

# Математическая модель процесса разложения получения фенола и ацетона кумольным методом

И.З. Байназаров<sup>1</sup>, Ю.С. Лавреньева<sup>2</sup>, И.В. Ахметов<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт Нефтехимии и Катализа РАН, проспект Октября 141, Уфа, Россия, 450075

<sup>2</sup>ООО «РН-УфаНИПИнефть», Бехтерева 3/1, Уфа, Россия, 450103

<sup>3</sup>Уфимский государственный нефтяной технический университет, Космонавтов 1, Уфа, Россия, 450062

**Аннотация.** В работе приводится обзор промышленного процесса получения фенола и ацетона с целью использования математических методов моделирования для выбора оптимальных режимных условий проведения процесса разложения ГПИПБ кумольным методом.

## 1. Введение

В настоящее время одним из перспективных направлений в органическом синтезе является производство фенола и ацетона через гидроперекись изопропилбензола [1].

Ранее нами был описан обзор технологического процесса и его роли [2].

В качестве объекта исследования выбран узел разложения РМО. Реакция разложения, являющаяся одной из стадий промышленного процесса совместного получения фенола и ацетона кумольным методом, во многом определяет селективность процесса в целом следует отметить, что за 60 лет существования промышленного процесса получения ГПИПБ не создана ни одна математическая модель промышленной реакции.

Актуальность объясняется необходимостью усовершенствования технологии фенола, связанной с тем, что фенол является базовым продуктом химической промышленности. Существующая технология осложнена многократными рециклами потоков, что приводит к накоплению побочных продуктов в системе и снижению технологических показателей производства (скорости и селективности основных процессов, качества товарных продуктов), а также повышению энергоемкости производства. Производство осуществляется на старых мощностях и практически не существует программного обеспечения, которая могла бы прогнозировать технологический процесс.

## 2. Математическая модель процесса разложения ГПИПБ

В промышленности наибольшее распространение получил способ разложения ГПИПБ в две стадии (двустадийный способ): на 1 стадии распадается основная масса ГПИПБ (рисунок 1), на 2 стадии реакционная масса разложения (РМР) нагревается до температуры, при которой

доразлагается пероксид дикумила (ПДК) и не разложившийся ГПИПБ превращаются в фенол и ацетон:

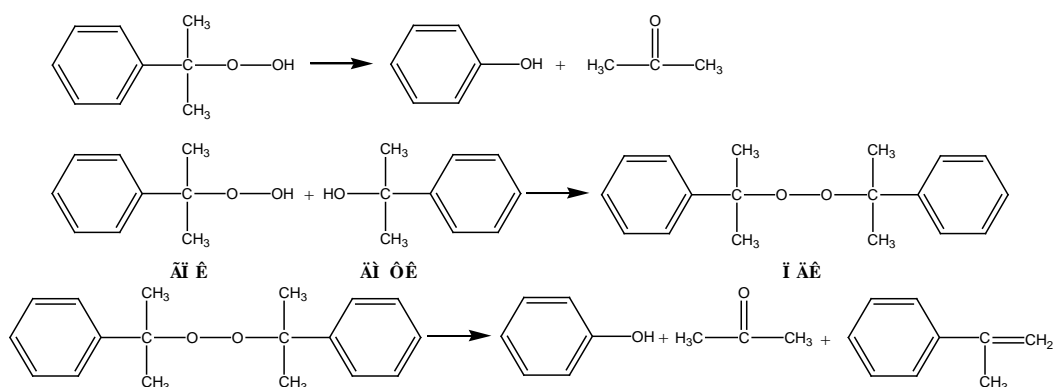


Рисунок 1. Разложение ГПИПБ в две стадии.

В настоящее время норму технологического режима узла разложения ГПИПБ регулируют исключительно количеством рецикла потока. Анализ состава реакционной массы показывает, что на первой стадии разложения образуется около 2-3 % компонентов смолы фенола. С целью повышения эффективности работы узла разложения ГПИПБ и оптимизации процесса в целом нами разрабатывается математическая модель на реально существующем производстве фенола и ацетона, где учтены все основные реакции, происходящие на данной стадии, с параметрами уравнения Аррениуса (таблица 1).

Таблица 1. Параметры реакций узла разложения ГПИПБ.

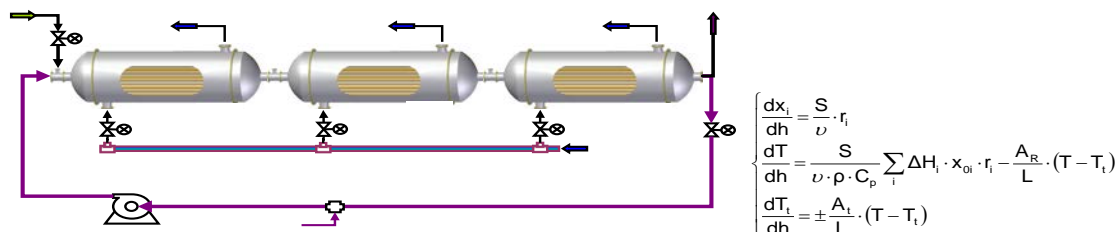
№ п/п	Основные реакции I стадии	E, кДж/кмоль	A	$\Delta H_{xp} \cdot 10^{-5}$ , кДж/кмоль
1	ГПИПБ $\xrightarrow{H^+}$ фенол + ацетон	53500	$1,75 \cdot 10^{11}$	- 2,353
2	ГПИПБ + ДМФК $\xrightarrow{H^+}$ ПДК + H <sub>2</sub> O	56400	$9,51 \cdot 10^{10}$	0,622
3	ДМФК $\xrightarrow{H^+}$ МС + H <sub>2</sub> O	85100	$5,23 \cdot 10^{13}$	1,764
4	ДМФК + фенол $\xrightarrow{H^+}$ КФ + H <sub>2</sub> O	82500	$2,58 \cdot 10^{12}$	0,951
5	2 ДМФК $\xrightarrow{H^+}$ ди-МС + 2 H <sub>2</sub> O	72400	$1,74 \cdot 10^{12}$	1,360

E и A – параметры уравнения Аррениуса;  $\Delta H_{xp}$  - тепловые эффекты реакций, рассчитанные при стандартных условиях; КФ – кумилфенол; ди-МС – димер МС.

В научной литературе упоминается о наличии математической модели данного процесса с расположением адиабатических реакторов расположенных параллельно и работающих одновременно соответственно. Однако в данном случае эта кинетическая модель, не соответствует реакторному блоку аппаратов работающих последовательно как реализовано в нашем случае. Также, имеющиеся модели не учитывает параметры аппаратного блока, реальные режимы технологических процессов, их состав, количество, давление и температуру, составы исходных смесей, побочные реакции и т.д. [3] Разрабатываемая нами математическая модель позволит определить влияние рециркуляции потоков данной стадии, размерность аппаратов, зависимость всех параметров реального режима разложения РМР по всей стадии узла разложения ГПИПБ.

Ниже показана схема расположения реакторов первой стадии процесса разложения ГПИПБ (рисунок 2). На данной стадии аппараты можно относить как к реакторам так и к

теплообменникам. Также нами рассматривается данная математическая модель на адекватность для данной узловой сборки реакторов (рисунок 2).



**Рисунок 2.** Схема расположения реакторов первой стадии процесса разложения ГПИПБ.

Алгоритм расчета и математическая модель процесса будет рассчитана в программе Matcad основываясь на кинетику процесса. В основу кинетической модели заложены основные реакции показанные в таблице 1. Изменение концентраций можно описать следующим видом дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{d[\Gamma\Pi K]}{dt} = -(k_1 [\Gamma\Pi K] + k_2 [\Delta M \Phi K]) \cdot [\Gamma\Pi K] [\text{kat}] \\ \frac{d[\Delta M \Phi K]}{dt} = -(k_2 [\Gamma\Pi K] + k_3 + k_4 [\Phi] + k_5 [\Delta M \Phi K]) \cdot [\Delta M \Phi K] [\text{kat}] \\ \frac{d[\Phi]}{dt} = (k_1 [\Gamma\Pi K]^2 - k_4 [\Delta M \Phi K] [\Phi]) [\text{kat}] \\ \frac{d[A\omega]}{dt} = k_1 [\Gamma\Pi K]^2 [\text{kat}] \\ \frac{d[\Pi \Delta K]}{dt} = k_2 [\Gamma\Pi K] [\Delta M \Phi K] [\text{kat}] \\ \frac{d[MC]}{dt} = k_3 [\Delta M \Phi K] [\text{kat}] \\ \frac{d[K\Phi]}{dt} = k_4 [\Delta M \Phi K] [\Phi] [\text{kat}] \\ \frac{d[\Delta MC]}{dt} = k_5 [\Delta M \Phi K]^2 [\text{kat}] \\ \frac{d[H_2O]}{dt} = (k_2 [\Gamma\Pi K] + k_3 + k_4 [\Phi] + 2k_5 [\Delta M \Phi K]) \cdot [\Delta M \Phi K] [\text{kat}] \end{cases}$$

### 3. Заключение

На данном этапе нами проведен анализ математических методов, алгоритмов, применяемых при решении задач для реакции разложения ГПИПБ. Изучены алгоритмы решения прямой и обратной задач. Также, произведено обследование производства и обработаны статистические материалы в разные периоды работы предприятия, выявлены слабые узлы производства.

В дальнейшем планируется разработать математическую модель кислотно-каталитического разложения ГПИПБ с целью управления и оптимизации промышленного процесса и сделать соответствующие выводы.

### 4. Литература

- [1] Закошанский, В.М. Фенол и ацетон: Анализ технологий, кинетики и механизма основных реакций / В.М. Закошанский. – СПб.: ХИМИЗДАТ, 2009. – 13 с.
- [2] Байназаров, И.З. V Всероссийская научно-практическая конференция «Математическое моделирование процессов и систем» / И.З. Байназаров, И.М. Губайдуллин. – Стерлитамак: ГАНУ Институт прикладных исследований РБ, 2016.
- [3] Дахнави, Э.М. Математическая модель разложения гидропероксида кумола в теплообменнике / Э.М. Дахнави // Нефтепереработка и нефтехимия. – 2010. – №2. – С.30-33.

# Mathematical model of process of production of phenol and acetone from cumene hydroperoxide

I.Z. Baynazarov<sup>1</sup>, U.S. Lavrentieva<sup>2</sup>, I.V. Akhmetov<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Institute of petrochemistry and catalysis of the Russian Academy of Science, Prospect Oktyabrya, 141, Ufa, Russia, 450075

<sup>2</sup>Ltd «RN-UfaNIPIneft», Bekhtereva, 3/1, Ufa, Russia, 450103

<sup>3</sup>Ufa State Petroleum Technological University, Kosmonavtov, 1, Ufa, Russia, 450062

**Abstract.** In this work the beginning of system analysis of the main stages of process of production of phenol and acetone with the aim of using mathematical modelling methods for selecting the optimal regime conditions for cumene method is provided.

**Keywords:** mathematical model, decomposition, phenol, acetone.