**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*](mailto: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):

(1)

(2)

(3)

где – молярный расход i-ого компонента, – координата по длине, – скорость реакции m, – стехиометрический коэффициент i-ого компонента в реакции m, – площадь поперечного сечения, – температура, – удельная теплоемкость i-ого компонента при температуре , – диаметр реактора, – тепловой поток к реакционной смеси, – скорость образования i-ого компонента, – стандартная энтальпия образования i-ого компонента, – общее давление, – коэффициент трения Фаннинга, – диаметр трубы реактора, – радиус кривизны колена пирозмеевика, – коэффициент Некрасова для изгибов, – плотность реакционной смеси; – 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.