

Моделирование кинетики процесса дегидрирования этилбензола с учетом дезактивации каталитического слоя реактора

Виталий К. Битюков	¹	prezident@vsuet.ru
Алексей П. Попов	¹	aleksej_p_91@mail.ru
Сергей Г. Тихомиров	¹	tikhomirov_57@mail.ru
Олег Г. Неизвестный	¹	o.neizvestnyi@mail.ru

¹ Воронежский государственный университет инженерных технологий, пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия

Реферат. Процесс синтеза стирола, протекающий в двухступенчатом адиабатическом реакторе непрерывного действия, является сложной химико-технологической системой. Он характеризуется недетерминированностью, нестационарностью и протекает в условиях постоянно действующих неконтролируемых возмущений. В связи с этим задача разработки системы предиктивного управления концентрацией основного продукта реакции дегидрирования - стирола для поддержания данной величины в заданном диапазоне на протяжении всего периода эксплуатации является актуальной. Ее решение невозможно без разработки на основе уточненной кинетической схемы процесса модели, учитывающей падение активности каталитического слоя реактора вследствие коксообразования на его поверхности. В статье обоснованы и предложены: зависимость изменения падения активности каталитического слоя как функция времени эксплуатации реакторного блока и усовершенствованная модель кинетики химических превращений. Синтезированная математическая модель процесса представляет собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений и позволяет: рассчитывать профили концентраций компонентов реакционной смеси за время прохождения шихты через ступени адиабатического реактора, определять состав контактного газа на выходе из реакторных ступеней на протяжении всего цикла работы каталитической системы, с учетом изменения температурного режима протекания процесса и падения активности каталитического слоя. Выполнена оценка значений констант скоростей химических реакций, а также расчет и анализ концентраций основных и побочных продуктов реакции дегидрирования на выходе из реакторной установки. Результаты моделирования показывают, что изменение температурного режима работы реактора, производимое по экспоненциальному закону с учетом дезактивации каталитического слоя, позволяет обеспечить выход конечного продукта в заданном технологическом регламенте диапазоне на протяжении всего цикла эксплуатации реакторного блока.

Ключевые слова: дегидрирование этилбензола, химическая кинетика, математическая модель, активность катализатора, коксообразование.

Modeling of ethylbenzene dehydrogenation kinetics process taking into account deactivation of catalyst bed of the reactor

Vitalii K. Bityukov	¹	prezident@vsuet.ru
Aleksei P. Popov	¹	aleksej_p_91@mail.ru
Sergei G. Tikhomirov	¹	tikhomirov_57@mail.ru
Oleg G. Neizvestnyi	¹	o.neizvestnyi@mail.ru

¹ Voronezh state university of engineering technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, 394036, Russia

Summary. Styrene synthesis process occurring in a two-stage continuous adiabatic reactor is a complex chemical engineering system. It is characterized by indeterminacy, nonstationarity and occurs in permanent uncontrolled disturbances. Therefore, the task of developing the predictive control system of the main product concentration of the dehydrogenation reaction - styrene to maintain this value within a predetermined range throughout the period of operation is important. This solution is impossible without the development of the process model on the basis of the kinetic revised scheme, taking into account the drop of the reactor catalytic bed activity due to coke formation on the surface. The article justifies and proposes: the drop changes dependence of catalyst bed activity as a time of reactor block operation function and improved model of chemical reactions kinetics. The synthesized mathematical model of the process is a system of ordinary differential equations and allows you: to calculate the concentration profiles of reaction mixture components during the passage of the charge through the adiabatic reactor stage, to determine the contact gas composition at the outlet of the reactor stages throughout the cycle of catalytic system, taking into account temperature changes and drop of the catalyst bed activity. The compensation of the decreased catalyst bed activity is carried out by raising the temperature in the reactor block for the duration of the operation. The estimation of the values of chemical reactions rate constants, as well as the calculation and analysis of the main and by-products concentrations of dehydrogenation reactions at the outlet of the reactor plant is carried out. Simulation results show that the change of temperature of the reactor, carried out by the exponential law considering deactivation of the catalyst bed allows the yield in a given range of technological regulations throughout the operation cycle of the reactor block.

Keywords: dehydrogenation of ethylbenzene, chemical kinetics, mathematical model, catalyst activity, coke formation

Для цитирования

Битюков В.К., Попов А.П., Тихомиров С.Г., Неизвестный О.Г. Моделирование кинетики процесса дегидрирования этилбензола с учетом дезактивации каталитического слоя реактора // Вестник ВГУИТ. 2017. Т. 79. № 1. С. 73–80. doi:10.20914/2310-1202-2017-1-73-80

For citation

Bitukov V.K., Popov A.P., Tikhomirov S. G., Neizvestnyi O.G. Modeling of ethylbenzene dehydrogenation kinetics process taking into account deactivation of catalyst bed of the reactor. *Vestnik VGUIT* [Proceedings of VSUET]. 2017. Vol. 79. no. 1. pp. 73–80. (in Russian). doi:10.20914/2310-1202-2017-1-73-80

Введение и постановка задачи

Стирол – один из важнейших продуктов нефтеперерабатывающей промышленности, так как является сырьем для производства полимеров (полистирол, синтетический каучук) и сополимеров (ударопрочный полистирол на основе акрилонитрила и бутадиена, АБС-пластики, бутадиен-стирольные каучуки, термоэластопласты).

На нефтехимических предприятиях России основным способом получения стирола является дегидрирование этилбензола в двухступенчатых реакторах шахтного типа с неподвижным слоем катализатора при отсутствии теплообмена с внешней средой (адиабатические условия протекания реакции).

Отделение молекул водорода от этилбензола происходит в процессе прохождения шихты через каталитическую зону реактора при температуре 560 °С на начальном этапе рабочего цикла каталитической системы с последующим повышением этого значения до 630 °С к окончанию срока службы.

Увеличение температуры в зоне реакции обеспечивает компенсацию падения активности катализатора, которое вызвано образованием углеродистых отложений, блокирующих активные центры каталитической поверхности.

В настоящее время, закоксовывание катализаторов при производстве ароматических углеводородов является одной из основных научно-производственных проблем нефтехимической отрасли, так как этот процесс является возмущающим воздействием, нарушающим технологический режим производства.

Повышение температуры протекания химических реакций достигается за счет увеличения расхода энергоносителей. Ввиду неконтролируемости и не прогнозируемости динамики изменения концентрации кокса на катализаторе, система управления температурным режимом работы реактора является информационной, т. е. в автоматическом режиме выполняются только измерительные и информационные функции, а решения по управлению принимает и реализует диспетчер по мере снижения концентрации конечного продукта на выходе из реакторных ступеней. Изменение температурного режима работы реактора выполняется на основе опыта обслуживающего персонала без предварительного использования математического описания, позволяющего определить:

– значения приращений по температуре ΔT в реакторе и величины временных интервалов Δt , через которые их необходимо производить;

– величины управляющих воздействий, вырабатываемых регулирующими устройствами для своевременного перевода объекта управления из нулевого состояния $x_0(T = 560 \text{ }^\circ\text{C})$ в состояния $x_i(T_i)$, требуемые для поддержания концентрации стирола в заданном диапазоне на протяжении рабочего цикла реактора.

Это приводит к перерасходу энергоносителей: топливного газа и перегретого водяного пара и как следствие является одной из главных причин низкой теплоэнергетической эффективности технологического процесса.

Также снижению ресурсоемкости и производительности процесса дегидрирования этилбензола способствуют недостатки, присущие адиабатическим реакторам:

1. Большой по сравнению с трубчатыми реакторами расход перегретого водяного пара, который является не только разбавителем (для понижения парциального давления углеводородов), но и теплоносителем.

2. Концентрация стирола на выходе из адиабатического реактора ниже из-за значительного перепада температур по высоте слоя катализатора, в то время как в трубчатых реакторах условия процесса приближаются к изотермическим.

Для повышения энерго- и ресурсосбережения процесса производства стирола необходимо устранение вышеперечисленных негативных факторов.

Усовершенствование конструкции адиабатических реакторов, количественное изменение величин и соотношений потоков сырья и энергоносителей является весьма затратным способом модернизации, так как отрасль науки, изучающая процессы и аппараты химической технологии, на сегодняшний день не способна устранить все технологические проблемы. Это приводит к усложнению и удорожанию технологических аппаратов, ввиду того, что проведение подобных исследований и внедрение их в промышленные и лабораторные условия требует длительного времени, сложной технической работы, а также существенных капитальных затрат на технологическое оборудование и контрольно-измерительные приборы. При этом невозможно решить проблему потери активности катализаторов вследствие их науглероживания, так как невозможно добиться подобия сложных химических превращений в присутствии катализатора, сопровождаемых процессами переноса вещества и тепловой энергии в промышленных и лабораторных установках [1].

Повышение эффективности работы реактора дегидрирования при одновременном снижении затрат на проведение технологического процесса невозможно без усовершенствования математического описания химической кинетики, а также теплового и материального балансов процесса для синтеза системы оптимального управления [2].

Таким образом, для усовершенствования системы управления отделением дегидрирования в производстве стирола актуальными являются следующие научные задачи:

- создание эффективного численного метода прогнозирования динамики закоксованности каталитической системы в течении процесса;
- разработка математического описания химической кинетики дегидрирования, учитывающего динамику изменения технологических параметров процесса во времени и в пространстве.

Результаты

Математические модели в сочетании со средствами вычислительной техники являются мощным и универсальным средством для исследования и прогнозирования активности катализатора в нестационарных условиях.

В результате проведенных вычислительных экспериментов установлено:

1. Изменение концентрации кокса в процессе эксплуатации катализатора описывается следующим уравнением:

$$Kkokc(\tau) = (k \cdot T(\tau) + h) \cdot \tau^2, \quad (1)$$

где $k = 1.895 \times 10^{-7}$; $h = 8.408 \times 10^{-5}$; τ – время эксплуатации реактора, суток; $T(\tau)$ – температура протекания процесса дегидрирования, °С; $Kkokc(\tau)$ – концентрация кокса на каталитическом слое, масс. %.

2. Увеличение температуры на входах в ступени реакторного блока целесообразно производить по экспоненциальному закону [3]:

$$\alpha = \frac{\tau^c}{10^d + b \cdot c}, \quad (2)$$

$$T(\tau) = 560 \cdot e^\alpha, \quad (3)$$

где $T(\tau)$ – величина температуры на входе в реакторный блок, °С; $d = 1.131$; $b = 2.9$; $c > 1$.

При выборе математической зависимости, описывающей динамику изменения активности катализатора дегидрирования приняты следующие допущения:

1. Процесс коксообразования на каталитической поверхности является полислоиным и протекает с одинаковой скоростью как на активных, так и на дезактивированных центрах, независимо от степени зауглероженности поверхности.

2. Отсутствует распределение величины активности каталитического слоя по длине реактора, т. е. данная величина принимается постоянной в любой точке каталитической зоны в конкретный момент времени протекания процесса.

3. Не происходит снижение количества активных центров на поверхности каталитической системы по причине старения, в связи с очень низкой скоростью потери активности промышленных контактов в ходе реакционного цикла, влиянием которой на динамику протекания процесса можно пренебречь [4].

4. Процессы переноса реагирующего вещества и тепла в зернистом слое катализатора реакционной зоны не оказывают существенного влияния на оценку активности ускорителя реакций.

На основании анализа зависимостей, описывающих механизм отложения кокса на каталитическом слое и, с учетом принятых допущений и особенностей протекания процесса дегидрирования, уравнение расчета величины активности каталитической системы реактора в произвольный момент времени протекания реакции выглядит следующим образом [5]:

$$\gamma = \frac{1}{Kkokc_{\max}}, \quad (4)$$

$$a(\tau) = e^{-\gamma \cdot Kkokc(\tau)}, \quad (5)$$

где $a(\tau)$ – активность катализатора; $Kkokc_{\max}$ – величина максимальной концентрации кокса, масс. %.

Используя выражения (1–4) осуществлено исследование скорости падения активности каталитической системы реактора в зависимости от изменения температуры в реакторных ступенях.

Варьирование величины параметра «с» в выражении (2) обеспечивает изменение температурного режима процесса, скорости коксообразования на катализаторе и как следствие падения величины его активности (рисунок 1).

Анализ полученных результатов показал, что увеличение значения параметра «с» выражения (2) обеспечивает наименьшее суммарное падение величины активности катализатора.

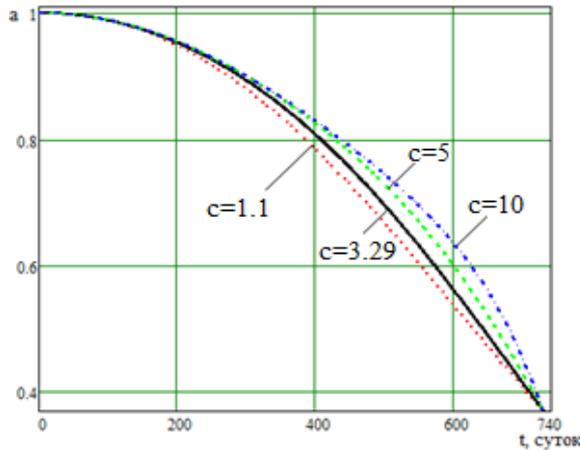


Рисунок 1. Динамика снижения каталитической активности в течении рабочего цикла процесса дегидрирования при различной скорости повышения температуры на входах в ступени реакторного блока
 Figure 1. Dynamic decrease of catalytic activity during the dehydrogenation process cycle at different rates of temperature increase at the inputs to the stage of the reactor block

Математическое описание процесса отделения водорода в производстве стирола при нестационарном режиме его протекания получено на основе разработанных моделей химической кинетики данного процесса, описывающих изменение компонентного состава контактного

газа на выходе из реакторных ступеней в статическом режиме [6, 7].

В процессе моделирования приняты следующие допущения:

1. Температура по длине реактора в любой момент времени является постоянной.

2. Коксовый слой на катализаторе накапливается равномерно по всей длине реактора.

3. Отсутствует разница во времени пребывания реакционной смеси по поперечному сечению аппарата, то есть реакционный поток является турбулентным.

4. На поверхности катализатора происходит газификация углистых отложений, в результате чего происходит частичная регенерация каталитического слоя реактора во время протекания процесса.

5. Реакторный блок работает непрерывно на протяжении всего межзагрузочного периода.

Таким образом, модель, описывающая механизм химических превращений, протекающих в результате отделения молекул водорода от этилбензольной шихты в условия нестационарности состояния каталитического слоя и параметров технологического процесса принимает следующий вид:

$$\frac{dC_a}{dt} = a(\tau) \cdot k_1(\tau) \cdot C_b(t) - a(\tau) \cdot \frac{k_3(\tau)}{kp(\tau)} \cdot C_a(t) \cdot C_c(t) - a(\tau) \cdot k_{14}(\tau) \cdot C_b(t) \cdot C_c^2(t), \quad (6)$$

$$\frac{dC_b}{dt} = a(\tau) \cdot \frac{k_3(\tau)}{kp(\tau)} \cdot C_a(t) \cdot C_c(t) - a(\tau) \cdot k_1(\tau) \cdot C_b(t) - a(\tau) \cdot k_2(\tau) \cdot C_b(t) - a(\tau) \cdot k_4(\tau) \cdot C_b(t) - a(\tau) \cdot k_5(\tau) \cdot C_b(t), \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_c}{dt} = & a(\tau) \cdot k_2(\tau) \cdot C_b(t) - a(\tau) \cdot \frac{k_3(\tau)}{kp(\tau)} \cdot C_a(t) \cdot C_c(t) - a(\tau) \cdot k_6(\tau) \cdot C_b(t) \cdot C_c(t) + \\ & + a(\tau) \cdot k_8(\tau) \cdot C_b(t) + a(\tau) \cdot k_4(\tau) \cdot C_g(t) + a(\tau) \cdot k_{10}(\tau) \cdot C_h(t) \cdot C_p^2(t) + \\ & + a(\tau) \cdot k_{12}(\tau) \cdot C_g(t) \cdot C_p(t) - a(\tau) \cdot \frac{k_{13}(\tau)}{kp(\tau)} \cdot C_m(t) \cdot C_c(t) - a(\tau) \cdot k_{14}(\tau) \cdot C_a(t) \cdot C_c^2(t) \end{aligned}, \quad (8)$$

$$\frac{dC_d}{dt} = a(\tau) \cdot k_4(\tau) \cdot C_b(t), \quad (9)$$

$$\frac{dC_e}{dt} = a(\tau) \cdot k_5(\tau) \cdot C_b(t), \quad (10)$$

$$\frac{dC_f}{dt} = a(\tau) \cdot k_6(\tau) \cdot C_b(t) \cdot C_c(t) + a(\tau) \cdot k_{14}(\tau) \cdot C_a(t) \cdot C_c^2(t), \quad (11)$$

$$\frac{dC_h}{dt} = a(\tau) \cdot k_7(\tau) \cdot C_g(t) - a(\tau) \cdot k_9(\tau) \cdot C_h(t) \cdot C_p^2(t) - a(\tau) \cdot k_{10}(\tau) \cdot C_h(t) \cdot C_p^2(t), \quad (12)$$

$$\frac{dC_k}{dt} = a(\tau) \cdot k_9(\tau) \cdot C_h(t) \cdot C_p^2(t), \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_g}{dt} = & a(\tau) \cdot k_6(\tau) \cdot C_b(t) \cdot C_c(t) - a(\tau) \cdot k_7(\tau) \cdot C_g(t) - a(\tau) \cdot k_8(\tau) \cdot C_g(t) - \\ & - a(\tau) \cdot k_{11}(\tau) \cdot C_g(t) \cdot C_p(t) - a(\tau) \cdot k_{12}(\tau) \cdot C_g(t) \cdot C_p(t) + \\ & + a(\tau) \cdot \frac{k_{13}(\tau)}{kp(\tau)} \cdot C_m(t) \cdot C_c(t) + a(\tau) \cdot k_{14}(\tau) \cdot C_a(t) \cdot C_c(t) \end{aligned}, \quad (14)$$

$$\frac{dC_m}{dt} = a(\tau) \cdot k_{11}(\tau) \cdot C_g(t) \cdot C_p(t) - a(\tau) \cdot \frac{k_{13}(\tau)}{kp(\tau)} \cdot C_m(t) \cdot C_c(t), \quad (15)$$

$$\tau = \overline{0 \dots 740}, \quad t = \overline{0 \dots 3000} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} C_a(0) &= 0, \quad C_b(0) = 0.998, \\ C_d(0) &= C_e(0) = 0.001, \\ C_e(0) &= C_f(0) = C_g(0) = 0, \\ C_h(0) &= C_k(0) = C_m(0) = 0. \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} k_1(0) &= 0.029, \quad k_2(0) = 0.0012, \quad k_3(0) = 0.0013, \\ k_4(0) &= 0.0021, \quad k_5(0) = 0.00146, \quad k_6(0) = 0.001, \\ k_7(0) &= 0.0012331, \quad k_8(0) = 0.0007, \quad k_9(0) = 0.0098, \\ k_{10}(0) &= 0.005, \quad k_{11}(0) = 0.009, \quad k_{12}(0) = 0.004, \\ k_{13}(0) &= 0.0014, \quad k_{14}(0) = 0.0015. \end{aligned} \quad (18)$$

где t – время прохождения слоя шихты через ступень реакторного блока, с; $C_a, C_b, C_c, C_d, C_e, C_f, C_g, C_h, C_k, C_m$ – концентрации стирола, этилбензола, водорода, бензола, этилена, толуола, метана, углерода, угарного и углекислого газов соответственно, масс. доли; k_1, k_4, k_5, k_7 – константы скоростей образования стирола, бензола, этилена и углерода соответственно, c^{-1} ; (k_3/kp) – константа скорости обратной реакции образования стирола, $c^{-1}/\text{масс. доли}$; k_6 – константа скорости образования толуола и метана, $c^{-1}/\text{масс. доли}$; k_2, k_8 – константы скоростей образования водорода в реакциях 1 и 4, c^{-1} ; k_9 – константа скорости образования углекислого газа, $c^{-1}/(\text{масс. доли})^2$; k_{10} – константа скорости образования водорода в реакции 5, $c^{-1}/(\text{масс. доли})^2$; k_{11} – константа скорости образования угарного газа, $c^{-1}/\text{масс. доли}$; k_{12} – константа скорости образования водорода в реакции 6, $c^{-1}/\text{масс. доли}$; (k_{13}/kp) – константа скорости обратной реакции взаимодействия метана с водяным паром, $c^{-1}/\text{масс. доли}$; k_{14} – константа скорости образования стирола и водорода, $c^{-1}/(\text{масс. доли})^2$; kp – константа равновесия, c^{-1} .

При увеличении температуры протекания процесса значение константы равновесия рассчитывается по следующей формуле [7]:

$$kp(\tau) = 16.72 \cdot e^{\frac{-15.35}{T(\tau)}}, \quad (19)$$

где $T(\tau)$ – температура протекания процесса, К;

Изменение величин констант скоростей химических реакций с повышением температуры протекания процесса происходит согласно закону Аррениуса и описывается следующими уравнениями:

$$k_i(\tau) = k_{0i} e^{\frac{-E_a}{R \cdot T(\tau)}}, \quad i = \overline{1 \dots 14}, \quad (20)$$

где $k_i(\tau)$ – скорость образования i -го компонента; k_{0i} – предэкспоненциальный множитель; E_a – энергия активации дегидрирования этилбензола, Дж/моль; R – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль×К); $T(\tau)$ – температура в реакционной зоне реакторного блока, К.

Полученная на основе анализа химических реакций и составленной кинетической схемы дегидрирования [6, 8] система дифференциальных уравнений (6)–(18), в сочетании с зависимостями (1)–(5), (19), (20), описывающими изменение величин: концентрации кокса на катализаторе, активности ускорителя реакции и температуры в реакционном аппарате является нестационарной кинетической моделью, которая позволяет оперативно оценивать и экстраполировать динамику изменения:

– величин технологических параметров, оказывающих непосредственное воздействие на скорость реакции дегидрирования;

– концентраций веществ компонентного состава реакционной смеси как по длине первой и второй реакторных ступеней, так и во временной области протекания процесса.

С помощью полученного математического аппарата выполнена оценка величины параметра «с» выражения (2) для определения закона изменения температуры в реакционной зоне на протяжении рабочего цикла, при которой обеспечивается поддержание концентрации стирола на выходе из реактора в заданном диапазоне ($c = 2.3$).

Графики и численные значения изменения температуры протекания процесса, концентрации кокса на каталитической поверхности и величины активности ускорителя реакций на протяжении рабочего цикла работы реактора представлены на рисунках 1–3 и в таблице 1.

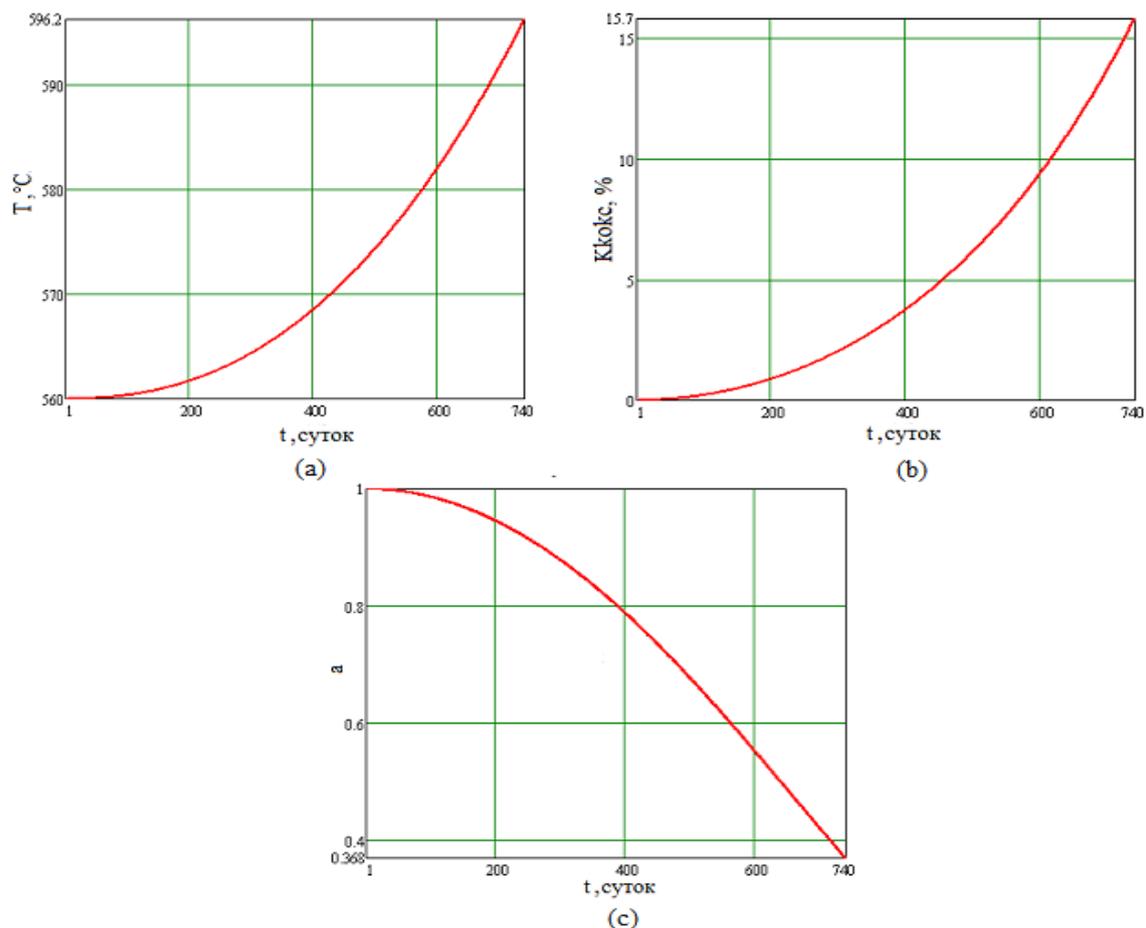


Рисунок 2. Динамика изменения температуры реактора T , $^{\circ}\text{C}$ (a), закоксованности каталитического слоя $K_{\text{кокс}}$, % (b), активности катализатора a (c) в течение рабочего цикла

Figure 2. Changes in temperature of the reactor T , $^{\circ}\text{C}$ (a), coking of the catalyst bed $K_{\text{кокс}}$, % (b), activity of the catalyst a , (c) during the operating cycle

Динамика изменения температуры реактора, закоксованности каталитического слоя и активности катализатора в течение рабочего цикла

Таблица 1.

Changes in temperature of the reactor, coking of the catalyst bed and activity of the catalyst during the operating cycle

Table 1.

Сутки (Day)	Температура (Temperature) T , $^{\circ}\text{C}$	Закоксованность, %	Активность (Activity)
1	560	0	1
60	560.10	0.07	0.99
120	560.52	0.31	0.98
180	561.34	0.71	0.95
240	562.62	1.28	0.92
300	564.39	2.04	0.87
360	566.70	3.00	0.82
420	569.59	4.18	0.76
480	573.09	5.62	0.70
540	577.23	7.35	0.62
600	582.06	9.40	0.55
660	587.61	11.84	0.47
720	593.92	14.71	0.39
740	596.20	15.78	0.36

Результаты моделирования работы реакторного блока в течении межзагрузочного периода функционирования катализатора, полученные с помощью уравнений (1)–(8) при найденном значении параметра «с»

в виде графиков и числовых значения, отображающих изменения величин концентраций продуктов разложения этилбензола, получаемых на выходе из данного аппарата представлены на рисунке 3 и таблице 2.

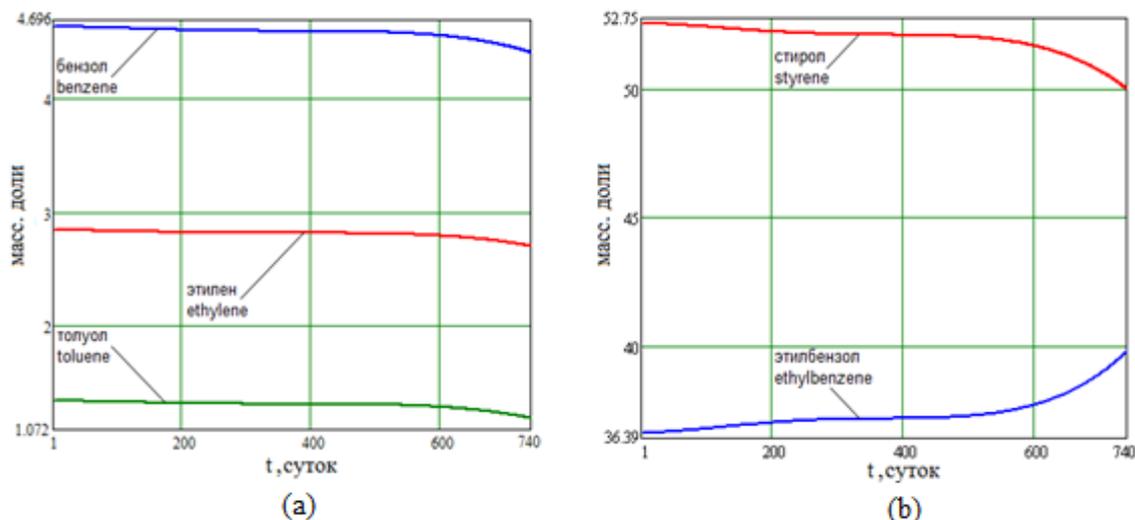


Рисунок 3. Динамика изменения концентрации стирола и этилбензола (а) этилена, бензола и толуола (b) на выходе из реактора в течение рабочего цикла

Figure 3. The dynamics of styrene and ethylbenzene (a) ethylene, benzene and toluene (b) concentration changes at the outlet of the reactor during the operating cycle

Таблица 2.

Динамика изменения концентрации стирола и этилбензола (а) этилена, бензола и толуола (b) на выходе из реактора в течение рабочего цикла

Table 2.

The dynamics of styrene and ethylbenzene (a) ethylene, benzene and toluene (b) concentration changes at the outlet of the reactor during the operating cycle

Сутки (Day)	C_a , масс. доли (mass fracture)	C_b , масс. доли (mass fracture)	C_a , масс. доли (mass fracture)	C_e , масс. доли (mass fracture)	C_f , масс. доли (mass fracture)
1	52.55	36.59	4.63	2.83	1.32
60	52.48	36.67	4.63	2.83	1.32
120	52.37	36.82	4.62	2.82	1.31
180	52.24	36.98	4.61	2.81	1.30
240	52.17	37.06	4.60	2.81	1.30
300	52.12	37.12	4.59	2.81	1.29
360	52.1	37.15	4.59	2.81	1.29
420	52.09	37.17	4.59	2.80	1.29
480	52.04	37.22	4.59	2.80	1.29
540	51.93	37.37	4.58	2.8	1.28
600	51.66	37.69	4.55	2.78	1.27
660	51.18	38.30	4.51	2.75	1.24
720	50.37	39.31	4.44	2.71	1.19
740	50.01	39.76	4.40	2.69	1.17

Полученные значения являются параметрами состояния объекта управления, в качестве которого выступает адиабатический реактор дегидрирования этилбензола.

Выявлено, что повышение температурного режима работы реактора с учетом кинетических закономерностей основных и побочных реакций, науглероживания и снижения количества активных центров катализатора позволяет предотвратить снижение концентрации стирола по ходу проведения технологического процесса ниже границы диапазона, заданного для данного параметра [9].

Выводы и рекомендации

Выполненные исследования позволили получить величины констант скоростей химических превращений, а также значения активности

каталитической системы и концентраций продуктов основных и побочных реакций каталитического дегидрирования в зависимости от изменения температурного режима работы реактора.

Анализ проведенных вычислительных экспериментов и результатов моделирования химической кинетики показал, что составленное математическое описание адекватно описывает динамику процесса дегидрирования и является эффективным инструментом для определения оптимальных законов изменения технологических параметров, позволяющих:

— обеспечивать выход стирола в заданном диапазоне на протяжении межзагрузочного периода функционирования каталитической системы реактора и тем самым повысить производительность данного аппарата.

— предотвращать несвоевременное падение активности каталитического слоя реактора в процессе эксплуатации;

Синтезированную математическую модель можно использовать для прогнозирования

ЛИТЕРАТУРА

1 Боресков Г.К. Гетерогенный катализ. М.: Наука, 1986. 155 с.

2 Битюков В.К., Тихомиров С.Г., Подкопаева С.В., Хромых Е.А. и др. Математическое моделирование объектов управления химической промышленности. Теория и практика. Воронеж: ВГУИТ, 2011.

3 Жатова И.А., Попов А.П., Алексеев М.В. Моделирование динамики коксообразования на каталитическом слое реактора дегидрирования этилбензола в процессе производства стирола // Научный вестник ВГАСУ. Серия: Информационные технологии в стр., соц., и эконом. Системах. 2014. № 2 (4). С. 80–83.

4 Третьяков В.Ф., Тальшинский Р.М. Кинетика и динамика гетерогенных каталитических нефтехимических процессов. М.: Издательство МИТХТ, 2012. С. 74.

5 Островский Н.М. Кинетика дезактивации катализаторов. Разработка методов и их применение: автореф. дис. ... док. техн. наук. Омск, 1998. 36 с.

6 Битюков В.К., Жатова И.А., Алексеев М.В., Попов А.П. Разработка математической модели кинетики процесса дегидрирования этилбензола в двухступенчатом адиабатическом реакторе непрерывного действия // Вестник ВГУИТ. Серия: Информационные технологии, моделирование и управление. 2015. № 2 (64). С. 55–60.

7 Островский Г.М., Волин Ю.М. Моделирование сложных химико-технологических схем. М.: Химия, 1975. С. 292–297.

8 Холохонова Л.И., Короткая Е.В. Кинетика химических реакций. Кемерово: Кемеров. техн. инст. пищ. пром., С. 4–11.

9 Башкатов Т.В., Жигалин Я.Л. Технология синтетических каучуков. Л.: Химия, 1987. С. 121.

REFERENCES

1 Boreskov G.K. Geterogennyi kataliz [Heterogeneous catalysis] Moscow, Nauka, 1986. 155 p. (in Russian)

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Виталий К. Битюков д. т. н., профессор, кафедра информационных и управляющих систем, Воронежский государственный университет инженерных технологий, пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия, president@vsuet.ru

Алексей П. Попов к.т. н., ст. преподаватель, кафедра информационных и управляющих систем, Воронежский государственный университет инженерных технологий, пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия, aleksej_p_91@mail.ru

Сергей Г. Тихомиров д. т. н., профессор, кафедра информационных и управляющих систем, Воронежский государственный университет инженерных технологий, пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия, tikhomirov_57@mail.ru

Олег Г. Неизвестный магистрант, кафедра информационных и управляющих систем, Воронежский государственный университет инженерных технологий, пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия, o.neizvestnyi@mail.ru

КРИТЕРИЙ АВТОРСТВА

Все авторы в одинаковой степени принимали участие в подготовке материала для рукописи. Ответственными за плагиат являются ст. преподаватель Попов А.П. и магистрант Неизвестный О.Г.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

ПОСТУПИЛА 17.01.2017

ПРИНЯТА В ПЕЧАТЬ 08.02.2017

динамики изменения параметров технологического процесса, нахождения оптимального режима эксплуатации и проектирования системы управления ступенями реакторного блока.

2 Bitukov V.K., Tikhomirov S.G., Podkopaeva S.V., Khromykh E.A. et al. Matematicheskoe modelirovanie ob'ektov upravleniya khimicheskoi promyshlennosti [Mathematical modeling of chemical industry facilities management. Theory and practice] Voronezh, VGUIT, 2011. (in Russian)

3 Zhatova I.A., Popov A.P., Alekseev M.V. Dynamics Simulation of coke on the catalytic dehydrogenation of ethylbenzene bed reactor during the manufacture of styrene. Nauchnyi vestnik VGASU [Scientific Bulletin VGASU. Series: Information Technology in the page, social, and economy systems] 2014, no. 2 (4), pp. 80–83. (in Russian)

4 Tretyakov, V.F., Talyshinsky R.M. Kinetika i dinamika geterogennykh kataliticheskikh neftekhimicheskikh protsessov [Kinetics and dynamics of heterogeneous catalytic petrochemical processes] Moscow, MITKhT, 2012. P. 74. (in Russian)

5 Ostrovsky N.M. Kinetika dezaktivatsii katalizatorov. Razrabotka metodov ikh primeneniya: avtoref. diss. ... doc. nauk [The kinetics of catalysts deactivation. The development of methods and their application. Abstr. dis. doc. tech. sci.] Omsk, 1998. 36 p. (in Russian)

6 Bitukov V.K., Zhatova I.A., Alekseev M.V., Popov A.P. The mathematical model development of the ethylbenzene dehydrogenation process kinetics in a two-stage adiabatic continuous reactor. Vestnik VGUIT [Proceedings of VSUET. Series: Information Technologies, Simulation and Control] 2015, no. 2 (64), pp. 55–60. (in Russian)

7 Ostrovsky G.M., Volin Yu.M. Modelirovanie slozhnykh khimiko-tekhnologicheskikh sistem [Modeling of complex chemical-engineering schemes] Moscow, Khimiya, 1975, pp. 292–297. (in Russian)

8 Kholokhonova L.I., Korotkaya E.V. Kinetika khimicheskikh reaktiv [Chemical reactions kinetics] Kemerovo, KTIPP, 2004, pp. 4–11. (in Russian)

9 Bashkatov T.V., Zhigalin Y.L. Tekhnologiya sinteticheskikh kauchukov [Synthetic Rubber Technology] Leningrad, Khimiya, 1987, 121 p. (in Russian)

INFORMATION ABOUT AUTHORS

Vitalii K. Bitukov doctor of technical sciences, professor, information and control systems department, Voronezh state university of engineering technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, 394036, Russia, president@vsuet.ru

Aleksei P. Popov candidate of technical sciences, senior lecturer, information and control systems department, Voronezh state university of engineering technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, 394036, Russia, aleksej_p_91@mail.ru

Sergei G. Tikhomirov doctor of technical sciences, professor, information and control systems department, Voronezh state university of engineering technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, 394036, Russia, tikhomirov_57@mail.ru

Oleg G. Neizvestnyi master student, information and control systems department, Voronezh state university of engineering technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, 394036, Russia, o.neizvestnyi@mail.ru

CONTRIBUTION

All authors equally participated in the preparation of material for manuscript. Senior lecturer Popov A.P. and master student Neizvestnyi O.G. are responsible for plagiarism.

CONFLICT OF INTEREST

The authors declare no conflict of interest.

RECEIVED 1.17.2017

ACCEPTED 2.8.2017