

незмінній концентрації, останнє важливо для вивчення різних режимів, при яких найменші зміни в експериментальних умовах можуть призвести до якісної зміни характеру коливань;

- по-третє, важливим являється аналіз чутливості впливу параметрів біфуркації на якісну зміну характеру коливань системи [2, 3].

### **Висновки**

Дослідження чутливості різноманітних режимів перебігу автоколивальної хімічної реакції Білоусова-Жаботинського є дуже актуальним на сьогоднішній день, адже вони можуть бути використані, як в аналітичних цілях так і для моделювання деяких екологічних та біологічних процесів.

### **Література**

1. *Кафаров, В. В.* Методы кибернетики в химии и химической технологии. – М. : Химия. 1985, 448с.
2. *Коробов, В. И.* Химическая кинетика: введение с Mathcad / В. И. Коробов, В. Ф. Очков. – М.: Телеком, 2009. – 384 с.
3. *Бугаєва Л. М.* Системний аналіз хіміко-технологічних комплексів: підручник / Л. М. Бугаєва, Т. В. Бойко, Ю. О. Безносик. – К.: «Інтерсервіс», 2017. – 254с.

## **МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ РОДІЄВОЇ ТЕХНОЛОГІЇ ВИРОБНИЦТВА ОЦТОВОЇ КИСЛОТИ З МЕТАНОЛУ**

**Примиська С. О.**

## **МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РОДИЕВОЙ ТЕХНОЛОГИИ ПРОИЗВОДСТВА УКСУСНОЙ КИСЛОТЫ ИЗ МЕТАНОЛА**

**Примиска С. А.**

## **MATHEMATICAL MODELING OF PRODUCTION OF ACETIC ACID FROM METHANOL BY RHODIUM TECHNOLOGY**

**Prymyska S.**

**Національний технічний університет України  
«Київський політехнічний інститут ім. Ігоря Сікорського»  
Київ, Україна  
[prymyska@ukr.net](mailto:prymyska@ukr.net)**

*Математична модель динаміки процесу гомогенного каталізу в реакторі ідеального змішування побудована рівнянням зміни мольної частки речовини з часом і зміною внутрішньої енергії ідеального потоку речовини. Розрахунок по моделі здійснено за методом*

Рунге-Кута третього порядку. Виконано перевірку на адекватність результатів розрахунку за моделлю до експериментальних даних.

**Ключові слова:** гомогенний катализ, реактор ідеального змішування, оцтова кислота

Математическая модель динамики процесса гомогенного катализа в реакторе идеального смешения построена уравнением изменения мольной доли вещества со временем и изменением внутренней энергии идеального потока вещества. Расчет по модели осуществлен методом Рунге-Куты третьего порядка. Выполнена проверка на адекватность результатов расчета по модели к экспериментальным данным.

**Ключевые слова:** гомогенный катализ, реактор идеального смешения, уксусная кислота

A mathematical model of the dynamics of the homogeneous catalysis process in an ideal mixing reactor is represented in the form of equations of change in the molar fraction of substance over time and a change in the inner energy of the ideal flow of substance. Calculation by the model is performed by the Runge-Kutta method of third order. A check on the adequacy of the results of calculations by model and experimental data has been performed.

**Keywords:** homogeneous catalysis, ideal mixing reactor, acetic acid

Карбонілювання метанолу (КМ) є промислово важливим процесом отримання оцтової кислоти, синтез якої здійснюють на основі технологій Monsanto і BP Chemicals Cativa в рідкій фазі із застосуванням в ролі катализаторів комплексів родію та іридію, а також галоїдних промоторів [1]. На рисунку 1 наведено маршрут перебігу реакції гомогенного КМ згідно зі способом фірми Monsanto.

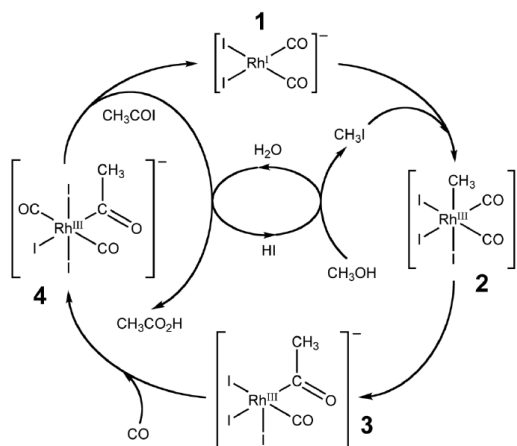


Рис. 1. Каталітична схема процесу фірми Monsanto

Кінетика такого процесу має деякі особливості. Порядок реакції як відносно оксиду вуглецю (II) так і відносно метанолу нульовий, що дозволяє проводити процес за низького тиску. Каталітичний цикл завершується реакціями, в результаті яких утворюється оцтова кислота і регенерується іодистий метил і є першого порядку. Встановлено, що швидкість реакції прямопропорційна концентрації родію то йодиду (родієвому комплексу). Метилйодид досягаю своєї концентрації миттєво, та залишається постійною протягом всього процесу.

Математична модель процесу карбонілювання метанолу побудована на основі теплового та матеріального балансу гомогенної реакції в реакторі ідеального змішування, враховуючи кінетику процесу. Вона подається у вигляді рівнянь зміни мольної долі речовини з часом та зміною внутрішньої енергії ідеального потоку речовини [2].

При цьому враховують такі допущення:

- 1) фізичні величини речовини – постійні;
- 2) загальний реакційний об'єм – постійний;
- 3) витрати теплоти на ізоляцію – незначимі:

$$\frac{dC_{ac.ac.}}{d\tau} = \frac{F_{in}C_{ac.ac.in} - F_{out}C_{ac.ac.out}}{V} - k_0C_{ac.ac.}e^{-E_A/RT},$$
$$\frac{dT}{d\tau} = \frac{mc_p(T_0 - T) - \Delta H(T)k_0C_{ac.ac.}e^{-E_A/RT}}{V\rho c_p}.$$

де  $F_{in}$ ,  $F_{out}$  – об'ємна витрата речовини і на вході та виході з реактору м<sup>3</sup>/год;  
 $C_{ac.ac.in}$ ,  $C_{ac.ac.out}$  – концентрація реагенту на вході та виході з реактору, моль/м<sup>3</sup>;  $V$  – реакційний об'єм, м<sup>3</sup>;  $c_p$  – теплоємність, Дж/кг\*К;  $k$  – постійна Арреніуса, с<sup>-1</sup>.

Розрахунок за моделлю здійснили методом Рунге-Куты третього порядку. Адекватність розрахунку за математичною моделлю до експериментальних даних [3] перевіряли за критерієм Фішера, розраховане значення якого виявилось менше табличного, що говорить про достовірність розрахунку за математичною моделлю.

## Література

1. Yoneda N. Recent advances in processes and catalysts for the production of acetic acid / N. Yoneda, S. Kusano, M. Yasui et al. // *Applied Catalysis A: General*, 2001. – № 221. – P. 253-265.
2. Prymyska S. Mathematical modeling of the dynamics of homogeneous reactions in the cascade of perfect mixing reactors / S. Prymyska, Yu. Beznosyk, W. Reschetilowski // *Восточно-Европейский журнал передовых технологий*. - 2017. - № 2(6). - С. 27-32.
3. De Ory I. Optimum starting-up protocol of pilot plant scale acetifier for vinegar production / De Ory I., LE Romero, D. Cantero // *Journal of Food Engineering*, 2002. – № 52. – P. 31-37.