

модели газификатора рассчитана зависимость температур в зонах окисления и конверсии от интенсивности циркуляции шлака. Установлено, что по мере уменьшения циркуляции шлака температура в зоне конверсии уменьшается, а в зоне окисления увеличивается. Минимально допустимая циркуляция шлака и в этом случае устанавливается по известной температуре затвердевания теплоносителя.

При реализации описанной схемы газификации получается 630 нм³/т угля чистого синтез – газа состава % (об): H₂ – 52,69, CO₂ – 5,34, CO – 41,97 и серосодержащего газа 160 м³/т угля состава % (об): H₂ – 67,42, N₂ – 7,72, CO – 20,42, H₂S – 4,44. Оба эти газа могут быть использованы для химического синтеза метанола или углеводородов (синтез Фишера – Тропша). Необходимое для этого стехиометрическое соотношение H₂:CO 2:1 достигается традиционным способом – по реакции водяного газа. Чистый газ с содержанием серы 50 – 60 ppm при этом может быть доочищен от примесей сероводорода адсорбцией на цинковых поглотителях. Серосодержащий газ предварительно необходимо отмывать от сероводорода, например, моноэтаноламином. Если в зону конверсии добавить воздух, с тем, чтобы получить в синтез – газе соотношение (CO+H₂):N₂ 3:1, то этот газ может быть использован в синтезе аммиака.

1. Гликин М.А. Газификация углей в расплаве. Кинетика и технология / М.А. Гликин, Е.И. Зубцов, И.М. Гликина, В.Ю. Тарасов // Хімічна промисловість України. – 2008. – №3. – С. 24 – 32.
2. Свидетельство Российского Агентства Интеллектуальной Собственности №950424 от 30.10.95.

РАСЧЕТ СВОЙСТВ НЕФТЕПРОДУКТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Шмелев А.С., Соловьев-Щедрин К.Н.

Институт химико-технологического проектирования

При исследовании и проектировании процессов нефтепереработки нефть и нефтепродукты рассматриваются обычно как смеси непрерывного состава, т.е. состоящие из бесконечного числа компонентов.

Если расположить эти компоненты в порядке возрастания какого-либо параметра, характеризующего их свойства, то зависимость содержания компонентов в смеси от выбранного свойства называется функцией распределения состава по заданному параметру. В качестве параметров функции распределения используются молекулярный вес, соотношение углерода и водорода в компоненте, нормальная температура кипения, которая и является наиболее распространенным параметром.

Экспериментально функция распределения состава нефтепродукта по температуре кипения может быть получена ректификацией его на колонке с высокой разделяющей способностью при большом флегмовом числе, так называемой разгонкой по ИТК (Рис. 1). Результаты этой разгонки, представляемые графиком зависимости $de/dT = f(T)$ (Рис. 2), где e – доля отгона нефтепродукта, а T – температура в кубе колонны, интерпретируются как функция распределения.

Другая более практичная форма представления функции распределения – ее гистограмма (Рис. 3), для построения которой интервал существования функции разбивается на заданное количество фрагментов и определяется площадь под кривой каждого фрагмента. Эти фрагменты интерпретируются как псевдокомпоненты со свойствами ближайшего по температуре кипения углеводорода, а содержание их в нефтепродукте ассоциируется с площадью фрагмента. К копируемым для псевдокомпонента свойствам из найденного углеводорода относятся: молекулярная масса, критические параметры, коэффициенты уравнений температурнозависимых свойств и т.д. Таким образом

формулируется задача в классической постановке для дискретной смеси и решается известными методами.

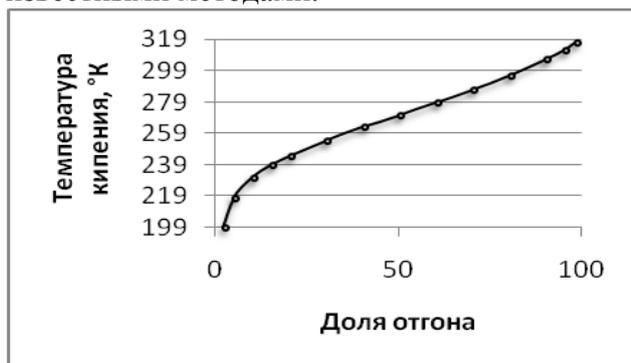


Рис. 1 Кривая выкипания ИТК

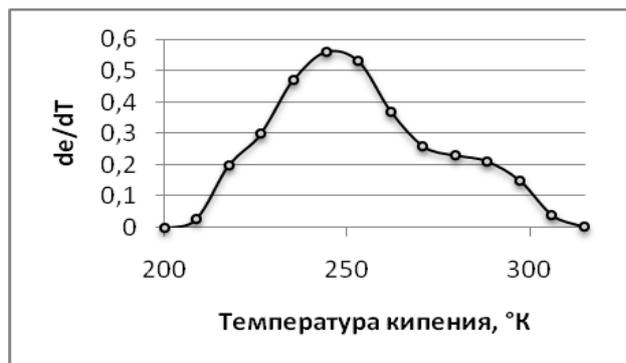


Рис. 2 Функция распределения

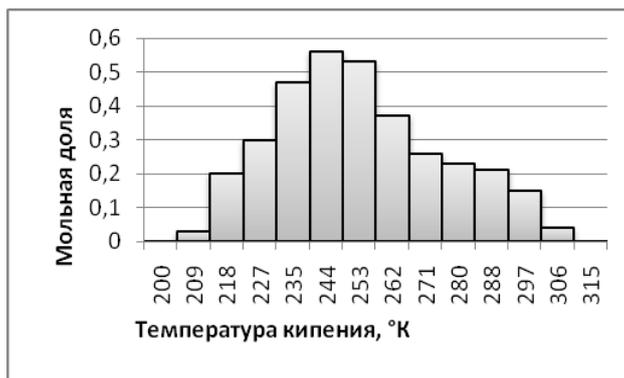


Рис. 3 Гистограмма функции распределения

Разгонка по ИТК – процесс длительный и трудоемкий, чаще выполняется разгонка по Энглеру (ASTM D86). Известны эмпирические формулы для пересчета данных Энглеровской разгонки в данные ИТК с последующим построением гистограммы функции распределения [1]. Воспроизведение расчетом разгонки по Энглеру моделируемого таким образом нефтепродукта экспериментальных данных часто недостаточно удовлетворительно. Уточнение модели минимизацией суммы квадратов расхождений расчета и эксперимента вариацией содержания псевдокомпонентов в смеси оказалось плохим из-за полиэкстремальности функции отклика, устранить которую иногда удается снижением числа параметров модели.

С этой целью испытано представление функции распределения аналитическим выражением в виде:

$$f(T) = \sum_{i=1}^n a_i e^{-x_i^2}$$

где $x_i = \frac{T-T_{0i}}{\Delta T_i}$; $a_i = \frac{C_i}{\Delta T_i}$; T_{0i} – положение i -й гауссианы функции распределения; ΔT_i – ширина i -й гауссианы функции распределения; C_i – концентрация i -й гауссианы функции распределения.

Воспроизведение экспериментальных данных в этом случае вполне удовлетворительно.

Все вышеизложенное реализовано в виде комплекса программ, входящего в состав САХТО – Системы автоматизованих хіміко-технологічних обчислювань. При выборе свойств псевдокомпонентов используется САХТО-БАНК[2].

1. API Technical Data Book – 1997.

2. В.И. Мирошниченко, А.С. Шмелев «САХТО-БАНК – банк данных для расчета свойств индивидуальных веществ при заданных условиях». Материалы настоящей конференции.