

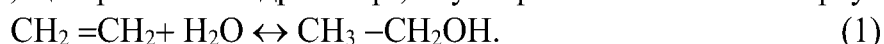
МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ПРОЦЕСУ ГІДРАТАЦІЇ ЕТИЛЕНУ З УРАХУВАННЯМ ЙОГО НЕСТАЦІОНАРНОСТІ

Борин В. С., Фешанич Л. І., Мельничук В. В.

Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу,
vasyl.melnychuk-akp211k@nung.edu.ua

Етанол належить до багатотонажних і широко застосовуваних продуктів органічного синтезу. Він є добрим, хоч і вогнєнебезпечним, розчинником; у великих кількостях використовується в харчовій та медичній галузях промисловості, у парфумерії та служить паливом у рідинних ракетних двигунах, антифризом і т. п.

Основна реакція, що протікає в гідрататорі, – утворення етилового спирту:



Відповідно стехіометричної схеми кінетичне рівняння має вигляд

$$\frac{dP_{\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}}}{dt} = \frac{k'}{P_{\text{H}_2\text{O}}^{\frac{1}{2}}} (P_{\text{C}_2\text{H}_4} - K_p^{-1} \frac{P_{\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}}}{P_{\text{H}_2\text{O}}}), \quad (2)$$

де $P_{\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}}$, $P_{\text{C}_2\text{H}_4}$, $P_{\text{H}_2\text{O}}$ – парціальні тиски відповідно етилового спирту, етилену та води, атм.; t – умовний час реакції, що визначається як відношення обсягу активної фосфорної кислоти в каталізаторі до об'ємної витрати парогазової суміші,

c ; k' – константа швидкості реакції, що дорівнює $k' = kP_{\text{H}_2\text{O}}^{\frac{1}{2}}$ і визначається з виразу $\log k' = 5.39 - \frac{14860}{4.57T}$; константа швидкості реакції, що спостерігається,

$k = -\frac{1}{t} K_p P_{\text{H}_2\text{O}} \ln(1 - \frac{P_{\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}}}{K_p P_{\text{C}_2\text{H}_4} P_{\text{H}_2\text{O}}})$; константа рівноваги реакції, ат⁻¹, визначається з ви-

разу $K_p = \frac{2093}{T} - 6.304 + (\frac{10.47}{T} - \frac{6.37 \cdot 10^3}{T})P$, де P – загальний тиск системи.

Перетворимо рівняння (2), використовуючи закон Дальтона-Авогадро $p_i = \frac{n_i}{\sum n_i} P$, P_i – парціальний тиск i -го компонента, n_i – число молей i -го компонента, після деяких перетворень отримано кінетичне рівняння процесу прямої гідратації етилену:

$$\begin{aligned} \frac{dn}{dt} = & \frac{k'}{(\frac{n_{\text{H}_2\text{O}}^0 - n}{n_{\text{C}_2\text{H}_4}^0 + n_{\text{H}_2\text{O}}^0 - n} P)^{\frac{1}{2}}} \cdot \\ & \cdot (\frac{n_{\text{C}_2\text{H}_4}^0 - n}{n_{\text{C}_2\text{H}_4}^0 + n_{\text{H}_2\text{O}}^0 - n} P - K_p^{-1} \frac{n}{n_{\text{H}_2\text{O}}^0 - n}) \cdot \\ & \cdot \frac{(n_{\text{C}_2\text{H}_4}^0 + n_{\text{H}_2\text{O}}^0 - n)^2}{P(n_{\text{C}_2\text{H}_4}^0 + n_{\text{H}_2\text{O}}^0)}. \end{aligned}$$

де n , $n_{\text{C}_2\text{H}_4}$, $n_{\text{H}_2\text{O}}$ – поточні значення етилового спирту, етилену та води.

Ця модель розроблена для стаціонарних умов протікання процесу без урахування втрати активності каталізатора з часом.

Ввівши обрану нами функцію управління процесом θ в кінетичну модель процесу, що протікає в стаціонарних умовах, отримано нестационарну кінетичну модель:

$$\frac{dn}{dt} = \frac{k\theta}{\left(\frac{n_{H_2O}^0 - n}{n_{C_2H_4}^0 + n_{H_2O}^0 - n} P\right)^{\frac{1}{2}}} \cdot \left(\frac{n_{C_2H_4}^0 - n}{n_{C_2H_4}^0 + n_{H_2O}^0 - n} P - K_p^{-1} \frac{n}{n_{H_2O}^0 - n}\right) \cdot \frac{(n_{C_2H_4}^0 + n_{H_2O}^0 - n)^2}{P(n_{C_2H_4}^0 + n_{H_2O}^0)}.$$

Виводячи рівняння теплового балансу враховано теплоту хімічної реакції одержання етилового спирту та теплоту, що йде на нагрівання олефіну:

$$\frac{4}{p_{кат}} \pi D^2 \frac{dT}{dl} = - \frac{\sum r \Delta H_R}{\sum_{i=1}^3 n_i C_{pi} (1.3)} - Q_{наг}. \quad (3)$$

Для обліку перепаду тиску довжині реактора використано рівняння Ергуна

$$\frac{dP}{dl} = - \left(\frac{150}{Re} + 1.75 \right) \cdot \frac{p_{газ} u_0^2 (1-\epsilon)}{d_p g \epsilon^3} \cdot 0.987 \cdot 10^{-5}, \quad (4)$$

де T – температура реакції, K ; $p_{кат}$ – щільність каталізатора, $кг/м^3$; r – швидкість реакції, $моль\ кг_{кат}^{-1}\ ч^{-1}$; C_{pi} – теплоємність i -го компонента, $кал\ моль^{-1}\ град^{-1}$; ΔH_R – теплота реакції $кал/моль$; $Q_{наг}$ – теплота, що йде на нагрівання етилену, $кал/моль$; n_i – поточне число молей i -го компонента, $моль/год$; Re – критерій Рейнольдса, рівний $\frac{d_p p_{газ} u_0}{\mu (1-\epsilon)}$, D – діаметр реактора, $м$; $p_{газ}$ – щільність газу $кг/м^3$; u_0 – лінійна швидкість, $м/с$; d_p – еквівалентний діаметр частинок, $м$; ϵ – порізність, $б/р$; μ – в'язкість газу, $кг\ м^{-1}\ с^{-1}$; l – довжина реактора, $м$;

Рівняння кінетичної моделі спільно з рівняннями теплового балансу (3) та втрати напору (4) становлять повну математичну модель процесу прямої гідратації етилену з урахуванням нестационарності його протікання. Використання запропонованої моделі дозволяє підтримувати продуктивність етилового спирту на потрібному (стаціонарному) рівні з найменшими витратами на витрати фосфорної кислоти.

Використання запропонованої моделі дозволяє підтримувати продуктивність етилового спирту на потрібному (стаціонарному) рівні з найменшими витратами на витрати фосфорної кислоти.