

Д. С. Корнеев, М. К. Котванова

**КОМПЬЮТЕРНЫЙ АНАЛИЗ И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ
ПРОЦЕССОВ НЕФТЕ- И ГАЗОПЕРЕРАБОТКИ**

Статья представляет собой обзор научных работ профессора А. А. Новикова. Показаны возможности и перспективы компьютерного моделирования промышленных процессов нефте- и газопереработки, предложенного профессором А. А. Новиковым. Представлены результаты по физико-химическим свойствам и составу нефтей Западной Сибири, использование которых позволяет выбрать наиболее эффективные и рациональные способы их добычи, транспортировки и переработки.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, прогнозирование, попутный нефтяной газ, нефтепереработка, фракционный состав нефти.

D. S. Korneev, M. K. Kotvanova

**COMPUTER ANALYSIS AND
OF OIL AND GAS REFINING PROCESSES**

The article is a review of the scientific works of Professor A. A. Novikov. The possibilities and prospects of computer simulation of industrial operations of oil and gas processing, proposed by Professor A. A. Novikov are shown. The results on the physicochemical properties and composition of oils from Western Siberia are presented. Use of them makes it possible to choose the most efficient and rational ways of extraction, transportation and oil processing.

Keywords: computer simulation, forecasting, associated petroleum gas, oil refining, fractional composition of oil.

Новиков Александр Автономович – доктор химических наук (2002 г.), профессор, член-корреспондент Российской Академии Естествознания, заведующий кафедрой химии Югорского государственного университета (2004–2013 гг.), проректор по научной работе ЮГУ (2013–2015 гг.). Научно-педагогическая деятельность Новикова А. А. связана с физической и инженерной химией процессов нефте- и газопереработки, нефтехимии. Новиков А. А. является одним из создателей общей методологии комплексного компьютерного анализа промышленных процессов нефте- и газопереработки, которая используется в научно-прикладных работах по повышению эффективности действующих производств, при подготовке инженеров-химиков и в специальных курсах повышения квалификации инженерно-технического персонала промышленных предприятий.

В России попутный нефтяной газ (ПНГ) начали сжигать на факелах в 1960-е годы в период открытий крупных залежей нефти в Западной Сибири. Сегодня этот метод утилизации признан самым неэффективным и экологически опасным, однако он до сих пор применяется не только в России, но и во всем мире. Система штрафов за сжигание ПНГ более 5 % от объема добычи, введенная в России еще в 2012 г., дала положительные результаты, однако к 2020 году сжигание сократилось лишь до 18 % от объема добываемого ПНГ. Проблема утилизации ПНГ остается на сегодняшний день одной из самых актуальных. Полезную утилизацию, в принципе, можно осуществить двумя способами: переработкой на газоперерабатывающих заводах, поскольку ПНГ представляет собой ценное углеводородное сырье, или его использованием

для внутрипромысловых нужд. И то, и другое, безусловно, способствует решению экологических проблем.

Первой стадией превращения ПНГ в жидкое топливо и другие химические продукты является получение так называемого синтез-газа (смеси монооксида углерода и водорода). Получение синтетических углеводородов из синтез-газа представляет собой сложный процесс (процесс Фишера-Тропша), сочетающий в себе каталитические и полимеризационные стадии: адсорбцию реагентов на поверхности катализатора; образование активных частиц; рост углеводородной цепи; обрыв цепи; десорбцию продуктов с поверхности катализатора; вторичные процессы.

Традиционные технологические схемы утилизации ПНГ, к сожалению, характеризуются низкой селективностью. В течение последних лет активно ведется разработка новых, более эффективных катализаторов, совершенствуется конструкция реакторов [1]. При этом для оценки эффективности катализатора, оптимизации и прогнозирования процесса все чаще используют методы математического моделирования, включающего в себя как термодинамический, так и кинетический анализ [2-4]. Работы А.А. Новикова фактически явились пионерскими в области общей методологии комплексного компьютерного анализа промышленных процессов нефте- и газопереработки. Так, в работе [5] проведены моделирование и сравнительный анализ проточной и проточно-циркуляционной схем двухстадийного синтеза жидких углеводородов из ПНГ. Показано, что применение циркуляции ПНГ существенно повышает выход жидких углеводородов. Действительно, использование циркуляционных технологических схем существенно повышает их селективность по целевому продукту, а значит, и экономическую привлекательность.

Кроме того, был предложен модульный компьютерный комплекс [6], позволяющий прогнозировать эффективность процессов переработки ПНГ и управлять реакторными блоками. В качестве исходных данных в комплексе использовались температура, давление, скорость и состав потока синтез-газа, скорость и состав теплоносителя, характеристики катализатора, параметры используемого реактора. Расчеты показали явные преимущества проточного реактора, введение которого снимало основные противоречия, присущие циркуляционным схемам: приближение состава циркуляционного потока к равновесному и, как результат, снижение производительности катализатора.

При разработке общей методологии компьютерного анализа процессов на основе синтез-газа автором описан механизм реакции гидрирования монооксида углерода на активных центрах катализатора [7]. Показано, что основным фактором, определяющим селективность реакций гидрирования СО, является форма активации молекул СО и Н₂, определяемая природой и степенью восстановления атомов металла в составе катализатора, структурой активного центра и характером взаимодействия с промоторами, а также внешними условиями синтеза, в первую очередь температурой и давлением в системе.

Созданный автором компьютерный комплекс технологического сопровождения промышленного синтеза метанола позволил разработать нестационарную модель синтеза на низкотемпературных Zn-Cu-катализаторах [8]. В рамках этой модели проведены анализ и оптимизация технологических параметров промышленного синтеза метанола и активности катализатора.

На протяжении последних десятилетий ключевым центром добычи нефти в Российской Федерации является Западно-Сибирский регион, а именно Ханты-Мансийский автономный округ и северная часть Томской области. В связи с этим важнейшее значение имеет оценка физико-химических свойств и состава нефтей Западной Сибири для установления и систематизации данных о зависимости между этими параметрами с целью выбора наиболее эффективных и рациональных способов их добычи, транспортировки и переработки.

На основании результатов анализа кривых истинных температур кипения (ИТК) установлено, что нефти Томской области и нефти ХМАО принципиально отличаются по фракционному составу. Однако нефти Томской области характеризуются повышенным содержанием дистиллятных фракций. Полученные данные о физико-химических свойствах нефтей Западной Сибири свидетельствуют о повышенных значениях плотности и показателя преломления у

нефтей Томской области. При этом средняя молекулярная масса выше у нефтей месторождений ХМАО. Таким образом, на основании экспериментальных и расчетных данных о групповом углеводородном составе и физико-химических характеристиках исследуемых нефтей (рис. 1 и 2) установлено, что нефти ХМАО богаче алифатическими соединениями, а нефти Томской области – ароматическими, что, в свою очередь, отражается на их физических свойствах [9].

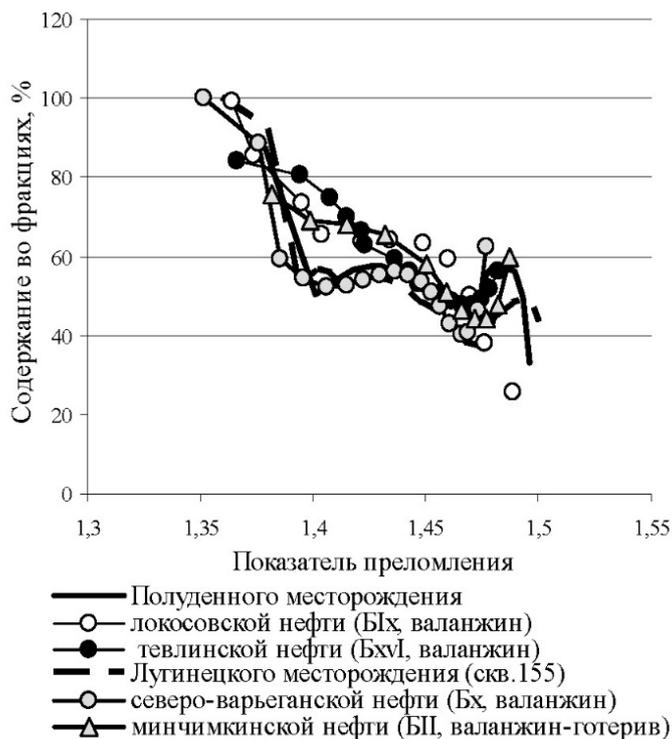


Рисунок 1 – Зависимость показателя преломления нефтей от содержания в них парафиновых углеводородов

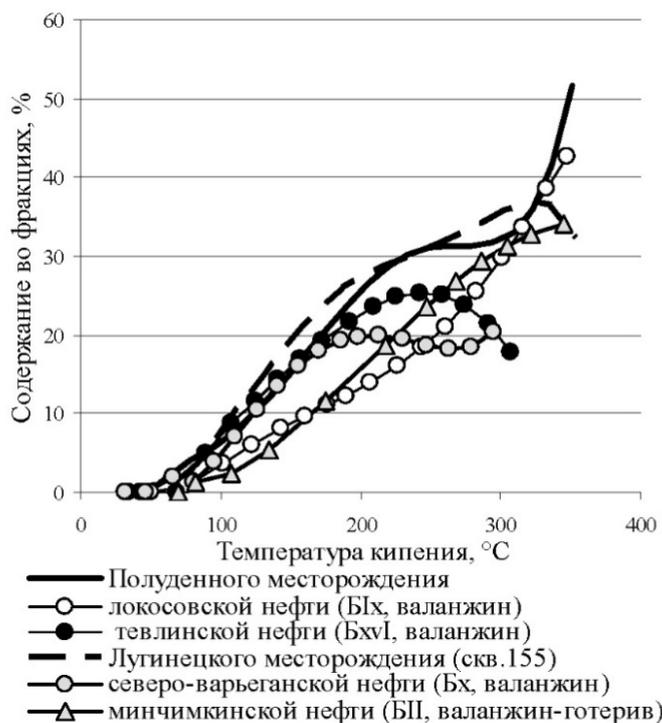


Рисунок 2 – Содержание ароматических углеводородов в различных фракциях нефтей

В рамках исследования взаимосвязи состава нефтей и их физико-химических параметров особое практическое значение имеет разработка и оптимизация методов расчета группового углеводородного состава широких нефтяных фракций. Так, в работах [10, 11] на примере шести нефтей месторождений Западной Сибири, характеристика которых представлена в таблице 1, проведен сравнительный анализ экспериментального (лабораторного) и расчетного методов определения группового углеводородного состава. В качестве расчетного выбран метод n-d-M, основанный на значениях показателя преломления, плотности, молекулярной массы фракции и содержания в ней серы.

Таблица 1 – Физико-химические параметры нефтей

Месторождение	Плотность при 20°C, г/см ³	Молекулярная масса, г/моль	Потенциальное содержание фракций, % мас.			
			НК-200°C	200-350°C	350-400°C	400-500 °C
Лугинецкое	0,8281	172	8,9	30,9	9,0	15,1
Северо-Варьганское	0,8200	190	36,7	29,1	8,3	13,2
Полуденное	0,8498	181	28,9	33,2	10,0	15,4
Тевлинское	0,8508	212	26,2	28,0	9,4	17,5
Локосовское	0,8583	190	21,7	26,7	9,9	20,0
Минчимкинское	0,8950	368	13,3	21,1	7,9	16,0

Полученные результаты указали на существенное рассогласование исследуемых методов, что в первую очередь связано с классическим представлением данных для широких нефтяных фракций. По этой причине предложено представлять фракционный состав нефти в виде узких нефтяных фракций, что позволяет рассматривать их как последовательно-параллельные ряды со стыкующимися интервалами температур кипения в общих пределах 28–300 °C (таблица 2).

Таблица 2 – Групповой углеводородный состав на примере нефти
Лугинецкого месторождения

Диапазон температур кипения, °C	Выход от нефти, % мас.	Содержание углеводородов, % отн.		
		Арены	Нафтены	Парафины
28-60	5,5	0	11	89
60-95	6,7	2	41	57
95-122	5,5	6	38	56
122-150	5,9	10	34	56
150-200	10,4	21	28	51
200-250	9,1	17	38	45
250-300	12,5	20	33	47

Такой подход делает возможным последовательный расчёт содержания в нефтях ароматических, нафтеновых и парафиновых углеводородов в ряду увеличения температуры кипения от 28 до 300 °C. Дополнительная модификация метода n-d-M путем коррекции констант эмпирических формул расчета группового состава нефтей позволила добиться удовлетворительных результатов расчета содержания ароматических, нафтеновых и парафиновых углеводородов.

Как упоминалось выше, исследование состава и физико-химических свойств нефтей и их фракций является первым шагом на пути к поиску эффективных способов переработки углеводородного сырья. В последние годы наряду с классическими для нефтепереработки термическими и термокаталитическими технологиями активно развиваются альтернативные подходы к превращению компонентов нефтей и их фракций в ценные нефтепродукты. Так, в работе [12] исследовано изменение состава нефти в условиях трибохимического воздействия. Приведен гипотетически возможный механизм химических превращений аренов, парафинов, нафтенов и изопарафинов на оксиде алюминия при трибохимическом воздействии. Также изучаются превращения углеводородов в процессе гидродинамической кавитационной обработки. Показано, что такое воздействие на тяжелые нефтяные остатки в присутствии воды и

оксида алюминия снижает температуру конца кипения получаемого продукта за счет деструкции высокомолекулярных компонентов с образованием светлых фракций [13]. Более детальный анализ влияния механохимического воздействия на превращения нефтяных остатков в присутствии оксида алюминия показывает, что в экспериментально установленных оптимальных условиях проведения процесса (концентрация оксида алюминия – 4 % мас., продолжительность механоактивации – 400 с) наблюдается значительное увеличение плотности и вязкости получаемого продукта по сравнению с исходным сырьем (таблица 3). При этом методом хромато-масс-спектрометрии установлено, что содержание н-алканов снижается на 0,3 % мас., а ароматических углеводородов увеличивается практически на ту же величину. Следует отметить, что, несмотря на общее отрицательное влияние механообработки на состав сырья, в ходе процесса образуется некоторое дополнительное количество низкокипящих фракций со значительным снижением температуры начала кипения продукта по сравнению с исходным сырьем.

Таблица 3 – Изменение состава и физико-химических свойств мазута в процессе механохимического воздействия

Параметр	Исходный мазут	Продукт превращения мазута
Плотность при 20 °С, кг/м ³	905,77	941,59
Вязкость кинематическая при 20 °С, мм ² /с	144,75	610,62
Содержание н-алканов, % мас.	8,282	7,981
Содержание аренов, % мас.	1,299	2,272

На основании полученных данных выявлены основные направления превращений углеводородов нефти в процессе механохимической активации: деструкция насыщенных углеводородов, алкилирование ароматических соединений, дегидрирование алкилзамещенных аренов [14].

Для понимания химизма процесса механоактивации проведено лабораторное моделирование превращений углеводородов нефти на примере смеси химически чистых этилбензола и н-декана в условиях, аналогичных предыдущему исследованию. На основании комплексных данных о составе образующихся продуктов предложен механизм превращений углеводородов при механохимическом воздействии, основанный на свободно-радикальных реакциях, инициированных разрывом связей С-С в молекулах н-алканов. При этом процессы деструкции и конденсации протекают в равной степени, а основной реакцией является свободно-радикальное алкилирование ароматических углеводородов продуктами деструкции парафинов [15].

Литература

1. Синева, Л. В. Перспективные тенденции в катализе газохимических процессов: кобальтовые катализаторы синтеза Фишера-Тропша / Л. В. Синева, В. З. Мордкович – Текст : непосредственный // Научный журнал Российского газового общества. – 2019. – № 1. – С. 42–57.
2. Новиков, А. А. Прикладная кинетика процессов на основе синтез-газа / А. А. Новиков. – Томск : Издательство Томского университета, 2001. – 156 с. – Текст : непосредственный.
3. Новиков, А. А. Физико-химическое моделирование оптимальных технологий на основе синтез-газа / А. А. Новиков – Текст : непосредственный // Вестник Югорского государственного университета. – 2006. – № 4. – С. 74–79.
4. Новиков, А. А. Анализ эффективности переработки попутного нефтяного газа при промышленном транспорте скважинной продукции / А. А. Новиков, Н. В. Чухарева – Текст : непосредственный // Нефтегазовые технологии. – 2007. – № 1. – С. 2–5.
5. Новиков, А. А. Оценка эффективности способов переработки попутных нефтяных газов месторождений Западной Сибири / А. А. Новиков, И. М. Федяева – Текст : непосредственный // Вестник Югорского государственного университета. – 2010. – № 4. – С. 73–80.

6. Новиков, А. А. Циркуляционные технологические схемы химической переработки попутного нефтяного газа / А. А. Новиков, И. М. Федяева, Л. Т. Мариамидзе – Текст : непосредственный // Вестник ЮГУ. – 2012. – № 3. – С. 45–49.
7. Новиков, А. А. Оценка эффективности химической переработки попутных нефтяных газов нефтяных месторождений ХМАО-Югры / А. А. Новиков, Л. Т. Назаренко. – Текст : непосредственный // Научный журнал Российского газового общества. – 2015. – № 1. – С. 36–39.
8. Новиков, А. А. Прогнозирование эффективности модифицированных технологий переработки природных и попутных газов / А. А. Новиков, Л. Т. Назаренко. – Текст : непосредственный // Вестник Югорского государственного университета. – 2015. – № 3. – С. 10–13.
9. Новиков, А. А. Сравнительный анализ свойств нефтей месторождений Западной Сибири / А. А. Новиков, И. М. Федяева. – Текст : непосредственный // Вестник Югорского государственного университета. – 2010. – № 4. – С. 81–83.
10. Новиков, А. А. Групповой состав нефтей Западной Сибири / А. А. Новиков, А. Р. Кухмазова. – Текст : непосредственный // Инновации и инвестиции. – 2018. – № 11. – С. 277–280.
11. Новиков, А. А. Модификация метода определения структурно-группового состава нефти / А. А. Новиков, А. Р. Кухмазова. – Текст : непосредственный // Инновации и инвестиции. – 2019. – № 6. – С. 208–210.
12. Превращения углеводородов нефти на оксиде алюминия в условиях трибохимического воздействия / Д. В. Дудкин, М. Г. Кульков, А. А. Якубенюк, А. А. Новиков. – Текст : непосредственный // Технологии нефти и газа. – 2014. – № 2. – С. 39–46.
13. Изменение химического состава тяжелых нефтяных остатков при гидродинамическом кавитационном воздействии / Д. В. Дудкин, А. А. Якубенюк, А. А. Новиков [и др.]. – Текст : непосредственный // Технологии нефти и газа. – 2013. – № 5. – С. 3–8.
14. Переработка нефтяных остатков в условиях механохимического воздействия / Д. В. Дудкин, М. Г. Кульков, Е. Н. Шестакова [и др.]. – Текст : непосредственный // Химия и технология топлив и масел. – 2012. – № 4. – С. 34–38.
15. Превращения углеводородов нефти при механохимическом воздействии / Д. В. Дудкин, М. Г. Кульков, Е. Н. Шестакова [и др.]. – Текст : непосредственный // Химия и технология топлив и масел. – 2012. – № 2. – С. 39–43.