

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ КИСЛОТНО-КАТАЛІТИЧНОГО НІТРУВАННЯ БЕНЗОЛУ В ПРОМИСЛОВОМУ РЕАКТОРІ

Кондратов Сергій, Красильнікова Анна, Аль Хамадані Мохаммед

Інститут хімічних технологій (м. Рубіжне) Східноукраїнського національного університету
ім. Володимира Даля
kondratovsa@gmail.com

Розроблено математичні і комп'ютерні моделі кислотно-каталітичного нітрування бензолу сульфатно-нітратною кислотною сумішшю в промисловому реакторі неперервної дії. Створено модель політропного та адіабатичного нітрування з уведенням відпрацьованої кислоти, а також, адіабатного процесу з відгонкою води з метою зациклоування сульфатної кислоти.

Нітробензол – перша ланка у ланцюгу синтезу мономерів перш за все ізоціанатів (4,4'-діфенілдіізоціанату, 4,4',4''-трифенілметантріізоціанату). Розробка підходів щодо вдосконалення промислової технології нітробензолу, що випускається вітчизняною хімічною промисловістю, починаючи з 20-х років 20 ст., є актуальною задачею.

Сучасний підхід до розробки технологій багатотоннажних промислових продуктів базується на широкому використанні комп'ютерного моделювання. Мета нашої роботи – розробка математичних та комп'ютерних моделей кислотно-каталітичного нітрування бензолу сульфатно-нітратною кислотною сумішшю в промисловому реакторі за різними режимами.

Вважаючи, що в процесі нітрування відбувається зміна густини реакційної маси, розроблено теорію реакторів ідеального змішування зі змінним часом перебування.

Розроблено наступні моделі нітрування:

- стаціонарну модель адіабатичного процесу у присутності відпрацьованої сульфатної кислоти (для зняття тепла),
- стаціонарну модель політропного процесу із зовнішнім зняттям тепла за рахунок теплообміну;
- імітаційну динамічну модель адіабатного і політропного нітрування в присутності відпрацьованої кислоти (у формі різницевої схеми);
- стаціонарну модель адіабатичного процесу у відсутності відпрацьованої кислоти зі зняттям тепла за рахунок випаровування при кипінні води і органіки. Цей процес має великий практичний інтерес з точки зору зменшення відходів за рахунок «зациклоування» сульфатної кислоти без її окремої регенерації.

Розроблені моделі реалізовано програмно в різних середовищах програмування. Показано, що моделі адіабатичного нітрування в присутності відпрацьованої кислоти непогано описує закономірності промислового нітрування. На динамічній моделі було встановлено, що в період пуску в нітраторі може спостерігатися накопичення значної кількості бензолу і нітратної кислоти, що створює небезпечність процесу. Цього можна запобігти в разі попереднього нагріву кислоти в реакторі перед пуском до 50-60°C