

Р. Р. Шангареев, С. А. Мустафина (Стерлитамак, СФ БГУ).
Оптимизация процесса синтеза винилацетата с учетом дезактивации катализатора.

Среди кислородосодержащих соединений, получаемых в промышленности основного органического и нефтехимического синтеза, одно из первых мест занимают сложные виниловые эфиры, наиболее важным из которых является винилацетат. Синтез винилацетата осуществляется, в основном, из ацетилена и уксусной кислоты посредством парофазного процесса, характеризующегося дезактивацией применяемого цинк-ацетатного катализатора. Математическую модель данного процесса в трубке реактора с неподвижным слоем катализатора в случае идеального вытеснения можно представить в виде [1]:

$$\frac{\partial x}{\partial l} = \frac{\theta(m+1)}{v_0} r(m, v_0, T, x), \quad \frac{\partial \theta}{\partial t} = -\theta k_p(T), \quad (1)$$

с граничными условиями:

$$x(0, t) = 0, \quad t \in [0, t_k], \quad \theta(l, 0) = \theta_0, \quad l \in [0, l_k], \quad (2)$$

где m — мольное отношение ацетилена и уксусной кислоты, v_0 — мольная скорость подачи сырья (моль/м²с), t — время действия катализатора, θ — величина, описывающая изменение каталитической активности, T — температура ($T \leq 230$ °С), l_k — длина реактора, t_k — время работы катализатора.

Задача оптимизации состоит в нахождении значений реакционной температуры, скорости парогазовой смеси на входе в реактор и мольного отношения ацетилен/уксусная кислота, удовлетворяющих критерию оптимизации:

$$\int_0^{t_k} \int_0^{l_k} \left(\frac{S}{t_\mu} \left[a_1 \theta r(m, v, T, x) - \frac{(a_2 m + a_3) v}{(m+1) l_k} \right] - \frac{a_6}{t_\mu} \right) dl dt \rightarrow \max_{v, m, T}, \quad (3)$$

где $a_6 = a_4 - a_5/t_\mu$, a_i — коэффициенты учета потерь в различных узлах технологической схемы, t_μ — длительность цикла работы, S — площадь поперечного сечения реактора (м²).

Для решения задачи (1)–(3) были применены численные методы последовательных приближений и вариации пространства управления с уровнем разделения $\varepsilon = 0,01$ и начальным приближением $T = 186$ °С [2].

Результаты показали, что оптимальный режим парофазного процесса синтеза винилацетата из ацетилена и уксусной кислоты характеризуется повышением температуры и мольного соотношения ацетилена и уксусной кислоты, а также понижением скорости парогазовой смеси со временем.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Быков В. В. Моделирование химико-технологических процессов. Красноярск: ИПЦКГТУ, 2002, 298 с.
2. Шангареев Р. Р., Давлетшин Р. С., Мустафина С. А. Программные модули для решения задач оптимизации химических процессов с учетом изменения активности катализатора. М: ОФЭРНИО, № 15478, ВНИИЦ № 0203025820376, 2010, 21 с.