

Секция «Инновационное природопользование»

Расчет октановых чисел углеводородов для оптимизации процесса компаундирования моторных топлив с помощью комплексной системы моделирования

Петрова Анастасия Андреевна

Аспирант

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Институт природных ресурсов, Томск, Россия

E-mail: petrova-a@sibmail.com

Основной задачей, стоящей перед каждым нефтеперерабатывающим заводом, является производство высококачественных моторных топлив при снижении издержек на производство. Большая роль в решении этой задачи отводится процессу компаундирования высокооктановых бензинов. Решением данной проблемы в настоящее время является разработка новых моделей прогнозирования октановых чисел. <?xml:namespace prefix = o ns = "urn:schemas-microsoft-com:office:office" />

Одним из основных показателей качества товарного бензина служит его детонационная стойкость, оцениваемая октановым числом. Существующие математические методы расчета детонационной стойкости бензинов основаны на покомпонентном и групповом углеводородном составе топливной смеси. Учитывая многокомпонентность бензинов, прогнозирование октановых чисел индивидуальных углеводородов является затруднительным.

Углеводородный состав компонентов высокооктановых бензинов изменяется в течение времени в зависимости от условий процесса и исходного сырья. Поэтому для оптимального проведения процесса смешения бензинов необходим оперативный расчет оптимальной и точной рецептуры смешения компонентов.

В процессе приготовления бензинов определяющая роль отводится октановым числам смешения, которые отличаются от взвешенной суммы октановых чисел отдельных компонентов. Причиной отклонения является наличие межмолекулярных взаимодействий между углеводородами, входящими в состав бензинов [1].

Одной из возможностей оценить детонационную стойкость молекулы является расчет энергии ее диссоциации [2]. Квантово-химическими методами были проведены расчеты энергий диссоциации индивидуальных углеводородов.

По рассчитанным значениям были найдены уравнения для расчета характеристики детонационной стойкости индивидуальных углеводородов. Далее с использованием разработанной методики расчета октановых чисел индивидуальных углеводородов были произведены расчеты различных рецептур компаундирования товарных бензинов, соответствующих экологическим стандартам. На основе математической модели промышленного процесса компаундирования разрабатывается комплексная система моделирования для производства высокооктановых бензинов.

Таким образом, разработанная методика расчета октановых чисел индивидуальных углеводородов позволяет повысить точность расчетов октановых чисел базовых компонентов товарных бензинов и тем самым повысить эффективность процесса компаундирования моторных топлив за счет точного и оперативного расчета рецептур смешения

бензинов, что позволит снизить издержки на производство и получить высококачественные топлива.

Литература

1. Смышляева Ю.А., Иванчина Э.Д., Кравцов А.В., Зыонг Ч.Т. Учет интенсивности межмолекулярных взаимодействий компонентов смеси при математическом моделировании процесса компаундирования товарных бензинов, Нефтепереработка и нефтехимия. Научно-технические достижения и передовой опыт. – 2010. - №9. - с. 9–14.
2. Tareq A. Albahri. Structural group contribution method for predicting the octane number of pure hydrocarbon liquids // Ind. Eng. Chem. Res., 2003. – с. 675-662.