**Кинетическое моделирование пиролиза этановой фракции с ингибированием коксообразования**

***Столярова П.С.***

*Студент, 2 курс магистратуры*

*РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, Москва, Россия*

*E-mail:* *stolyarova.p@gubkin.ru*

Термический пиролиз углеводородного сырья занимает центральное место на нефтегазохимическом производстве. Подбор оптимальных параметров проведения пиролиза позволяет варьировать состав продуктов, увеличивая выход этилена, пропилена или жидких продуктов, а также снижать коксообразование, являющееся одной из ключевых проблем процесса.

Существующие кинетические модели, основанные на упрощенных молекулярных схемах, позволяют довольно быстро оценить ключевые показатели, однако зачастую в них пренебрегают процессами коксообразования [1]. В связи с чем в данной работе поставлена цель, заключающаяся в разработке кинетической модели пиролиза с учетом процесса коксообразования, а также его ингибирования с помощью серосодержащих соединений. В качестве сырья выбрана этановая фракция, так как она является весьма перспективным сырьем для термического пиролиза благодаря своей способности обеспечивать высокий выход целевых продуктов, таких как этилен.

Моделирование проводилось в среде MATLAB. Предложенная молекулярная схема реакций состоит из 13 реакций. В основе вычислений лежат решения трех уравнений для каждого компонента, а именно уравнений массопереноса, теплопереноса и гидравлических потерь (1)-(3):

$\frac{dF\_{i}}{dx}=\left(\sum\_{j}^{}ν\_{im}r\_{m}\right)Ω $ (1)

$\sum\_{i}^{ }F\_{i}.c\_{p,i}.\frac{dT}{dx}=ωq+Ω\left(\sum\_{i}^{}R\_{i}\left(-Δ\_{f}H\_{i}^{0}\right)\right)$ (2)

$-\frac{dp\_{t}}{dx}=\left(\frac{2f}{d\_{t}}+\frac{ζ}{πr\_{b}}\right)ρu^{2}+ρu\frac{du}{dx} $ (3)

где $F\_{i}$ – молярный расход i-ого компонента, $x$ – координата по длине, $r\_{m}$ – скорость реакции m, $ν\_{im}$ – стехиометрический коэффициент i-ого компонента в реакции m, $Ω$ – площадь поперечного сечения, $T$ – температура, $c\_{p,i}$ – удельная теплоемкость i-ого компонента при температуре $T$, $ω$ – диаметр реактора, $q$ – тепловой поток к реакционной смеси, $R\_{i}$ – скорость образования i-ого компонента, $Δ\_{f}H\_{i}^{0}$ – стандартная энтальпия образования i-ого компонента, $p\_{t}$ – общее давление, $f$ – коэффициент трения Фаннинга, $d\_{t}$ – диаметр трубы реактора, $r\_{b}$ – радиус кривизны колена пирозмеевика, $ζ$ – коэффициент Некрасова для изгибов, $ρ$ – плотность реакционной смеси; $u$ – линейная скорость потока.

Для оценки влияния ингибитора на коксообразование построена модель, в которой кинетические параметры коксообразования скорректированы в зависимости от применяемого ингибитора и его количества. При этом эффективность снижения коксообразования и выхода монооксида углерода основывалась на экспериментальных данных по исследованию серосодержащих ингибиторов таких как диметилдисульфид (ДМДС), диметилсульфид (ДМС) и диметилсульфоксид (ДМСО) [2].

Разработанная модель пиролиза применялась с исходными данными, взятыми с установки пиролиза этановой фракции мощностью 18 т/ч по этилену.

**Литература**

1. Жагфаров Ф.Г., Столярова П.С., Карпов А.Б. Кинетические модели пиролиза с ингибированием коксообразования / // Научный журнал Российского газового общества. – 2024. – № 4(46). – С. 36-43.

2. Karpov A.B., Zhagfarov F.G., Gyulmaliev A.M. Assessment of Kinetic Indicators of Coke Formation in the Course of Steam Cracking with the Use of Inhibitors // Solid Fuel Chemistry. – 2023. – Vol. 57, No. S1. – P. 6-11.