

А. Ф. Шагалева, И. М. Губайдуллин (Уфа, БашГУ, ИНК РАН РБ). **Расчет пускового режима процесса олигомеризации α -метилстирола в присутствии катализатора в трубчатом реакторе.**

Реакция олигомеризации α -метилстирола привлекает внимание исследователей тем, что продукты реакции являются ценным нефтехимическим сырьем.

Кинетическая модель процесса представляет собой совокупность элементарных стадий реакции и уравнений, характеризующих зависимость скорости химического превращения от параметров реакции: давления, температуры, концентрации реагентов. Эти зависимости определяются на основе экспериментальных данных в области изменения параметров реакции. На основании проведенных экспериментов и анализа литературных данных предложена схема химических превращений α -метилстирола, которая включает в себя девять стадий. Кинетические уравнения, соответствующие схеме превращений, проанализированы в рамках закона действующих масс [1].

Математическое описание процесса представляется следующей системой уравнений в частных производных и обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \bar{u} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} &= \frac{\alpha}{c_p} (\theta_s - \theta) + \sum_{j=1}^9 \frac{q_j}{c_p} \bar{w}_j, \\ \frac{\partial \theta_x}{\partial \tau} + \frac{v_x}{v_0} \frac{\partial \theta_x}{\partial \xi} &= \beta (\theta - \theta_x), \quad \frac{\partial x_k}{\partial \tau} + \bar{u} \frac{\partial x_k}{\partial \xi} = F_k - x_k F_n, \\ \frac{\partial \bar{u}}{\partial \xi} &= F_n, \quad F_n = \sum_{j=1}^9 \bar{w}_j \sum_{k=1}^5 v_{kj}, \\ \tau = 0: \quad x_k &= 0, \quad \theta = \theta^0, \quad \theta_x = \theta_x^0, \\ \xi = 0: \quad x - k &= x_k^0, \quad \theta = \theta^0, \quad \theta_x = \theta_x^0, \quad \bar{u} = 1. \end{aligned}$$

Выбран оптимальный метод численного решения достаточно сложной системы уравнений [2]. Разработана программа расчета, позволяющая при варьировании начальных условий (температуры θ_x и расхода хладагента \bar{u}) рассчитывать пусковые режимы трубчатого реактора. Максимальная температура в реакторе ниже 130° С.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Смьнько М. Г.* Научные основы теории каталитических процессов и реакторов. — Кинетика и катализ, 2000, т. 41, № 6, с. 933–946.
2. *Дробышев В. И.* Эффективный алгоритм расчета нестационарных режимов в каталитическом реакторе. — В кн.: Распространение тепловых волн в гетерогенных средах. Новосибирск: Наука, 1988, с. 275–285.