

УДК 66.011:547.264:547.284.4

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССА ОКИСЛЕНИЯ БУТАНОЛА-2 В МЕТИЛЭТИЛКЕТОН

А.Р.Сафаров

*Институт Катализа и Неорганической Химии им. акад. М.Нагиева
AZ 1143 Баку, пр.Г.Джавида, 113; e-mail: kqki@kqki.science.az*

В настоящей работе приводятся результаты разработки полной математической модели для процесса окислительного дегидрирования бутанола-2 в метилэтилкетон. На основе кинетической модели процесса осуществлен выбор оптимального типа реактора. Выявлены наиболее значимые физико-химические явления, существенным образом влияющие на ход процесса. Определены температурные зависимости теплового эффекта каждой реакции, а также теплоемкостей веществ, принимающих участие в процессе. В разработанной математической модели осуществлен учет потери напора в системе при движении газовой смеси через неподвижный слой катализатора.

Ключевые слова: *бутанол-2, метилэтилкетон, моделирование, математическое описание, тепловой баланс, тепловые эффекты, потеря напора.*

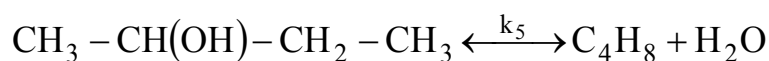
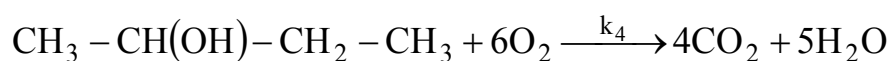
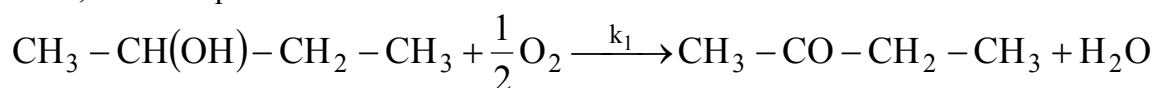
Метилэтилкетон (МЭК) в химической промышленности применяется как промежуточный продукт при изготовлении вторбутиламина, пероксид метилэтилкетона и т.д. Сам по себе метилэтилкетон – это растворитель, применяемый для растворения полиакриловых, нитроцеллюлозных, лакокрасочных материалов, клеев, перхлорвиниловых материалов, типографских красок, депарафинизации масел и удаления смеси масел с низкоплавким парафином.

В работе [1] приведены результаты исследования по подбору активного модифицированного цеолитного катализатора для реакции парциального окисления бутанола-2 в метилэтилкетон, а также по изучению кинетики и механизма реакции. Анализ данных по этому процессу показал, что металлцеолитный катализатор CuZnPdNaY, синтезированный на основе

цеолита NaY методом ионного обмена и содержащий 3.0 мас.% Cu²⁺, 4.0 мас.% Zn²⁺ и 1.0 мас.% Pd²⁺, проявляет наиболее высокую активность в этой реакции.

Кинетические экспериментальные исследования на этом катализаторе проводились в интервале температур 280⁰-340⁰С, объемных скоростей 2000-4000 ч⁻¹ и при различных парциальных давлениях: P_{B-2} – (0.122-0.365) · 10⁵ Па, P_{O₂} – (0.122-0.243) · 10⁵ Па. При P_{B-2}=0.243·10⁵ Па, температуре 320⁰С, объемной скорости 2500 ч⁻¹ увеличение P_{O₂} от 0.122·10⁵ Па до 0.162·10⁵ Па повышает выход МЭК от 82.8 мас. % до 87.1 мас. % [1].

Проведенные эксперименты позволили предложить стехиометрические уравнения образования МЭК, бутиленов и диоксида углерода:



(1)

и, согласно выдвинутой гипотезе о ботать следующую кинетическую модель: механизме протекания реакции, разра-

$$r_{\text{МЭК}} = k_1 P_{\text{O}_2} \left\{ \frac{\sqrt{1 + 4 \left(\frac{k_1 P_{\text{O}_2}}{2k_2 P_{\text{B-2}}} + \frac{k_1 P_{\text{O}_2}}{2k_3} \right)} - 1}{2 \left(\frac{k_1 P_{\text{O}_2}}{2k_2 P_{\text{B-2}}} + \frac{k_1 P_{\text{O}_2}}{2k_3} \right)} \right\}^2$$

$$r_{\text{CO}_2} = \frac{k_4 K_1 K_2 P_{\text{O}_2} P_{\text{B-2}}}{(1 + K_1 P_{\text{O}_2} + K_2 P_{\text{B-2}})^2}$$

(2)

$$r_{\text{C}_4\text{H}_8} = k_5 \frac{P_{\text{B-2}} - \frac{1}{K_R} P_{\text{C}_4\text{H}_8} P_{\text{H}_2\text{O}}}{K_3 P_{\text{B-2}} + K_4 P_{\text{H}_2\text{O}}},$$

$$K_R = -A + B/T, \quad A = 2.65, \quad B = 2024.9$$

(выведены эмпирически); $k_j = k_j^0 \cdot e^{-\frac{E_j}{RT}}$

$K_i = K_i^0 \cdot e^{\frac{Q_i}{RT}}$. Здесь: $K_1 - K_4$ константы адсорбционного равновесия молекул кислорода, спирта, бутиленов и воды, 1/Па; K_R – константа равновесия реакции дегидратации; $k_1 - k_5$ – константы скоростей реакций элементарных стадий:

k_1, k_2 , моль/(г_{кат} с Па); k_3, k_4, k_5 ,

моль/(г_{кат} с); P_{O_2} , $P_{\text{B-2}}$ – парциальные давления кислорода и бутанола-2, Па;

$r_{\text{МЭК}}$, r_{CO_2} , $r_{\text{C}_4\text{H}_8}$ – скорости образования метилэтилкетона, двуокиси углерода и бутиленов, моль/(г_{кат} с); Q_i – теплота адсорбции i-го компонента, кДж/моль; E_j – энергии активации j-ой реакции, кДж/моль. Численные значения параметров кинетической модели представлены в табл. 1.

Табл. 1. Кинетические параметры модели.

$\ln k_j^0, \ln K_i^0$		E_j, Q_i , кДж/моль	
$\ln k_1^0$	7.19	E_1	21.5785
$\ln k_2^0$	4.03	E_2	27.1093
$\ln k_3^0$	7.67	E_3	22.1232
$\ln k_4^0$	2.09	E_4	8.9247
$\ln k_5^0$	9.98	E_5	6.8716
$\ln K_1^0$	3.21	Q_1	8.2962
$\ln K_2^0$	4.08	Q_2	16.76
$\ln K_3^0$	4.67	Q_3	6.285
$\ln K_4^0$	4.54	Q_4	17.5561

Картина протекания химических превращений на микроуровне, т.е. по законам классической химической кинетики, резко отличается от таковой в производственных условиях. В реальных аппаратах на химическую реакцию влияют сопутствующие физические процессы, обусловленные тепло- и массообменом и гидродинамической обстановкой в них.

Таким образом, химическая кинетика реакции не определяет реальный процесс в целом. Реальный процесс представляет собой сочетание различных «элементарных» процессов, подчиненных определенным математическим закономерностям. Изучение таких процессов, их описание на языке математики, т.е. в форме тех или иных уравнений, позволяет при последующем объединении этих уравнений в систему относительно общих параметров «элементарных» процессов получить математическое описание исследуемого объекта.

При математическом моделировании в первую очередь необходимо выяснить форму математической модели, которая определяется типом выбранного реактора. Поэтому при составлении математической модели особое значение приобретает описание движения потоков веществ. Как известно, к основным типовым моделям, характеризующих гидродинамический поток, относятся модель идеального вытеснения и идеального перемешивания, проводимых, соответственно в реакторах вытеснения и смешения. Сравнение химических реакторов можно производить различными методами. В частности, с этой целью удобно выбрать какой-либо параметр, который определяет работу и экономичность реактора, и оценить значение этого параметра для рассматриваемых типов реакторов [2].

С помощью теоретически обоснованной кинетической модели данного процесса (2) нами был произведен выбор оптимального типа реактора. Компьютерное моделирование процесса окисли-

тельного превращения бутанола-2 в метилэтилкетон исследовалось в одиночном реакторе идеального смешения и в реакторе идеального вытеснения при идентичных условиях. Проведенные расчеты показали, что коэффициент использования реакционного объема для всех степеней превращения в реакторе идеального смешения больше, чем в реакторе идеального вытеснения и установлено, что с увеличением степени превращения от 50 до 70 % соотношение объемов исследованных реакторов $V_{ис}/V_{ив}$ возрастает от 1.25 до 1.85. Аналогичные результаты получаются также для других условий реакции.

Таким образом, на основе вышеприведенных результатов можно заключить, что для процесса окислительного превращения бутанола-2 в метилэтилкетон оптимальным является реактор идеального вытеснения. К такому гидродинамическому режиму можно приблизиться в реакторах с неподвижным слоем катализатора. Как известно, в этом аппарате не предусматривается перемешивание между различными элементами среды в направлении движения потока, т.е. это такой реактор непрерывного действия, для которого допускается, что среда движется в нем подобно поршню.

Теперь выделим основные элементарные процессы, существенным образом влияющие на ход процесса. Для рассматриваемого процесса отсутствуют градиенты температур и скоростей в направлении, перпендикулярном движению потока. Изменение температуры, состава реагирующей среды и давления происходит вдоль реактора. Потеря напора обуславливается наличием сопротивлений, которые должна преодолеть газовая смесь при прохождении через неподвижный слой катализатора.

Поэтому при математическом описании данного процесса было учтено влияние указанных факторов на ход процесса, т.е. уравнение кинетики было

дополнено уравнениями теплового баланса и гидродинамики.

В основе уравнения теплового баланса любого процесса или аппарата лежит закон сохранения энергии [3], согласно которому количество теплоты,

поступающей в данный процесс, если в последнем нет превращения ее в другой вид энергии, равно количеству теплоты, выделяющейся при процессе. В уравнении теплового баланса была учтена потеря тепла в окружающую среду:

$$\frac{dT}{dG_{\text{кат}}} = - \frac{\sum_{j=1}^3 r_j \Delta H_{Rj}}{\sum_{i=1}^7 n_i C_{pi}} - \frac{\alpha(T - T_x)}{\sum_{i=1}^7 n_i C_{pi}} \quad (3)$$

где r_j – скорости образования метилэтилкетона, двуокиси углерода и бутиленов, моль/($\Gamma_{\text{кат}} \text{ с}$); ΔH_{Rj} – значение теплового эффекта j -ой реакции, кДж/моль; C_{pi} ($i = \overline{1,7}$) – значения теплоемкостей компонентов процесса: этилового спирта, кислорода, этилацетата, уксусной кислоты, ацетальдегида, диоксида углерода, воды, азота соответственно индексу, Дж/(моль·К); α – коэффициент теплопередачи, Дж/(К· $\Gamma_{\text{кат}} \cdot \text{с}$); T_x – температура

окружающей среды, К; T – температура газовой смеси, К; $G_{\text{кат}}$ – количество катализатора, г; n_i – мольная скорость i -го компонента, моль/ч.

Для решения уравнения теплового баланса необходимо определить температурные зависимости теплового эффекта каждой реакции, а также теплоемкостей веществ, принимающих участие в процессе.

Температурные зависимости теплоемкостей на основании экспериментальных данных имеют следующие эмпирические формулы [4]:

$$C_p = a + bT + cT^2 + dT^3 \quad (4)$$

В таблице 2 представлены значения эмпирических коэффициентов всех веществ [4], участвующих в данном процессе.

Таблица 2. Значения эмпирических коэффициентов

№	Вещество, i	ΔH_{0i} ккал/моль	Коэффициенты температурных зависимостей теплоемкостей, кал/(моль К)			
			a	b	c	d
1	Кислород	0	6.713	$-0.879 \cdot 10^{-6}$	$4.170 \cdot 10^{-6}$	$-2.544 \cdot 10^{-9}$
2	Вода	-57.80	7.701	$4.495 \cdot 10^{-4}$	$2.521 \cdot 10^{-6}$	$-0.859 \cdot 10^{-9}$
3	Диоксид углерода	-94.05	4.728	$1.754 \cdot 10^{-2}$	$-1.338 \cdot 10^{-5}$	$4.097 \cdot 10^{-9}$
4	Азот	0	7.440	$-0.324 \cdot 10^{-2}$	$4.4 \cdot 10^{-6}$	$-2.79 \cdot 10^{-9}$
5	Бутанол-2	-69.94	1.374	$1.014 \cdot 10^{-1}$	$-5.561 \cdot 10^{-5}$	$1.140 \cdot 10^{-8}$
6	Метилэтилкетон	-56.97	2.614	$8.501 \cdot 10^{-2}$	$-4.538 \cdot 10^{-5}$	$9.362 \cdot 10^{-9}$
7	Бутилены	-1.67	0.105	$7.054 \cdot 10^{-2}$	$-2.431 \cdot 10^{-5}$	$-0.147 \cdot 10^{-9}$

Подставляя значения эмпирических в формулу (4), получим следующие коэффициенты, приведенных в таблице 2, зависимости теплоемкостей от температуры:

$$\begin{aligned}C_{p1} &= 6.713 - 0.879 \cdot 10^{-6}T + 4.17 \cdot 10^{-6}T^2 - 2.544 \cdot 10^{-9}T^3 \\C_{p2} &= 7.701 + 4.495 \cdot 10^{-4}T + 2.521 \cdot 10^{-6}T^2 - 0.859 \cdot 10^{-9}T^3 \\C_{p3} &= 4.728 + 1.754 \cdot 10^{-2}T - 1.338 \cdot 10^{-5}T^2 + 4.097 \cdot 10^{-9}T^3 \\C_{p4} &= 7.440 - 0.324 \cdot 10^{-2}T + 4.4 \cdot 10^{-6}T^2 - 2.79 \cdot 10^{-9}T^3 \\C_{p5} &= 1.374 + 1.014 \cdot 10^{-1}T - 5.561 \cdot 10^{-5}T^2 + 1.140 \cdot 10^{-8}T^3 \\C_{p6} &= 2.614 + 8.501 \cdot 10^{-2}T - 4.538 \cdot 10^{-5}T^2 + 9.362 \cdot 10^{-9}T^3 \\C_{p7} &= 0.105 + 7.054 \cdot 10^{-2}T - 2.431 \cdot 10^{-5}T^2 - 0.147 \cdot 10^{-9}T^3\end{aligned}$$

Формула, выражающая зависимость температуры, имеет следующий вид [4]:
теплого эффекта реакции от

$$\Delta H_{Rj} = \int_0^T \Delta C_{pj} dT + \Delta H_{0j} = \Delta H_{0j} + \Delta a_j T + \frac{1}{2} \Delta b_j T^2 + \frac{1}{3} \Delta c_j T^3 + \frac{1}{4} \Delta d_j T^4, \quad (5)$$

где ΔH_{0j} – стандартная теплота образования j -ой реакции, равная:

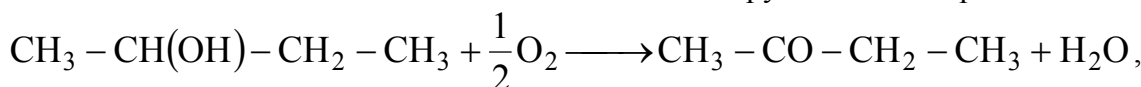
$$\Delta H_{0j} = \left(\sum_i v_i' \Delta H_{0i}^{\text{прод}} - \sum_i v_i \Delta H_{0i}^{\text{исх.В-В}} \right), \quad (6)$$

где v_i и v_i' – стехиометрические коэффициенты i -го компонента исходных веществ и продуктов реакции.

Определим зависимости теплового

эффекта от температуры для каждой стадийной схемы образования продуктов реакции (МЕК, диоксида углерода, бутиленов).

Из брутто-схемы образования МЕК:



значений коэффициентов уравнений теплоемкостей в таблице 2 и формул:

$$\Delta a_j = \left(\sum_i v_i' \Delta a_i^{\text{прод}} - \sum_i v_i \Delta a_i^{\text{исх.В-В}} \right)_j$$

$$\Delta b_j = \left(\sum_i v_i' \Delta b_i^{\text{прод}} - \sum_i v_i \Delta b_i^{\text{исх.В-В}} \right)_j$$

$$\Delta c_j = \left(\sum_i v_i' \Delta c_i^{\text{прод}} - \sum_i v_i \Delta c_i^{\text{исх.В-В}} \right)_j$$

$$\Delta d_j = \left(\sum_i v_i' \Delta d_i^{\text{прод}} - \sum_i v_i \Delta d_i^{\text{исх.В-В}} \right)_j,$$

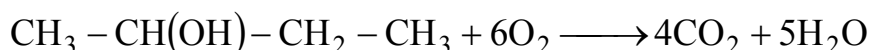
а также значения стандартной теплоты реакции

$$\Delta H_{01} = -44.83 \text{ ккал/моль}$$

получим зависимость теплового эффекта от температуры:

$$\Delta H_{R1} = -44830 + 5.5845T - 0.01594T^2 + 5.35249 \cdot 10^{-5}T^3 - 1.625 \cdot 10^{-9}T^4 \quad (7)$$

Для диоксида углерода, образующегося по схеме:

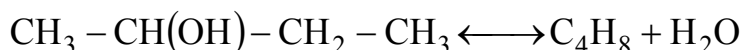


аналогично получим значения стандартной теплоты образования и температурную зависимость теплового эффекта:

$$\Delta H_{02} = -595.26 \text{ ккал/моль}$$

$$\Delta H_2 = -595260 + 16.0152T - 0.0289T^2 - 1.032 \cdot 10^{-5}T^3 + 1.595 \cdot 10^{-8}T^4 \quad (8)$$

Для бутиленов имеем:



$$\Delta H_{03} = 10.47 \text{ ккал/моль}$$

$$\Delta H_2 = -10470 + 6.432T - 0.0304105T^2 + 3.3821 \cdot 10^{-5}T^3 - 1.2406 \cdot 10^{-8}T^4 \quad (9)$$

Для определения распределения выходов продуктов и основных параметров процесса (температура, давление) по длине реактора необходимо сделать некоторые преобразования. Возьмем для примера скорость образования метилэтилкетона $r_{\text{МЭК}}$ и осуществим переход изменения выхода метилэтилкетона по длине реактора:

$$\frac{dA_1}{d\left(\frac{G_{\text{cat}}}{N_1^0}\right)} = r_{\text{МЭК}} \quad (10)$$

Известно, что

$$G_{\text{cat}} = \rho_{\text{cat}} \cdot V_{\text{cat}} = \rho_{\text{cat}} \cdot S \cdot l, \quad (11)$$

где ρ_{cat} – плотность катализатора; V_{cat} – объем катализатора; S – площадь сечения реактора; l – длина реактора.

Так как площадь поперечного сечения реактора имеет форму круга, ее можно вычислить по следующей формуле:

$$S = \frac{\pi D^2}{4} \quad (12)$$

где D – диаметр реактора.

Таким образом, подставив (12) в (11), массу катализатора можно выразить следующим образом:

$$G_{\text{cat}} = \rho_{\text{cat}} \cdot \frac{\pi D^2}{4} \cdot l \quad (13)$$

Теперь найдем изменение выхода этилацетата по длине реактора, Подставив (13) в (10), получим:

$$\frac{dA_1}{d\left(\frac{G_{\text{cat}}}{N_1^0}\right)} = \frac{N_1^0}{\rho_{\text{cat}} \cdot \frac{\pi D^2}{4}} \frac{dA_1}{dl} = r_{\text{МЭК}} \quad (14)$$

Таким же образом осуществляется определение изменения выходов других продуктов реакций и основных параметров процесса по длине реактора.

Прохождение потока ингредиентов в проточных реакторах сопровождается потерями давления. Хотя потеря давления незначительна, но для получения более правильного и точного распределения выходов продуктов реакции по длине реактора возникает необходимость его учета. Потеря напора, или давления, обуславливается как сопротивлением трения, так и местными сопротивлениями.

Уравнение, предложенное Эргуном [5], очень хорошо описывает экспериментальные данные различных авторов по сопротивлению в слое, и было использовано при построении математической модели для расчета потери давления по длине ректора. Уравнение удобно также и потому, что оно применимо для ламинарного, переходного и турбулентного режимов и, следовательно, для расчета не требуется предварительного определения характеристики режима. Оно имеет следующий вид:

$$\frac{dP}{dl} = -\left(\frac{150}{\text{Re}} + 1.75\right) \cdot \frac{\rho_{\text{газ}} u_0^2 (1-\varepsilon)}{d_p g \varepsilon^3} \cdot 0.987 \cdot 10^{-5}, \quad (15)$$

где Re – критерий Рейнольдса, $\frac{d_p \rho_{\text{газ}} u_0}{\mu(1-\varepsilon)}$; D – диаметр реактора; $\rho_{\text{газ}}$ – плотность газа, кг/м^3 ; g – ускорение свободного падения, м/с^2 ; u_0 – линейная скорость, м/с ; d_p – эквивалентный диаметр частиц, м ; ε – порозность, б/р ; μ –

вязкость газа, $\text{кг/(м} \cdot \text{с)}$; l – длина реактора, м .

Уравнения кинетической модели (2), теплового баланса (3) и потери напора (15) составляют полную математическую модель процесса окисления бутанола-2 в метилэтилкетон. В виде единой системы она будет представлена следующим образом:

$$\left. \begin{aligned}
 \frac{N_1^0}{\rho_{\text{cat}} \cdot \frac{\pi D^2}{4}} \frac{dA_1}{dl} &= \kappa_1 P_{O_2} \left\{ \frac{\sqrt{1 + 4 \left(\frac{\kappa_1 P_{O_2}}{2\kappa_2 P_{B-2}} + \frac{\kappa_1 P_{O_2}}{2\kappa_3} \right)} - 1}{2 \left(\frac{\kappa_1 P_{O_2}}{2\kappa_2 P_{B-2}} + \frac{\kappa_1 P_{O_2}}{2\kappa_3} \right)} \right\}^2 \\
 \frac{N_1^0}{\rho_{\text{cat}} \cdot \frac{\pi D^2}{4}} \frac{dA_2}{dl} &= \frac{\kappa_4 \kappa_1 \kappa_2 P_{O_2} P_{B-2}}{\left(1 + \kappa_1 P_{O_2} + \kappa_2 P_{B-2} \right)^2} \\
 \frac{N_1^0}{\rho_{\text{cat}} \cdot \frac{\pi D^2}{4}} \frac{dA_3}{dl} &= \kappa_5 \frac{P_{B-2} - \frac{1}{K_R} P_{C_4H_8} P_{H_2O}}{K_3 P_{B-2} + K_4 P_{H_2O}} \\
 \frac{4}{\rho_{\text{cat}} \pi D^2} \frac{dT}{dl} &= - \frac{\sum_{j=1}^3 r_j \Delta H_{Rj}}{\sum_{i=1}^7 n_i C_{pi}} - \frac{\alpha(T - T_x)}{\sum_{i=1}^7 n_i C_{pi}} \\
 \frac{dP}{dl} &= - \left(\frac{150}{Re} + 1.75 \right) \cdot \frac{\rho_{\text{газ}} u_0^2 (1 - \varepsilon)}{d_p g \varepsilon^3} \cdot 0.987 \cdot 10^{-5}
 \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

где A_1, A_2, A_3 – выходы метилэтикетона, диоксида углерода и бутенов соответственно, б/р; N_1^0 – число молей бутанола-2 в сырье, моль/с.

Разработанная математическая модель в дальнейшем будет использована для решения вопросов оптимального управления реакторным элементом окислительного дегидрирования бутанола-2 в метилэтилкетон.

ЛИТЕРАТУРА

1. Алиев А.М., Матиев К.И., Агаев Ф.А. и др. Кинетика селективного окислительного дегидрирования бутанола-2 в метилэтилкетон на модифицированном цеолитном катализаторе CuZnPdCaA. // Нефтепереработка и нефтехимия. Научно-технические достижения и передовой опыт. Москва, Изд. «ЦНИИТЭ-нефтехим», №10, 2015, с. 33.
2. Бондарь А.Г. Математическое моделирование в химической технологии. – Киев: Вища школа, 1973. 280 с.
3. Бесков С.Д. Техно-химические расчеты. М.: Госхимиздат, 1950, 560 с.
4. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей: Справочное пособие. / Пер. с англ. под ред. Б.И.Соколова. – 3-е изд., перераб. и доп. Л.: Химия, 1982. 592 с.
5. Вейлас С. Химическая кинетика и расчеты промышленных реакторов. М.: Химия, 1967, 416 с.

REFERENCES

1. Aliev A.M., Matiev K.I., Agaev F.A. i dr. Kinetics of selective oxidative dehydration of butanol-2 into methylethylketone on the modified ceolyte catalyst CuZnPdCaA. *Refining and Petrochemicals. Scientific and technical achievements, and innovate experience*. Moscow, CNITJ-neftehim Publ., 2015, no.10, p.33. (In Russian).
2. Bondar A.G. *Matematicheskoe modelirovanie v himicheskoj tehnologii*. [Mathematical modeling in the chemical technology]. Kiev, Vishaya shkola Publ., 1973, 280 p.
3. BeskovS.D. *Tehno-himicheskie raschety* [Techno-chemical calculations]. Goshimizdat Publ.,1950, 560 p. (In Russian).
4. Rid R., Prausnic Dzh., Shervud T. *Svoystva gazov i zhidkostej*. [Properties of gases and liquids]. (Translation from English). Leningrad, Himiya Publ., 1982, 592p. (In Russian).
5. Vejlis S. *Himicheskaja kinetika i raschety promyshlennyh reaktorov* [Chemical kinetics and estimates of industrial reactors]. Moscow, Himiya Publ.,1967, 416p. (In Russian).

MATHEMATICAL DESCRIPTION OF BUTANOL-2 IN METHYLETHYLKETONE OXIDATION PROCESS

A.R. Safarov

Acad. M.F. Nagiyev Institute of Catalysis and Inorganic Chemistry
H. Javid Ave., 113, AZ 1143 Baku, Azerbaijan; e-mail: kqki@kqki.science.az

The paper presents results of the development of the full mathematical model for the oxidative dehydrogenation process of butanol-2 to methylethylketone. On the basis of the kinetic model there has been selected an optimal type of reactor. It revealed the most important physical and chemical factors that are significantly affecting the course of the process. It found temperature dependences of thermal effect of each reaction, as well as heat capacities of substances involved in the process. The mathematical model takes into account the loss of pressure in the system during the motion of the gas mixture through the fixed catalyst bed.

Keywords: butanol-2, methylethylketone, modeling, mathematical description, heat balance, thermal effects, loss of pressure.

**İKİLİ BUTİL SPİRTİNİN METİLETİLKETONA OKSİDLƏŞMƏSİ
PROSESİNİN RİYAZİ MODELİNİN TƏSVİRİ**

A.R.Səfərov

AMEA-nın akad. M.Nağıyev adına Kataliz və Qeyri-üzvi Kimya İnstitutu
AZ 1143, Bakı, H.Cavid pr., 113; e-mail: kqki@kqki.science.az

Məqalədə butanol-2-in metiletilketona oksidləşdirici dehidrogenləşmə prosesi üçün tam riyazi modelinin yaradılmasının nəticələri göstərilib. Prosesin kinetik modeli əsasında reaktorun optimal tipi seçilib. Prosesdə iştirak edən maddələrin istilik tutumları və hər bir reaksiyanın istilik effektləri təyin edilib. Tərpənməz lay katalizatoru üzərindən qaz qarışığının keçməsi zamanı əmələ gələn təzyiq itkisi riyazi modeldə nəzərə alınıb.

Açar sözlər: butanol-2, metiletilketon, modelləşdirmə, riyazi təsvir, istilik balans, istilik effektləri, təzyiq itkisi.

Поступила в редакцию 13.01.2016.