

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ  
УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ  
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ»

Інженерно-хімічний факультет



**АВТОМАТИЗАЦІЯ  
ТА КОМП'ЮТЕРНО-ІНТЕГРОВАНІ ТЕХНОЛОГІЇ – 2014**

І МІЖНАРОДНА НАУКОВО-ПРАКТИЧНА КОНФЕРЕНЦІЯ  
МОЛОДИХ УЧЕНИХ, АСПІРАНТІВ І СТУДЕНТІВ

**АКІТ – 2014**

КИЇВ, 16–17 КВІТНЯ 2014

**Матеріали конференції**

Київ  
НТУУ «КПІ»  
2014

УДК 681.5(063)  
ББК 32.965я43  
А22

А22 Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології [Текст]: Матеріали Першої Міжнародної науково-практичної конференції молодих учених, аспірантів і студентів (АКІТ-2014); Київ, НТУУ «КПІ», 16–17 квітня 2014 р. – К.: НТУУ «КПІ», 2014. – 141 с. : іл. – Бібліогр.: в кінці тез. – 130 пр.

**ISBN 978-966-622-627-6**

Наведено матеріали Першої Міжнародної науково-практичної конференції молодих учених, студентів і аспірантів «Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології (АКІТ-2014)», яка відбулася в Національному технічному університеті України «Київський політехнічний інститут» 16–17 квітня 2014 року.

Висвітлено сучасні підходи та методи в автоматизації виробничих процесів, математичному моделюванні технологічних об'єктів, дослідженні та синтезі сучасних комп'ютерних систем керування.

Для науковців, аспірантів і студентів вищих навчальних закладів.

**УДК 681.5(063)**  
**ББК 32.965я43**

Рекомендовано до друку Вченою радою ІХФ НТУУ «КПІ»  
Протокол № 3 від 31 березня 2014 р.

Відповідальний за випуск  
*А. І. Жученко*, д-р техн. наук, проф.,  
Національний технічний університет України  
«Київський політехнічний інститут»

Упорядкування, редагування, комп'ютерна правка та верстка  
*М. В. Лукінюка*

**ISBN 978-966-622-627-6**

© Автори тез доповідей, 2014  
© НТУУ «КПІ» (ІХФ), 2014

## МОДЕЛЮВАННЯ РЕАКТОРА ВИРОБНИЦТВА МАЛЕЇНОВОГО АНГІДРИДУ ОКИСЛЕННЯМ БЕНЗОЛУ

Холодцько І. І., Безносик Ю. О.

Національний технічний університет України «КПІ», ivanxolodko@ukr.net

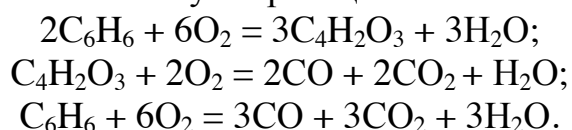
Малеїновий ангідрид має велику реакційну здатність і тому використовується у виробництві полімерів, фармацевтичних препаратах, сільськогосподарських хімікатів і т. д. Найбільша частка його споживання припадає на виробництво пластмас. Попит на поліефірні смоли обумовлює в основному розвиток виробництва малеїнового ангідриду. Наступним за важливістю споживачем малеїнового ангідриду є виробництво алкідних смол. Застосування малеїнового ангідриду дозволяє створювати поверхневі алкідні покриття з підвищеною ударною в'язкістю, а також подовжує термін їх служби.

Основним промисловим методом отримання малеїнового ангідриду є парофазне каталітичне окислення бензолу. Окислення проводять в паровій фазі на стаціонарному шарі каталізатора. Залежно від використовуваного каталізатора змінюється температура реакції в діапазоні 350...450 °С. Процес ведуть практично без тиску, який становить 0,5 атм і обумовлюється опором технологічних апаратів. Ефективність процесу отримання малеїнового ангідриду парофазним окисленням бензолу залежить від селективності застосовуваних для цього каталізаторів і від ступеня досконалості самого процесу – як стадії окислення, так і стадій виділення цільового продукту. У сучасних промислових процесах отримання малеїнового ангідриду парофазним окисненням бензолу забезпечує вихід малеїнового ангідриду на стадії окислення 72...74 % при конверсії 98...100 %.

Моделюється процес окиснення бензолу в трубчастому реакторі з нерухомим шаром ванадій-молібденового каталізатора з домішками. Процес окиснення – екзотермічний. Відведення тепла із зони реакції здійснюється розплавом солей. Для розрахунку реактора прийняті такі допущення:

1. За технологією апарат являє собою трубчатий реактор. Речовини в реакторі знаходяться в газоподібному стані;
2. Густина, теплоємність реакційної суміші та теплоти утворення речовин вважаються постійними по довжині реактора і не залежать від температури;
3. Швидкість руху потоку і масова витрата газу приймається сталою;
4. Константи швидкостей реакцій залежать лише від температури;
5. Теплоємністю конструкції реактора нехтуємо, тобто все тепло реакцій іде лише на нагрівання потоку;
6. Усі процеси протікають у стаціонарному режимі.

В реакторі відбуваються наступні реакції:



Математичний опис реактора без урахування явищ повздовжнього і радіального переносу тепла і речовини має вигляд:

$$\frac{dx_A}{dl} = \frac{SF}{G}(W_1 - W_2);$$

$$\frac{dx_B}{dl} = -\frac{SF}{G}(W_1 + W_3);$$

$$\frac{dT}{dl} = \frac{S}{G_X} \sum_{i=1}^3 W_i Q_i - \frac{K_T D}{G c_P}(T - T_X);$$

$$\frac{dT_X}{dl} = \frac{K_T D}{G_X c_X}(T - T_X);$$

$$W_1 = k_1 \frac{x_B}{1 + b x_A} \quad W_2 = k_2 x_A \quad W_3 = k_3 \frac{b x_A}{1 + b x_A} \quad k_i = k_{0i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right);$$

з початковими умовами:

$$x_A(0) = 0; \quad x_B(0) = x_{B0}; \quad T(0) = T_0; \quad T_X(0) = T_{X0};$$

де  $x_A$ ;  $x_B$  – концентрації малеїнового ангідриду і бензолу відповідно;  $T$ ,  $T_X$  – температура в зоні реакції та теплоносія;  $S$  – питома поверхня каталізатора;  $F$  – переріз трубки;  $G$  – швидкість потоку реакційної суміші;  $W_i$  – швидкість  $i$ -тої реакції;  $l$  – координата по довжині трубки;  $c_P$ ,  $c_X$  – теплоємність газової суміші і теплоносія;  $Q_i$  – тепловий ефект  $i$ -тої реакції;  $K_T$  – коефіцієнт теплопередачі;  $D$  – периметр трубки;  $R$  – газова стала;  $E_i$  – енергія активації  $i$ -тої реакції;  $k_{0i}$  – перед експоненціальний множник  $i$ -тої реакції;  $G_X$  – швидкість теплоносія;  $b$  – адсорбційна константа.

Величини  $k_{0i}$  та  $E$  й дорівнюють для першої реакції 29,2 та 14573 Дж/моль, для другої реакції 5,12 та 12529 Дж/моль, для третьої реакції 0,0184 та 37000 Дж/моль відповідно\*. Теплові ефекти реакцій становлять  $4,831 \cdot 10^5$ ,  $1,395 \cdot 10^6$ ,  $3,184 \cdot 10^6$  Дж/моль відповідно для першої, другої та третьої реакцій.

Розрахунки проводились в середовищах MathCAD та VisualBasic 6.0, де було реалізовано для рішення моделі метод Ейлера з кроком 0,001. Такий маленький крок було обрано для забезпечення високої точності числового інтегрування диференціальних рівнянь моделі.

Розроблене програмне забезпечення реалізує розрахунок кінетики процесу отримання малеїнового ангідриду. На основі системи рівнянь, складених за реакціями, виконується обчислення зміни концентрації бензолу та малеїнового ангідриду, а також температури і, як наслідок, констант швидкостей реакцій по довжині реактора. Дана залежність відображається на графіку та у розрахунковій таблиці. За отриманими даними у програмі визначаються необхідні конструктивні параметри реактора. В програмі передбачено обробку основних помилок, які користувач може допустити при роботі. Для їх усунення й запобігання виникненню організовано систему підказок і блокувань при неправильному ввводі. Це надає можливість після виправлень легко продовжити роботу.

Результати розрахунків показали, що для заданих у роботі параметрах процесу та радіуса реактора максимальна концентрація малеїнового ангідриду склала 0,259 моль/л за довжини реактора 0,612 м. При цьому було забезпечено конверсію бензолу 91,56 %.

\* Марголис Л. Я. Окисление углеводородов на гетерогенных катализаторах [Текст] / Л. Я. Марголис. – М.: Химия, 1977. – 328 с. – Библиогр.: с. 310–322. – 2400 экз.