

## ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОМЫШЛЕННОЙ УСТАНОВКИ ПОЛУЧЕНИЯ ЭТИЛБЕНЗОЛА НА ЦЕОЛИТНЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

К.Х. Паппел, И.О. Долганова, С.А. Кошкин

Научный руководитель профессор Е.Н. Ивашкина

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

Алкилирование ароматических углеводородов является крупнотоннажным направлением нефтехимического синтеза. Одним из основных промышленных процессов алкилирования является синтез этилбензола, который широко используется в нефтехимической промышленности в качестве промежуточного продукта при получении стирола, сырья для производства полистирола, АБС-пластиков и синтетических каучуков. В настоящее время мощность мирового производства этилбензола достигает 45 млн. т в год [5].

В настоящее время наблюдается тенденция перевода существующих установок алкилирования на современные твердые цеолитсодержащие катализаторы. По данным на 2004 год в мире эксплуатировались около 70 установок производства этилбензола, из них — 17 с использованием хлорида алюминия, 28 — с применением цеолитных катализаторов в газофазном режиме проведения реакции алкилирования бензола этиленом и еще 25 — в жидкофазном режиме [1].

Математическое моделирование является удобным инструментом оптимизации работы промышленных установок. Такие задачи позволяют решить лишь математические модели, разработанные с учетом термодинамических и кинетических закономерностей реакторных процессов, так как именно они остаются чувствительными к изменению состава сырья и эксплуатационных свойств катализаторов [3].

Целью данной работы является установление термодинамических и кинетических закономерностей процесса алкилирования бензола этиленом на цеолитных катализаторах и создание математической модели установки одного из нефтехимических предприятий России, обладающей высоким прогностическим потенциалом.

На рисунке 1 представлена технологическая схема производства этилбензола, где Р-1 – реактор алкилирования; Р-2 – реактор трансалкилирования; Р-3 – реактивный защитный слой. Поток свежего этилена вводится между первым и вторым, третьим и четвертым, пятым и шестым слоями катализатора.

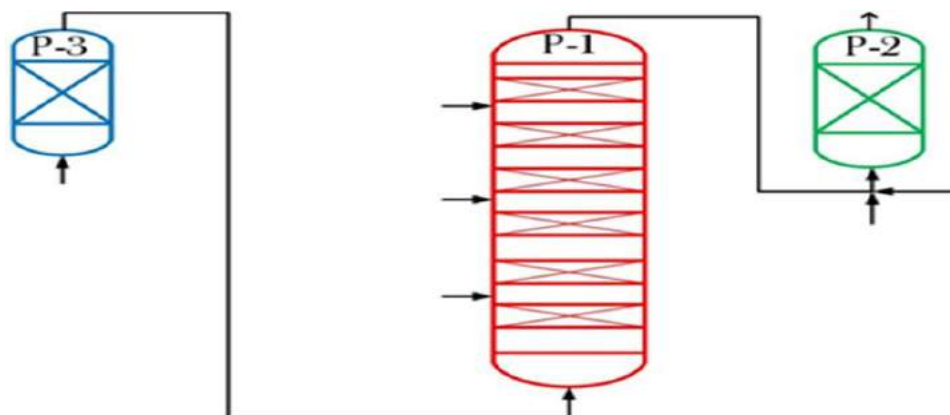


Рис.1. Технологическая схема производства этилбензола

В ходе проделанной работы были определены термодинамические и кинетические закономерности процесса алкилирования бензола этиленом. Расчеты таких величин как энтальпия, энтропия и энергия Гиббса были проведены с использованием метода теории функционала плотности на уровне V3LYP. Этот метод был выбран из-за своей точности по сравнению с эмпирическими методами. Уровень V3LYP является наивысшим среди уровней теории функционала плотности, используемый программой Gaussian, а базисный набор должен быть выбран таким образом, чтобы сохранить управляемость расчетов, но при этом не снизить точность описания физической ситуации.

На основе проведенных расчетов был составлен список возможных реакций, а также схема превращений углеводородов в процессе алкилирования. При составлении схемы реакций, прежде всего, следует руководствоваться имеющимися теоретическими знаниями о процессах алкилирования в промышленности, а также данными, полученными непосредственно с установок алкилирования и информацией, содержащейся в технологических регламентах в части химизма и материального баланса процессов. Схема превращений должна в достаточной степени отражать физико-химическую сущность процесса, а также быть не слишком сложной для возможности ее математической и компьютерной реализации [2].

Исходя из термодинамической вероятности реакций, протекающих в процессе алкилирования, были выделены основные целевые и побочные реакции, на основании чего была составлена формализованная схема превращений веществ в процессе алкилирования бензола этиленом, представленная на рисунке 2. Здесь Б – бензол, ЭБ – этилбензол, ДЭБ – диэтилбензол, ТЭБ – товарный этилбензол, R-Б, R-ЭБ, R-ДЭБ – тяжелые компоненты, имеющие в составе радикалы алканов, ЭБ и ДЭБ.

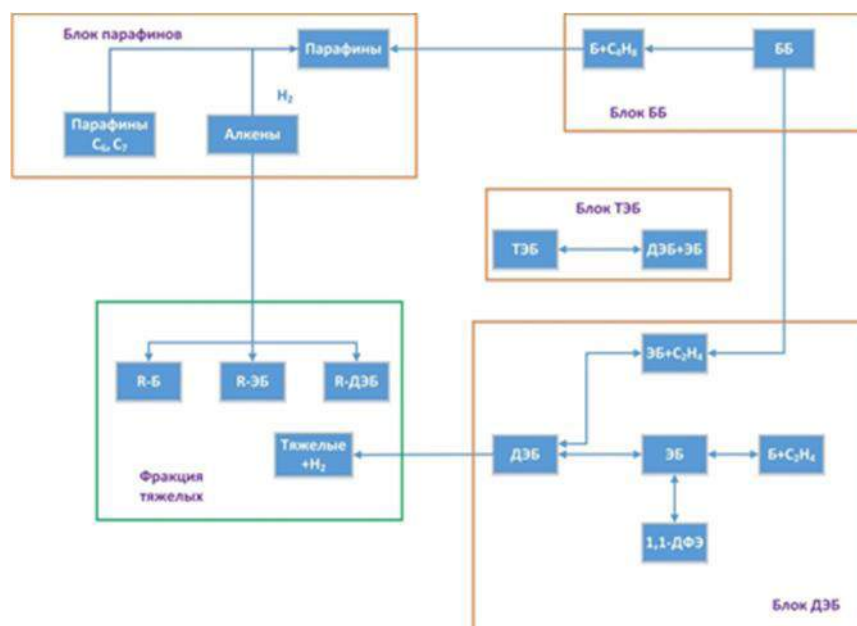


Рис.2. Формализованная схема превращений веществ в процессе алкилирования бензола этиленом

Полученная схема превращений является достаточно детализированной и подробной. При этом по всем веществам, участвующим в превращениях, имеются экспериментальные данные с промышленной установки по их содержанию в исходном сырье и продуктах реакции. Данные факторы позволяют на основе разработанной схемы составить кинетическую, а затем и математическую модель процесса.

Для внедрения математической модели на производстве необходимо реализовать ее в виде технологической моделирующей системы. Программная реализация осуществлена с применением объектно-ориентированной среды программирования Visual Studio [4]. Ее успех в значительной степени объясняется в возможности устанавливать плагины для расширения функциональных возможностей почти на любом уровне, в том числе для поддержки систем контроля исходного кода и новых инструментов для редактирования на предметно-ориентированных языках программирования.

Проверка математической модели на адекватность осуществлялась вычислением среднеквадратичного отклонения концентраций основных веществ расчетных от наблюдаемых. Для проверки модели на адекватность была дополнительно составлена компьютерная модель процесса в программе [Aspen HYSYS](#). Был обработан большой объем экспериментальных данных. Погрешность расчета основных и побочных продуктов составила не больше 10%, что говорит об адекватности созданной модели.

#### Литература

1. Герзелиев И. М., Хаджиев С. Н., Сахарова И. Е. Синтез этилбензола и трансалкилирование бензола диэтилбензолами на цеолитных катализатора // Нефтехимия - Томск, 2010. - №1. - С.40 - 49.
2. Долганова И. О., Белинская Н. С., Ивашкина Е. Н., Мартемьянова Е.Ю. , Ткачев В.В. Повышение эффективности технологии получения этилбензола с использованием метода математического моделирования // Фундаментальные исследования. - 2013 - №. 8-3. - С. 595 - 600.
3. Долганова И.О., Ивашкина Е.Н., Иванчина Э.Д. Математическое моделирование в задачах повышения эффективности работы установки производства линейных алкилбензолов // Известия Томского политехнического университета. - Томск, 2011. - Т. 319. № 3 - С. 109 - 112.
4. Паппел К. Х., Хлебникова Е. С, Ивашкина Е. Н. Моделирование работы промышленной установки получения этилбензола // Переработка углеводородного сырья. Комплексные решения (Левинтерские чтения): материалы Всероссийской научной конференции. - Самара, 2016. - С. 202 - 203
5. Пат. 97120884 Италия. Каталитическая композиция и способ алкилирования и/или пералкилирования ароматических соединений. Заявлено. 11.12.1997; Опубл. 10.09.1999, Бюл. № - 25 с.