

**РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА СУЛЬФИРОВАНИЯ
ЛИНЕЙНЫХ АЛКИЛБЕНЗОЛОВ В ПЛЕНОЧНОМ РЕАКТОРЕ**

Сладков Д.Ю., Солопова А.А., Долганов И.М.

Научный руководитель - доцент И.М. Долганов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

Алкилбензолсульфокислота является ценным промежуточным нефтехимическим сырьем, получаемым сульфированием линейных алкилбензолов, и преимущественно используется для получения алкилбензолсульфонатов (в основном натрия и кальция), которые применяются в производстве множества синтетических моющих средств и промышленных поверхностно-активных веществ. Они получили широкое распространение благодаря хорошей первичной биоразлагаемости и неспособностью к биоаккумуляции.

В настоящее время наиболее технологичными реакторами, в которых получают алкилбензолсульфокислоту, являются многотрубчатые пленочные реакторы. Специфика таких реакторов и самого процесса сульфирования не позволяют применять существующие моделирующие системы. Принципиальное отличие данной математической модели от ранее разработанных – учет процесса массопереноса SO_3 из газовой фазы в жидкую фазу реакционной смеси.

Целью настоящей работы является разработка математической модели процесса сульфирования линейных алкилбензолов в многотрубчатом пленочном реакторе.

При разработке модели были сделаны следующие допущения: исследуемый процесс соответствует режиму идеального вытеснения, отсутствует массоперенос веществ из жидкой фазы в газовую, процесс протекает исключительно в ламинарном режиме течения пленки, не происходит каплеунос жидкой фазы газозвушной смесью. Данная математическая модель позволяет количественно оценить влияние исходных параметров в системе на скорость превращения исходного вещества и перенос SO_3 в жидкую фазу, и может быть описана следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{газ} \frac{\partial C_{SO_3}^{газ}}{\partial l} = - \frac{\beta F \Delta C}{V_{газ}} \\ u_{жид} \frac{\partial C_{SO_3}^{жид}}{\partial l} = -k_0 a_0 C_{ЛАБ} C_{SO_3} - k_2 a_2 C_{АБСК} C_{SO_3}^2 - 2k_3 a_3 C_{ЛАБ} C_{SO_3}^2 - 2k_6 a_6 C_{непредЛАБ} C_{SO_3} + \frac{\beta F \Delta C}{V_{жид}} \\ u_{жид} \frac{\partial C_{ЛАБ}}{\partial l} = -k_0 a_0 C_{ЛАБ} C_{SO_3} - k_1 a_1 C_{ЛАБ} C_{АБСК} - k_2 a_2 C_{АБСК} C_{SO_3}^2 - k_3 a_3 C_{ЛАБ} C_{SO_3}^2 - k_4 a_4 C_{ЛАБ} C_{ПСК} + k_7 a_7 C_{неСульф} C_{H_2O} \\ u_{жид} \frac{\partial C_{АБСК}}{\partial l} = k_0 a_0 C_{ЛАБ} C_{SO_3} - k_1 a_1 C_{ЛАБ} C_{АБСК} - 2k_2 a_2 C_{АБСК} C_{SO_3}^2 + k_5 a_5 C_{ангАБСК} C_{H_2O} + k_7 a_7 C_{неСульф} C_{H_2O} \\ u_{жид} \frac{\partial C_{ПСК}}{\partial l} = k_3 a_3 C_{ЛАБ} C_{SO_3}^2 - k_4 a_4 C_{ЛАБ} C_{ПСК} \\ u_{жид} \frac{\partial C_{ангАБСК}}{\partial l} = k_2 a_2 C_{АБСК} C_{SO_3}^2 - k_5 a_5 C_{ангАБСК} C_{H_2O} \\ u_{жид} \frac{\partial C_{неСульф}}{\partial l} = k_1 a_1 C_{ЛАБ} C_{АБСК} + k_6 a_6 C_{непредЛАБ} C_{SO_3} - k_7 a_7 C_{неСульф} C_{H_2O} \\ u_{жид} \frac{\partial C_{H_2O}}{\partial l} = k_2 a_2 C_{АБСК} C_{SO_3}^2 - k_5 a_5 C_{ангАБСК} C_{H_2O} - k_7 a_7 C_{неСульф} C_{H_2O} \\ u_{жид} \frac{\partial C_{H_2SO_4}}{\partial l} = k_2 a_2 C_{АБСК} C_{SO_3}^2 \\ u_{жид} \frac{\partial C_{непредЛАБ}}{\partial l} = -k_6 a_6 C_{непредЛАБ} C_{SO_3} \\ u_{жид} \frac{\partial T}{\partial l} = \frac{1}{C_p} (Q_0 k_0 a_0 C_{ЛАБ} C_{SO_3} + Q_1 k_1 a_1 C_{ЛАБ} C_{АБСК} + Q_2 k_2 a_2 C_{АБСК} C_{SO_3}^2 + Q_3 k_3 a_3 C_{ЛАБ} C_{SO_3}^2 + Q_4 k_4 a_4 C_{ЛАБ} C_{ПСК} + Q_5 k_5 a_5 C_{ангАБСК} C_{H_2O} + Q_6 k_6 a_6 C_{непредЛАБ} C_{SO_3} + Q_7 k_7 a_7 C_{неСульф} C_{H_2O}) \end{array} \right.$$

$$l = 0, C_i = C_i^{in}, T = T^{in}$$

Где: T – температура, К; C_i – концентрация i -го компонента, моль/м³; k_i – константа скорости i -ой реакции; a_i – активность реакционной среды; β – коэффициент массоотдачи, м/с; F – поверхность контакта фаз, м²; ΔC – движущая сила массопереноса SO_3 , моль/м³; $V_{жид}$ – объем жидкой фазы реакционной среды, м³; $V_{газ}$ – объем газовой фазы реакционной среды, м³; $u_{газ}$ – линейная скорость газовой фазы, м/с; $u_{жид}$ – линейная скорость жидкой фазы, м/с; l – координата по длине трубки реактора, м; C_p – теплоемкость реакционной среды, Дж/К; Q_i – тепловой эффект i -й реакции, Дж/моль. ЛАБ – линейный алкилбензол с углеводородным радикалом $C_{10} - C_{13}$; АБСК – алкилбензолсульфокислота с углеводородным радикалом $C_{10} - C_{13}$; ПСК – пиросульфокислота; ангидрид АБСК – ангидрид сульфоновой кислоты; непредЛАБ – остаточный линейный алкилбензол с углеводородным радикалом $C_{10} - C_{13}$; несulfированные соединения – сульфоны и тетралины.

Коэффициент массопереноса SO_3 из газовой фазы в жидкую рассчитывается по уравнению [1]:

$$\beta = 0,127 * Re_{пл}^{0,58} * \omega_r * \left(\frac{D}{H}\right)^{0,66}$$

СЕКЦИЯ 12. СОВРЕМЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ПОДГОТОВКИ И ПЕРЕРАБОТКИ ПРИРОДНЫХ РЕСУРСОВ. ПОДСЕКЦИЯ 2 – ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ПОДГОТОВКИ И ПЕРЕРАБОТКИ ГОРЮЧИХ ИСКОПАЕМЫХ

Где: D – диаметр трубки реактора, м; H – высота трубки реактора, м; $Re_{пл}$ – критерий Рейнольдса для стекающей пленки жидкости.

Активность реакционной среды находится как [2]:

$$\alpha_j = e^{-\alpha C_{v.c.}}, \text{ при } l = 0, C_{v.c.} = 0, \alpha = 1, a_j = 1$$

На основании разработанной математической модели было исследовано влияние концентрации SO_3 в газозвушной смеси и давления в реакторе на степень превращения ЛАБ. При рассмотрении влияния давления варьировалось входное давление в реакторе, перепад давления между входом и выходом при этом оставался постоянным и составлял 20 кПа.

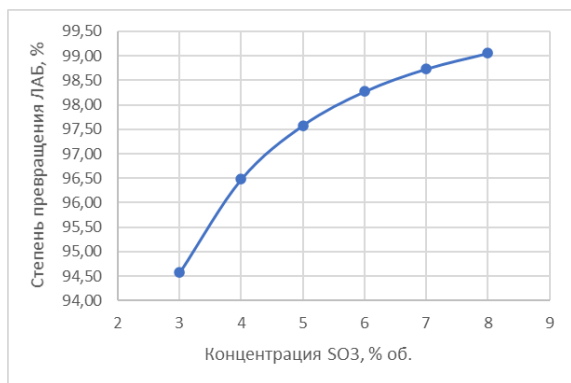


Рис. 1 Влияние концентрации SO_3 в газозвушной смеси на степень превращения линейных алкилбензолов

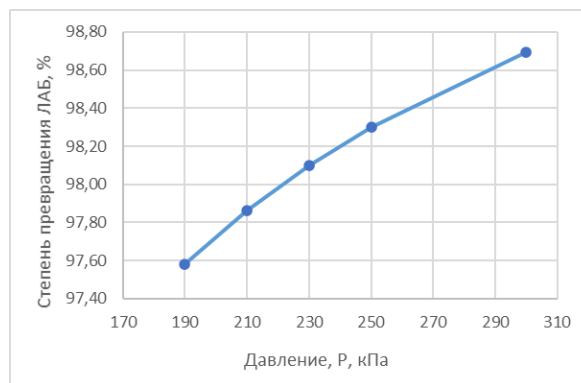


Рис. 2 Давления в реакционной среде на степень превращения линейных алкилбензолов

Таким образом, при увеличении концентрации SO_3 в газозвушной смеси увеличивается степень превращения линейных алкилбензолов, так как увеличивается движущая сила процесса массопереноса вещества в жидкую фазу. Также при увеличении давления степень превращения растет, что обусловлено уменьшением линейной скорости газа при одинаковом расходе. Разности концентраций SO_3 в жидкой и газовой фазе в этом случае растет больше степени, чем снижается коэффициент массопереноса.

Разработанная математическая модель позволяет количественно и качественно прогнозировать влияние различных параметров системы на выход целевых и побочных продуктов в процессе сульфирования линейных алкилбензолов

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 20-38-90103

Литература

1. Соколов В.Н. Газожидкостные реакторы [Текст] / Соколов В.Н., Доманский И.В. – Л.: «Машиностроение», 1976. 216 с.
2. Dolganov I.M. Alkylaromatics in Detergents Manufacture: Modeling and Optimizing Linear Alkylbenzene Sulfonation [Text] / Dolganova I.O., Dolganov I.M., Ivanchina E.D., Ivashkina E.N. // Journal of Surfactants and Detergents, 2018 – V.21.– No1.– P.175–184.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СОСТАВА ПРОДУКТОВ КАТАЛИТИЧЕСКОГО КРЕКИНГА УСТАНОВКИ КТ-1/1 С ПРИМЕНЕНИЕМ МОДЕЛИРУЮЩЕЙ ПРОГРАММЫ

Солдатов В.К., Назарова Г.Ю.

Научный руководитель - профессор Е.Н. Ивашкина

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

Среди процессов переработки нефтяного сырья важную роль занимает процесс каталитического крекинга, позволяющий дополнительно получать до 50 % (от перерабатываемого сырья) бензина с высоким октановым числом, а также газ, насыщенный пропан-пропиленовой и бутан-бутиленовой фракциями. Параллельно с этим, в процессе происходит образование кокса, который приводит к обратимой дезактивации катализатора крекинга, что негативно сказывается на эффективности процесса. В свою очередь, кокс необходим для поддержания теплового баланса системы «реактор-регенератор», т.к. в процессе регенерации катализатора путем выжигания кокса с поверхности катализатора выделяется большое количество тепла. Поэтому, с одной стороны, необходимо уменьшить количество кокса, образующегося на поверхности катализатора, обеспечив при этом тепловой баланс системы.

Качество и выход продуктовых потоков с установки каталитического крекинга определяется групповым составом сырья, свойствами катализатора, технологическими параметрами работы установки и др. Метод математического моделирования является одним из способов повышения эффективности процессов переработки