

УДК 66.011

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК МЕТОД ПОВЫШЕНИЯ  
ЭФФЕКТИВНОСТИ КОМПАУНДИРОВАНИЯ БЕНЗИНОВ**

Сахневич Б.В., Киргина М.В., Чеканцев Н.В., Иванчина Э.Д.

**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЯК МЕТОД ПІДВИЩЕННЯ  
ЕФЕКТИВНОСТІ КОМПАУНДУВАННЯ БЕНЗИНІВ**

Сахневич Б.В., Кіргина М.В., Чеканцев М.В., Іванчина Е.Д.

**COMPUTER MODELING AS A METHOD OF INCREASING THE EFFICIENCY  
OF GASOLINE BLENDING**

Sakhnevich B.V., Kirhhina M.V., Chekantsev N.V., Ivanchina E.D.

**Национальный исследовательский  
Томский политехнический университет, г. Томск, Российская Федерация**  
[sugar92\\_bv@mail.ru](mailto:sugar92_bv@mail.ru)

*С использованием метода математического моделирования создан расширенный формализованный список из 110 компонентов, вносящих основной вклад в формирование октанового числа бензинов. В среде Borland «Delphi 7» разработан модуль автоматизированной обработки хроматограмм, позволяющий разрабатывать рецептуры смешения товарных бензинов и реагировать на изменение состава сырья.*

**Ключевые слова:** *Компаундирование, октановое число, бензин, данные хроматографического анализа, формализация, рецептура бензина, риформат, МТБЭ*

*З використанням методу математичного моделювання створений розширений формалізований список з 110 компонентів, що вносять основний внесок у формування октанового числа бензинів. У середовищі Borland «Delphi 7» розроблений модуль автоматизованої обробки хроматограм, що дозволяє розробляти рецептури змішання товарних бензинів і реагувати на зміну складу сировини.*

**Ключові слова:** *компаундування, октанове число, бензин, дані хроматографічного аналізу, формалізація, рецептура бензину, риформат, МТБЕ*

*The extended formalized set of 110 hydrocarbon components, key contributors in gasolines' octane number formation, was created with applying of mathematic modeling. The new module of automatic chromatographic analysis data was developed in Borland «Delphi 7» workspace. It provides to develop recipes of trade gasolines blending and helps to respond the changes of raw materials composition.*

**Keywords:** *compounding, octane number, chromatographic analysis data, formalization petrol recipes, reformate, MTBE*

В условиях современной конкурентной экономики любое нефтеперерабатывающее предприятие ставит перед собой целью обеспечение внутреннего и внешнего рынка высококачественными моторными топливами при одновременном снижении издержек на их производство. При этом большое внимание

уделяется процессу компаундирования – процессу получения высокооктановых топлив путём смешения прямогонных фракций с компонентами вторичных процессов переработки нефти, а также с присадками и добавками.

Процесс компаундирования крайне сложен для оптимизации, что объясняется рядом факторов:

- наличием большого числа компонентов;
- отклонениями от аддитивности физико-химических свойств компонентов смесей;
- трудностью создания математических моделей, адекватных процессу в широком диапазоне изменения свойств компонентов;
- постоянным изменением состава сырья [1].

Использование метода математического моделирования на физико-химической основе, реализованного в виде компьютерной системы, позволит производить расчет наиболее целесообразных и экономически выгодных рецептур смешения компонентов для каждой партии бензина. Таким образом, задача повышения эффективности и оптимизации процесса компаундирования на любом предприятии является крайне актуальной как с точки зрения повышения качества продукции, так и с экономической точки зрения.

На кафедре Химической технологии топлива и химической кибернетики ТПУ предложен новый подход к расчету процесса приготовления товарных бензинов с использованием компьютерной моделирующей системы. Выявлено, что имеет место различие свойств индивидуальных компонентов в свободном состоянии и в смеси их с другими углеводородами, вследствие того, что атомы и молекулы взаимно влияют друг на друга, изменяя свои свойства. Проведенный анализ влияния межмолекулярных взаимодействий компонентов смеси на неаддитивность их свойств позволил учитывать особенности заводских технологий и состава перерабатываемого сырья [2, 3].

В модели процесса компаундирования учитывается неаддитивность физико-химических свойств углеводородных потоков в процессе их смешения, что приводит к изменению конечного октанового числа смеси:

$$ОЧ_{см} = \sum_{i=1}^n (ОЧ_i \cdot C_i) + B; B = \frac{1}{100} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=2}^n B_i B_j C_i C_j; B_i = \alpha (D_i / D_{max})^n. \quad (1)$$

где  $ОЧ_{см}$  – октановое число смешения бензинов;  $C_i$  – концентрация  $i$ -го компонента, отн. ед.;  $B_i, B_j$  – величины, характеризующие склонность  $i$ -й молекулы к межмолекулярному взаимодействию с  $j$ -й молекулой;  $\alpha$  и  $n$  – кинетические параметры, определяющие интенсивность межмолекулярных взаимодействий в зависимости от дипольного момента  $D$ ;  $D_{max}$  – максимальный дипольный момент молекул углеводородов.

Однако неаддитивность при смешении проявляют не только углеводороды бензиновой фракции, но и добавки и присадки, вовлекаемые в процесс компаундирования, в силу их полярности. На основе механизма действия присадок, который заключается в разрушении пероксидов, была разработана математическая модель процесса компаундирования, учитывающая влияние антидетонационных присадок на прирост октанового числа базового бензина:

$$ОЧ_i = ОЧ_0 + П \cdot \Delta ОЧ_{max} \cdot (1 - e^{-K_{эф} \cdot C_{пр}}); C_{пр} = C_i / C_{max}. \quad (2)$$

где  $P$  – величина, характеризующая приемистость разного типа топлива к присадке;  $K_{эфф}$  – коэффициент эффективности присадки;  $C_{пр}$  – приведенная концентрация присадки, равная отношению концентрации присадки  $C_i$  к максимально допустимой концентрации присадки в бензине  $C_{max}$ .

На основе данной методики была разработана моделирующая система «Compounding», позволяющая рассчитать октановые числа товарных бензинов, полученных методом компаундирования.

Поскольку разработанная компьютерная моделирующая система предназначена для расчета процесса компаундирования различных нефтеперерабатывающих заводов, возникает объективная необходимость в формировании единой формы представления входной информации. Для этой цели в программе «Compounding» присутствует блок автоматизированной обработки хроматограмм, позволяющий автоматически систематизировать информацию о составах потоков, полученных после хроматографического анализа. В процессе систематизации происходит агрегирование компонентов, основным принципом которого является схожесть углеводородов по структуре и детонационной стойкости. Основой систематизации является список №1, содержащий 69 компонентов, распределение по группам которых представлено в табл. 1.

Таблица 1

Содержание блока автоматизированной обработки хроматограмм

Группы компонентов	Список №1	Список №2
н-парафины	8	10
и-парафины	36	39
Олефины	0	32
Нафтены	19	15
Ароматические соединения	9	14
<b>ИТОГО</b>	<b>69</b>	<b>110</b>

На основе данного списка происходит обработка данных хроматографического анализа, определение концентраций всех имеющихся углеводородов и дальнейший расчет октановых чисел потоков. Математическая модель данного процесса учитывает покомпонентный и групповой углеводородный состав и межмолекулярные взаимодействия компонентов смеси. Однако, как можно видеть в табл. 1, имеющийся список не содержит олефиновых углеводородов. Вместе с тем, олефины, молекулы которых также являются полярными, крайне склонны к межмолекулярным взаимодействиям, что приводит к отклонению от аддитивности октановых чисел смеси.

Важно отметить, что олефиновые углеводороды в значительных количествах содержатся в продуктах процессов глубокой переработки нефти, таких как каталитический крекинг и коксование, вовлечение которых в производство товарных бензинов растет с каждым годом. Например, содержание олефинов в бензинах каталитического крекинга может достигать до 40%, в свою очередь, бензины каталитического крекинга вовлекаются в процесс компаундирования в количестве порядка 20%.

Таким образом, олефины вносят существенный вклад в конечное октановое число бензина, которым нельзя пренебрегать. Учитывая это влияние, необходимым является расширение списка компонентов для формализованной обработки данных хроматографического анализа.

Процесс расширения списка компонентов для создания модуля автоматической обработки данных хроматографического анализа включал в себя следующие этапы:

### **Этап 1. Составление «глобального» списка.**

На данном этапе был проведен анализ углеводородного состава потоков, вовлекаемых в процесс компаундирования на основе данных хроматографического анализа. В процессе исследования рассмотрены хроматограммы различных потоков, каждая из которых включала в себя список компонентов в порядке увеличения количества атомов углерода в молекулах.

Всего в анализ было включено 7 наиболее распространенных потоков, вовлекаемых в производство автомобильных бензинов: бензин каталитического риформинга с движущимся слоем катализатора (д/с); бензины каталитического крекинга №1 и №2; бензин каталитического риформинга с неподвижным слоем катализатора (н/с); алкилат; бензин газовый; изомеризат. Все вещества, встречающиеся в хроматограммах этих потоков, были сведены в общую таблицу.

### **Этап 2. Упорядочение списка.**

Полученный «глобальный» список компонентов был упорядочен и формализован, исходя из групповой принадлежности углеводородов, в порядке увеличения числа атомов углерода. Концентрации компонентов, в различных потоках, были расположены по уменьшению.

### **Этап 3. Формализация компонентов.**

На данном этапе работы был создан расширенный список компонентов, включающий в себя, помимо присутствовавших в нем ранее углеводородов также олефины.

Агрегирование компонентов осуществлялось на основе четырех критериев:

- групповая принадлежность углеводородов;
- близость концентраций;
- близость углеводородной структуры молекул;
- близость октановых чисел компонентов.

Имея в распоряжении список индивидуальных компонентов, число которых достигало двухсот, необходимо было формализовать их таким образом, чтобы список был минимально возможным по количеству компонентов, но вместе с тем позволяющим точно рассчитывать октановые числа потоков. Таким образом, был сформирован окончательный расширенный список компонентов, согласно которому будет происходить автоматизированная систематизация данных хроматографического анализа.

Список №2 включает в себя 110 компонентов, в том числе олефиновые углеводороды (табл. 1). На основе составленного набора компонентов был создан программный модуль автоматизированной обработки данных хроматографического анализа.

Основной блок программы разработан в среде Borland «Delphi 7», где имеется возможность разрабатывать удобный для пользователя интерфейс в короткие сроки, не теряя при этом его функциональности. При создании программного модуля применялись функциональные элементы String Grid, позволяющие хранить и обрабатывать информацию об углеводородах, входящих в состав потоков и их концентрациях, в виде таблиц.

С использованием разработанной моделирующей системы, дополненной блоком автоматизированной обработки хроматограмм, были разработаны рецептуры смешения бензинов марок Премиум-95 и Супер-98, соответствующие современным требованиям, предъявляемым к качеству бензинов классов Евро-3, Евро-4 и Евро-5 (табл. 2).

Таблица 2

## Рецептуры смешения бензинов марок Премиум-95 и Супер-98

Потоки	Содержание потока, мас. %			
	Премиум-95			Супер-98
	Евро-3	Евро-4	Евро-5	Евро-5
Риформат д/с №3	28	28	27	29
Алкилат №2	20	19	16	25
Бензин газовый	5	4	5	–
Бензин кат.крекинга №1	–	25	–	–
Бензин кат.крекинга №2	25	–	28	25
Изомеризат	22	20	20	15
МТБЭ	–	4	4	6
Характеристики бензина				
ОЧИ	95,9	95,2	95,9	98,2
Содержание бензола, мас. %	1	0,96	0,99	1,01
Содержание ароматики, мас. %	29,22	29,07	29,16	29,84
Содержание олефинов, мас. %	6,01	5,04	6,6	4,95

Основными критериями, согласно которым осуществлялась разработка рецептур смешения бензинов, являлись экологические требования, предъявляемые к различным маркам топлив, а также стоимость компонентов и наличие их на предприятии. Так, наиболее дорогостоящими являются продукты процессов алкилирования и изомеризации, однако они не содержат бензола, ароматических и олефиновых углеводородов, что делает их наилучшим сырьем для компаундирования.

При составлении рецептур бензинов вовлекалось как можно большее количество риформатов, вследствие их большого количества на предприятии, и наименьшее количество антидетонационных присадок, в частности, метилтретбутилового эфира (МТБЭ), в связи с высокой стоимостью и необходимостью экономии данного компонента.

### Выводы

1. В ходе работы была создана методика агрегирования компонентов, входящих в состав бензинов, на основе групповой принадлежности углеводородов, близости углеводородной структуры молекул, а также октановых чисел и концентраций.
2. С использованием данной методики был составлен расширенный формализованный список, состоящий из 110 компонентов, вносящих основной вклад в формирование октанового числа бензинов. На основе списка был разработан модуль автоматизированной обработки данных хроматографического анализа, который в совокупности с программой «Compounding» позволяет точно рассчитывать детонационные характеристики бензина, реагировать на изменение состава сырья, а также варьировать рецептуры смешения и вырабатывать рекомендации по вовлечению в компаундирование различного по составу сырья.
3. Точность рецептур, разработанных использованием моделирующей системы, дополненной блоком автоматизированной обработки хроматограмм, обеспечивает экономию дорогостоящих компонентов бензинов, таких, как продукты установок изомеризации и алкилирования и антидетонационные присадки. В конечном итоге это позволит нефтеперерабатывающему предприятию иметь существенный

экономический эффект за счет уменьшения запаса по качеству товарных продуктов.

### Литература

1. Лисицын Н.В., Гошкин В.П., Поздяев В.В., Кузичкин Н.В. Методология построения системы оптимального компаундирования товарных нефтепродуктов // Химическая промышленность. – 2003. – № 8. – С. 15–20.
2. Смышляева Ю.А., Иванчина Э.Д., Кравцов А.В., Зыонг Ч.Т., Фан Ф. Разработка базы данных по октановым числам для математической модели процесса компаундирования товарных бензинов// Известия Томского политехнического университета. – 2011. – Т. 318, № 9. – С. 75–80.
3. Киргина М.В., Иванчина Э.Д., Долганов И.М., Смышляева Ю.А., Кравцов А.В., Фан Фу. Моделирование процесса приготовления товарных бензинов на основе учета реакционного взаимодействия углеводородов сырья с высокооктановыми добавками // Нефтепереработка и нефтехимия. Научно-технические достижения и передовой опыт. – 2012. – №4. – С. 3–8.

УДК 631.841

### КИНЕТИКА НЕЙТРАЛИЗАЦИИ РАСТВОРОВ ПОЛУЧЕННЫХ АЗОТНОКИСЛОТНОЙ ОБРАБОТКОЙ ОБЕДНЕННЫХ ФОСФОРИТОВ

Рыщенко И.М., Савенков А.С., Белогур И.С., Свергунова В.А.

\*Николенко Н.В., \*Калашникова А. Н.

### КИНЕТИКА НЕЙТРАЛІЗАЦІЇ РОЗЧИНІВ ОТРИМАНІХ АЗОТНОКИСЛОТНОЇ ОБРОБКИ З ЗБІДНЕНИХ ФОСФОРИТІВ

Рищенко І.М., Савенков О.С., Белогур І.С., Свергунова В.А.

\*Ніколенко М.В., \*Калашникова А. М.

### KINETICS OF NEUTRALIZATION NITRIC ACID SOLUTIONS DERIVED FROM PHOSPHATE-DEPLETED

Ryshchenko I.M., Savenkov O.S., Belohhur I.S., Sverhhunova V.A.

\*Nikolenko M.V., \*Kalashnikova A. M.

Национальный технический университет «ХПИ», г. Харьков, Украина

[savenkov@kpi.kharkov.ua](mailto:savenkov@kpi.kharkov.ua)

\*Украинский Днепропетровский химико-технологический университет, г. Днепропетровск, Украина

[n\\_nikolenko@ukr.net](mailto:n_nikolenko@ukr.net)

*Предложено при анализе переработки низкосортных руд и концентратов и анализе реакций, протекающих в таких многокомпонентных системах, учитывать ионное равновесие в нейтрализованных растворах. Проведены теоретические и экспериментальные*