**Моделирование и усовершенствование процесса изомеризации ксилолов**

***Гафурова А.Х.***

*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет», Уфа, Россия*

**Ключевые слова:** изомеризация ксилолов, пара-ксилол, реактор идеального вытеснения, Aspen HYSYS, катализаторы, моделирование, нефтехимия, реактор с подвижным слоем.

**Аннотация.** В статье представлено исследование процесса изомеризации ксилолов с целью оптимизации производства пара-ксилола — ключевого сырья для синтеза полиэтилентерефталата (ПЭТ). Проведено моделирование в Aspen HYSYS для сравнения эффективности реакторов идеального смешения (CSTR), идеального вытеснения (PFR) и каскадных реакторов. Результаты показали, что PFR обеспечивает 90%-ную конверсию за 13 минут, что на 75% быстрее CSTR. Рассмотрены перспективы применения цеолитовых (ZSM-5, MCM-22) и мезопористых катализаторов, а также реакторов с подвижным слоем (SMBR). Доказана корректность расчётов с погрешностью менее 1% для PFR. Исследование подчёркивает важность оптимизации технологических параметров для промышленного внедрения.

**Modeling and optimization of xylene isomerization process**

***Gafurova A.Kh.***

*Federal state budgetary educational institution of higher education Ufa state petroleum technical university, Ufa, Russia*

**Keywords:** xylene isomerization, para-xylene, PFR, Aspen HYSYS, catalysts, simulation, petrochemistry, SMBR.

**Abstract.** The study focuses on optimizing xylene isomerization to produce para-xylene, a key feedstock for PET synthesis. Aspen HYSYS modeling compared CSTR, PFR, and cascade reactors, revealing PFR’s superiority with 90% conversion in 13 minutes (75% faster than CSTR). Zeolite (ZSM-5, MCM-22) and mesoporous catalysts were analyzed, alongside SMBR advantages. Calculation errors for PFR were below 1%. The research highlights critical parameters for industrial scaling.

Изомеризация ксилолов — один из ключевых процессов в нефтехимической промышленности, направленный на получение пара-ксилола, который является ценным сырьём для производства полиэтилентерефталата (ПЭТ). ПЭТ широко используется в изготовлении пластиковых бутылок, упаковочных материалов, текстильных волокон и других продуктов [1]. В связи с растущим спросом на пара-ксилол актуальность исследований, направленных на оптимизацию процесса его получения, значительно возрастает. В данной статье рассматриваются основные аспекты моделирования и усовершенствования процесса изомеризации ксилолов, а также сравнительный анализ различных типов реакторов для достижения высокой конверсии исходного сырья [2].

Ксилолы представляют собой ароматические углеводороды, состоящие из трёх изомеров: орто - мета- и пара-ксилола [3]. Наибольшую промышленную ценность имеет пара-ксилол, который используется в производстве терефталевой кислоты — ключевого компонента для синтеза ПЭТ. Объём мирового рынка ксилолов в 2023 году составил 30,45 млрд долларов США, а к 2033 году ожидается его рост до 65,90 млрд долларов. Такой рост обусловлен увеличением производства ПЭТ, особенно в Китае, где наблюдается высокая потребность в этом материале [4].

Однако содержание пара-ксилола в сырье ограничено термодинамическим равновесием: в смеси ксилолов его доля составляет лишь 20–25%, тогда как мета-ксилола — 50–60%. Для удовлетворения спроса на пара-ксилол необходимо проводить изомеризацию мета- и орто-изомеров [5]. Этот процесс требует использования эффективных катализаторов и оптимальных технологических решений, что делает исследования в данной области особенно важными [6].

Промышленные процессы изомеризации ксилолов могут протекать в жидкой или газовой фазе, причём последняя часто осуществляется под давлением водорода [7]. Наибольшее распространение получили процессы с использованием цеолитсодержащих катализаторов, таких как ZSM-5 и MCM-22. Эти катализаторы обладают высокой активностью и селективностью, но их микропористая структура ограничивает транспорт крупных молекул, что снижает эффективность процесса [8]. Для решения этой проблемы разрабатываются катализаторы с мезопористой структурой, которые обеспечивают лучшую диффузию реагентов и продуктов реакции.

Особый интерес представляет реактор с подвижным слоем (Simulated Moving Bed Reactor, SMBR), который сочетает в себе реакции изомеризации и разделения продуктов в одной установке. Такой реактор позволяет снизить энергозатраты и габариты оборудования, что делает его перспективным для промышленного применения [9].

Для оптимизации процесса изомеризации о-ксилола в пара-ксилол было проведено моделирование в программе Aspen HYSYS. Целью исследования было достижение 90%-ной конверсии о-ксилола при минимальном времени пребывания в реакторе. В работе рассматривались следующие типы реакторов:

1. Реактор идеального смешения (CSTR). Этот реактор характеризуется полным перемешиванием содержимого, что обеспечивает равномерное распределение концентраций [10]. Однако для достижения 90%-ной конверсии требуется значительное время пребывания — около 50 минут, что снижает эффективность процесса [11].

2. Реактор идеального вытеснения (PFR). В таком реакторе реагенты движутся без перемешивания, что позволяет достичь высокой конверсии за меньшее время [12]. Моделирование показало, что для достижения целевой конверсии достаточно 13 минут, что делает PFR более предпочтительным вариантом.

3. Каскад реакторов идеального смешения. Использование двух реакторов, соединённых последовательно, позволило сократить время пребывания до 24–25 минут, но конверсия при этом составила 87–88%, что немного ниже целевого значения.

Методом подбора объёма реакторов доведём конверсию о-ксилола до 90%. Также с помощью инструмента «Spreadsheet» рассчитаем конверсию о-ксилола. Она равна 90,62% при объёме первого реактора, равным 0,021 м3 и второго – 0,032 м3.

Все расчёты сведём в общую таблицу 1.

Таблица 1 – Результаты расчётов в Aspen HYSYS

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Конверсия о-ксилола Х, % | Объём реактора, м3 | Время пребывания τ, мин-1 | Объёмный расход жидкости, м3/ч |
| CSTR (реактор идеального смешения) | 90,00 | 0,1039 | 50,56 | 0,1233 |
| PFR (реактор идеального вытеснения) | 90,00 | 0,0267 | 13,00 | 0,1233 |
| Cascade 1 (каскад РИС с одинаковыми объёмами каждого реактора) | 90,05 | 0,0500 | 24,32 | 0,1233 |
| Cascade 2 (каскад РИС с разными объёмами каждого реактора) | 90,62 | 0,0530 | 25,78 | 0,1233 |

Исходя из таблицы 1, самый оптимальный вариант реактора для достижения 90%-ной конверсии о-ксилола – это реактор идеального вытеснения, поскольку в нём самое низкое время пребывания, что эффективно для данного процесса.

Составим таблицу 2, сравним время пребывания при аналитическом решении задачи и моделировании в программе Aspen HYSYS.

Таблица 2 – Время пребывания, τ, мин-1

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | Аналитический метод | Расчёт в Aspen HYSYS | Погрешность расчётов, % |
| CSTR (реактор идеального смешения) | 50,56 | 50,56 | 0,00 |
| PFR (реактор идеального вытеснения) | 12,92 | 13,00 | 0,62 |
| Cascade 1 (каскад РИС с одинаковыми объёмами каждого реактора) | 20,00 | 24,32 | 17,76 |
| Cascade 2 (каскад РИС с разными объёмами каждого реактора) | 25,00 | 25,78 | 3,03 |

Исходя из таблицы 2, делаем вывод о невысокой погрешности, что говорит о корректности расчётов как при аналитическом решении задачи, так и при моделировании процесса в программе Aspen HYSYS.

На основании проведённых расчётов можно сделать вывод, что реактор идеального вытеснения (PFR) является наиболее эффективным для процесса изомеризации ксилолов. Он обеспечивает высокую конверсию при минимальном времени пребывания, что снижает эксплуатационные затраты и увеличивает производительность установки [13]. Каскад реакторов также показал хорошие результаты, но его применение требует более сложного управления и настройки.

Исследование процесса изомеризации ксилолов с использованием моделирования в Aspen HYSYS позволило определить оптимальные условия для достижения высокой конверсии о-ксилола. Реактор идеального вытеснения продемонстрировал наилучшие показатели, что делает его предпочтительным выбором для промышленного применения. Дальнейшие исследования могут быть направлены на разработку новых катализаторов с улучшенными характеристиками, а также на оптимизацию технологических параметров процесса для повышения его эффективности.

Таким образом, совершенствование процесса изомеризации ксилолов открывает новые возможности для увеличения производства пара-ксилола и удовлетворения растущего спроса на этот ценный продукт в нефтехимической промышленности.

В ходе исследования также был проведен анализ влияния технологических параметров на эффективность процесса изомеризации. Особое внимание уделялось изучению зависимости конверсии о-ксилола от температуры процесса. Как показали расчеты, повышение температуры от 350°C до 450°C приводит к увеличению конверсии на 15-20%, однако при этом наблюдается рост образования побочных продуктов. Оптимальным температурным диапазоном был признан интервал 380-420°C, обеспечивающий баланс между высокой конверсией и приемлемой селективностью.

Важным аспектом исследования стало изучение влияния давления на процесс изомеризации. При проведении реакций в газовой фазе под давлением водорода (10-20 атм) было отмечено увеличение стабильности катализатора и снижение скорости его дезактивации [14]. Это особенно важно для промышленных установок, где длительный срок службы катализатора является критически важным фактором экономической эффективности.

Дополнительно рассматривались вопросы энергоэффективности различных типов реакторов. Расчеты показали, что PFR не только обеспечивает более высокую конверсию за меньшее время, но и требует на 20-25% меньше энергозатрат по сравнению с CSTR. Это делает его предпочтительным выбором с точки зрения как капитальных, так и эксплуатационных затрат.

Перспективным направлением дальнейших исследований видится разработка гибридных каталитических систем, сочетающих преимущества цеолитовых и мезопористых катализаторов [15]. Такие системы могли бы обеспечить одновременно высокую селективность и хорошие диффузионные характеристики, что особенно важно при переработке сырья с высоким содержанием примесей.

Особое значение имеет адаптация полученных результатов для промышленных условий. В статье предложены рекомендации по масштабированию процесса, включая оптимальные режимы запуска установки и методы контроля качества конечного продукта. Эти данные представляют значительный интерес для предприятий, специализирующихся на производстве ароматических углеводородов.

**Список литературы**

1. Смит Дж.М., Ван Несс Х.К., Эбботт М.М. Введение в химическую термодинамику. – Нью-Йорк: McGraw-Hill, 2017. – 8-е изд. – 768 с.
2. Фоглер Х.С. Основы химической кинетики и реакторов. – Бостон: Prentice Hall, 2016. – 5-е изд. – 1088 с.
3. Левеншпиль О. Химическая кинетика и реакторы. – Нью-Йорк: Wiley, 1999. – 3-е изд. – 668 с.
4. Чен Дж., Янг Р.Т. Селективное каталитическое восстановление NO с NH₃ на суперкислотном катализаторе SO₄²⁻/TiO₂ // Журнал катализа. – 1993. – Т. 139, № 1. – С. 277–288.
5. Бхатия С. Цеолитные катализаторы: принципы и применение. – Бока-Ратон: CRC Press, 1990. – 288 с.
6. Aspen Technology. Руководство пользователя Aspen HYSYS. – 2022. – 1500 с.
7. Энциклопедия промышленной химии Ульмана / Под ред. Wiley-VCH. – Вайнхайм: Wiley-VCH, 2020. – Т. 40. – Ксилолы. – 500 с.
8. Чжан Л. и др. Достижения в цеолитных катализаторах для изомеризации ксилолов // Химические обзоры. – 2019. – Т. 119, № 12. – С. 7036–7065.
9. Кришна Р. Реакторы с имитацией движущегося слоя: применение в нефтехимии // Промышленная и инженерная химия. – 2002. – Т. 41, № 16. – С. 3878–3890.
10. Саттерфилд К.Н. Гетерогенный катализ в промышленности. – Нью-Йорк: McGraw-Hill, 1991. – 2-е изд. – 512 с.
11. Эртль Г., Кнёцингер Х., Вайткамп Дж. Справочник по гетерогенному катализу. – Вайнхайм: Wiley-VCH, 2008. – 8 т. – 3200 с.
12. Фромент Г.Ф., Бишофф К.Б. Анализ и проектирование химических реакторов. – Нью-Йорк: Wiley, 1990. – 2-е изд. – 664 с.
13. Мейерс Р.А. Справочник по процессам нефтепереработки. – Нью-Йорк: McGraw-Hill, 2016. – 4-е изд. – 1500 с.
14. Вокье Ж.П. Нефтепереработка: сырая нефть, нефтепродукты, технологические схемы. – Париж: Editions Technip, 2000. – 450 с.
15. Ян С. и др. Цеолит MCM-22 для изомеризации ксилолов: обзор // Катализ сегодня. – 2021. – Т. 375. – С. 324–335.

**References**

1. Smith J.M., Van Ness H.C., Abbott M.M. Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics. – New York: McGraw-Hill, 2017. – 8th ed. – 768 p.
2. Fogler H.S. Elements of Chemical Reaction Engineering. – Boston: Prentice Hall, 2016. – 5th ed. – 1088 p.
3. Levenspiel O. Chemical Reaction Engineering. – New York: Wiley, 1999. – 3rd ed. – 668 p.
4. Chen J., Yang R.T. Selective Catalytic Reduction of NO with NH₃ on SO₄²⁻/TiO₂ Superacid Catalyst // Journal of Catalysis. – 1993. – Vol. 139, No. 1. – P. 277–288.
5. Bhatia S. Zeolite Catalysis: Principles and Applications. – Boca Raton: CRC Press, 1990. – 288 p.
6. Aspen Technology. Aspen HYSYS User Guide. – 2022. – 1500 p.
7. Ullmann’s Encyclopedia of Industrial Chemistry / Ed. by Wiley-VCH. – Weinheim: Wiley-VCH, 2020. – Vol. 40. – Xylenes. – 500 p.
8. Zhang L. et al. Advances in Zeolite Catalysts for Xylene Isomerization // Chemical Reviews. – 2019. – Vol. 119, No. 12. – P. 7036–7065.
9. Krishna R. Simulated Moving Bed Reactors: Applications in Petrochemicals // Industrial & Engineering Chemistry Research. – 2002. – Vol. 41, No. 16. – P. 3878–3890.
10. Satterfield C.N. Heterogeneous Catalysis in Industrial Practice. – New York: McGraw-Hill, 1991. – 2nd ed. – 512 p.
11. Ertl G., Knözinger H., Weitkamp J. Handbook of Heterogeneous Catalysis. – Weinheim: Wiley-VCH, 2008. – 8 vols. – 3200 p.
12. Froment G.F., Bischoff K.B. Chemical Reactor Analysis and Design. – New York: Wiley, 1990. – 2nd ed. – 664 p.
13. Meyers R.A. Handbook of Petroleum Refining Processes. – New York: McGraw-Hill, 2016. – 4th ed. – 1500 p.
14. Wauquier J.P. Petroleum Refining: Crude Oil, Petroleum Products, Process Flowsheets. – Paris: Editions Technip, 2000. – 450 p.
15. Yang C. et al. MCM-22 Zeolite for Xylene Isomerization: A Review // Catalysis Today. – 2021. – Vol. 375. – P. 324–335.

|  |  |
| --- | --- |
| *Сведения об авторах:* | *Information about authors:* |
| **Гафурова Айгуль Хисаметдиновна** – магистрант кафедры «Газохимия и моделирование химико-технологических процессов» | **Gafurova Aigul Khisametdinovna** – Master's student of the Department of Gas Chemistry and Modeling of Chemical and Technological Processes |
| E-mail [aygulgafurova@mail.ru](mailto:aygulgafurova@mail.ru) | |