

Истомин Андрей Леонидович,

д.т.н., профессор, Ангарский государственный технический университет,
e-mail: a.l.istomin@mail.ru

Кривов Максим Викторович,

к.т.н., доцент, Ангарский государственный технический университет,
e-mail: vmc@angtu.ru

Истомина Алена Андреевна,

к.т.н., доцент, Ангарский государственный технический университет,
e-mail: alenaist@yandex.ru

ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ЭТИЛЕНА В АВТОКЛАВНОМ РЕАКТОРЕ С МЕШАЛКОЙ

Istomin A.L., Krivov M.V., Istomina A.A.

CONSTRUCTION OF A MODEL OF THE ETHYLENE POLYMERIZATION PROCESS IN AN AUTOCLAVE REACTOR WITH A STIRRER

Аннотация. Предложена математическая модель реактора полимеризации как каскад из аппаратов идеального смешения.

Ключевые слова: автоклавный химический реактор, математическая модель реактора полимеризации этилена

Abstract. A mathematical model of a polymerization reactor as a cascade of ideal mixing apparatuses is proposed.

Keywords: autoclave chemical reactor, mathematical model of ethylene polymerization reactor

Для выявления зависимостей между входными переменными, технологическим режимом и выходными переменными процесса полимеризации этилена в автоклавном реакторе с мешалкой, а также анализа влияния конструктивных параметров реактора на его эффективность была построена математическая модель реактора полимеризации. Модель получена на основе анализа физико-химических закономерностей процесса полимеризации этилена.

Конструктивно реактор разделен на четыре зоны. В каждую из зон можно подавать различные количества этилена и инициатора, поддерживая в них разную температуру и достигая разного среднего времени пребывания. В реакторе осуществляется процесс образования высокомолекулярного вещества (полимера) путем взаимного соединения большого числа молекул исходного низкомолекулярного вещества (мономера).

Процесс образования молекулы полимера состоит из следующих стадий:

- инициирование – образование первичного свободного радикала;
- рост цепи – последовательное присоединение к радикалу молекул мономера с сохранением свободной валентности на конце растущей молекулы;
- обрыв цепи - прекращение роста молекулы (взаимодействие двух растущих радикалов с образованием одной или двух неактивных молекул полиэтилена).

В предположении об идеальности перемешивания и постоянном давлении автоклавный реактор полимеризации рассмотрен как каскад 4-х аппаратов иде-

ального смешения для описания каждой из 4-х зон реактора.

Схема потоков в зонах реактора показана на рис.1.

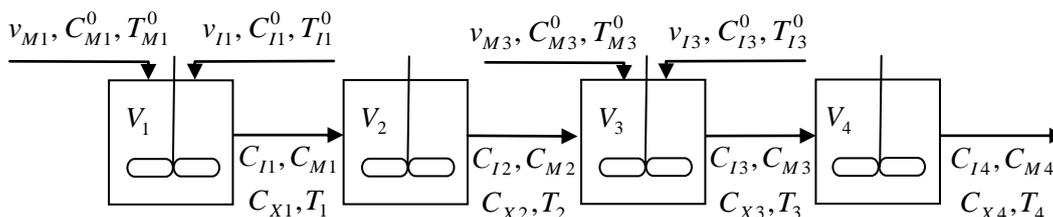


Рисунок 1 – Схема потоков в зонах реактора

На схеме приведены обозначения: v_{M1} , v_{M3} , v_{I1} и v_{I3} – объемные расходы мономера и инициатора в 1-ю и 3-ю зоны реактора соответственно ($\text{м}^3/\text{с}$); C_{M1}^0 , C_{M3}^0 , C_{I1}^0 и C_{I3}^0 – массовые концентрации мономера и инициатора на входе 1-й и 3-й зоны ($\text{кг}/\text{м}^3$); C_{Ii} , C_{Mi} , C_{Xi} – концентрации инициатора, мономера и активных молекул на выходе i -й зоны реактора, $i = \overline{1, 4}$ ($\text{кг}/\text{м}^3$); T_1^0 , T_3^0 , T_i , $i = \overline{1, 4}$ – температура входных и выходных потоков зон реактора ($^{\circ}\text{C}$); V_i , $i = \overline{1, 4}$ – реакционный объем i -й зоны реактора (м^3).

На схеме не указан охлаждающий поток через поверхность рубашки. Вследствие небольшого объема реакционной зоны принято допущение, что температура охлаждающего воздуха в рубашке одинакова во всем объеме.

Математическая модель каждой из зон реактора представляет систему из трех обыкновенных дифференциальных уравнений для нахождения концентраций мономера, инициатора, а также температуры и одного конечного уравнения для определения концентрации активных молекул.

Начальные условия систем дифференциальных уравнений определяются из решения уравнений модели статики.

Получение решения уравнений модели не вызывает каких-либо трудностей и реализовано с помощью известных численных методов. Так, для решения системы нелинейных алгебраических уравнений статики использовался метод Ньютона-Рафсона, а для решения систем дифференциальных уравнений метод Рунге-Кутты 4-го порядка.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Вольтер, Б.В.** Устойчивость режимов работы химических реакторов /Б.В. Вольтер, И.Е. Сальников. – Москва: Химия, 1981. – 200 с.
2. **Жоров, Ю.М.** Моделирование физико-химических процессов нефтепереработки и нефтехимии. – Москва: Химия, 1978. – 376 с.
3. **Перлмуттер, Д.** Устойчивость химических реакторов. Пер. с англ. Под ред. Н.С. Гурфейна. – Ленинград: Химия.1976. – 256 с.