

УДК 62-555.621.9

DOI: 10.17223/00213411/64/7/115

ZHAO DU, QIAN LIU, YUXUAN YANG

КАТАЛИТИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА И CFD-МОДЕЛИРОВАНИЕ МНОГОСТУПЕНЧАТОГО КОМБИНИРОВАННОГО УДАЛЕНИЯ ХВОСТОВОГО ГАЗА АКРИЛОНИТРИЛА *

Предлагается многоступенчатый комбинированный каталитический кинетический анализ и CFD-имитационный анализ совместного удаления хвостового газа акрилонитрила. Основываясь на представлениях о многостадийных комбинированных правилах каталитической реакции, при помощи матричных преобразований решается многостадийная комбинированная каталитическая реакционная сеть. Определен возможный путь реакции в данной реакционной сети. Для определения динамических факторов и параметров применялось программное обеспечение и генетический алгоритм. Экспериментальные результаты показывают, что наблюдаются внутренние и внешние диффузионные эффекты. Многоступенчатая комбинированная каталитическая кинетическая модель использует сетчатый катализатор, внутренняя и внешняя диффузия не влияет на удаление хвостового газа.

Ключевые слова: хвостовой газ акрилонитрила, многостадийный комбинированный катализ, кинетика, CFD-моделирование.

Введение

Акрилонитрил – бесцветная или светло-желтая жидкость, высокотоксичная и взрывоопасная, поэтому необходимы строгие меры безопасности. В то же время акрилонитрил является отличным растворителем и химическим сырьем. Это важный и широко используемый продукт [1, 2]. Акрилонитрил получают, в основном, путем аммоксидирования пропилена. Отходящий газ – это, в основном, хвостовой газ, который содержит пропилен, пропан, монооксид углерода, следы акрилонитрила и других вредных компонентов. Если этот газ будет сбрасываться в атмосферу, то вызовет опасное загрязнение. В настоящее время методами очистки являются адсорбция, прямое, регенеративное и каталитическое сжигание, биологическая очистка. Для решения актуальных задач необходимо выяснить реакции в процессе каталитического крекинга. Наиболее эффективным методом изучения является моделирование [3, 4]. В работе [5] получено выражение полного окисления этилена, пропана и их смесей на катализаторе Pd/AI₂O₃. В [6] исследовано горение пропана на перовските, а в [7] – гидрирование ацетонитрила с активированным углем в качестве катализатора. Характеристики гидрирования полистирола для получения ацетонитрила изучены в [8]. Метод агрегации, представляющий прорыв в исследовании различных компонентов в катализе, предложен в [4–9]. В каталитических процессах протекает множество видов реакций, причем большинство из них являются реакциями параллельными и последовательными с сильной связью между собой. Кроме того, кинетика горения тесно связана с характеристиками катализатора и видами реакций. В настоящее время отсутствуют доступные кинетические данные для уравнения скорости каталитического горения хвостового газа акрилонитрила. Поэтому необходимо изучить многостадийную комбинированную каталитическую кинетику удаления СО из хвостового газа акрилонитрила.

Многостадийная комбинированная каталитическая кинетика удаления СО из хвостового газа акрилонитрила**Анализ каталитической реакционной сети для удаления хвостового газа**

Сложность последовательной параллельной реакционной сети возрастает с увеличением глубины реакции, поэтому анализируется сеть совместного удаления хвостового газа акрилонитрила, строится динамическая модель. Реакционная сеть хвостового газа акрилонитрила показана на рис. 1. На основе правил реакции [10] получена реакционная сеть из сырья, прошедшего 9 этапов: 1 – открытие кольца, 2 – дегидрирование, 3 – деалкилирование, 4 – крекинг боковой цепи, 5 – дегидроароматизацию, 6 – образование конденсационного кокса, 7 – термический крекинг, 8 – термический крекинг, 9 – дегидрирование.

* Исследование проводится при поддержке Ключевого научно-исследовательского проекта в провинции Хэбэй, Китай (грант № 19273709D).

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>