

- хімії, технологіях і системах сталого розвитку – КМХТ-2014». – м. Київ, 13-15 травня 2014 р. – К.: НТУУ «КПІ», 2014. – с. 172-177. URL: <http://kxtp.kpi.ua/common/kxtp-papers-2014-cmct-172-177.pdf>
6. Солнцев В. П., Шахновский А. М., Хаметова А. В. К проблеме вычислительной эффективности при моделировании процессов термического разложения оксида хрома (VI) в смеси с хромом // *Международн. научно-техн. конф. молодых ученых «Инновационные материалы и технологии» ИМТ-2019 – Минск, 2019.* – с 433-436
7. Shakhnovsky A. M., Solntsev V. P., Petrash K. M., Terekh T. Yu. On justification of choice of numerical methods in modelling the process of thermal decomposition of chrome trioxide mixed with chrome // *Комп'ютерне моделювання в хімії та технологіях і системах сталого розвитку – КМХТ-2019: Збірник наукових статей Сьомої міжнар. наук.-практ. конф. – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2019 – С. 53–57.*

### КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТЕХНОЛОГІЧНОЇ СХЕМИ ТА РЕАКТОРА ОТРИМАННЯ МЕТАНАЛЮ ОКИСЛЕННЯМ МЕТАНОЛУ

Коноваленко К. О., Осипов К. О., Безносик Ю. О., Бугаєва Л. М.

### КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ СХЕМЫ И РЕАКТОРА ПОЛУЧЕНИЯ ФОРМАЛЬДЕГИДА ОКИСЛЕНИЕМ МЕТАНОЛА

Коноваленко Е. О., Осипов К. А., Безносик Ю. А., Бугаева Л. Н.

### SIMULATION OF TECHNOLOGICAL SCHEME AND REACTOR FOR PRODUCING METHANAL BY METHANOL OXIDATION

Konovalenko K., Osypov K., Beznosyk Yu., Bugaieva L.

Національний технічний університет України  
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»  
Київ, Україна  
[katherinaknvlnk@gmail.com](mailto:katherinaknvlnk@gmail.com)  
[kirill.osypov@gmail.com](mailto:kirill.osypov@gmail.com)

*В статті розглянуто застосування програм Chemcad та Mathcad для математичного моделювання технологічної схеми і каталітичного реактора синтезу метанолу. (формальдегіду)*

**Ключові слова:** комп'ютерне моделювання, математичне моделювання, хімічний реактор, метанол, метаналь, формальдегід, Chemcad, Mathcad

*В статье рассмотрено применение программ Chemcad и Mathcad для математического моделирования технологической схемы и каталитического реактора синтеза формальдегида.*

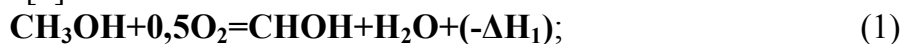
**Ключевые слова:** компьютерное моделирование, математическое моделирование, химический реактор, метанол, метаналь, формальдегид, Chemcad, Mathcad

*The article deals with the application of mathematical packages Mathcad and Chemcad for mathematical simulation flowsheet and catalytic synthesis reactor methanal (formaldehyde).*

**Keywords:** computer simulation, mathematical modeling, chemical reactor, methanol, methanal, formaldehyde, Chemcad, Mathcad

Метаналь (або формальдегід) і його технічні модифікації завдяки великій реакційній здатності, доступності і дешевизні отримали дуже важливе значення для синтезу різних продуктів і поліпшення властивостей деяких матеріалів, а також як дезінфікуючий, інсектицидний і консервуючий засоби.

Метаналь отримується окисленням метанолу у трубчастому каталітичному реакторі. При окисленні метанолу в метаналь ми маємо справу з двома послідовними безповоротними реакціями [1]:



Технологічний процес отримання метанолу окислювальним дегідруванням метанолу киснем повітря із застосуванням гетерогенного металевого каталізатора виконується в паровій фазі. Він протікає у зовнішньо дифузійній області, в адіабатичних умовах, з розігрівом реакційної маси, без охолодження каталізатора, в реакторах ідеального витіснення, в проточних умовах (по безперервному методу) [2].

Було запропоновано багато нових каталізаторів на основі окисно-перехідних металів. Найбільш ефективними виявилися змішані окисні залізо-молібденові контакти. Каталізатори цього типу вже використовувались в промисловості [3]. Термін служби каталізатора 2 роки і більше. На рис. 1 наведена технологічна схема виробництва метанолу з метилового спирту на срібному каталізаторі, термін служби якого становить 6...12 місяців [1-2]. Потужність установки 40 тис. т водного 40% формальдегіду в рік. Суміш, що містить 6,5% (об.)  $\text{CH}_3\text{OH}$  і 11% (об.)  $\text{O}_2$  (в вигляді повітря), надходить в трубчасту частину реактора 2, заповнених каталізатором. У трубках метиловий спирт перетворюється практично без остачі, а тепло що виділяється знімають, пропускаючи через сорочку реактора масло. Частина нагрітого масла (10 %) охолоджується в котлі-утилізаторі, що дозволяє підтримувати необхідну температуру масла на вході в міжтрубному просторі реактора. Потік газу на виході з трубчастої частини реактора проходить через адіабатичний шар каталізатора, де відбувається доокиснення непрореагувавшего спирту. У трубчастій частині реактора підтримується температура 360...370 °С, а в адіабатній 380...390 °С.

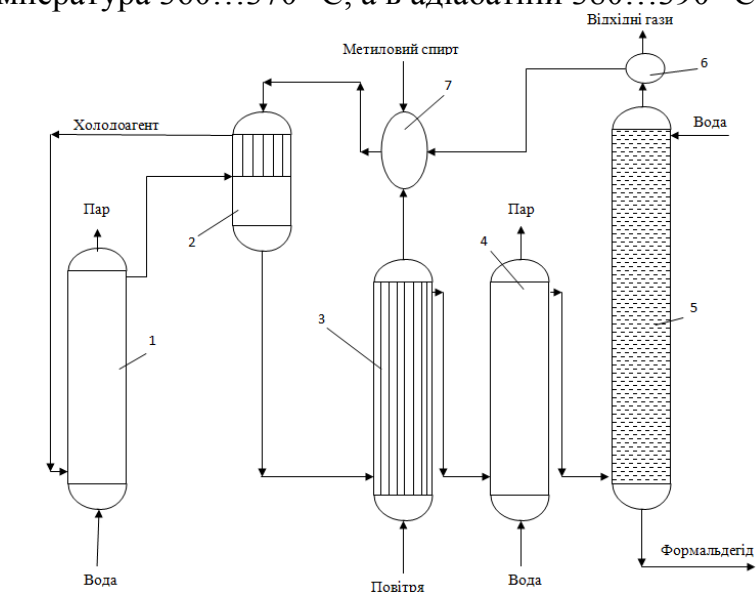


Рис. 1. Технологічна схема отримання метанолу окисненням метанолу:  
1, 4 – котли-утилізатори; 2 – реактор; 3 – теплообмінник; 5 – абсорбер;  
6 – розділювач; 7 – міксер

У програмі *Chemcad* [4-6] було побудовано технологічну схему отримання метанолу окисненням метанолу на срібному каталізаторі (рис. 2). Нумерація апаратів вказана в колах, а нумерація потоків в квадратах.

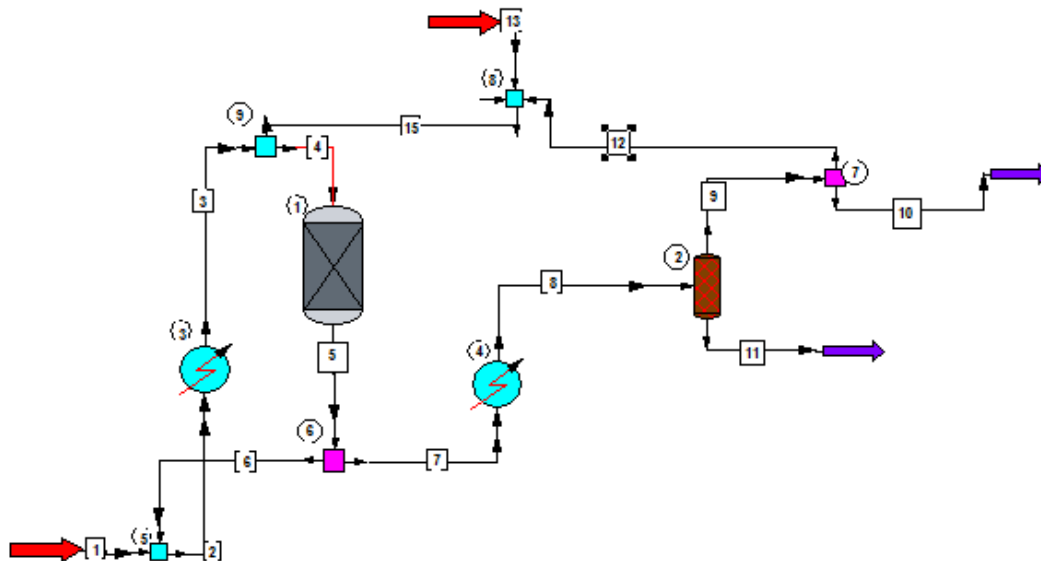


Рис. 2. Технологічна схема отримання метанолу у *Chemcad*:  
1 – реактор; 2 – сепаратор 3 – теплообмінник; 4 – котел-утилізатор;  
5, 8, 9, – міксер; 6,7 – розділювач

В табл. 1 відображені дані, які необхідно задати у вхідних потоках схеми.

### Таблиця 1. Вхідні потоки схеми

| Речовина | Вхідні потоки | Параметри потоку |        |                              |                           |                            |
|----------|---------------|------------------|--------|------------------------------|---------------------------|----------------------------|
|          |               | T, C             | P, МПа | Молярні витрати<br>кмоль/год | Масові витрати,<br>кг/год | Об'ємні витрати,<br>м3/год |
| Метанол  | 1             | 30               | 0,12   | 20                           | 640,84                    | 0,6408                     |
| Оксиген  | 13            | 400              | 0,16   | 10                           | 319,99                    | 0,3199                     |

Моделювання нової технологічної схеми за допомогою Chemcad передбачає наступні етапи [4,5]:

1. Створення нового файлу технологічної схеми;
2. Вибір технічних розмірностей;
3. Вибір компонентів потоків;
4. Вибір термодинамічних моделей;
5. Побудова технологічної схеми;
6. Завдання параметрів вхідних потоків;
7. Завдання специфікацій одиниць обладнання;
8. Налаштування математичних методів розрахунку рециклу;
9. Запуск програми моделювання;
10. Перегляд результатів моделювання на екрані;
11. Отримання твердої копії результатів моделювання.

Зазначені етапи не обов'язково виконувати в такій же послідовності, не обов'язково також проходити через всі етапи при побудові технологічної схеми, так як для деяких з них існує інформація за умовчанням; але ці етапи, принаймні, слід взяти до уваги при вирішенні кожного завдання.

*Chemcad* надає можливість для вирішення великої кількості завдань, пов'язаних з реакторами, починаючи з простих стехіометричних реакцій і кінчаючи множинними кінетичними реакціями. Модуль *Stoichiometricreaction (REACT)* моделює стехіометричний реактор при наявності набору стехіометричних коефіцієнтів, ключових компонентів і ступенів перетворення. Реактор може бути адіабатичним, ізотермічним або з підведенням/відведенням тепла. Вікно *Stoichiometricreactor (REAC)* модуля містить дві вкладки. На вкладці *GeneralSpecifications* (Загальні специфікації) (рис. 3) представлені опції для завдання загальних технічних умов. В області *SpecifyThermalMode*: (Задати тепловий режим:) вибирається тепловий режим роботи реактора:

- *Adiabatic* (Адіабатичний) - адіабатичний;
- *Isothermal* (Ізотермічний) - ізотермічний;
- *Heat Duty* (Теплове навантаження) - із заданим тепловим навантаженням.

Нам потрібно обрати саме *Isothermal* (Ізотермічний) оскільки відома необхідна температура (400 °C) протікання реакції.

У списку *Keycomponent* (Ключовий компонент) встановлюємо ключові компоненти. Передбачається, що ключовий компонент є реагентом. Це обов'язковий для введення параметр. В реакції приймають участь наступні компоненти: Метанол, Оксиген, Вода і Метаналь (Формальдегід). *Frac. Conversion* (Ступінь перетворення) - ступінь перетворення ключового компонента (значення від 0 до 1), і в нашому випадку цей параметр має значення, що дорівнює 0,95. Стехіометричні коефіцієнти розставляємо відповідно за рівняннями 1, 2.

The image shows a software window titled "Stoichiometric Reactor (REAC)". It has two tabs: "General Specifications" and "More Components". The "General Specifications" tab is selected. Inside, there's a section "Specify Thermal Mode:" with three radio buttons: "1. Adiabatic", "2. Isothermal" (which is selected), and "3. Heat Duty". Next to "2. Isothermal" is a text box containing "400" and a unit "C". Below this, there's a "Key Component" dropdown menu showing "1 Methanol". To its right is "Frac. Conversion" with a value of "0.95". Further down are fields for "Heat of Reaction" (empty), "Reactor Pressure" (0.16 MPa), and "Calc H of Reac." (-1.5678e+008 J/kmol). There's also a dropdown for "Ideal gas state". At the bottom, "Stoichiometric Coefficients:" are listed for "Methanol" (-2), "Water" (2), "Formaldehyde" (2), and "Oxygen" (-1). At the very bottom are "Help", "Cancel", and "OK" buttons.

Рис. 3. Введення необхідних параметрів в паспорт реактора

У *Chemcad* представлені модулі розрахунку теплообмінників *Heatexchanger* (HTXR) з одним або двома вхідними потоками. При одному вхідному потоці модуль служить як нагрівач або як охолоджувач. Розглянемо введення параметрів для одностороннього теплообмінника. В схемі присутні два теплообмінники, один виконує роль нагрівача до температури 200 °С (рис. 4а), а інший – охолоджує до температури 30 °С (рис. 4б). Як можемо спостерігати на рис. 4 для коректної роботи одностороннього теплообмінника достатньо задати лише один параметр – температуру на виході з нього.

а)

б)

Рис.4. Введення необхідних параметрів в паспорт теплообмінників:  
а) – нагрівача; б) - охолоджувача

Отриманий матеріальний баланс представлено в табл. 2.

Таблица 2. Матеріальний баланс технологічної схеми отримання метанолу

| Одиниці виміру | Молярні витрати<br>кмоль/год |               | Масові витрати, кг/год |                |
|----------------|------------------------------|---------------|------------------------|----------------|
|                | Вхід                         | Вихід         | Вхід                   | Вихід          |
| Метанол        | 20                           | 0,425         | 640,840                | 13,617         |
| Метаналь       | 0                            | 19,575        | 0                      | 587.759        |
| Оксиген        | 10                           | 0,212         | 319,990                | 6,795          |
| Вода           | 0                            | 19,575        | 0                      | 352,649        |
| <b>Сума</b>    | <b>30</b>                    | <b>39,788</b> | <b>960,830</b>         | <b>960,821</b> |

Як видно з табл. 2 матеріальний баланс зійшовся, отже схема працює вірно.

При розрахунку параметрів реактора використовується модель ідеального витиснення [2, 6]:

$$\omega \frac{dC_M}{dl} = -W_1; \quad \omega \frac{dC_F}{dl} = W_1 - W_2; \quad \omega \frac{dC_{H_2O}}{dl} = W_1 + W_2; \quad \omega \frac{dC_{O_2}}{dl} = \frac{-(W_1 + W_2)}{2}$$

$$\omega c_p \rho \frac{dT_s}{dl} = q_1 W_1 + q_2 W_2$$

$$W_1 = \frac{K_1 C_M}{1 + k_1 C_M + k_2 C_{H_2O} + k_3 C_M / C_{O_2}}$$

$$W_2 = \frac{K_2 C_F}{1 + b_1 C_M + b_2 C_{H_2O} + b_3 C_F / C_{O_2}} + \frac{K_3 C_M}{1 + b_4 C_{H_2O} + b_5 C_M / C_{O_2}}$$

де  $W_1, W_2$  – швидкості основної і побічної реакцій на зерні каталізатора, моль/(м<sup>3</sup>\*с);  $C_M, C_F, C_{H_2O}, C_{O_2}$  – концентрація метанолу, формальдегіду, води та кисню моль/м<sup>3</sup>;  $T_s$  – температура реакційної суміші, К;  $\omega$  – лінійна швидкість реакційної суміші, м/с;  $l$  – поточна координата шару каталізатора в трубці, м;  $c_p$  – середня теплоємність реакційної суміші кДж/(кг\*К);  $\rho$  – середня густина реакційної суміші, кг/м<sup>3</sup>;  $q_1, q_2$  – теплові ефекти реакцій, кДж/моль.

Значення кінетичних констант  $K_i$  та  $b_j$  взято з роботи [7].

В роботі отримані результати розрахунку трубчастого реактора окислення метанолу в середовищі Mathcad, а саме зміну концентрацій метанолу, формальдегіду, води та кисню по довжині реактору, а також зміну температури реакційної суміші та температури холодоагенту (рис. 5-6).

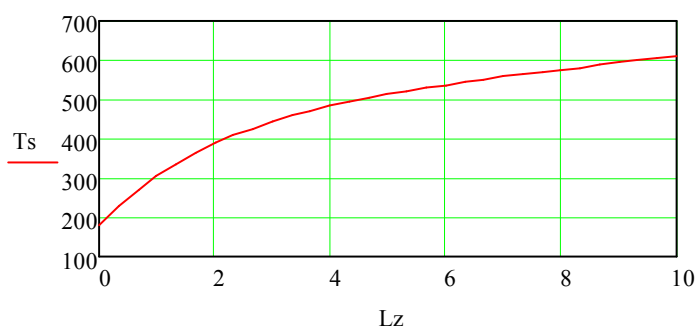


Рис. 5. Зміна температури суміші по довжині реактора

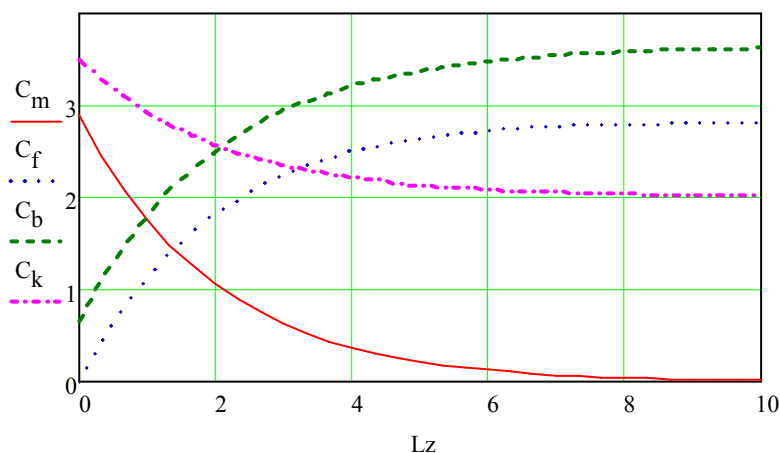


Рис. 6. Зміна концентрацій речовин в залежності від довжини реактора



### ВИСНОВКИ

Розглянуто задачу моделювання технологічної схеми отримання метанолу окисленням метанолу. Розрахунок матеріального балансу технологічної схеми було проведено у програмному середовищі *Chemcad*, а математичне моделювання трубчатого каталітичного реактора окислення метанолу у програмі *Mathcad*.

### ЛІТЕРАТУРА

1. Мельник, С. Р., Мельник, Ю. Р., Піх, З. Г. Проектування та розрахунок технологічних процесів органічного синтезу. *Львів: Львівська Політехніка*, 2006. 448.
2. Луговський, В. І., Білоус, В. М., Брем, В. В. Методи автоматизованих розрахунків хіміко-технологічних систем. *Одеса: Екологія*, 2005. 232.
3. Шаган, Д. В., Бугаєва, Л. М. Інтелектуальна система підтримки прийняття рішень для вибору каталізатора процесу окислювальної конденсації метану. *Комп'ютерне моделювання в хімії та технологіях і системах сталого розвитку – КМХТ-2018: Збірник наукових статей Шостої міжнар. наук.-практ. конф. Київ: КПП ім. Ігоря Сікорського*, 2018, 70–72.
4. Бугаєва Л. М., Бойко Т. В., Безносик Ю. О. Системний аналіз хіміко-технологічних комплексів. *Київ, Інтерсервіс*, 2017. 254.
5. Бугаєва Л. М., Безносик Ю. О., Статюха Г. О. Системний аналіз хіміко-технологічних комплексів. *Навчальний посібник., Київ, Політехніка*, 2014. 132.
6. Холоднов, В. А., Решетилловский, В. П., Лебедева, М. Ю., Боровинская Е. С. Системный анализ и принятие решений. Компьютерное моделирование и оптимизация объектов химической технологии в Mathcad и Excel. *Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ)*, 2007. 425 с.
7. Бибин, В. Н., Попов, Б. И. Кинетика окисления метанола воздухом на окисном железомобденовом катализаторе. *Кинетика и катализ*, 1969. Том X. № 6. 1326-1335.

### АВТОМАТИЗОВАНА СИСТЕМА КЕРУВАННЯ ПРОЦЕСОМ ОТРИМАННЯ ПЛАСТИФІКАТОРА НА ОСНОВІ ПРОДУКТІВ ПЕРЕТВОРЕННЯ ПОЛІЕТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТУ

Бондаренко С. Г., Ботвинко Т. В., Василькевич О. І., Абрамова А. О.

### АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ ПРОЦЕССОМ ПОЛУЧЕНИЯ ПЛАСТИФИКАТОРА НА ОСНОВЕ ПРОДУКТОВ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ПОЛИЭТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТА

Бондаренко С. Г., Ботвинко Т. В., Василькевич А. И., Абрамова А. А.

### AUTOMATED CONTROL SYSTEM PLASTICIZER PRODUCTION PROCESS BASED ON POLYETHYLENE TEREPHTHALATE CONVERSION PRODUCTS

Bondarenko S., Botvynko T., Vasylykevych O., Abramova A.

Національний технічний університет України  
"Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"  
м. Київ, Україна  
[s\\_g\\_bondarenko@ukr.net](mailto:s_g_bondarenko@ukr.net)