

М.М. Кисляков, В.Ю. Харченко, Е.Ю. Харченко

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРОЦЕССА ПОДГОТОВКИ СЫРЬЯ
В ПРОИЗВОДСТВЕ ФТАЛОЦИАНИНА МЕДИ**

Фталоцианин меди (ФЦМ) – одно из наиболее востребованных соединений в химической и лакокрасочной промышленности. Он является красящим пигментом – основой для производства красок [1].

Так как синтез ФЦМ является достаточно энергоемким процессом и исходные компоненты довольно дорогостоящи, то возникают задачи снижения себестоимости готового продукта и повышения его качества за счет оптимизации динамических режимов. Эти задачи целесообразно решать на основе математического моделирования и имитационных исследований.

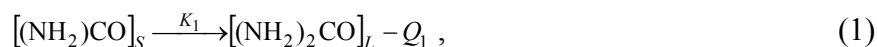
Таким образом, необходимо получить математическое описание данного процесса с целью дальнейшего проведения имитационного исследования и решения задач оптимального управления.

Синтез фталоцианина протекает в реакторе с рубашкой и мешалкой [2]. Так как перемешивание в реакторе проводится с высокой интенсивностью, то в качестве гидродинамической модели реактора правомерно использование модели идеального смешения. На основании проведенного литературного обзора по данной теме, при моделировании использовалась следующая система допущений [1, 3, 4]:

- потери тепла в окружающую среду незначительны, вследствие конструктивных особенностей реактора;
- частицы сыпучих материалов в твердой фазе имеют сферическую форму [2, 6];
- тепловая инерция стенок реактора незначительна, так как материал стенок имеет достаточно высокий коэффициент теплопроводности.

РАССМОТРИМ СТАДИЮ ПОДГОТОВКИ ИСХОДНЫХ КОМПОНЕНТОВ.

В реактор из промежуточной емкости поступает плав трихлорбензола (ТХБ), который имеет температуру T_n . После этого в реактор загружают мочевины М, которая под воздействием температуры начинает плавиться и разлагаться [2]. Это необходимо для обогащения смеси азотосодержащими компонентами, что играет немаловажную роль для синтеза ФЦМ. При температуре $T < 150$ °С происходит разложение только до биурета, при $T < 220$ °С происходит разложение до триурета, при $T > 220$ °С мочевины разлагается полностью [3]. Плавление мочевины происходит по схеме [1]



где $[\dots]_s$ – твердая фаза; $[\dots]_l$ – жидкая фаза; Q_1 – тепловой эффект реакции.

Плавление удовлетворительно описывается уравнением вида [1]

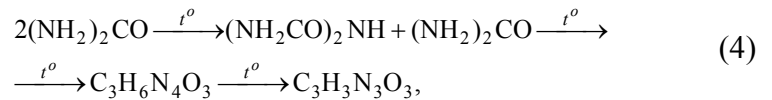
$$\frac{d\bar{R}}{d\tau} = A\bar{R}^\alpha \exp(-E/RT)(C^* - C)/\rho_S; \quad (2)$$

с начальными условиями

$$\bar{R}(0) = \bar{R}_0, \quad (3)$$

где \bar{R} – средний радиус частиц, м; E – энергия активации, кДж/кмоль; ρ_S – плотность твердой фазы, кг/м³; C^* – равновесная концентрация, кмоль/м³; C – текущая концентрация, кмоль/м³; A, α – коэффициенты, подлежащие идентификации.

Кинетика разложения мочевины под действием температуры описывается стехиометрическим уравнением вида [3]:



покомпонентный баланс для уравнения (4) будет иметь вид:

$$\begin{cases} \frac{dC_1}{d\tau} = -K_2 C_1^2; \\ \frac{dC_2}{d\tau} = K_2 C_1^2 - K_3 C_2; \\ \frac{dC_3}{d\tau} = K_3 C_2 - K_4 C_3; \\ \frac{dC_4}{d\tau} = K_4 C_3. \end{cases} \quad (5)$$

С начальными условиями:

$$C_1(0) = C_1^0, C_2(0) = C_3(0) = C_4(0) = 0, \quad (6)$$

$$\text{где } K_i = K_{oi} \exp(-E_i / RT) - \quad (7)$$

температурная зависимость в форме Аррениуса; K_i – константа скорости реакции, кмоль/м³ · с; K_{oi} – предэкспоненциальный множитель; подстрочный индекс i соответствует мочеvine, 2 – биурету, 3 – триурету, 4 – циануровой кислоте; $i = 1...4$.

Тепловой баланс для данной системы будет иметь вид

$$c_p^{\text{см}} V^{\text{см}} \frac{dT}{d\tau} = Q_i^l + kF(T_{\text{ст}} - T). \quad (8)$$

С начальными условиями

$$T(0) = T_H \quad (9)$$

где $V^{\text{см}}$ – объем реакционной массы, м³; $c_p^{\text{см}}$ – теплоемкость смеси, кДж/кмоль; k – коэффициент теплопередачи от стенки к смеси, кДж/(м² · град); F – площадь поверхности теплообмена, м².

В математическую модель входят неизвестные коэффициенты, подлежащие идентификации. При решении задачи идентификации были получены следующие результаты: $A = 1,365 \cdot 10^{-2}$, $\alpha = 3,548 \cdot 10^{-4}$.

ПО ИЗВЕСТНОЙ МЕТОДИКЕ [4], БЫЛА ПРОВЕДЕНА ПРОВЕРКА АДЕКВАТНОСТИ МОДЕЛИ. МАКСИМАЛЬНАЯ ПРИВЕДЕННАЯ ПОГРЕШНОСТЬ МОДЕЛИ СОСТАВИЛА 6,213

%. НА РИС. 1 ПРЕДСТАВЛЕНЫ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ И РЕЗУЛЬТАТЫ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ММ.

Таким образом, система (1) – (9) составляет математическую модель процесса подготовки сырья для производства фталоцианина меди, учитывающую теплофизические свойства и кинетику разложения мочевины. Модель предназначена для проведения имитационных исследований и решения задач оптимизации динамических режимов.

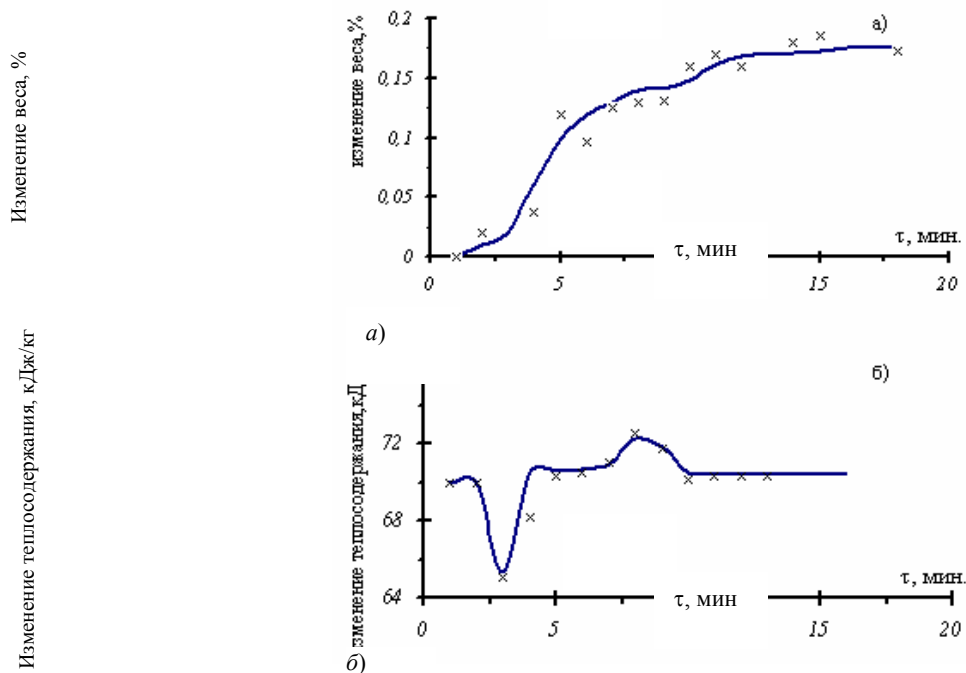


Рис. 1 Результаты уравнений ММ:

а – изменение веса мочевины по времени; *б* – скорость изменения теплосодержания; сплошные линии – кривые, рассчитанные по модели; точки – экспериментальные данные

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1 Технологический регламент производства фталоцианина меди низкопроцентного. 1983.
- 2 Абубакер О.С. Математическое моделирование и оптимизация процесса получения фталоцианина голубого β-модификации. Дис. ... канд. техн. наук. Тамбов: Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2002.
- 3 Общая химия / Под ред. Н.А. Глинки. М.: Химия, 1982.
- 4 Кафаров В.В. Глебов А.С. Методы оптимизации в химтехнологии. М.: Химия, 1981.
- 5 Карнишев В.В. "Математическое моделирование процессов в трубчатых реакторах (на примере красителя фталоцианина меди β-модификации)" Дис. ... канд. техн. наук. Тамбов: Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2001.