

УДК 66.095.253.097

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАДИИ СМЕШЕНИЯ РЕАГЕНТОВ ПРОИЗВОДСТВА ЭТИЛБЕНЗОЛА С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ГИДРОДИНАМИКИ

Белинская Н.С.*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Томск, e-mail: ns_belinskaya@sibmail.com*

Настоящая статья посвящена исследованию стадии смешения реагентов и каталитического комплекса в производстве этилбензола алкилированием бензола этиленом в присутствии каталитического комплекса хлорида алюминия. В данном исследовании использованы современные методы вычислительной гидродинамики и пакет прикладных программ для моделирования ANSYS FLUENT. Оценена эффективность смешения бензола и каталитического комплекса (однофазная жидкая система) при разных скоростях подачи потоков в камеру смешения, а также до и после установки смесительного устройства в камеру смешения. Показано, что установка смесительного устройства в камеру смешения позволяет повысить эффективность процесса смешения на 20%. Предложено технологическое решение по подаче этилена в смесительную камеру в дополнение к подаче этилена в реактор. Оценена эффективность смешения бензола, каталитического комплекса и этилена (двухфазная система «газ – жидкость») в зависимости от скорости подачи этилена в камеру смешения. Определена скорость подачи этилена в камеру смешения, обеспечивающая наиболее равномерное смешение реагентов и каталитического комплекса.

Ключевые слова: ANSYS FLUENT, алкилирование, бензол, этилен, вычислительная гидродинамика, смешение, двухфазная система «газ – жидкость»

MODELLING OF REAGENT MIXING STAGE IN ETHYLBENZENE PRODUCTION BY METHODS OF COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS

Belinskaya N.S.*National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, e-mail: ns_belinskaya@sibmail.com*

This article is dedicated to the study of reagents and catalytic complex mixing stage in the process of ethylbenzene production by alkylation of benzene by ethylene in the presence of catalytic complex of aluminum chloride. In this research modern methods of computational fluid dynamics and software for modelling ANSYS FLUENT were applied. The benzene and catalytic complex (one phase system) mixing efficiency at different flow rates in the mixing camera was estimated. The efficiency of mixing before and after installation of a mixing device into the camera was also estimated. It was showed that installation of the mixing device into the camera provides increasing the efficiency of mixing by 20%. The technology solution on injection ethylene into the mixing camera in addition to ethylene supply directly into the reactor was suggested. The benzene, catalytic complex and ethylene (two phase system «gas-liquid») mixing efficiency depending on the flow rate of ethylene into the camera was estimated. The ethylene flow rate into the mixing camera, which ensures the most uniform mixing of reagents and catalytic complex, was determined.

Keywords: ANSYS FLUENT, alkylation, benzene, ethylene, computational fluid dynamics, mixing, two phase system «gas-liquid»

Процесс алкилирования бензола этиленом является одним из крупнотоннажных процессов нефтехимической отрасли [1]. Это обусловлено тем, что получаемый продукт – этилбензол – используется в качестве полуфабриката для производства ценных конечных продуктов. Так, 90% этилбензола перерабатывается для получения стирола, используемого для производства полистирола.

Большинство реакторных блоков промышленных установок производства этилбензола включают 2 основные стадии: стадия смешения реагентов и реакционная стадия. Стадия смешения протекает в камерах различной конструкции. После данной стадии реагенты поступают в реактор [3].

Предварительное смешение реагентов является важной стадией производства,

в частности, в процессе алкилирования бензола этиленом в присутствии каталитического комплекса хлорида алюминия. Реагенты должны быть перемешаны равномерно до поступления их в реактор. Кроме того, так как процесс алкилирования бензола этиленом является двухфазным процессом, исследование динамики поведения газового потока в жидкости представляет особый интерес. Знание режима движения газовой и жидкой фаз, диспергирование, средний размер газовых пузырьков и их распределение в жидкой фазе, обеспечение требуемой степени смешения в камере смешения важны с точки зрения достижения большой реакционной поверхности, высокой скорости протекания реакций, а также селективности процесса.

Актуальной проблемой, возникающей на производстве этилбензола, использующего комплекс хлорида алюминия в качестве катализатора, является значительное количество сточных вод, загрязненных катионами алюминия [4]. Концентрация катионов алюминия в сточных водах составляет 5–15 г/л, что в 12,5–47,5 раз превышает ПДК, равную 0,4 мг/л. Эта проблема может быть решена путем повышения эффективности стадии предварительного смешения реагентов, так как более равномерное смешение приведет к более эффективному протеканию реакций и снижению потребления каталитического комплекса и, как следствие, снижению концентрации катионов алюминия в сточных водах.

Целью работы является исследование факторов, влияющих на эффективность смешения реагентов в процессе алкилирования бензола этиленом.

Материалы и методы исследования

В настоящее время для решения проблем, связанных с гидродинамикой жидкостей и газов, широко применяются методы вычислительной гидродинамики. Химическая промышленность является одной из основных, в которых используется моделирование

с применением методов вычислительной гидродинамики [2, 6, 7].

Исследование процессов с применением методов вычислительной гидродинамики включает следующие этапы:

1. Создание геометрии аппарата и разбиение ее на ячейки (создание сетки) в программе GAMBIT.
2. Моделирование аппарата в программе ANSYS FLUENT 14.5.
3. Обработка результатов в программе Tecplot.

Задачи исследования включают исследование поведения реагентов в камере смешения, эффективности и интенсивности процесса смешения, факторов, влияющих на процесс смешения для следующих случаев:

- 1) смешения бензола и каталитического комплекса;
- 2) смешения бензола, каталитического комплекса и этилена.

Конструкция камеры смешения схематично представлена на рис. 1.

Камера смешения заполнена каталитическим комплексом. Бензол поступает в камеру через патрубок диаметром $D_1 = 110$ мм и смешивается с каталитическим комплексом, который поступает в камеру через 2 патрубка: свежий каталитический комплекс подступает через патрубок диаметром $D_2 = 60$ мм, циркулирующий – через патрубок диаметром $D_3 = 110$ мм. Этилен подается через патрубок с диаметром $D_4 = 110$ мм. Длина смесительной камеры $L = 3000$ мм. Свойства исследуемых жидкостей и газа представлены в таблице.

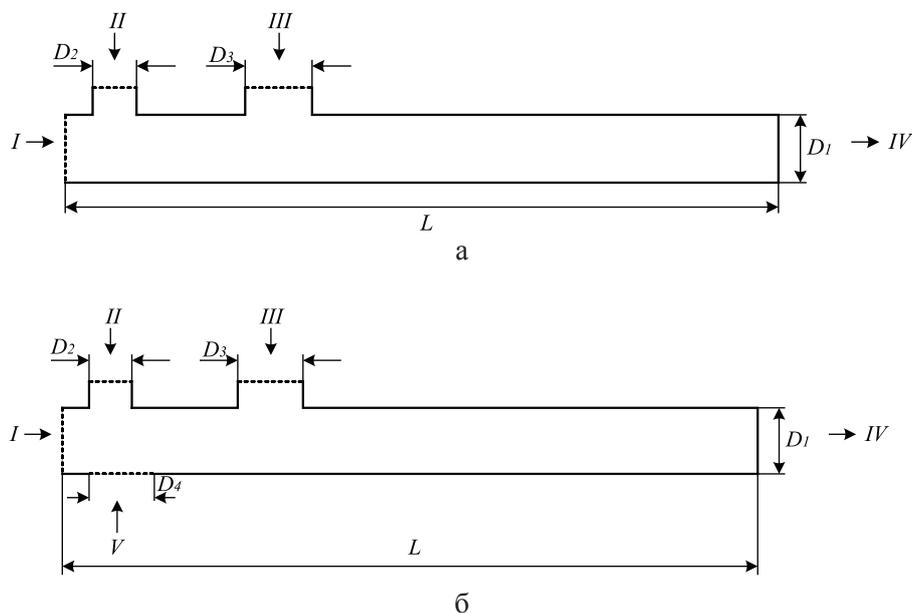


Рис. 1. Конструкция смесительной камеры:

I – бензол; *II* – свежий каталитический комплекс; *III* – циркулирующий каталитический комплекс; *IV* – смесь реагентов; *V* – этилен

Свойства исследуемых жидкостей и газа

Свойство	Бензол	Каталитический комплекс	Этилен
Плотность, кг/м ³	875	1050	1,137
Вязкость, кг·м ⁻¹ ·с ⁻¹	0,00060	0,00100	0,00001
Молекулярная масса, кг/кмоль	78,1	40,95	28,05

Температура в камере смешения: 390 К, давление: 0,15 МПа.

Для оценки режима движения в исследуемой камере смешения рассчитан критерий Рейнольдса [5]:

$$Re = \frac{wd\rho}{\mu} = \frac{0,042 \cdot 0,11 \cdot 875}{0,0006} = 6738,$$

где w – характерная скорость, м/с; d – гидравлический диаметр, м; ρ – плотность среды, кг/м³; μ – вязкость среды, кг·м⁻¹·с⁻¹.

Так как рассчитанное значение критерия Рейнольдса превышает критическое значение перехода течения от ламинарного к турбулентному (2320), то режим движения в камере смешения – турбулентный.

Для исследования эффективности процесса смешения были использованы следующие интегральные критерии:

- критерии для оценки эффективности в однофазном потоке (при смешении бензола с каталитическим комплексом)

$$J_1 = \frac{1}{V} \int_0^V C_{cat} (1 - C_{cat}) dy;$$

$$J_2 = \frac{1}{D} \int_0^D C_{cat} (1 - C_{cat}) dy,$$

где V – объем камеры смешения; C_{cat} – массовая концентрация каталитического комплекса; D – диаметр камеры смешения;

- критерии для оценки эффективности для двухфазного потока (при смешении бензола, каталитического комплекса и этилена)

$$J_3 = \frac{1}{V} \int_0^V C_{et} (1 - C_{et}) dy;$$

$$J_4 = \frac{1}{D} \int_0^D C_{et} (1 - C_{et}) dy,$$

где C_{et} – массовая концентрация этилена.

Результаты исследования и их обсуждение

Исследование смешения бензола и каталитического комплекса

Для оценки влияния скорости потоков на эффективность смешения и времени смешения (время, которое требуется для

достижения стационарного режима смешения, при котором концентрации жидкостей остаются постоянными во времени) были изучены два случая. В первом случае были приняты следующие значения скоростей потоков: скорость подачи бензола 0,042 м/с, скорость свежего каталитического комплекса 0,002 м/с, скорость циркулирующего каталитического комплекса 0,019 м/с. Во втором случае скорости потоков были уменьшены в 5 раз: скорость бензола 0,0084 м/с, скорость свежего каталитического комплекса 0,0004 м/с, скорость циркулирующего каталитического комплекса 0,0038 м/с.

Сравнение объемного и поверхностного интегральных критериев для двух случаев показало, что более низкая скорость потоков позволяет достичь более равномерного смешивания бензола и каталитического комплекса (рис. 2). Как видно из рис. 2, объемный интегральный критерий при более низких скоростях потоков превышает критерий для более высоких скоростей на 0,043 (на 21%), поверхностный интегральный критерий для второго случая превышает критерий для первого случая на 0,037 (на 18%).

В первом случае время смешения составляет 60 с, во втором случае – 320 с.

Несмотря на то, что в случае более низкой скорости потоков смешение происходит более равномерно, мощность установившейся реакции, количество целевого продукта в единицу времени снижается. Поэтому в промышленности используются смесительные устройства различной конструкции для повышения эффективности процессов смешения. Смесительные устройства позволяют достичь требуемой степени смешения без потери мощности установки. Линия 3 на рис. 2 показывает, что при скоростях подачи потоков в смесительную камеру, как в первом случае, установка смесителя позволяет повысить эффективность смешения на 20% при малом времени смешения (60 с).

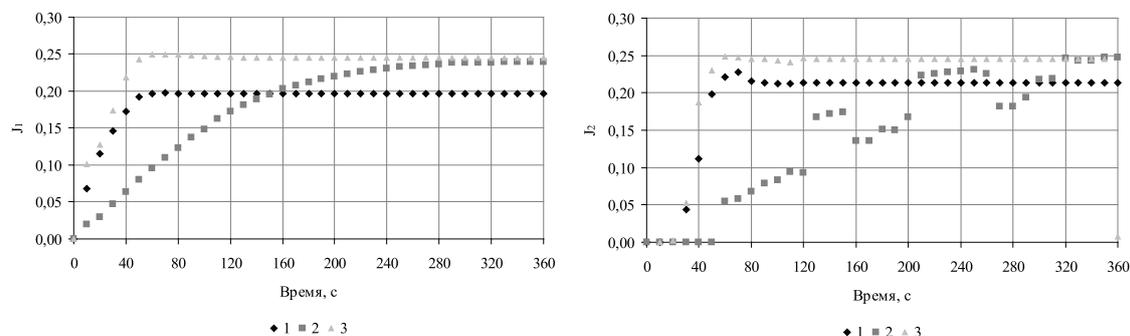


Рис. 2. Исследование смешения бензола и каталитического комплекса

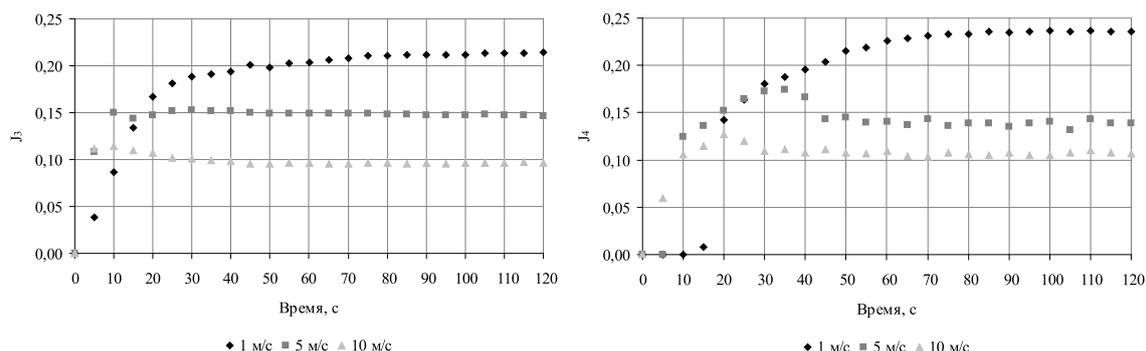


Рис. 3. Исследование влияния скорости подачи этилена на процесс смешения

Исследование смешения бензола, каталитического комплекса и этилена

Для того чтобы повысить степень превращения реагентов, этилен может подаваться не только непосредственно в реактор, но и в камеру смешения. Проведено моделирование камеры смешения с учетом подачи в нее этилена.

1. *Исследование влияния скорости подачи этилена в камеру смешения на процесс смешения*

Диаметр патрубка для подачи этилена составляет 5 мм. Исследование влияния скорости подачи этилена на процесс смешения было выполнено для скоростей 1, 5, 10 м/с. Результаты расчетов представлены на рис. 3.

Критерии J_3 и J_4 показывают степень смешения этилена и смеси жидких компонентов – бензола и каталитического комплекса.

Критерий J_3 для скорости подачи этилена 1 м/с больше, чем для скорости 5 м/с, на 0,068 (т.е. в случае скорости 1 м/с эффективность процесса смешения на 32% выше, чем при скорости 5 м/с). Критерий J_3 для скорости 1 м/с больше, чем для скорости

10 м/с, на 0,120 (т.е. в случае скорости 1 м/с эффективность процесса смешения на 56% выше, чем при скорости 10 м/с).

Критерий J_4 в случае подачи этилена со скоростью 1 м/с превышает этот критерий в случае скорости подачи этилена 5 м/с на 0,096, что эквивалентно на 41% более эффективному смешению в случае скорости 1 м/с. Критерий J_4 для случая подачи этилена со скоростью 1 м/с превышает этот критерий в случае скорости подачи этилена 10 м/с на 0,128, что эквивалентно на 55% более эффективному смешению в случае скорости 1 м/с.

Профили массовой концентрации этилена в смесительной камере представлены на рис. 4.

Как видно из рис. 4, при скорости подачи этилена в камеру смешения 1 м/с струя этилена разбивается на мелкие пузырьки диаметром 6–20 мм. Концентрация этилена в потоке составляет 0,40–0,60% мас. При скорости подачи этилена 5 и 10 м/с движение этилена представляет собой глобулярное течение крупных пузырьков, и струя не разбивается на мелкие пузырьки.

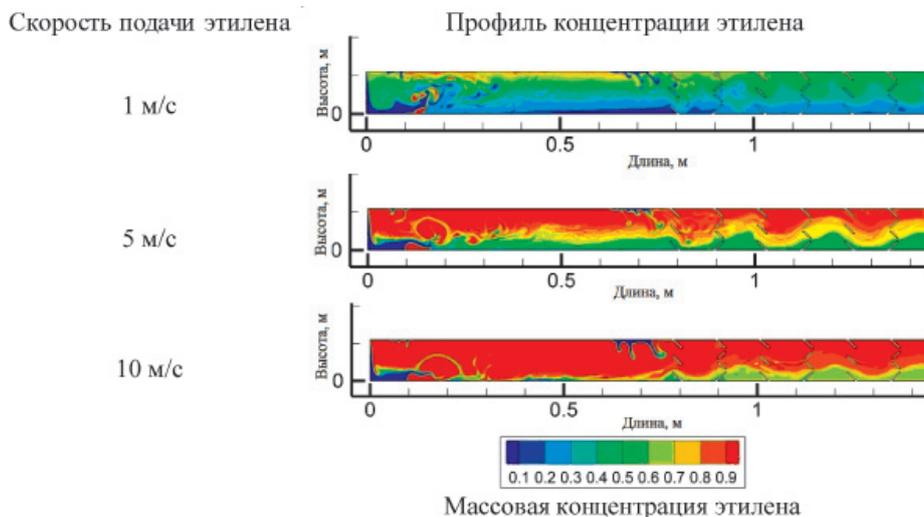


Рис. 4. Профили массовой концентрации этилена в камере смешения

Концентрация этилена находится в диапазоне 0,75–0,85 и 0,85–0,95 % мас. соответственно. Кроме того, этилен заполняет всё пространство камеры, что затрудняет прохождение жидкости в камеру смешения.

Таким образом, при скорости подачи этилена 1 м/с наблюдается более равномерное смешение реагентов и каталитического комплекса процесса алкилирования бензола этиленом, так как образуются более мелкие пузырьки этилена, что увеличивает реакционную поверхность для протекания реакций с более высокой скоростью и селективностью. Также показано, что пузырьки этилена имеют диаметр не более 20 мм и равномерно распределяются в объеме камеры смешения как дисперсная фаза.

Заключение

Путем моделирования с использованием методов вычислительной гидродинамики показано, что установка смесительного устройства в камеру смешения реагентов и каталитического комплекса на установке алкилирования бензола этиленом позволяет повысить эффективность процесса смешения на 20%. Предложено технологическое решение по подаче этилена в смесительную камеру в дополнение к подаче этилена в реактор. Определена скорость подачи этилена в камеру смешения (1 м/с), обеспечивающая наиболее равномерное смешение бензола, этилена и каталитического комплекса в камеру смешения.

Список литературы

1. Берберов А.Б., Афонин Д.С., Борзаев Х.Х., Иванов Е.В., Гушин П.А. Алкилирование бензола этиленом // Башкирский химический журнал – 2014. – Т. 21. – № 1. – С. 5–8.
2. Гусева Е.В., Сафаров Р.Р., Меньшутина Н.В., Будран Ж. Подход к моделированию, масштабированию и оптимизации работы биореакторов на основании вычислительной гидродинамики // Программные продукты и системы. – 2015. – № 4 (112). – С. 249–255.
3. Долганова И.О., Белинская Н.С., Ивашкина Е.Н., Мартемьянова Е.В., Ткачев В.В. Повышение эффективности

технологии получения этилбензола с использованием метода математического моделирования // Фундаментальные исследования. – 2013. – № 8. – С. 595–600.

4. Ивашкина Е.Н., Хлебникова Е.С., Беккер А.В., Белинская Н.С. Исследование процесса смешения реагентов в технологии алкилирования бензола этиленом с использованием методов вычислительной гидродинамики // Химическая промышленность сегодня. – 2014. – № 8. – С. 46–56.

5. Касаткин А.Г. Основные процессы и аппараты химической технологии: учеб. для вузов. – 10-е изд., стереотипное, доработанное. Перепечатано с изд. 1973 г. – М.: ООО ТИД «Альянс», 2004. – 753 с.

6. Кленов О.П., Носков А.С. Вычислительная гидродинамика в разработке каталитических реакторов // Катализ в промышленности. – 2011. – № 4. – С. 52–62.

7. Терещенко К.А., Улитин Н.В., Набиев Р.Р. Расчет гидродинамических и температурных условий в реакторе синтеза битилкаучука с применением методов вычислительной гидродинамики // Вестник Казанского технологического университета. – 2013. – Т. 16. – № 21. – С. 150–156.

References

1. Berberov A.B., Afonin D.S., Borzaev H.H., Ivanov E.V., Gushin P.A. Alkilirovanie benzola jetilenom // Bashkirskij himicheskij zhurnal 2014. Vol. 21. no. 1. pp. 5–8.
2. Guseva E.V., Safarov R.R., Menshutina N.V., Budran Zh. Podhod k modelirovaniju, masshtabirovaniju i optimizacii raboty bioreaktorov na osnovanii vychislitelnoj gidrodinamiki // Programmnye produkty i sistemy. 2015. no. 4 (112). pp. 249–255.
3. Dolganova I.O., Belinskaya N.S., Ivashkina E.N., Martemjanova E.V., Tkachev V.V. Povyshenie jeffektivnosti tehnologii polucheniya jetilbenzola s ispolzovaniem metoda matematicheskogo modelirovanija // Fundamentalnye issledovanija. 2013. no. 8. pp. 595–600.
4. Ivashkina E.N., Hlebnikova E.S., Bekker A.V., Belinskaya N.S. Issledovanie processa smesheniya reagentov v tehnologii alkilirovanija benzola jetilenom s ispolzovaniem metodov vychislitelnoj gidrodinamiki // Himicheskaja promyshlennost segodnja. 2014. no. 8. pp. 46–56.
5. Kasatkin A.G. Osnovnye processy i apparaty himicheskoy tehnologii: ucheb. dlja vuzov. 10-e izd., stereotipnoe, dorabotannoe. Perepechatano s izd. 1973 g. M.: ООО ТИД «Альянс», 2004. 753 p.
6. Klenov O.P., Noskov A.S. Vychislitel'naja gidrodinamika v razrabotke kataliticheskikh reaktorov // Kataliz v promyshlennosti. 2011. no. 4. pp. 52–62.
7. Tereshhenko K.A., Ulitin N.V., Nabiev R.R. Raschet gidrodinamicheskikh i temperaturnyh uslovij v reaktore sinteza bitilkauchuka s primeneniem metodov vychislitelnoj gidrodinamiki // Vestnik Kazanskogo tehnologicheskogo universiteta. 2013. Vol. 16. no. 21. pp. 150–156.