

Анализ работы катализатора был проведен с использованием Системы контроля работы катализаторов «Активность». Адекватность математической модели реальному процессу проверялась по значениям октанового числа расчетного и фактического, расхождение не превышает 0,5 п [1].

Из расчетных данных видно, что октановое число в продукте с течением времени остается постоянным (95). Содержание кокса на катализаторе увеличилось – за 4 месяца на 4,36%, что связано с ростом температуры. При этом активность катализатора снизилась с 0,78 до 0,65.

#### Литература

1. Баннов П.Г. Процессы переработки нефти. М: ЦНИИТЭнефтехим. 2001. — 625 с.
2. Костенко А.В., Кравцов А.В., Иванчина Э.Д., Полубоярцев Д.С. Оценка технологических параметров Pt-катализаторов риформинга методом математического моделирования // Нефтепереработка и нефтехимия, 2005. –12. – С. 52–55.
3. Кравцов А.В., Иванчина Э.Д., Костенко А.В., Чеканцев Н.В., Гынгазова М.С. Учет реакционной способности углеводородов и потенциала катализатора в инновационных технологиях мониторинга промышленных процессов риформинга и изомеризации бензинов // Нефтепереработка и нефтехимия, 2008. - №9. – с. 10-16.
4. Интернет-ресурс. URL: [http://www.rosneft.ru/Downstream/refining/Refineries/Kuibyshev\\_Refinery/](http://www.rosneft.ru/Downstream/refining/Refineries/Kuibyshev_Refinery/)
5. Мелехин В.В., Чеканцев Н.В., Шарова Е.С., Кравцов А.В., Иванчина Э.Д., Машкина Е.Н. Мониторинг промышленной установки Л-35-11-450К Комсомольского НПЗ с использованием системы контроля работы катализатора // Нефтепереработка и нефтехимия, 2010. - №12. – с. 16-19.

### ЧИСЛЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА АЛКИЛИРОВАНИЯ БЕНЗОЛА ЭТИЛЕНОМ

**Е.С. Хлебникова, А.В. Беккер, Н.С. Белинская**

Научный руководитель профессор Е.Н. Ивашкина

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия*

Одним из наиболее динамично развивающихся направлений нефтехимической промышленности является получение этилбензола, используемого в качестве промежуточного продукта в производстве стирола, полистирола и синтетических каучуков.

В России этилбензол в промышленности получают путем алкилирования бензола этиленом с использованием катализаторного комплекса  $AlCl_3$ .

В 2012 году на одной из промышленных установок получения этилбензола была произведена реконструкция смесительной камеры перед реактором алкилирования. До реконструкции установки смешение реагентов с катализаторным комплексом осуществлялось в два этапа: 1) свежий и регенерированный катализаторный комплекс смешивались в установочной перед реактором камере; 2) объединенный поток поступал в оборудованный барботажным устройством реактор алкилирования и смешивался с этиленом.

Реконструкция смесительной камеры предполагает дооборудование ее новыми смесительными устройствами, представляющими собой металлические стержни, расположенные непосредственно в камере смешения по ходу движения реакционных потоков, через которые планируется организовать подачу не только катализаторного комплекса, бензола, но и этилена.

Целью данной работы являлось численное исследование процесса алкилирования бензола этиленом и оценка целесообразности реконструкции смесительного оборудования перед реактором установки получения этилбензола с использованием численных методов.

Ранее на кафедре ХТТ была разработана математическая модель процесса алкилирования [1], которая позволяет рассчитывать концентрации основных компонентов продуктовой смеси, а также перепад температуры по реактору.

Диаметр камеры смесителя составляет 0,105 м, длина – 2,45 м. Руководствуясь геометрическими характеристиками аппарата, для дальнейших расчетов была выбрана модель идеального вытеснения. Выражение, описывающее гидродинамическую модель идеального вытеснения [2], имеет вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u \frac{\partial C}{\partial l}, \quad (1)$$

где  $u$  – линейная скорость потока, м/с;  $C$  – концентрация вещества, моль/м<sup>3</sup>;  $t$  – время, с;  $l$  – длина реактора, м.

Допущение о возможности применения модели идеального вытеснения для рассматриваемого смесителя было проверено путем расчета диффузионного и теплового критерия Пекле для потока на входе в смеситель перед реактором алкилирования.

Согласно литературным данным, отношение между критериями Пекле диффузионным и тепловым составляет:

$$Pe_T / Pe_D = 1,05 \div 1,5 \quad (2)$$

В свою очередь, тепловой критерий Пекле можно рассчитать по формуле:

$$Pe_T = \omega \cdot l \cdot c_p \cdot \frac{\rho}{\lambda} = Re \cdot Pr, \quad (3)$$

где  $w$  – скорость потока в смесителе, м/с;  $l$  – определяющий линейный размер смесителя, м;  $c_p$  – теплоемкость смеси, Дж/(кг·°K);  $\rho$  – плотность смеси, кг/м<sup>3</sup>;  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности смеси, Вт/(м·°K),  $Re$  – число Рейнольдса,  $Pr$  – критерий Прандтля.

В качестве исходных данных были использованы данные по составу входного потока в реактор алкилирования (табл.1), массовый расход на входе в смеситель составил 20800 кг/час.

Таблица 1

## Состав входного потока в смеситель

Компонент	Массовое содержание, %	Мольное содержание, %
бензол	0,851	0,789
толуол	2,55E-04	2,01E-04
этилен	0,067	0,174
пропилен	3,37E-06	5,80E-06
ПАБ (триэтилбензол)	0,082	0,037
парафин	6,73E-05	2,87E-05

Коэффициент теплопроводности, плотность и теплоемкость жидкой смеси были определены с помощью программного пакета HYSYS. При проведении расчетов температура на входе в смеситель была зафиксирована на уровне 70 °С. Давление в смесителе перед реактором алкилирования составило 1,1 кгс/см<sup>2</sup>.

В таблице 2 приведены найденные значения коэффициентов теплопроводности, теплоемкости, вязкости и плотности входного потока.

Таблица 2

## Физические свойства входного потока

Коэффициент теплопроводности, Вт/(м °К)	Плотность, кг/м <sup>3</sup>	Теплоемкость, Дж/(кг·°К)	Динамическая вязкость, сПз
0,1216	831,9	1715	0,4037

Тогда критерий Пекле:  $Re_T = 98676$ .

Следовательно, диффузионный критерий Пекле будет находиться в пределах:

$$Re_D = 103610 \div 148015$$

Полученные значения диффузионного и теплового критериев Пекле говорят о том, что конвективные потоки переноса тепла и вещества в смесителе значительно преобладают над диффузионными и гипотеза о том, что в смесителе наблюдается гидродинамический режим, близкий к идеальному вытеснению, подтверждается.

В дальнейшем было определено время пребывания реагентов в смесителе, которое составило  $2,61 \cdot 10^{-4}$  с. Время же контакта реагентов в реакторе составляет 0,28 с. Таким образом, при найденном времени контакта при  $T_{вх.} = 388$  °К в смесителе с использованием математической модели был проведен анализ кинетических закономерностей целевых и побочных реакций процесса алкилирования с количественной оценкой характеристик выходного потока из смесителя и реактора. Результаты расчета расходов компонентов на выходе из смесителя и реактора представлены в табл. 3

Таблица 3

## Результаты расчета расходов компонентов на выходе из смесителя и реактора

Параметр	Расход из смесителя (расч.), кг/ч	Расход из реактора (расч.), кг/ч	Расход из реактора (эксперим.), кг/ч
бензол	17678,2	11849,56	11454,63
диэтилбензол	12,48	1167,9	524,2
этилбензол	-1476,53	7327,78	6173,85
ПАБ	1689,37	0	0
пропилен	0,06	0	0
ИПБ	2,7	20,78	58,24
толуол	48,07	483,87	563,02
этилен	1813,77	9,89	0
этилтолуол	30,02	390,21	446,54
$T_{вых.}$ , °К	388,04	406,4	

Выход этилбензола из смесителя при таких условиях получил отрицательное значение, а также почти отсутствует перепад температуры по аппарату, что говорит о малой вероятности протекания реакций в смесителе, хотя согласно полученным значениям изменения энергии Гиббса, все реакции, входящие в схему превращений процесса алкилирования бензола этиленом, являются термодинамически возможными. В табл.4 представлены значения энергии Гиббса для двух основных реакций процесса алкилирования.

Таблица 4

## Значения изобарно-изотермического потенциала для основных реакций процесса алкилирования

№	Реакция	$\Delta G$ , кДж/моль
1	$C_6H_6 + CH_2 = CH_2 \rightarrow C_6H_5C_2H_5$	-47,9
2	$C_6H_5C_2H_5 + CH_2 = CH_2 \rightarrow C_6H_5(C_2H_5)_2$	-61,4

На рис. представлены результаты расчета расхода диэтилбензола из реактора, а также из смесителя в течение полугода. Как видно из представленных результатов, образование диэтилбензола в смесителе незначительно, что говорит о малой скорости протекания этой реакции при данных условиях и времени контакта.

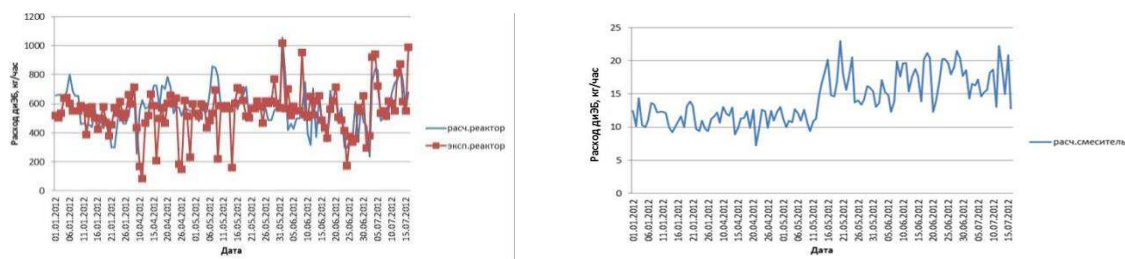


Рис. Расход диэтилбензола из реактора и в смесителя

Математическая модель реактора, в основу которой были положены найденные решением обратной кинетической задачи кинетические параметры, позволяет с достаточно высокой точностью описывать реальный процесс, так как расчетные и экспериментальные данные имеют хорошую сходимость. Погрешность расчетов не превышает 9 %. Созданное математическое описание было использовано для расчета показателей работы смесительной камеры перед реактором алкилирования, при этом было уточнено время контакта реагентов с катализатором. Результаты расчета на модели показали, что при условиях проведения промышленного процесса после реконструкции при организации подачи катализаторного комплекса, бензола и этилена через новые смесительные устройства, будет наблюдаться малая скорость протекания целевых и побочных реакций на стадии смешения или их практическое отсутствие. Поэтому не существует потенциальной опасности перегрева сопутствующего оборудования – смесителя – в результате протекания экзотермических реакций и не возникает необходимости отвода избыточного тепла из аппарата.

#### Литература

1. Белинская Н.С., Долганова И.О., Ивашкина Е.Н., Мартемьянова Е.В., Ткачев В.В. Повышение эффективности технологии получения этилбензола с использованием метода математического моделирования // *Фундаментальные исследования*, 2013. – № 8 (часть 3). – 782 с.
2. Бесков В.С., Флокк В. Моделирование каталитических процессов и реакторов.– М: Химия, 1991.

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОМЫСЛОВОЙ ПОДГОТОВКИ НЕФТИ С УЧЕТОМ ВЛИЯНИЯ СОСТАВА СЫРЬЯ Э.Я. Худавердиева

Научный руководитель доцент Е.А. Кузьменко

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия*

В настоящее время добыча нефти стала неотъемлемой частью нашей жизни. Нефть, извлекаемая из скважин, всегда содержит в себе механические примеси, попутный газ и пластовые воды, в которых растворены различные соли. Обычно в начальный период эксплуатации месторождения добываются безводная или малообводненная нефть. По мере добычи ее обводненность увеличивается до 90...98%. Очевидно, что такую «сырую» нефть нельзя транспортировать и перерабатывать на нефтеперерабатывающем заводе без тщательной промышленной подготовки.

При промышленной подготовке и переработке нефти очень важную роль играет состав сырья. В данной работе исследовано влияние состава и свойств пластовой нефти на качество подготавливаемой на установке первичной подготовки нефти (УПН) товарной нефти на основе данных о нефти различных пластов соседних месторождений Западной Сибири с использованием моделирующей системы, описанной в [1]. В табл. 1. приведены составы и свойства пластовой нефти.

Таблица 1

Составы сырья

Пласт	Содержание компонентов, % молн.										Молекулярная масса, г/моль	Плотность безводной нефти, кг/м <sup>3</sup> по ГОСТ 3900-85
	CO <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	C <sub>1</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	i-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	n-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	C <sub>6+</sub>		
BC <sub>1</sub>	0,08	0,45	26,22	1,52	3,12	1,44	3,17	1,64	2,44	59,92	173,5	879,0
BC <sub>2-3</sub>	0,04	0,37	23,64	1,39	3,00	1,25	3,03	1,55	2,30	63,43	183,5	884,0
BC <sub>4</sub>	0,23	0,44	26,11	1,15	2,23	0,94	2,40	1,26	1,88	63,36	191,5	891,0
BC <sub>10</sub>	0,10	0,63	26,80	2,39	4,99	1,15	3,43	1,28	2,05	57,18	166,3	879,8
AC <sub>8</sub>	0,07	0,44	24,70	0,77	1,23	0,77	2,01	1,25	1,96	66,80	184,3	881,0
BC <sub>1-1</sub>	0,08	0,55	26,80	0,87	2,09	1,04	2,51	1,41	2,09	62,56	174,6	875,0
BC <sub>10-1</sub>	0,00	0,31	26,14	1,09	2,90	0,99	3,00	1,53	2,39	61,66	172,6	89,01
ЮС <sub>1</sub>	0,38	0,73	26,27	4,05	8,40	1,40	5,14	1,81	2,81	49,01	127,7	845,7
ЮС <sub>1-1</sub>	0,50	0,75	20,10	4,63	8,46	1,38	5,39	1,67	3,13	53,99	127,3	841,4
ЮС <sub>1-2</sub>	0,46	0,54	19,60	4,73	8,23	1,29	5,02	1,68	2,85	55,60	126,3	836,7
ЮС <sub>1-3</sub>	0,37	0,29	16,86	4,34	7,05	1,08	5,01	1,55	2,97	60,48	139,5	872,0