

ратурные свойства экспериментальным и расчетным методом.

При проведении испытаний использовался прибор – измеритель низкотемпературных показателей нефтепродуктов ИНПН SX-800.

Так как дизельное топливо является сложной дисперсной многокомпонентной системой и с учетом того, что на низкотемпературные свойства дизельного топлива наибольшее влияние оказывает массовое содержание парафинов нормального строения, была принята математическая зависимость влияния концентрации депрессора на низкотемпературные свойства дизельного топлива, на основании которой был произведен расчет температуры застывания для каждого исследуемого образца.

При расчете на модели были получены значения температур застывания (T_z) для образцов дизельных фракций, в зависимости от концен-

трации присадки. В таблице 1 приведены значения температур, полученных при расчете на модели, а также полученные экспериментальным методом.

При анализе таблицы 1 делаем вывод, что погрешность при расчете температуры застывания топлива в среднем составляет не более 2°C для образцов дизельных фракций и не более $1,7^\circ\text{C}$ для образцов газойлевых фракций, что подтверждает возможность ее использования для прогнозирования низкотемпературных характеристик дизельного топлива различного углеводородного состава при добавлении присадки в различных концентрациях. А также для подбора оптимальных концентраций присадки с целью получения дизельного топлива, соответствующего стандартам ГОСТ 305-2013 «Топливо дизельное. Технические условия» [2].

Список литературы

1. Воробьев Ю.В., Дунаев А.В. *Способ улучшения низкотемпературных свойств нефтепродуктов, в том числе дизельного топлива и рабочих жидкостей гидросистем, 2017.*
2. *ГОСТ 305-2013 «Топливо дизельное. Технические условия».*

ИССЛЕДОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРИСАДОК И ДОБАВОК НА ЭКСПЛУАТАЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МОТОРНЫХ ТОПЛИВ

Н.Д. Радченко, Д.М. Нелюбова

Научный руководитель – к.т.н., доцент М.А. Самборская

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, radchenkonad@mail.ru

Глобальные проблемы, связанные с загрязнением воздуха, изменением климата и невозобновляемостью топливных ресурсов, требуют от автомобильной промышленности значительного повышения эффективности работы двигателей внутреннего сгорания.

Поскольку обычные виды топлива, будь то дизельное или бензиновое, представляют собой сложные смеси различных соединений, полное описание и моделирование химии их горения в настоящее время недоступно. Именно поэтому суррогаты, содержащие ограниченный набор соединений, используются для имитации поведения реальных топлив в процессах эксплуатации, хранения и транспортировки.

Октановые числа рассчитываются с помощью сопоставления детонационной стойкости испытуемого топлива со стойкостью смесей н-гептана и изооктана, где концентрация выражена в объемных долях жидкости. Тем не менее, давно известно, что правила смешения, которые основаны на аддитивности по объемным долям жидкости, имеют ограниченную репрезентативность [1].

Цель работы – исследование детонационной стойкости суррогатных и реальных топлив, в т.ч. с октаноповышающими добавками.

Для достижения цели выполнены исследования свойств реальных и суррогатных топлив различного состава. Исследовано влияние антидетонационных добавок (АД) на октановое

число суррогатных топлив, разработано правило смешения, позволяющие выполнить точный прогноз детонационной стойкости. Выполнена проверка полученных закономерностей для образцов реального топлива на примере прямогонных бензиновых фракций и бензиновых фрак-

ций вторичных процессов. Предложен подход к расчету октановых чисел моторных топлив с добавками, что дает возможность вести поиск новых компонентов, получать оптимальные рецептуры на ограниченном наборе экспериментальных данных.

Список литературы

1. Knopa V., Loosb M., Pera C., Jeuland N. A linear-by-mole blending rule for octane numbers of *n*-heptane/iso-octane/toluene mixtures. *Fuel*, 2014. – 115: 666–673.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РЕАКЦИЙ ПРОЦЕССА ГИДРООЧИСТКИ ВАКУУМНОГО ГАЗОЙЛЯ

Е.Р. Самойлов¹, А.Д. Афанасьева¹, Т.А. Калиев^{1,2}

Научный руководитель – д.т.н., профессор Е.Н. Ивашкина¹

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30

²ТОО «Павлодарский нефтехимический завод»
Казахстан, г. Павлодар, vafand@mail.ru

Каталитический крекинг – важнейший процесс нефтепереработки, в ходе которого получают различные продукты, например, топливные фракции. Но для того, чтобы получаемая продукция соответствовала стандартам качества, необходима очистка сырья каталитического крекинга. Эту задачу решает процесс гидроочистки, в ходе которого уменьшается содержание в сырье гетеросоединений, а также металлорганических соединений.

Одной из важных задач химико-технологического производства является оптимальная эксплуатация процессов и катализаторов. И решением являются математические модели, для создания которых, в первую очередь, проводятся исследования, направленные на установление кинетических и термодинамических закономерностей протекающих химических реакций.

Целью данной работы является установление термодинамических закономерностей процесса гидроочистки вакуумного газойля на основе расчета основных параметров реакций с участием углеводородов ряда C_{28} и C_{40} , содержащих гетероатомы.

Для достижения поставленной цели необходимо проанализировать химизм процесса гидропереработки и установить физико-химические закономерности химических реакций гидроочистки.

В результате анализа литературных данных выяснилось, что основную массу серо- и азотсодержащих соединений вакуумного газойля представляют бензотиофен, дибензотиофен, пиридин, хинолин и акридин. Именно для этих соединений был проведен расчет термодинамических параметров, с помощью которых можно судить о возможности протекания химических реакций в условиях проведения промышленного процесса гидроочистки.

Расчет термодинамических параметров проводился в программе Gaussian, которая реализует метод DFT – Density Functional Theory [2]. Результаты расчета приведены ниже.

Энергии Гиббса реакции гидрирования пиридина до соответствующего алкана состава C_{28} составляет $-131,77$ кДж/моль, а для C_{40} – $-132,75$ кДж/моль. Гидрирование хинолина происходит с получением этилбензола с энергией Гиббса у C_{28} составляет $-73,07$ кДж/моль, у C_{40} – $-76,52$ кДж/моль. Восстановление акридина водородом до дифенила состава C_{28} с энергией Гиббса $-53,32$ кДж/моль, а состава C_{40} с энергией Гиббса $-63,65$ кДж/моль.

Энергии Гиббса реакции гидрирования бензотиофенов до соответствующих R-бензолов для состава C_{28} составляет $-109,34$ кДж/моль и для C_{40} – $-112,56$ кДж/моль. Гидрирование дибензотиофенов происходит до соответству-