

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ СТАЦИОНАРНОГО РЕЖИМА ПРОЦЕССА ОКИСЛЕНИЯ В ОКСИДАТОРЕ

Колюкович Е.А.

Могилёвский государственный университет продовольствия
г. Могилёв, Беларусь

Совместное каталитическое окисление параксилола и *m*-эфира кислородом воздуха в паратолуиловую кислоту, монометилловый эфир терефталевой кислоты и терефталевую кислоту ведется поточно и непрерывно. Поток состоит из трех последовательно установленных оксидаторов. Оксидатор представляет собой вертикальный цилиндрический аппарат высотой 26000 мм и диаметром 3600 мм со встроенной системой охлаждения.

Наиболее оптимальной температурой окисления при работе на смешанном кобальт-марганцевом катализаторе считается 135-170 °С. При снижении температуры реакции уменьшается скорость реакции. При более высоких температурах окисление протекает быстрее, но снижается химический выход целевого продукта, так как сырье при этом в большом количестве окисляется до окиси, двуокиси углерода и низших жирных кислот. Кроме того, увеличивается количество высококипящих компонентов.

Ход реакции окисления контролируется по кислотному числу оксидата. Оптимальные кислотные числа для каждого реактора приведены в таблице. Не рекомендуется вести окисление до кислотного числа более 260 ед., т.к. при этом в оксидате увеличивается содержание терефталевой кислоты, кристаллы которой приводят к забивке аппаратов и трубопроводов.

Для перемешивания газожидкостной смеси в зоне реакции применяют барботаж кислородсодержащего газа, вводимого в реакционную зону.

Для построения математической модели химического превращения в оксидаторе в стационарном состоянии принимаются следующие допущения:

- движение потоков реакционной смеси в реакторе (основной поток) и теплоносителя в системе охлаждения (вспомогательный поток) представляется гидродинамическими моделями идеального перемешивания;
- параметры потока теплоносителя в системе охлаждения (обозначаются нижним индексом «т») неизменны, кроме температуры потока теплоносителя в системе охлаждения.
- реакции в реакторе гомогенны, без фазовых переходов;
- все процессы происходят в жидкой фазе, все реакции протекают одновременно;
- тепловые эффекты стадий химической реакции не зависят от температуры;
- при теплообмене между основным и вспомогательным потоками учитывается только теплопередача;
- коэффициент и поверхность теплопередачи между основным и теплоносителем вспомогательным потоками являются постоянными и не изменяются.

Уравнения материального и теплового балансов для потока реакционной смеси в реакторе (основного потока) (1, 2, 3) и для потока теплоносителя в системе охлаждения реактора (вспомогательного или теплового потока) (4) записываются следующим образом:

$$\begin{aligned}
1 \quad & \nu^{(0)} \cdot x_i^{(0)} - \nu \cdot x_i + V^R \cdot g_i^R = 0, \quad (i = 1, \dots, n) \\
2 \quad & \nu^{(0)} - \nu + V^R \cdot \sum_{i=1}^4 g_i^R = 0; \\
3 \quad & \nu^{(0)} \cdot C_p^{(0)} \cdot T^{(0)} - \nu \cdot C_p \cdot T + V^R \cdot \Delta q^R + F^T \cdot \Delta q^T = 0; \\
4 \quad & \nu_T^{(0)} \cdot C_{pT}^{(0)} \cdot T_T^{(0)} - \nu_T \cdot C_{pT} \cdot T_T + F^T \cdot (-\Delta q^T) = 0.
\end{aligned} \tag{1}$$

где ν – расход компонентов;

x_i – концентрация i -го компонента;

V^R – объем реакционной смеси;

C_p – теплоемкость;

T – температура;

Δq^T – интенсивность локальной теплопередачи через поверхность F ;

Δq^R – интенсивность локального источника тепла химической реакции в объеме V ;

g_i^R – интенсивность локального источника компонента за счёт химической реакции;

нижний индекс «Т» — признак потока теплоносителя;

индекс 0 – указывает на начальное значение.

С учётом 1 и выражений для локальных интенсивностей источников массы и тепла система уравнений математического описания процесса химического превращения в реакторе с барботированием и системой охлаждения в стационарном состоянии записывается в виде системы нелинейных уравнений:

$$\begin{aligned}
\bar{1}_{(n)} \quad & \nu^{(0)} \cdot x_i^{(0)} - \nu \cdot x_i + V^R \cdot g_i^R = 0, \quad (i = 1, \dots, n); \\
\bar{2}_{(n)} \quad & g_i^R = \sum_{j=1}^m a_{ij} \cdot r_j, \quad (i = 1, \dots, n); \\
\bar{3}_{(m)} \quad & r_j = k_j \cdot \prod_{i=1}^n x_{ij}^{x_j}, \quad (j = 1, \dots, m); \\
& x_{ij} = \begin{cases} -a_{ij} & \Leftarrow i - \text{реагент на } j\text{-й элементарной стадии} \\ 0 & \Leftarrow i - \text{не реагент на } j\text{-й элементарной стадии} \end{cases} \\
\bar{4}_{(m)} \quad & k_j = A_j \cdot e^{\frac{-E_j}{RT}}, \quad (j = 1, \dots, m); \\
5 \quad & \nu^{(0)} - \nu + V^R \cdot \sum_{i=1}^n g_i^R = 0; \\
6 \quad & \nu^{(0)} \cdot C_p^{(0)} \cdot T^{(0)} - \nu \cdot C_p \cdot T + V^R \cdot \Delta q^R + F^T \cdot \Delta q^T = 0; \\
7 \quad & \Delta q^R = \sum_{j=1}^m |a_{pj}| \cdot (-\Delta H_{pj}^R) \cdot r_j; \\
8 \quad & \Delta q^T = K^T \cdot (T_T - T); \\
9 \quad & C_p \approx \sum_{i=1}^n C_{pi}^{ind} \cdot x_i; \\
\bar{10}_{(n)} \quad & C_{pi}^{ind} = a_i + b_i \cdot T + c_i \cdot T^2 + d_i \cdot T^3; \\
& (a_i, b_i, c_i, d_i - \text{коэффициенты зависимостей теплоемкостей} \\
& \text{индивидуальных веществ } C_{pi}^{ind} \text{ от температуры}) \\
11 \quad & \nu_T^{(0)} \cdot C_{pT}^{(0)} \cdot T_T^{(0)} - \nu_T \cdot C_{pT} \cdot T_T + F^T \cdot (-\Delta q^T) = 0.
\end{aligned} \tag{2}$$