

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ ИДЕНТИФИКАЦИЯ ПРОЦЕССА КАТАЛИТИЧЕСКОЙ РЕКТИФИКАЦИИ ФТОРОРГАНИЧЕСКИХ ЭФИРОВ И КИСЛОТ

Гартман Т.Н.

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
125047 Москва Миусская площадь 9,
e-mail: tngartman@gmail.com*

С использованием результатов экспериментальных исследований каталитической дистилляции^{1,2,3} четырехкомпонентной системы: $\text{CF}_3\text{COOCH}_3 - \text{CF}_3\text{COOH} - \text{BrCF}_2\text{COOCH}_3 - \text{BrCF}_2\text{COOH}$ при получении бромдифторуксусной кислоты в присутствии катализатора серной кислоты предложена и реализована процедура компьютерного моделирования процесса непрерывной каталитической ректификации с химической реакцией получения бромдифторуксусной кислоты. Разработан оригинальный алгоритм определения параметров бинарного взаимодействия моделей Wilson и NRTL, учитывающий протекание химических реакций при проведении экспериментальных исследований парожидкостного равновесия.

Адекватность компьютерных моделей проверена путем сравнения результатов экспериментальных исследований с данными моделирования изобарических равновесных данных по фазовому² и химическому равновесию¹. Моделирование непрерывного процесса каталитической ректификации осуществляется в стационарных условиях в колонных аппаратах насадочного и тарельчатого типа⁴.

Результаты работы могут быть использованы для усовершенствования методов получения фторорганических эфиров и кислот, а также при проектировании установок дистилляции и ректификации для их разделения.

Литература

1. Квашнин С.Я., Лупачев Е.В., Лотхов В.А., Курицын Н.Н., Кулов Н.Н. Теоретические основы химической технологии, 2017, том 51, №6, с. 669-677.
2. Лупачев Е.В., Захлевный А.В., Квашнин С.Я., Лотхов В.А., Кулов Н.Н. Теоретические основы химической технологии, 2018, том 52, №3, с. 239-250.
3. Лупачев Е.В., Полковниченко А.В., Квашнин С.Я., Лотхов В.А., Кулов Н.Н. Теоретические основы химической технологии, 2019, том 53, №1, с. 3-14.
4. Перерва О.В., Гартман Т.Н. Компьютерное моделирование статических и динамических режимов работы ректификационных установок: практическое руководство для технологов и проектировщиков. М.: ДеЛи плюс, 2016. 206 с.