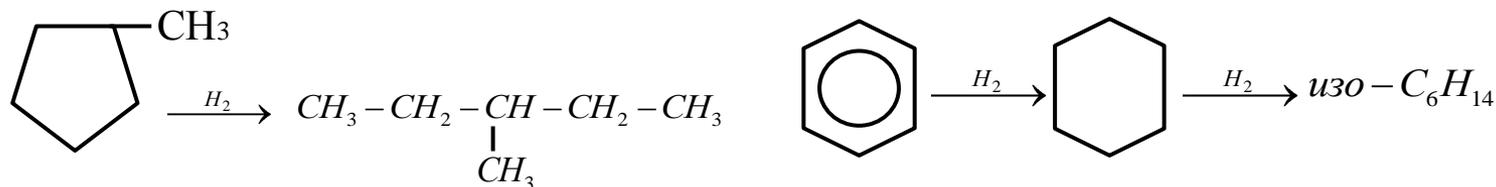
Превращения нафтенов



Превращения бензола



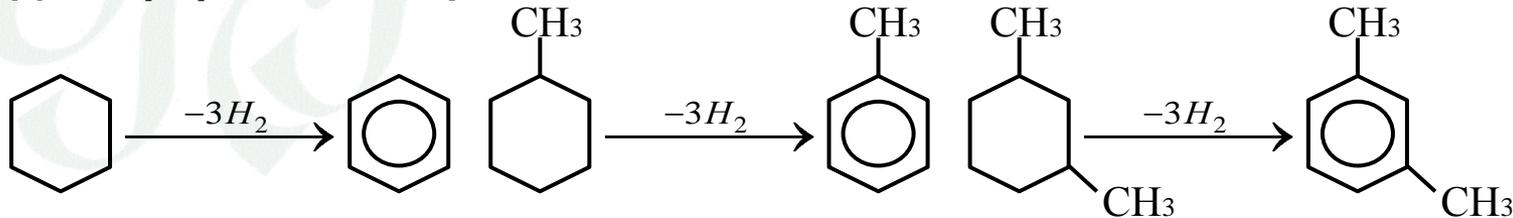
Гидрирование нафтенов и ароматических углеводородов



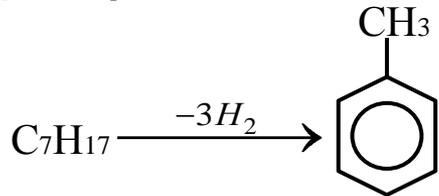
● Математическая модель процесса риформинга

Основные реакции протекающие в ходе процесса риформинга:

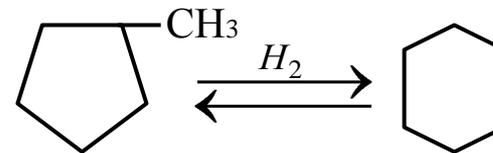
Дегидрирование нафтенов



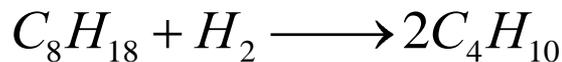
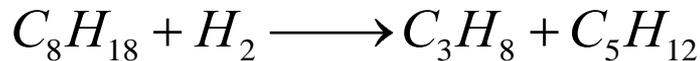
Дегидроциклизация парафинов



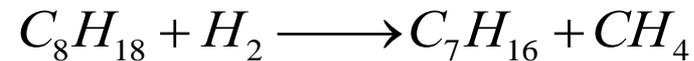
Изомеризация



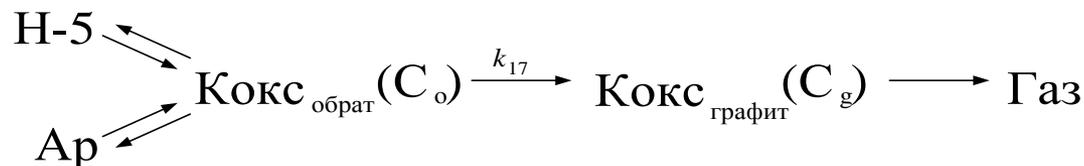
Гидрокрекинг



Гидрогенолиз



Образование кокса

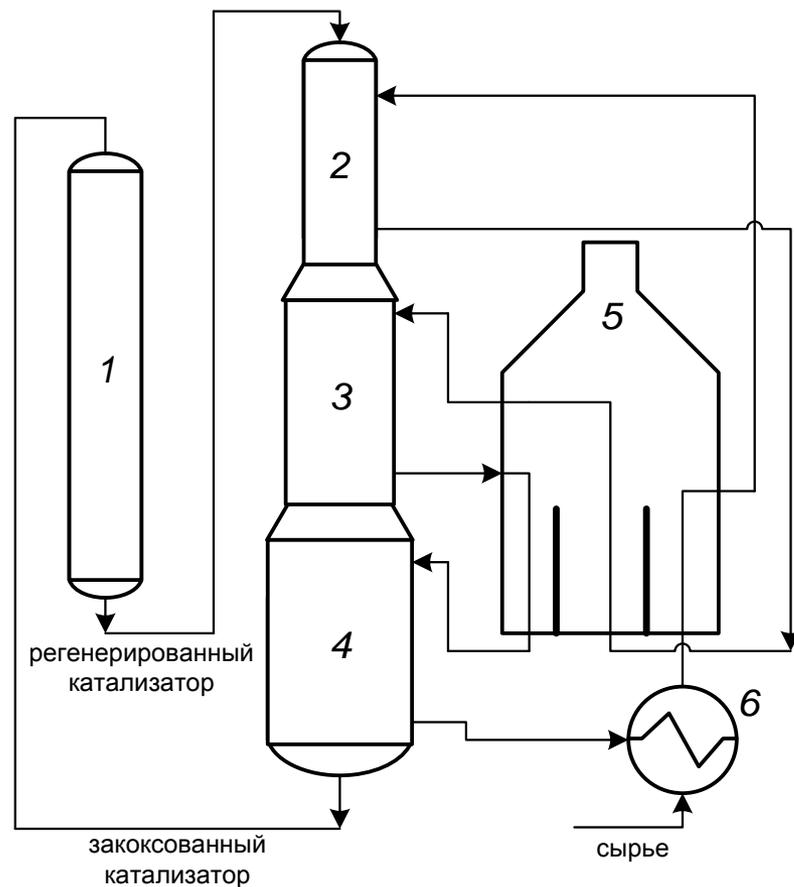
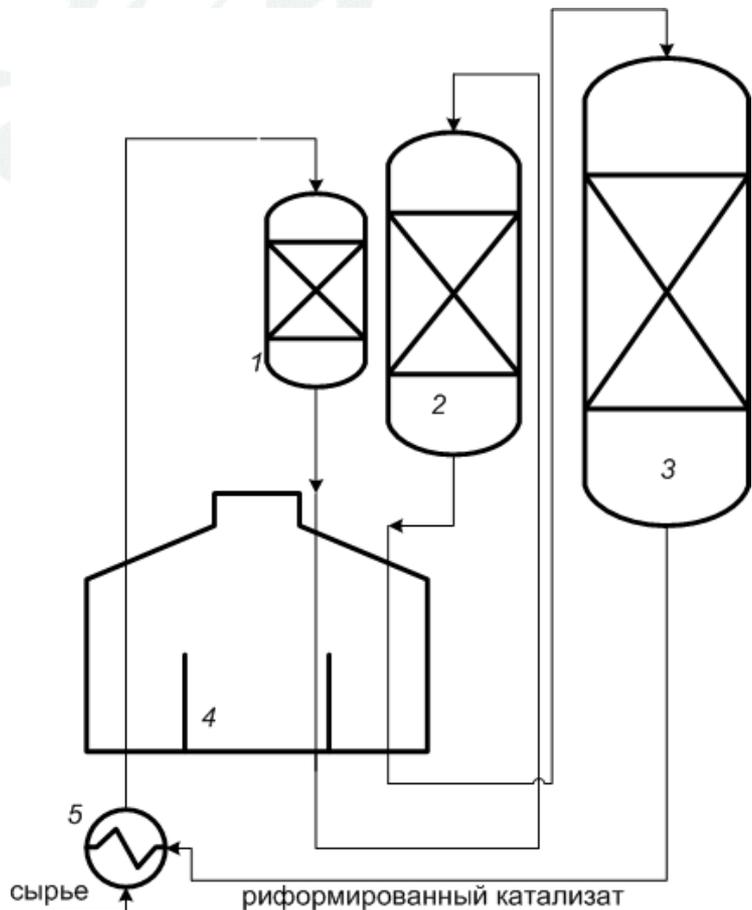


● Аппаратурно-технологическая схема

процесса риформинга

Рис. 5 Реакторный блок процесса риформинга с неподвижным слоем катализатора

Рис. 6 Реакторный блок процесса риформинга с движущимся слоем катализатора

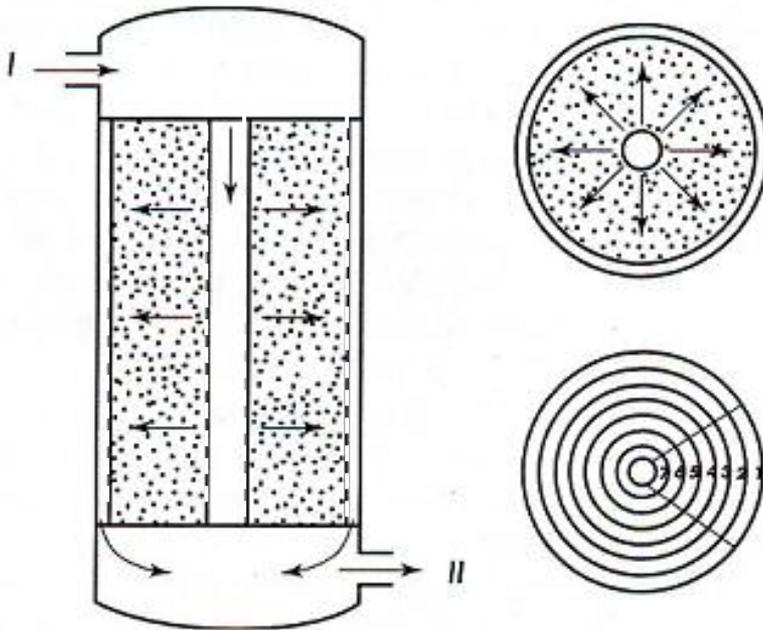


1, 2, 3 – реакторы риформинга;
4 – трубчатая печь; 5 – теплообменник

1 – регенератор; 2, 3, 4 – реакторы риформинга;
5 – трубчатая печь; 6 – теплообменник

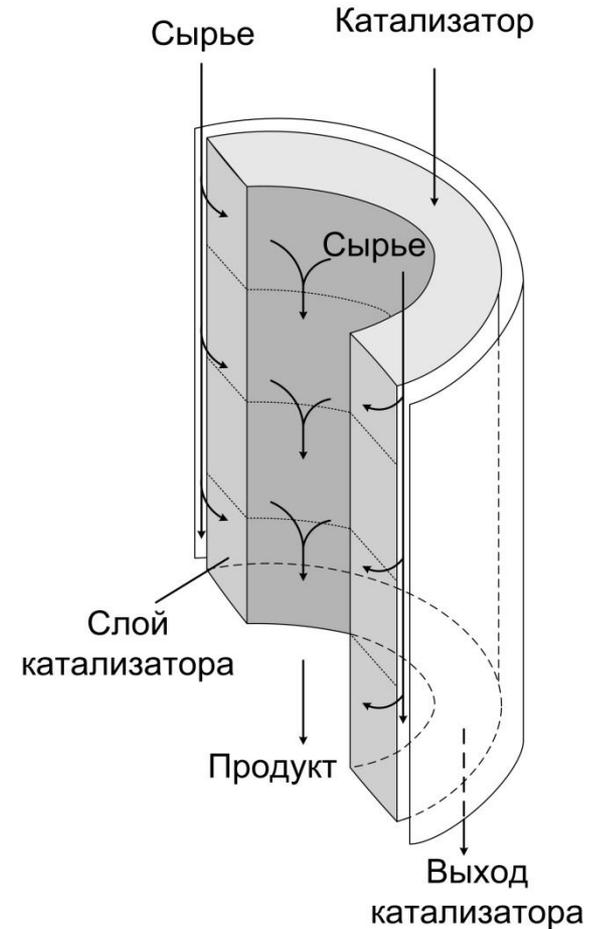
● Конструкция реакторов процессов риформинга и изомеризации

Рис. 7 Устройство реактора изомеризации



I – сырье; II – изомеризат

Рис. 8 Устройство реактора риформинга с движущимся слоем катализатора



● Математические модели риформинга и изомеризации

Модель реактора изомеризации:

$$G \cdot \frac{\partial C_i}{\partial z} + G \cdot \frac{\partial C_i}{\partial V} = \sum_{j=1}^m a_j \cdot r_j$$

$$G \cdot \frac{\partial T}{\partial z} + G \cdot \frac{\partial T}{\partial V} = \frac{1}{\rho \cdot C_p^{см}} \sum_{j=1}^m Q_j \cdot a_j \cdot r_j$$

при $z = 0$ $C_i = C_{i,0}$; $T = T_{нач}$;

при $V = 0$ $C_i = C_{i,0}$; $T = T_{нач}$;

Модель реактора риформинга:

$$G \cdot \frac{\partial C_i}{\partial z} = -u \cdot \frac{\partial C_i}{\partial R} - \varphi \cdot \frac{\partial C_i}{\partial l} + \frac{1}{l} \cdot \int_0^l r_j(l) a_j(l) dl$$

$$\rho^{см} \cdot C_p^{см} \cdot G \cdot \frac{\partial T}{\partial z} = -u \cdot \rho^{см} \cdot C_p^{см} \cdot \frac{\partial T}{\partial R} - \varphi \cdot \rho^{кат} \cdot C_p^{кат} \cdot \frac{\partial T}{\partial l} + \sum Q_j \cdot \frac{1}{l} \cdot \int_0^l r_j(l) a_j(l) dl$$

если $z = 0$ $C_i = C_{i,0}$; $T = T_{нач}$;

если $l = 0$ $C_i = C_{i,0}$ (на входе в реактор); $T = T_{нач}$;

если $r = 0$ $C_i = C_{i,0}$; $T = T_{нач}$.

● Моделирование процессов риформинга и изомеризации

Таблица 2 Изменения состава сырья процесса каталитического риформинга бензинов с движущимся слоем катализатора

Компоненты, % мас.	Сырье №1	Сырье №2	Сырье №3	Сырье №4	Сырье №5	Сырье №6
н-парафины	23,80	23,40	23,40	25,10	25,10	24,50
изопарафины	23,80	23,60	21,20	22,50	22,90	23,20
нафтены	42,90	42,40	44,00	42,70	42,20	42,30
ароматические углеводороды	10,40	9,80	10,30	9,60	9,80	9,90
н-парафины/изопарафины	1,00	0,99	1,10	1,12	1,10	1,06
н-парафины/нафтены+ароматические углеводороды	0,45	0,45	0,43	0,48	0,48	0,47

Таблица 3 Изменения состава сырья процесса Изомеризации пентан-гексановой фракции

Компоненты, % мас.	Сырье №1	Сырье №2	Сырье №3	Сырье №4	Сырье №5	Сырье №6
н-пентан	31,82	35,27	31,72	26,42	23,58	27,59
изопентан	8,26	9,05	5,81	1,19	0,80	1,34
н-гексан	15,13	13,27	17,69	18,47	19,04	20,06
2-метилпентан	22,02	20,14	22,78	23,24	23,64	21,59
3-метилпентан	11,53	10,59	12,54	15,23	15,51	14,62
2,2-диметилбутан	0,27	0,39	0,00	0,63	0,75	0,92
2,3-диметилбутан	0,81	1,02	0,73	4,83	5,06	4,37

➔ изменение более 10 % мас.

➔ изменение более 5 % мас.

● Блоки моделирования риформинга и изомеризации

Модель дезактивации катализатора изомеризации:

$$a_j = \frac{k_{j,t}}{k_{j,нач.}}$$

$k_{j,нач.}$ – константа скорости j -ой реакции в начальный момент времени;
 $k_{j,t}$ – константа скорости в некоторый текущий момент времени.

Модель дезактивации катализатора риформинга:

$$a_j = A_0 \cdot e^{-\alpha_j \cdot C_{\text{кокс}} / h_{\text{цир}}}$$

$$h_{\text{цир}} = u \cdot \rho^{см} / (\varphi \cdot \rho^{кат})$$

$C_{\text{кокс}}$ – массовая доля кокса на катализаторе;
 a_j – активность катализатора;
 A_0 – линейная величина, определяющая число активных центров на катализаторе;
 α_j – коэффициент отравления катализатора;
 $h_{\text{цир}}$ – кратность циркуляции катализатора;
 φ – расход катализатора, м³/час;
 u – скорость потока, м/час;

● Расчет октановых чисел с учетом неаддитивности

- Октановое число – неаддитивная характеристика.
- Расчет октановых чисел с учетом взаимодействий между углеводородами, входящими в состав бензинов, являющихся причиной отклонений октановых чисел от аддитивности.

$$ОЧ_{см} = \sum_{i=1}^n ОЧ_i \cdot C_i + B_i$$

$ОЧ_{см}$ – октановое число смешения бензинов;

$ОЧ_i$ – октановое число i -го компонента;

B_i – отклонение октанового числа i -го компонента от аддитивности;

C_i – концентрация i -го компонента, % мас.;

● Расчет октановых чисел индивидуальных углеводородов на основе расчета энергии диссоциации молекул

- На сегодняшний день детонационная стойкость многих индивидуальных углеводородов остается неизвестной, имеющиеся данные в литературе различаются или носят противоречивый характер, что затрудняет расчет октановых чисел смесей.

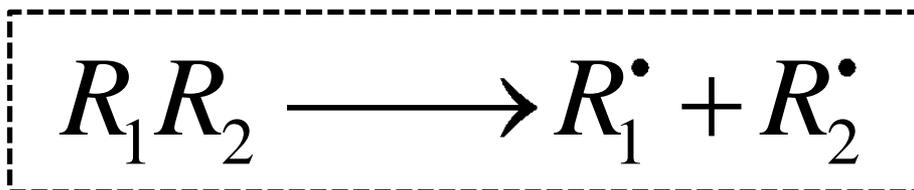
Таблица 4 Литературные данные по октановым числам некоторых углеводородов

Углеводород	Октановое число, исследовательский метод						
бензол	120	117	113	115	113	113	115
толуол	116	115	107	120	115	112,5	120

- Детонация имеет цепной механизм, одной из основных стадий является стадия инициирования радикалов (разрыв С-С связей).
- Детонация представляет собой разрыв молекулы, чем сложнее разорвать молекулу, тем выше её детонационная стойкость.
- **Одной из возможностей оценить детонационную стойкость молекулы является расчет энергии ее диссоциации.**

● Расчет энергии диссоциации молекул углеводородов бензина

Энергией диссоциации связи R_1R_2 называют энтальпию реакции:



Величина энергии диссоциации химической связи может быть рассчитана как*:

$$E_d(R_1 - R_2) = \Delta H_f^0(R_1^\bullet) + \Delta H_f^0(R_2^\bullet) - \Delta H_f^0(R_1R_2)$$

E_d – энергия диссоциации химической связи (энтальпия реакции разрыва химической связи);

R_1R_2 – химическая связь фрагментов R_1 и R_2 в молекуле R_1R_2 ;

ΔH_f^0 – энтальпия образования из элементов при стандартных условиях ($P = 1$ атм., $T = 298,15$ К);

R^\bullet – свободный радикал.

* Забрянский Е.И., Зарубин А. П. Детонационная стойкость и воспламеняемость моторных топлив (методы определения). – Москва: Химия. – 216 с.

● Расчет энергии диссоциации молекул углеводородов бензина

Таблица 5 Рассчитанные значения энергий диссоциации некоторых углеводородов бензиновой смеси

№	Углеводород	Энергия диссоциации, кДж/моль	№	Углеводород	Энергия диссоциации, кДж/моль
1	н-пентан	299,30	16	2,2-диметилпентан	263,40
2	н-гексан	283,21	17	2,2-диметилгексан	368,28
3	н-гептан	279,30	18	2,4-диметилгексан	268,67
4	н-октан	272,36	19	2,4-диметилгептан	268,61
5	н-нонан	268,70	20	циклопентан	321,60
6	н-декан	258,81	21	метилциклопентан	308,34
7	н-ундекан	255,05	22	этилциклопентан	306,92
8	н-додекан	250,67	23	бензол	588,94
9	и-бутан	316,39	24	толуол	384,37
10	и-пентан	298,32	25	этилбензол	369,45
11	2-метилпентан	289,64	26	пропилбензол	354,35
12	2-метилгексан	287,07	27	бутилбензол	354,81
13	3-метилгексан	277,13	28	п-ксилол	415,18
14	3-метилгептан	255,00	29	м-ксилол	909,43
15	2,2-диметилбутан	280,05	30	о-ксилол	380,95

Расчет с использованием пакета квантово-химических программ **Gaussian** и **Chemcraft** (метод DFT базис DGDZVP) при условиях сгорания топлива в двигателе внутреннего сгорания ($T = 900$ К, $P = 8,883$ атм.).

● Расчет октановых чисел индивидуальных углеводородов на основе расчета энергии диссоциации молекул

С увеличением энергии диссоциации молекулы, увеличивается октановое число, т.е. повышается детонационная стойкость.

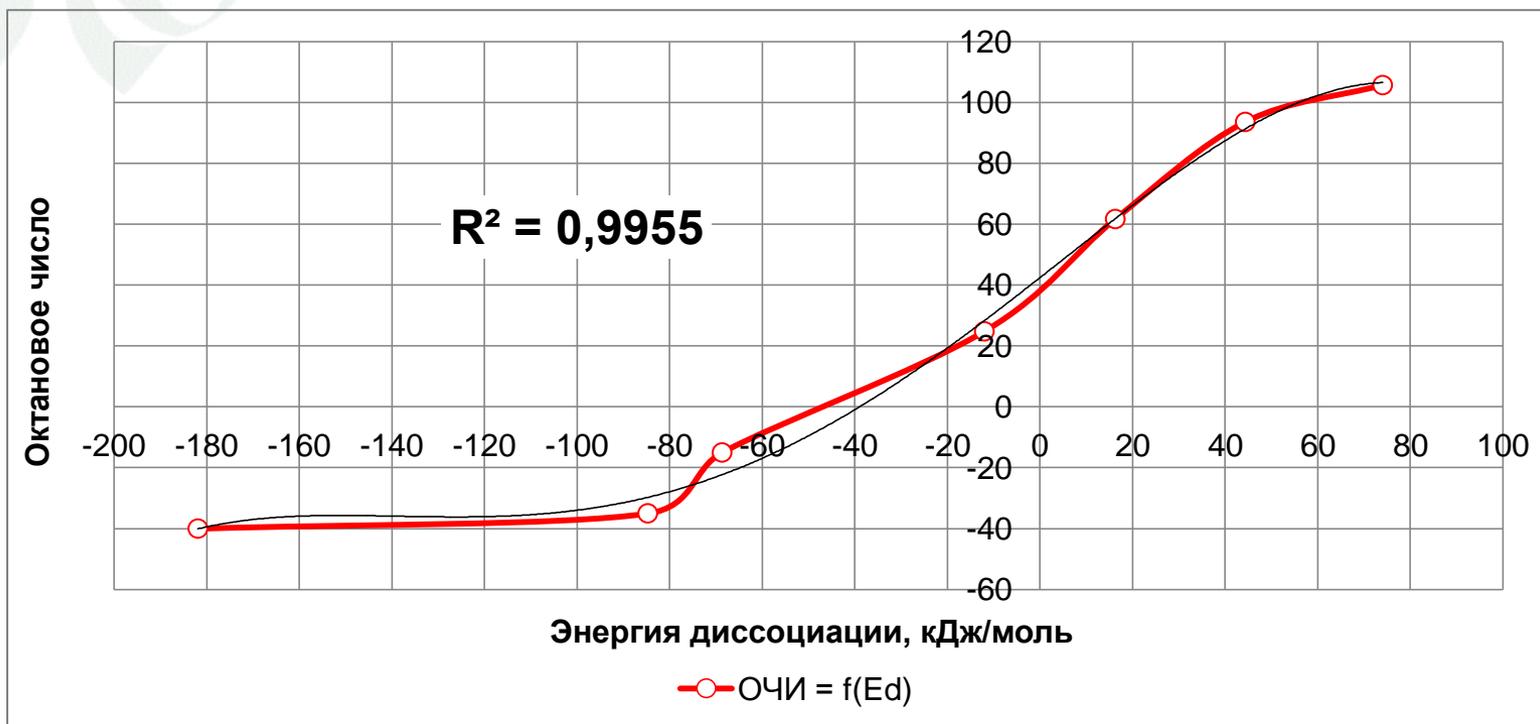


Рис. 9 Зависимость октанового числа от энергии диссоциации для n- и изопарафинов

● Расчет октановых чисел индивидуальных углеводородов на основе расчета энергии диссоциации молекул

Установлены количественные зависимости, позволяющие рассчитывать значения октановых чисел индивидуальных углеводородов различных гомологических рядов, в зависимости от энергии диссоциации.

Таблица 6 Установленные зависимости для расчета октановых чисел

Углеводороды	Октановое число исследовательский метод (ОЧИ)	Октановое число моторный метод (ОЧМ)
н-парафины	$y = 2,0929x - 577,41$	$y = 2,1538x - 593,36$
изопарафины (2-метил-замещенные)	$y = -0,1409x^2 + 86,787x - 13254$	$y = -0,1356x^2 + 83,372x - 12710$
изопарафины (3-метил-замещенные)	$y = 0,0058x^2 - 1,9694x + 149,19$	$y = 0,0075x^2 - 3,0863x + 334,42$
изопарафины (2,2-диметил-замещенные)	$y = -0,0015x^2 + 0,7621x - 2,9799$	$y = -0,0005x^2 + 0,1227x + 95,82$
изопарафины (2,4-диметил-замещенные)	$y = 4,3623x - 1105$	$y = -4,38x^2 + 2375x - 321869$
нафтены	$y = -1,1098x^2 + 699,85x - 110185$	$y = -0,1096x^2 + 69,381x - 10897$
ароматические углеводороды	$y = 0,0301x^2 - 21,863x + 4078,8$	$y = 0,0154x^2 - 11,182x + 2131,4$

x – значение энергии диссоциации для индивидуального углеводорода, кДж/моль.

● Расчет октановых чисел индивидуальных углеводородов на основе расчета энергии диссоциации молекул

Таблица 7 Сопоставление рассчитанных октановых чисел компонентов товарных бензинов с экспериментальными данными

Компонент бензина	ОЧИ с исп. литературных данных*	ОЧИ с исп. рассчитанных ОЧ	ОЧИ экспериментальное	Δ литература/ эксперимент	Δ расчет/ эксперимент
Риформат Сызранский НПЗ	96,79	96,50	96,20	0,59	0,30
Бензин каталитического крекинга Новокуйбышевский НПЗ	85,46	85,88	86,00	0,54	0,12
Отгон гидроочистки Сызранский НПЗ	88,08	87,49	87,30	0,78	0,19
Алкилат Куйбышевский НПЗ	93,08	93,38	93,30	0,22	0,08
Изомеризат Ачинский НПЗ	87,71	87,23	86,70	1,01	0,53
Прямогонная фракция н.к. 20-80°C Новокуйбышевский НПЗ	67,69	64,81	66,20	1,49	1,39

* Лосиков Б.В. Нефтепродукты: свойства, качество, применение. Справочник. – Москва: Химия. – 776 с.

● **Расчет соотношений смешиваемых компонентов для приготовления бензинов**

Невозможно выработать универсальное соотношение смешиваемых компонентов для производства бензина.

**Разработка схемы смешения компонентов
должна осуществляться с учетом:**

1. углеводородного состава сырья процессов риформинга и изомеризации;
2. активности применяемых катализаторов, загруженных в реакторы изомеризации и риформинга с неподвижным и движущимся слоем катализатора;
3. октановых чисел индивидуальных углеводородов, входящих в состав бензиновой фракции, и межмолекулярных взаимодействий между ними.

● Расчет соотношений смешиваемых компонентов для приготовления бензинов с учетом состава сырья изомеризации

Исследовано влияние состава сырья процесса изомеризации пентан-гексановой фракции на соотношение смешиваемых компонентов для приготовления бензина.

Таблица 8 Содержание ключевых компонентов в сырье процесса изомеризации

Вещества, % мас.	Сырье №1	Сырье №2	Сырье №3
н-пентан	26,42	23,58	27,59
н-гексан	18,47	19,04	20,06

Таблица 9 Содержание ключевых компонентов в продуктах процесса изомеризации (расчет на модели)

Содержание веществ, % мас.	Изомеризат №1	Изомеризат №2	Изомеризат №3
н-пентан	0,30	0,06	0,01
н-гексан	0,25	0,03	0,00
диметилбутаны	74,60	83,16	92,32
ОЧИ	89,70	92,10	93,40

Изменение содержания ключевых компонентов – н-пентана и н-гексана в составе сырья процесса изомеризации на 2-3 % мас. приводит к изменению октанового числа получаемых изомеризатов на 2-3 пункта, что в свою очередь определяет соотношение компонентов при приготовлении бензина.

● Расчет соотношений смешиваемых компонентов для приготовления бензинов с учетом состава сырья изомеризации

Таблица 10 Соотношения смешиваемых компонентов для приготовления бензина с учетом состава сырья процесса изомеризации пентан-гексановой фракции

ПОТОКИ	Премиум-95, ЕВРО-5		
	I	II	III
Соотношение смешиваемых компонентов, % мас.			
Риформат R-264	28	28	28
Изомеризат №1	10	–	–
Изомеризат №2	–	11	–
Изомеризат №3	–	–	13
Бензин кат. крекинга	37	37	37
Алкилат	12	12	11
Изопентан	10	10	10
МТБЭ	3	2	1

Увеличение содержания ключевых компонентов – н-пентана и н-гексана в составе сырья процесса изомеризации на 2-3 % мас. позволяет снизить вовлечение добавки-оксигената метилтретбутиловый эфир (МТБЭ) и алкилата в производство бензина на 1-2 % мас.

● Расчет соотношений смешиваемых компонентов для приготовления бензинов с учетом состава сырья изомеризации



● Расчет соотношений смешиваемых компонентов для приготовления бензинов с учетом активности катализатора риформинга

Исследовано влияние изменения активности катализаторов процесса риформинга бензинов с движущимся слоем катализатора на соотношение смешиваемых компонентов для приготовления бензина.

Исследование проводилось для 3 различных катализаторов риформинга – **R-134, ШПР-8 и R-264.**

Таблица 11 Содержание ключевых компонентов в продуктах процесса риформинга (расчет на модели)

Содержание веществ, % мас.	Риформат катализатор R-134	Риформат катализатор ШПР-8	Риформат катализатор R-264
бензол	1,70	3,20	2,00
ароматические углеводороды	79,90	77,20	81,40
ОЧИ	104,30	101,80	105,40

Применение более эффективного катализатора R-264 по сравнению с использованием катализатора ШПР-8 позволяет повысить октановое число риформата на 3-4 пункта.

● Расчет соотношений смешиваемых компонентов для приготовления бензинов с учетом активности катализатора риформинга

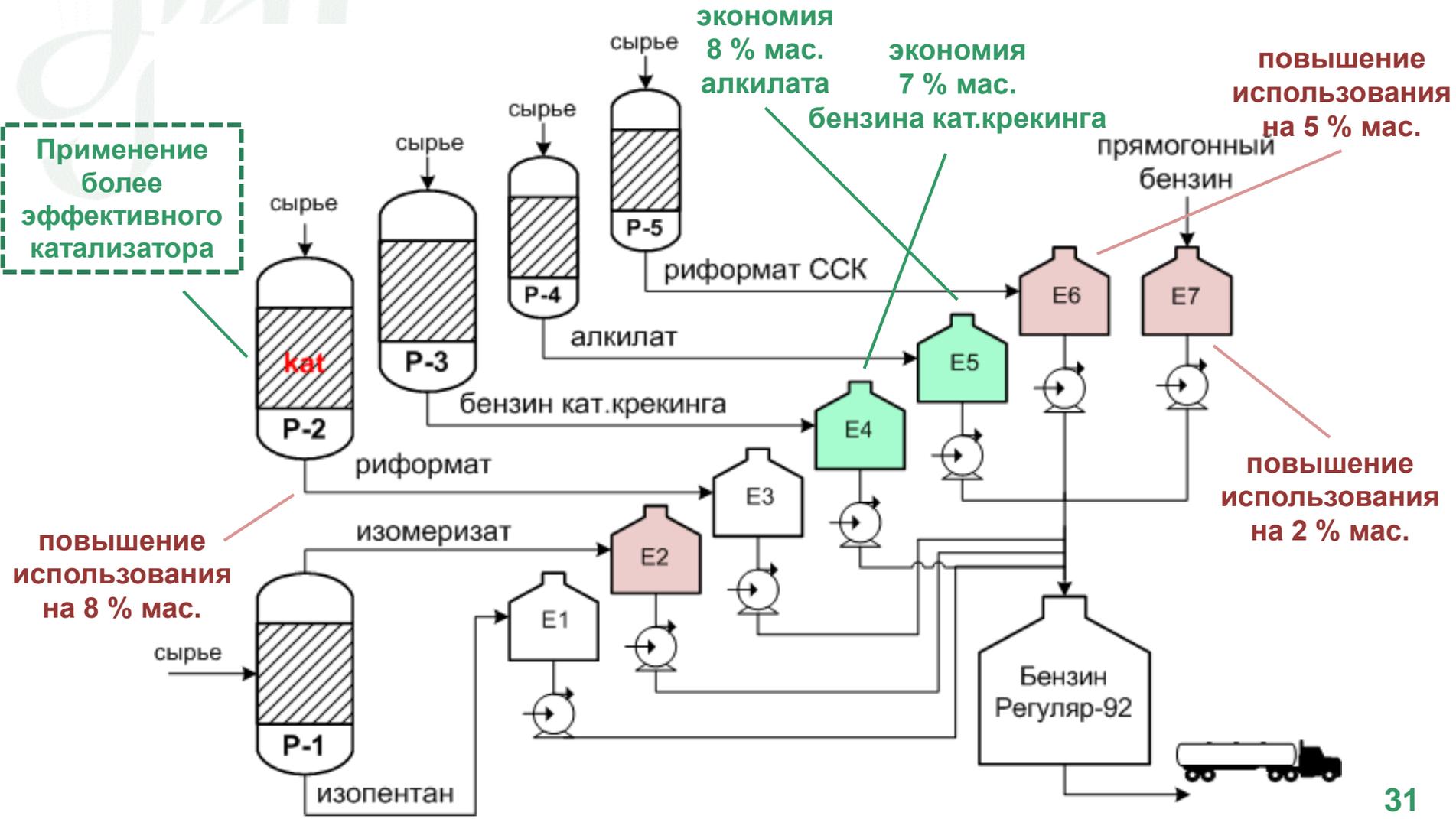
Таблица 12 Соотношения смешиваемых компонентов для приготовления бензина с учетом активности катализатора, используемого в процессе каталитического риформинга

ПОТОКИ	Регуляр-92, ЕВРО-5		
	I	II	III
Соотношение смешиваемых компонентов, % мас.			
Риформат R-134	30	–	–
Риформат ШПР-8	–	–	20
Риформат R-264	–	28	–
Риформат ССК	2	2	–
Изомеризат №2	11	11	11
Бензин кат. крекинга	42	44	51
Алкилат	–	–	8
Изопентан	10	10	10
Прямогонный бензин	5	5	–

Применение более эффективного катализатора R-264 по сравнению с использованием катализатора ШПР-8 позволяет:

- повысить вовлечение в производство бензина прямогонного бензина и риформата ССК на 2 % мас. и 5 % мас. соответственно, вовлечение риформата на 8 % мас.;
- снизить вовлечение в производство бензина алкилата и бензина кат.крекинга на 8 % мас. и 7 % мас. соответственно.

Расчет соотношений смешиваемых компонентов для приготовления бензинов с учетом активности катализатора риформинга



● Научная новизна

1. Установлено, что оптимизация процессов производства высокооктановых бензинов компаундированием сложных по составу углеводородных смесей, вырабатываемых в различных процессах производства бензиновых компонентов, возможна только на основе комплексной математической модели, построенной с учетом сопряженности процессов риформинга, изомеризации и компаундирования.
2. Показано, что углеводородный состав сырья процессов риформинга и изомеризации, а также активность применяемых катализаторов являются основными факторами, определяющими детонационные свойства смесевых бензинов. Влияние изменения углеводородного состава сырья на октановое число составляет 1-2 пункта в процессах изомеризации и риформинга; влияние активности катализатора на октановое число составляет 2-3 пункта.
3. Установлена зависимость октановых чисел индивидуальных углеводородов от энергии диссоциации молекул, что обеспечило адекватное отражение показателя детонационной стойкости в моделирующей системе. Погрешность расчета октановых чисел не превышает 0,2-0,5 единиц, что сопоставимо с погрешностью экспериментального определения данного показателя.

● Практическая значимость

- Разработана комплексная моделирующая система для оптимизации процессов производства бензинов, позволяющая рассчитывать октановые числа, основываясь на данных НПЗ по углеводородному составу сырьевых потоков процессов изомеризации и риформинга, а также рассчитывать оптимальное соотношение потоков для получения бензина требуемой марки с учетом ограничений по содержанию компонентов согласно требованиям ГОСТ.
- Разработанная моделирующая система реализована также на кафедре Химической технологии топлива Национального исследовательского Томского политехнического университета и внедрена в учебный процесс при проведении лабораторных работ по дисциплине «Системный анализ», «Компьютерные моделирующие системы», выпускных работ для специальности «Основные процессы химических производств и химическая кибернетика».
- В рамках договора с предприятием ОАО «ГАЗПРОМНЕФТЬ-ОНПЗ», разработанная моделирующая система внедряется в систему планирования выпуска бензинов различных марок.

● Выводы

1. Ресурсоэффективность процессов производства бензинов определяющим образом зависит от учета влияния реакционной способности углеводородов сырьевых потоков и активности катализатора на соотношение расходов смешиваемых продуктовых потоков в процессах производства бензинов. При этом отклонения расходов от оптимальных значений приводят к некондиционности бензинов или к неоправданному перерасходу компонентов.
2. Оптимизация расхода сырьевых потоков определяется многими факторами: производительностью аппаратов, углеводородным составом сырьевых потоков и активностью применяемых катализаторов. Решение данной задачи наиболее эффективно может быть выполнено разработкой и применением системы математического моделирования на физико-химической основе.
3. Предложен способ расчета октановых чисел индивидуальных углеводородов по энергии диссоциации молекул. Показано, что увеличение значения энергии разрыва связи приводит к увеличению октанового числа индивидуальных углеводородов. Достоверность подтверждается большим массивом экспериментальных данных с установок риформинга, изомеризации, алкилирования. Расхождение между экспериментальными и рассчитанными значениями октановых чисел индивидуальных углеводородов находятся в пределах допустимой погрешности, и составляет 0,2-0,5 пункта.

● Выводы

4. Использование разработанной системы моделирования адекватно отражает процессы производства бензинов и подтверждается экспериментальными данными с различных НПЗ. Средняя абсолютная погрешность, полученная в результате сопоставления расчетных октановых чисел смесевых потоков с экспериментальными, составляет не более 0,2-0,5 пункта, что соответствует требованиям ГОСТ 511-82 об воспроизводимости результатов определения октанового числа.
5. С использованием разработанной комплексной моделирующей системы рассчитаны оптимальные варианты смешения углеводородных потоков для получения высокооктановых бензинов марок Регуляр-92, Премиум-95 и Супер-98 класса ЕВРО-3 и выше, отвечающих всем требованиям современных экологических и технических стандартов.
6. Показано, что изменение содержания ключевых компонентов – н-пентана и н-гексана в составе сырья процесса изомеризации на 2-3 % мас. приводит к изменению октанового числа получаемых изомеризатов на 2-3 пункта, что в свою очередь определяет соотношение компонентов при приготовлении бензина. Чем выше октановое число изомеризата, тем меньше необходимо вовлекать в производство бензина метилтретбутилового эфира и алкилата.
7. Установлено, что изменение активности катализатора, используемого в процессе риформинга, приводит к изменению октанового числа получаемого риформата, применение более активного катализатора R-264 по сравнению с использованием катализатора ИППУ позволяет повысить октановое число риформата на 3-4 пункта. Показано, что активность применяемого катализатора определяет соотношение компонентов при приготовлении бензина – чем больше октановое число вовлекаемого риформата, тем меньше его необходимо для производства бензина заданной марки.



**Спасибо за
внимание!**

● Публикации и апробация

По теме работы опубликовано около **70 работ**, в том числе **8 статей** в журналах из списка ВАК.

Основные результаты работы доложены и обсуждены на **12 Международных** и **Всероссийских конференциях**, выставках и конкурсах.

Опубликована монография:

1. Петрова А.А, Иванчина Э.Д., Киргина М.В. **Физико-химические основы определения детонационной стойкости бензинов**. LAP LAMBERT Academic Publishing, 2012. – 109 с.

Зарегистрированы **две программы** для ЭВМ:

1. Свидетельство №2013619273 **Комплексная моделирующая система приготовления товарных бензинов**, 2013 г.
2. Свидетельство №2013619272 **Обработка данных хроматографического анализа углеводородных потоков (UniCrom)**, 2013 г.

● Публикации и апробация

Статьи ВАК:

1. Киргина М.В. **Оптимизация процесса производства товарных бензинов на ОАО "ГАЗПРОМНЕФТЬ-ОМСКИЙ НПЗ"** / М.В. Киргина, М.В. Короленко, Э.Д. Иванчина, Н.В. Чеканцев // Известия Томского политехнического университета. – 2012 – Т. 321 – №. 3. – С. 132-136.
2. Киргина М.В. **Пути совершенствования процесса производства товарных бензинов в ОАО "Газпромнефть-ОНПЗ"** / М.В. Киргина, Н.В. Чеканцев, Э.Д. Иванчина, М.В. Короленко // Нефтепереработка и нефтехимия: Научно-технические достижения и передовой опыт. – 2013. – Вып. 1. – С. 6-11.
3. Киргина М.В. **Повышение ресурсоэффективности процессов производства моторных топлив методом математического моделирования** / М.В. Киргина, Н.В. Чеканцев, Э.Д. Иванчина, М.В. Майлин, Б.В. Сахневич // Нефтепереработка и нефтехимия. Научно-технические достижения и передовой опыт. – 2013 – №. 10. – С. 28-33.
4. Киргина М.В. **Разработка рецептур смешения бензинов на ОАО «АНПЗ ВНК» с использованием компьютерной моделирующей системы** / М.В. Майлин, М.В. Киргина, Э.Д. Иванчина // Современные технологии. Системный анализ. Моделирование. – 2013 – №. 3 (39). – С. 241-248.
5. Киргина М.В. **Разработка методики расчета детонационной стойкости индивидуальных углеводородов с применением методов квантовой химии** / А.А. Петрова, М.В. Киргина, Э.Д. Иванчина, М.В. Майлин // Известия Томского политехнического университета. – 2013 – Т. 322 – №. 3. – С. 68-72.
6. Киргина М.В. **Разработка модуля автоматизированной обработки данных хроматографического анализа для повышения эффективности процесса компаундирования товарных бензинов** / Б.В. Сахневич, М.В. Киргина, Н.В. Чеканцев, Э.Д. Иванчина // Известия Томского политехнического университета. – 2014 – Т. 324 – №. 3. – С. 127-136.
7. Киргина М.В. **Моделирование процесса приготовления товарных бензинов на основе учета реакционного взаимодействия углеводородов сырья с высокооктановыми добавками** / Ю.А. Смышляева, Э.Д. Иванчина, М.В. Киргина, И.М. Долганов, А.В. Кравцов, Ф. Фан // Нефтепереработка и нефтехимия. – 2012 – Вып. 4 – С. 3-8.
8. Киргина М.В. **Компьютерная программа для оптимизации процесса компаундирования высокооктановых бензинов** / М.В. Киргина, Э.Д. Иванчина, И.М. Долганов, Н.В. Чеканцев, А.В. Кравцов, Фан Фу // Химия и технология топлив и масел. – 2014 – № 1. – с. 12-18.

● Интеллектуальная собственность

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2013619272

Обработка данных хроматографического анализа
углеводородных потоков (UniCrom)

Правообладатель: *Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (RU)*

Авторы: *Сахневич Богдан Вячеславович (RU), Чеканцев Никита Витальевич (RU), Киргина Мария Владимировна (RU), Иванчина Эмилия Дмитриевна (RU)*

Заявка № 2013617098

Дата поступления 07 августа 2013 г.

Дата государственной регистрации
в Реестре программ для ЭВМ 30 сентября 2013 г.

Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

Б.П. Симонов

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2013619273

Комплексная моделирующая система приготовления
товарных бензинов

Правообладатель: *Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (RU)*

Авторы: *Куртуков Виктор Викторович (RU), Чеканцев Никита Витальевич (RU), Киргина Мария Владимировна (RU), Иванчина Эмилия Дмитриевна (RU), Чузлов Вячеслав Алексеевич (RU)*

Заявка № 2013617096

Дата поступления 06 августа 2013 г.

Дата государственной регистрации
в Реестре программ для ЭВМ 30 сентября 2013 г.

Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

Б.П. Симонов

● Интеллектуальная собственность

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2014660111

**Блок взаимодействия систем моделирования производства
автомобильных бензинов**

Правообладатель: *федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Томский политехнический
университет» (RU)*

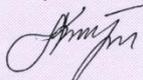
Авторы: *Чеканцев Никита Витальевич (RU), Киргина Мария
Владимировна (RU), Чузлов Вячеслав Алексеевич (RU), Иванчина
Эмилия Дмитриевна (RU)*

Заявка № 2014617820

Дата поступления 06 августа 2014 г.

Дата государственной регистрации
в Реестре программ для ЭВМ 01 октября 2014 г.

Врио руководителя Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

 Л.Л. Кирий



РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2014660118

**Система расчета оптимальных рецептур приготовления
бензинов**

Правообладатель: *федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Томский политехнический
университет» (RU)*

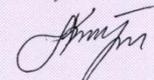
Авторы: *Киргина Мария Владимировна (RU), Чеканцев Никита
Витальевич (RU), Сахневич Богдан Вячеславович (RU), Иванчина
Эмилия Дмитриевна (RU), Чернышев Никита Владимирович
(RU)*

Заявка № 2014617822

Дата поступления 06 августа 2014 г.

Дата государственной регистрации
в Реестре программ для ЭВМ 01 октября 2014 г.

Врио руководителя Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

 Л.Л. Кирий



● Интеллектуальная собственность



общество с ограниченной ответственностью

ИНН 5401295537 КПП 540101001 ОГРН 1075401016844 р/с 40702810344070003048 в
Сибирском банке Сбербанка РФ г.Новосибирск к/с 30101810500000000641
БИК 045004641 Фактический адрес: 630099, г.Новосибирск, ул. Кавалерийская,2
Почтовый адрес: 630099, г.Новосибирск, ул. Кавалерийская,2
Тел./факс +7 (383) 203-44-03, +7 (383) 203-44-04

АКТ О ВНЕДРЕНИИ

Научных результатов на предприятии ООО «Группа компаний «Спектр» в виде
рецептур приготовления бензинов, разработанных с использованием компьютерной
моделирующей системы для оптимизации процесса производства бензинов
«Compounding»

Мы, нижеподписавшиеся представители Общества с ограниченной
ответственностью «Группа компаний «Спектр» и Федерального государственного
автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный
исследовательский Томский политехнический университет» составили настоящий Акт о
внедрении научных результатов на предприятии в виде рецептур приготовления бензинов,
разработанных с использованием компьютерной моделирующей системы для
оптимизации процесса производства бензинов «Compounding».

Данная программа обеспечивает возможность расчета основных физико-
химических и эксплуатационных характеристик бензинов (октановое число, давление
насыщенных паров, плотность, вязкость, содержание различных веществ), исследовать
влияние антидетонационных присадок и добавок-оксигенатов на октановое число бензина,
а так же разрабатывать рецептуры приготовления бензинов для производства бензина
заданной марки.

Использование программы позволило разработать наиболее экономически
выгодные рецептуры приготовления бензинов, внедрение которых позволило снизить
себестоимость производства бензина.

От ООО «Группа компаний «Спектр»

Директор Братеньков А.А.

«___» _____ 2014 г.



От ФГАОУ ВО НИ ТПУ

Ассистент каф. ХТТи ХК Киргина М.В.

«___» _____ 2014 г.

Зав.каф. ХТТи ХК Юрьев Е.М.

«___» _____ 2014 г.

Профессор каф. ХТТиХК Иванчина Э.Д.

«___» _____ 2014 г.

Доцент каф. ХТТиХК Чеканцева Н.В.

«___» _____ 2014 г.

Магистрант каф. ХТТиХК Сахневич Б.В.

«___» _____ 2014 г.



Зав. кафедрой
ХТТиХК