

Д. Ю. Смирнов (Уфа, ИНК РАН). Математическая модель процесса дегидрирования метилбутиенов в реакторе с псевдоожиженным слоем катализатора.

Синтетические полиизопреновые каучуки (СКИ) пользуются большим спросом в мире, т. к. являются почти полноценной альтернативой натурального каучука (Н-К) и более предпочтительны из-за возможности целенаправленного регулирования их свойств. Затраты на производство СКИ из изопрена обычно составляют 25–30% от себестоимости СКИ, т. е. эффективность производства в целом определяют затраты на синтез изопрена. Поэтому основное внимание уделяют совершенствованию существующих и созданию новых процессов его производства на основе доступного углеводородного сырья. Ранее в работе [1] была построена модель процесса, и проведен расчет для адиабатического реактора с неподвижным слоем катализатора.

В настоящее время процессы дегидрирования реализуются в реакторах с псевдоожиженным слоем катализатора [2]. Построим двухфазную модель процесса в реакторе с псевдоожиженным слоем катализатора. Материальный баланс описывается системой дифференциальных уравнений:

$$\varepsilon q \frac{dy_i}{d\tau} + qv \frac{d(y_i)}{dl} = D \frac{d^2 y_i}{dl^2} + f S_{yd} \beta_m (x_i - y_i) + f \sum_{j=1}^n \nu_{ij} \frac{W_j}{C_0},$$

$$\varepsilon(1 - q) \frac{dx_i}{d\tau} + (1 - q)v \frac{dx_i}{dl} = f S_{yd} \beta_m (y_i - x_i),$$

тепловой баланс представлен уравнениями:

$$\varepsilon q c_p \rho \frac{dT}{d\tau} + q c v \rho \frac{dT}{dl} = \alpha \frac{d^2 T}{dl^2} + f S_{yd} \beta_T (T - \Theta) + f \sum_{j=1}^4 Q_j W_j,$$

$$\varepsilon(1 - q) c_p \rho \frac{dT}{d\tau} + (1 - q) c v \rho \frac{dT}{dl} = f S_{yd} \beta_T (\Theta - T),$$

где y_i — концентрации компонентов в плотной фазе; x_i — концентрации компонентов в фазе пузырей; v — линейная скорость потока, м/с; q — доля потока, проходящего через плотную фазу; β_T, β_m — коэффициенты тепло- и массообмена, м/с; ε — порозность расширенного слоя; D, a_T — коэффициенты диффузии и теплопроводности, м²/с; Θ, T — температуры катализатора и газа, К; C_k, C_p — теплоемкости катализатора и газа, Дж/(моль К); l — осевая координата, м; f — коэффициент, обратный коэффициенту слоя; S_{yd} — внешняя удельная поверхность зерна катализатора, м²/м³; τ — время, с; C_0 — мольная плотность газа, кмоль/м³; Q_j — адиабатические разогревы, К.

В модели учтен тепло- и массоперенос в плотной фазе за счет теплопроводности и продольной диффузии, переносы в плотной фазе и фазе пузырей конвективными потоками.

На основе построенной модели проведен вычислительный эксперимент и найдены оптимальные режимные параметры его проведения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мустафина С.А., Балаев А.В., Смирнов Д.Ю., Спивак С.И. Моделирование каталитического процесса дегидрирования метилбутиенов. — Системы управления и информационные технологии, 2006, № 1, с. 10–14.
2. Слинько М.Г. Основы и принципы математического моделирования каталитических процессов. Новосибирск: ИНК им. Г. К. Борескова, 2004, 488 с.