

УДК 66.095.81

**МОДЕЛИРОВАНИЕ НИТРОВАНИЯ БЕНЗОЛА В  
РЕАКТОРЕ ИДЕАЛЬНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ**

Кондратов С.А., Аль Хамадани М.Д.

**МОДЕЛЮВАННЯ НІТРУВАННЯ БЕНЗОЛУ У РЕАКТОРІ ІДЕАЛЬНОГО  
ПЕРЕМІШУВАННЯ**

Кондратов С.О., Аль Хамадані М.Д.

**THE SIMULATION OF THE NITRATION OF BENZENE IN THE BATH IDEAL  
MIXING REACTOR**

Kondratov S., Al Khamadani M.D.

Институт химических технологий  
Восточноукраинского национального университета имени В. Даля  
г. Рубежное, Украина  
[kondratovsa@gmail.com](mailto:kondratovsa@gmail.com)

*Разработаны математические модели непрерывного процесса нитрования бензола в реакторе идеального перемешивания в стационарном и переходном режимах. Рассмотрены и обсуждены результаты моделирования*

*Ключевые слова:* бензол, нитрование, моделирование, реактор идеального перемешивания

*Розроблено математичні моделі безперервного процесу нітрування бензолу в реакторі ідеального перемішування в стаціонарному і перехідному режимах. Розглянуто та обговорено результати моделювання.*

*Ключові слова:* бензол, нітрування, моделювання, реактор ідеального перемішування

*The mathematical models of a continuous process of the nitration of benzene in the bath ideal mixing reactor in a steady state and transient conditions were created. The results of the simulation was discussed.*

*Keywords:* modeling, benzene, nitration, reactor of ideal mixing

Нитробензол – один из базовых продуктов органического синтеза, основа для дальнейшего получения полимеров, красителей, лекарственных препаратов, взрывчатых веществ. В настоящее время в Украине реализована классическая технология получения этого продукта, основанная на нитровании бензола серно-азотной кислотной смесью со снятием тепла внешним теплоносителем и последующей денитрацией-концентрированием отработанной серной кислоты и возвратом ее в цикл [1]. Современные подходы к совершенствованию технологии промышленного производства базируются на широком использовании компьютерных моделей для выявления закономерностей и оптимизации процессов. Цель настоящей

работы – разработка математической модели нитрования бензола, ее компьютерная реализация и исследование на ней закономерностей нитрования в промышленном реакторе.

Модель непрерывного процесса нитрования составлена в виде системы из двух дифференциальных уравнений идеального перемешивания:

$$\begin{cases} \frac{dC}{dt} = \frac{C_0 - C}{\tau} - W(C) \\ \frac{dT}{dt} = \frac{T_0 - T}{\tau} + \frac{q_p \cdot W(C)}{\rho \cdot C_p} + \frac{Q_{\phi.x.} - Q_{cm}}{v_S \cdot \tau \cdot \rho \cdot C_p} - \alpha(T - T_{mn}) \end{cases} \quad (1)$$

где  $\tau = \frac{V}{v}$  - среднее время пребывания массы в системе, с;  $V$  – рабочий объем

реактора, м<sup>3</sup>;  $v$  – суммарная объемная скорость подачи бензола и нитросмеси, м<sup>3</sup>·с<sup>-1</sup>;  $C_0, C$  – концентрации бензола, соответственно, на входе в реактор и на выходе, кмоль·м<sup>-3</sup>;  $W(C)$  – текущее значение скорости реакции в реакторе, кмоль·м<sup>-3</sup>·с<sup>-1</sup>;  $\rho$  – плотность реакционной массы;  $v_S$  – суммарная объемная скорость подачи реагентов, м<sup>3</sup>·с<sup>-1</sup>;  $V$  – рабочий объем реактора, м<sup>3</sup>;  $T, T_0, T_{mn}$  – соответственно, температура массы в реакторе, на входе в реактор и средняя температура теплоносителя в системе теплосъема, °С;  $q_p$  – скорость выделения теплоты в процессе нитрования, Дж·с<sup>-1</sup>;  $Q_{cm}$  – теплотери через стенку нитратора;  $Q_{\phi.x.}$  – теплота физико-химических процессов (разбавления кислотной смеси водой, выделяющейся в реакции), Дж·с<sup>-1</sup>;

$\alpha = \frac{k \cdot F}{\rho \cdot V \cdot C_p}$  – приведенная теплоотдача;  $k$  – теплоотдача через систему теплообмена, Дж·град<sup>-1</sup>·с<sup>-1</sup>·м<sup>-2</sup>;  $F$  – поверхность теплообмена, м<sup>2</sup>;  $C_p$  – удельная теплоемкость реакционной массы.

Первое них – уравнение материального баланса, второе – уравнение теплового баланса. На разработанной модели были выявлены закономерности пускового периода и стационарного процесса нитрования (рис.1):

1) в пусковом периоде при низкой начальной температуре в реакторе (20°С) наблюдается сначала накопление удельного количества азотной кислоты и бензола, проходящее через максимум а затем, при наступлении стационарного состояния, их уменьшение в 3-4 раза. Накопление непрореагировавших бензола и азотной кислоты создает потенциальную опасность неуправляемого протекания процесса. С повышением пусковой температуры наблюдается уменьшение максимальной концентрации непрореагировавших бензола и азотной кислоты, вплоть до полного исчезновения максимума при 60 - 65°С.

2) Исследовано количество стационарных решений модели. Установлено, что система имеет одно стационарное решение, зависящее от времени пребывания массы в реакторе. С увеличением времени пребывания увеличивается стационарные температура и степень превращения. При этом наблюдается линейная корреляция между стационарной температурой и стационарной степенью превращения на выходе из реактора.

3) Используя статистическое моделирование и экспертное оценивание, исследовано влияние неопределенности в значении входных параметров, а также уравнения скорости на результат – неопределенность стационарных температуры и

## КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ТА БІОХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ І СИСТЕМ

степени превращения. Установлено, что неопределенность в выходных параметрах снижается при увеличении концентрации отработанной кислоты до 70 % и времени пребывания выше 600 с. При снижении концентрации отработанной кислоты до 66 % наблюдается значительное возрастание неопределенности степени превращения. Эта неопределенность может быть снижена при увеличении времени пребывания в реакторе до 4000 – 6000 с.

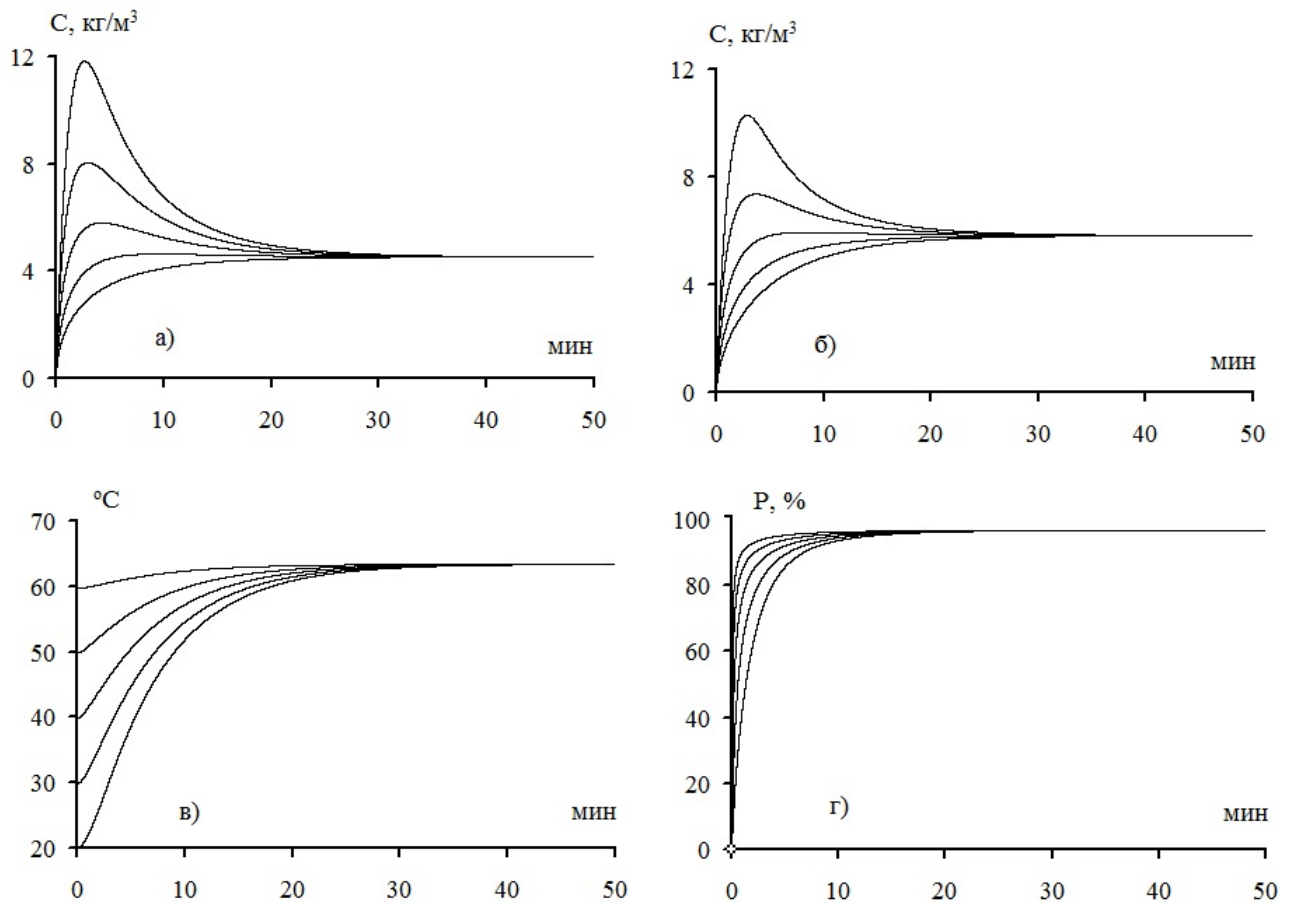


Рис.1. Зависимость от времени концентраций бензола (а) и азотной кислоты (б), температуры (в) и степени превращения (г) в реакторе нитрования бензола

На основании проведенных исследований сформулированы практически рекомендации для проведения нитрования в промышленном реакторе: пуск процесса следует проводить после предварительного подогрева отработанной кислоты в реакторе до 60-65°C, а оптимальный состав кислотной смеси должен быть таким, чтобы концентрация серной кислоты в отработанной кислоте составляла 70-72 %.

### Литература

1. *Kent and Riegel's handbook of industrial chemistry and biotechnology* / ed. J.A.Kent [Text]. – N.Y.: Springer, 2007. – v.1, p. 396.
2. *Кондратов С.А.* Моделирование пускового периода реактора непрерывного нитрования бензола /С. А. Кондратов, А. Г. Ковган А.Г., М. Д. аль-Хамадани [Текст] // Вісник Східноукраїнського національного університету ім. В.Даля, 2012. – Т. 17 (188) – С. 153–158.