

УДК 661.185:66.02

*М. О. ПОДУСТОВ, А. І. ДЗЕВОЧКО, І. Г. ЛИСАЧЕНКО, О. М. ДЗЕВОЧКО***АНАЛІЗ ПРОЦЕСУ СУЛЬФАТУВАННЯ В ТРУБЧАСТОМУ ПЛІВКОВОМУ РЕАКТОРІ МЕТОДОМ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ**

Пропонуються результати математичного моделювання для визначення оптимальних умов ведення процесу сульфатування в трубчастому плівковому реакторі з низхідним рухом плівки органічної речовини та газоподібного сульфатуючого агента. Показані та проаналізовані впливи початкових концентрацій, витрат та температур технологічних потоків на перебіг процесу. Зроблено висновки про можливість поліпшення температурного режиму процесу сульфатування в трубчастому плівковому реакторі за допомогою сегментування охолоджуючої рубашки та зміни напрямів руху охолоджуючої рідини.

**Ключові слова:** математичне моделювання, аналіз, плівковий реактор, алгоритм, процес сульфатування, сегментування, прямотечія, протитечія.

Предлагаются результаты математического моделирования для определения оптимальных условий ведения процесса сульфатирования в трубчатом пленочном реакторе с нисходящим потоком пленки органического вещества и газообразного сульфатирующего агента. Показано и проанализировано влияние начальных концентраций, расходов и температур технологических потоков на ход процесса. Сделаны выводы о возможности улучшения температурного режима процесса сульфатирования в трубчатом пленочном реакторе с помощью сегментирования охлаждающей рубашки и изменения направлений движения охлаждающей жидкости.

**Ключевые слова:** математическое моделирование, анализ, пленочный реактор, алгоритм, процесс сульфатирования, сегментирование, прямоток, противоток.

The results of mathematical modeling are proposed to determine the optimal conditions for conducting the sulfation process in a tubular film reactor with a downward flow of a film of organic matter and a gaseous sulfating agent. It is shown that the most important moment in the reactor is the temperature peak of the substance, which manifests itself approximately in the first third of its height. Too high a peak temperature leads to a deterioration in the quality of the finished product. The influence of the initial concentration of gaseous low-concentration sulfur trioxide, the costs of the sulfating agent and organic raw materials, as well as the initial temperatures of process flows on the course of the process, is analyzed. Conclusions are made about the possibility of improving the temperature regime of the sulfation process in a tubular film reactor by segmenting the cooling jacket and changing the direction of movement of the cooling liquid, in each segment separately, which provides the most favorable temperature regime in the reactor, which ensures a high degree of sulfation and chromaticity of the product.

**Keywords:** mathematical modeling, analysis, film reactor, algorithm, sulphation process, segmentation, straight flow, counterflow.

**Вступ.** Поверхнево-активні речовини (ПАР) широко використовуються у різних галузях народного господарства як емульгатори, диспергатори, змочувачі, з метою підвищення нафтовіддачі пластів, але більша частина використовується як основа миючих і піноутворюючих засобів.

За наявності різноманітних технічних рішень ведення процесу сульфатування та різних варіантів його апаратурно-технологічного оформлення значний інтерес становить плівкові реактори сульфатування органічної речовини низькоконцентрованим газоподібним триоксидом сірки які здатні забезпечити відповідний температурний режим процесу, а це в свою чергу дасть змогу одержати продукт високої якості.

У світовій науковій літературі є велика кількість публікацій, присвячених дослідженню процесу сульфатування в трубчастих плівкових апаратах, автори яких використовували різні підходи до обґрунтування, застосовували як спрощені математичні моделі так і складні реалістичні, доповнені як коефіцієнтами так і рівняннями отриманими на основі експериментальних даних [1 – 5], але незважаючи на їх велику кількість, питання математичного моделювання плівкових реак-

торів сульфатування вимагає подальшого вивчення.

**Мета роботи.** Метою данного дослідження є визначення параметрів процесу сульфатування органічної сировини низькоконцентрованим триоксидом сірки в трубчастому плівковому реакторі, з метою забезпечення необхідної якості кінцевого продукту.

**Результати роботи.** Для реалізації поставленої мети в програмі MatLab, у відповідності алгоритму [6], була реалізована математична модель однотрубного трубчастого реактора, схема якого наведена на рисунку 1, та проведено моделювання процесу сульфатування в ньому.

Реактор являє собою вертикальний апарат у верхній частині якого знаходиться вана з рідкою реакційною масою (органічною сировиною) яка, переливаючись через край, стікає тонким шаром по внутрішній поверхні реакційної трубки та взаємодіє з сульфатуючим агентом (газоподібним низькоконцентрованим триоксидом сірки) що рухається в тому ж напрямку що і рідка маса, для відводу надмірного реакційного тепла реактор оснащено охолоджуючою рубашкою.

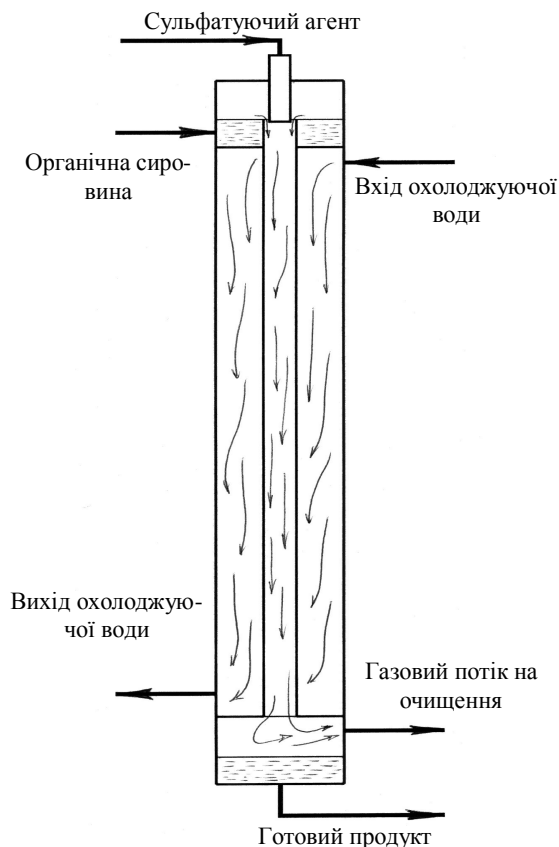


Рис. 1 – Загальний вид трубчастого плівкового реактора

Так для моделювання реактора за прямою, було розраховано випадок для таких параметрів: мольне співвідношення  $\text{SO}_3$  до органічної сировини 1,06 : 1, концентрація  $\text{SO}_3$  5 % від газового об'єму, діаметр реакційної трубки 0,037 м, довжина реактора дорівнює 150 діаметрам реакційної трубки, початкова температура рідини 312 К, початкова температура хладоагенту 293 К, початкова температура газового пото-

ку 303 К.

Результати приведені на рисунку 2.

Найважливішим моментом у реакторі є температурний пік речовини, який проявляється приблизно в першій третині реактора по його довжині (рисунк 2, крива 1).

Так на наступному етапі моделювання проведені розрахунки впливу таких параметрів процесу як: кількість рідкої реакційної суміші, її початкової температури, початкової температури охолоджуючого потоку на хід процесу, з метою зменшення температурного піку. Так на рисунку 3 показана залежність температури рідкої реакційної суміші по довжині реактора від її кількості, що подається до реактора.

Видно, що збільшення витрати рідкої фази призводить до збільшення температури процесу, що неприпустимо в даному випадку.

На рисунку 4 показано результати розрахунків реактора при зміні початкової температури рідкої фази.

Провівши аналіз залежностей температури процесу та ступеня перетворення, зроблено висновок, що збільшення температури початкового потоку рідини збільшує температуру реакції.

Це призводить до погіршення кольоровості продукту. А зменшення температури призводить до зменшення ступеня сульфатування, що спричиняє збільшення витрат на стадії нейтралізації та очищення газових викидів.

На наступному етапі моделювання було поставлено питання щодо зміни напрямку руху охолоджуючого потоку з протічечі на протитечію.

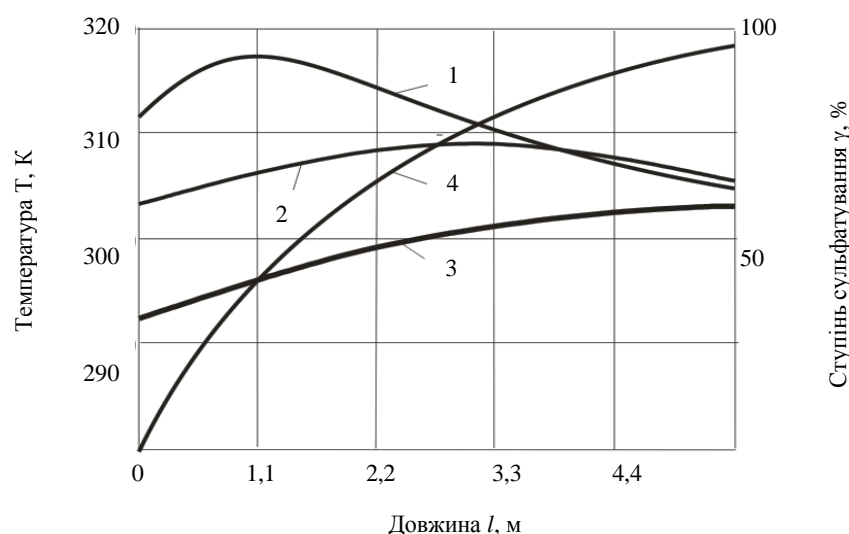


Рис. 2 – Результати математичного моделювання реактора сульфатування: 1 – температура рідкої фази, 2 – температура газової фази, 3 – температура хладоагенту, 4 – ступінь сульфатування.

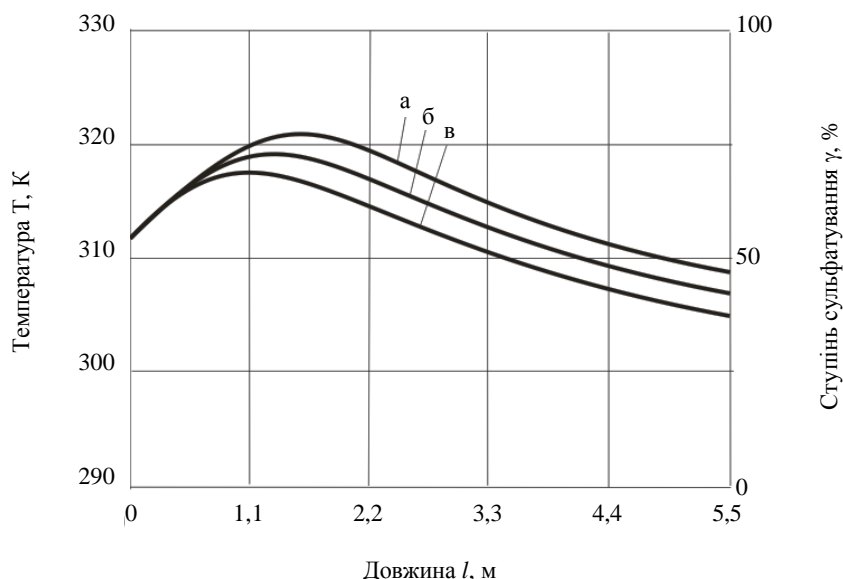


Рис. 3 – Результати математичного моделювання реактора сульфатування при зміні початкової температури рідкої фази: а – 297 К, б – 312 К, в – 317 К.

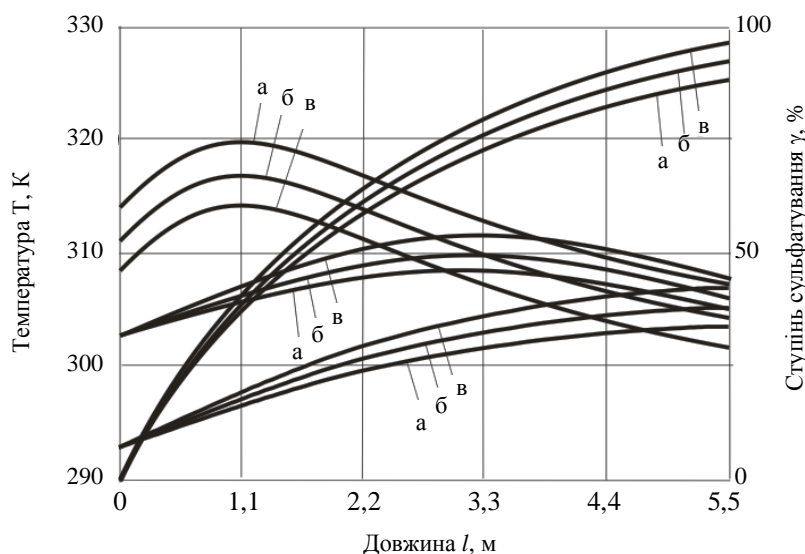


Рис. 4 – Зміна температури рідкої фази по довжині реактора від її кількості, кг/годину: а – 16, б – 22, в – 34.

Аналіз показав, що використання протитечії одним потоком по всій довжині реактора недоцільно.

В такому випадку також буде зменшена температура реакції наприкінці реактора, що знижує швидкість процесу сульфатування та зменшує його кінцевий ступінь.

Тому було запропоновано реалізувати тепло обмін з двома однаковими послідовними секціями (рис. 5), охолодження в яких здійснюється протитечією до реакційної маси. В такій схемі охолодження відсутній ефект заходження наприкінці реактора за рахунок того, що охолоджуючий потік підігрівается в першій (верхній) секції, знімаючи основне теплове навантаження та зменшуючи температурний пік.

Після першої секції підігрітий охолоджуючий потік спрямовується на охолодження другої (нижньої) секції.

З рисунку 5 видно, що спостерігається значне зменшення температурного піку, але також є незначне зменшення температури наприкінці реактора.

Для підвищення температури наприкінці реактора проведено розрахунок, де охолодження другої (нижньої) секції здійснюється за протитечією, рисунок 6.

Так, згідно рисунку 6, охолоджуючий потік входить всередині реактора (точка 1) і рухається протитечією реакційній масі, ефективно знімаючи надмірне реакційне тепло, після виходу цього охолоджуючого потоку (частково підігрітого) з точки 2, спрямовується в нижню частину реактора (точка 2') де рухається прямою до реакційної маси.

За рахунок того, що основний теплове навантаження спостерігається у верхній частині реактора, а в

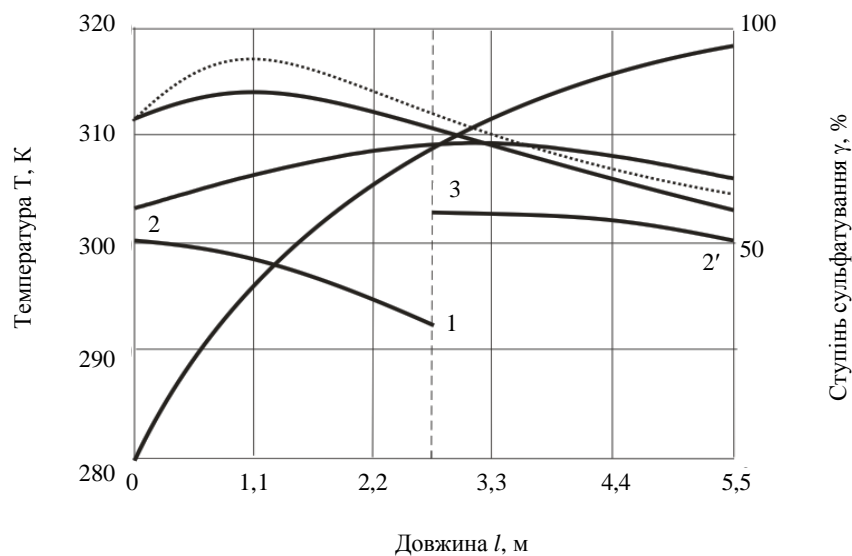


Рис. 5 – Результати математичного моделювання двосекційного охолодження реактора «протитечія – протитечія»

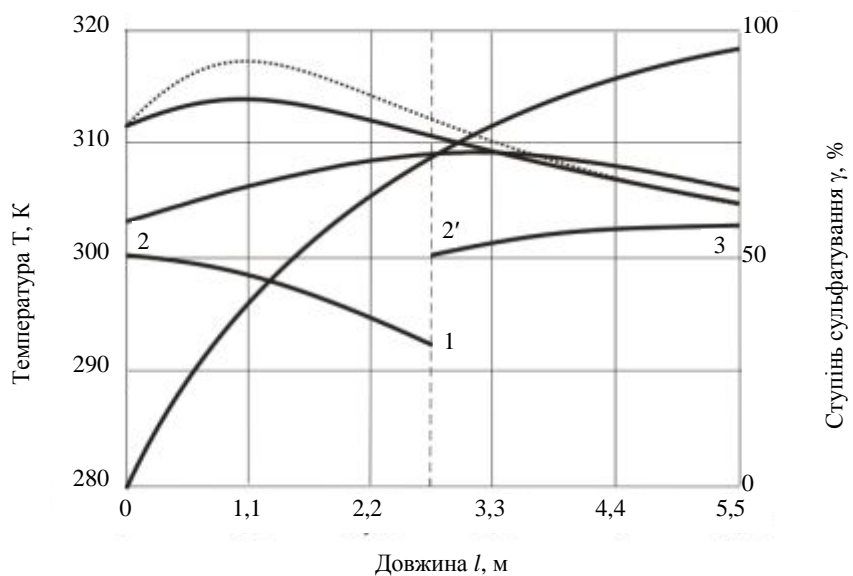


Рис. 6 – Результати математичного моделювання двосекційного охолодження реактора «протитечія – протитечія»

нижній частині кількість тепла, що виділяється, незначна, частково підігрітий в першій секції охолоджуючий потік, забираючи реакційне тепло в другій секції сприяє підвищенню температури наприкінці реактора, що в свою чергу збільшує швидкість процесу.

Після визначення напрямів охолоджуючих потоків в секціях було проведено моделювання з визначення співвідношення їх розмірів.

Так на рисунку 7 показано результат, який свідчить, що раціональне співвідношення довжин першої (верхньої) та другої (нижньої) секції складає 2/3.

Такий розподіл дозволяє суттєво знизити температурний пік та підвищити температуру процесу наприкінці реактора.

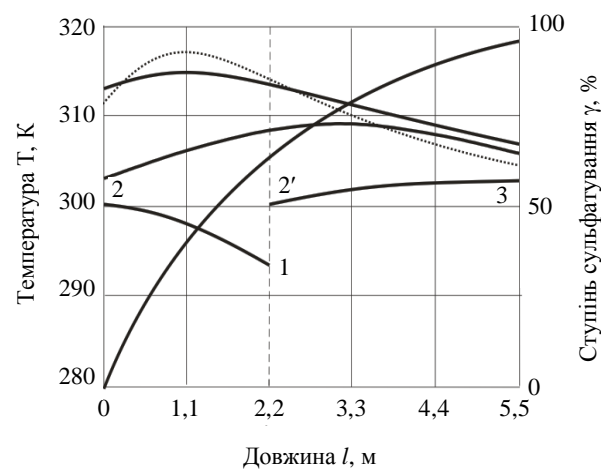


Рис. 7 – Результати математичного моделювання з визначення співвідношення секцій охолодження

**Висновки.**

Таким чином, за результатами математичного моделювання була запропонована схема охолодження реактора сульфатування, що забезпечує найбільш сприятливий температурний режим в реакторі, який, в свою чергу, забезпечує відповідну кольоровість продукту та високий ступінь сульфатування.

**Список літератури**

1. *Правдин В. Г.* Сульфирование и сульфатирование нефтехимических продуктов газообразным триоксидом серы в производстве ПАВ / В. Г. Правдин. – М.: ЦНИИТЭ Нефтехим, 1981. – 44 с.
2. Dabir B., Riazi M. R., Davoudirad H. R. Modelling of falling film reactors. *Chemical Engineering Science*, 1996, Vol. 51, No.12, pp. 2553 – 2558.
3. Talens F. I. The modelling of falling film chemical reactors. *Chemical Engineering Science*, 1999, Vol. 54, No.12, pp. 1871 – 1881.
4. Akanksha, Pant K. K., Srivastava V. K. Modelling of sulphanation of tridecylbenzene in a falling film reactor. *Math. Comp. Model*, 2007, Vol. 46, No. 9-10, pp. 1332 – 1344.
5. Ortega Y. T. Sulfonation / Sulfation processing technology for anionic surfactant manufacture. *Advances in Chemical Engineering*, 2011, Vol. 11, pp. 269 – 294.
6. *Дзевочко А. І.* Розробка математичної моделі процесу сульфатування в плівковому реакторі / А. І. Дзевочко, М. О. Подустов, В. О. Панасенко // Інтегровані технології та енергозбереження. – Х.: – 2017. – № 1. – С. 25 – 33.

*Бібліографічні описи / Библиографические описания / Bibliographic descriptions*

**Аналіз процесу сульфатування в трубчастому плівковому реакторі методом математичного моделювання / М. О. Подустов, А. І. Дзевочко, І. Г. Лисаченко, О. М. Дзевочко // Вісник НТУ «ХП».** – Серія: Хімія, хімічна технологія та екологія. – Х.: НТУ «ХП». – 2017. – № 49 (1270). – С. 60 – 65. – Бібліогр.: 6 назв. – ISSN 2079-0821.

**Анализ процесса сульфатирования в трубчатом пленочном реакторе методом математического моделирования / М. А. Подустов, А. И. Дзевочко, И. Г. Лысаченко, А. М. Дзевочко // Вісник НТУ «ХП».** – Серія: Хімія, хімічна технологія та екологія. – Х.: НТУ «ХП». – 2017. – № 49 (1270). – С. 60 – 65. – Бібліогр.: 6 назв. – ISSN 2079-0821.

**Analysis of the sulfating process in a tubular film reactor by method of mathematical modeling / М. О. Podustov, A. I. Dzevochko, I. H. Lysachenko, O. M. Dzevochko // Bulletin of NTU “KhPI”.** – Series: Chemistry, Chemical Engineering and Ecology. – Kharkov: NTU “KhPI”. – 2017. – № 49 (1270). – P. 60 – 65. – Bibliogr.: 6 names. – ISSN 2079-0821.

*Відомості про авторів / Сведения об авторах / About the Authors*

**Подустов Михайло Олексійович** – доктор технічних наук, професор, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», завідувач кафедри автоматизації технологічних систем та екологічного моніторингу, тел.: (057) 70-76-687; e-mail: podustov@kpi.kharkov.ua

**Подустов Михаил Алексеевич** – доктор технических наук, профессор, Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт», заведующий кафедрой автоматизации технологических систем и экологического мониторинга, тел.: (057) 70-76-687; e-mail: podustov@kpi.kharkov.ua

**Podustov Mykhaylo Oleksiiovych** – Doctor of Technical Sciences, Full Professor, National Technical University “Kharkiv Polytechnic Institute”, Head of the Department of Automation of Technological Systems and Environmental Monitoring, tel.: (057) 70-76-687; e-mail: podustov@kpi.kharkov.ua

**Дзевочко Альона Ігорівна** – Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», асистент кафедри автоматизації технологічних систем та екологічного моніторингу, тел.: (057) 70-76-687; e-mail: adzevchko@ukr.net

**Дзевочко Алёна Игоревна** – Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт», ассистент кафедры автоматизации технологических систем и экологического мониторинга, тел.: (057) 70-76-687; e-mail: adzevchko@ukr.net

**Dzevochko Alona Ihorivna** – National Technical University “Kharkov Polytechnic Institute”, Assistant at the Department of Automation of Technological Systems and Environmental Monitoring, tel.: (057) 70-76-687; e-mail: adzevchko@ukr.net

**Лысаченко Игор Григорович** – кандидат технических наук, доцент, Национальный технический университет «Харківський політехнічний інститут», доцент кафедри автоматизації технологічних систем та екологічного моніторингу, тел.: (057) 70-76-687; e-mail: lysachenko1970@gmail.com

**Лысаченко Игорь Григорьевич** – кандидат технических наук, доцент, Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт», доцент кафедры автоматизации технологических систем и экологического мониторинга, тел.: (057) 70-76-687; e-mail: lysachenko1970@gmail.com

**Lysachenko Ihor Hryhorovych** – Candidate of Technical Sciences (Ph. D), Associate Professor, National Technical University “Kharkov Polytechnic Institute”, Associate Professor at the Department of Automation of Technological Systems and Environmental Monitoring, tel.: (057) 70-76-687; e-mail: lysachenko1970@gmail.com

**Дзевочко Олександр Михайлович** – кандидат технических наук, доцент, Национальный технический университет «Харківський політехнічний інститут», доцент кафедри автоматизації технологічних систем та екологічного моніторингу, тел.: (057) 70-76-687; e-mail: sashadzevchko@ukr.net

**Дзевочко Александр Михайлович** – кандидат технических наук, доцент, Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт», доцент кафедры автоматизации технологических систем и экологического мониторинга, тел.: (057) 70-76-687; e-mail: sashadzevchko@ukr.net

**Dzevochko Oleksandr Mykhailovych** – Candidate of Technical Sciences (Ph. D), Associate Professor, National Technical University “Kharkov Polytechnic Institute”, Associate Professor at the Department of Automation of Technological Systems and Environmental Monitoring, tel.: (057) 70-76-687; e-mail: sashadzevchko@ukr.net