

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РЕАКЦИИ СИНТЕЗА ВИНИЛАЦЕТАТА

Бурунов Фирдавсий Эшбуриевич

Каршинский инженерно-экономический
институт, доцент, т.ф.ф.д. (PhD)

Annotation: *In the article, the kinetic laws and kinetics and mechanism of the oxidation acetylation reaction of ethylene in the vapor phase. As a result of the study, the following optimal conditions for the reaction were selected: in the middle zone of the reactor at a temperature of 165 °C, volumetric speed - 2000 h⁻¹, at a pressure of 4 atm, the ratio of ethylene to acetic acid 4:1 and oxygen content 7%.*

Key words: *ethylene, oxygen, acetic acid, vinyl acetate, kinetic equation, mechanism.*

Процесс синтеза винилацетата проводился при температуре 145-200°C (температура повышается медленно в зависимости от активности катализатора), давлении 0,4 МПа и объемной скорости впрыска парогазовой смеси (БГА). при 2000 ч⁻¹. Молярное соотношение этилена к уксусной кислоте составляет 4:1, объемная концентрация кислорода в сухом газе (без уксусной кислоты) составляет 7,5%. Синтез ВА осуществляют при неполной конверсии исходных веществ. Непрореагировавшие этилен, кислород и уксусная кислота очищаются и возвращаются в узел подготовки парогазовой смеси.

Уровень конверсии средний за одну перекачку: по этилену – 8%, по уксусной кислоте – 18%, по кислороду – 47%. Синтез ВА осуществляется на пилотной установке по приготовлению комплексного катализатора. Процесс состоит из двух этапов.

Для приготовления катализатора гидротермически обрабатывали УКТ с удельной поверхностью 150 м²/г, насыпной плотностью 54 г/см³, размером пор 0,78 см³/г и диаметром частиц 4,5-5 мм. в течение 6 часов при 200 °C (цеолит с высоким содержанием кремнезема).

Катализаторы испытывались в трубчатом реакторе диаметром 20 мм и высотой 900 мм (для рассеивания тепла экзотермической реакции образования ВА и СО₂ подается нагретое масло) в демонстрационной установке синтеза ВА.

Каждый из образцов катализатора испытывался в течение 36-40 часов при загрузке в реактор 100 см³ катализатора, экспериментально найденные оптимальные параметры процесса для данного устройства составили: 165°C, 0,4 МПа, соотношение этилен:уксусная кислота 4:1, объемное. производительность 6000 ч⁻¹, количество кислорода в сухом газе 7,0 об.%. В этих условиях реакция образования ВА и СО₂ протекает с незначительным эффектом диффузии в кинетическом поле, который начинает проявляться лишь с увеличением

времени нахождения парогазовой смеси в реакторе - при объемной скорости впрыск парогазовой смеси 3000 ч-1.

Содержание ВА-сырья и газовой смеси определяли хроматографическим методом после реактора [1-3]. Критерий работоспособности катализатора - его активность $W_{ВА}/(л \cdot \text{кат} \cdot \text{ч})$ и селективность образования ВА по этилену, скорость реакции рассчитывали на 100 см^3 - всю массу катализатора в реакторе.

Математическая модель. Общая скорость реакции пропорциональна количеству немодифицированных и модифицированных активных центров палладия (не кластеров). Избыточное количество модификатора (как ацетата калия, так и меди) блокирует активные центры, снижая эффективность катализатора. Физический смысл полученных частичных математических моделей состоит в дробно-линейных функциях. Различия в уравнениях скоростей образования винилацетата и CO_2 указывают на то, что эти реакции протекают в разных активных центрах катализатора.

С целью создания общей математической модели, показывающей зависимость эффективности катализатора от его состава, приведем экспериментальные зависимости в таблице 1.

Бир қатор экспериментларни ўтказиш шартлари ва уларда олинган математик моделлар

Таблице 1.

№	Количество компонентов в катализаторе (%)			W (винилацетат), моль/ч	W (CO_2), моль/ч
	Pd	CH_3COOK	Cu		
I	0,3-3,0	0	0	$(0,35 \cdot [\text{Pd}])/(1+0,05[\text{Pd}]^4)$	$(0,08 \cdot [\text{Pd}])/(1+0,065[\text{Pd}]^4)$
II	0,2	2,0-20,0	0	$(0,1 \cdot (1 + [\text{CH}_3\text{COOK}]))/((1,0 + 0,013 \cdot [\text{CH}_3\text{COOK}]^2))$	$0,04 + 0,0043 \cdot [\text{CH}_3\text{COOK}]$
III	0,15	5	0,05-3,0	$\frac{0,24 + 0,47 \cdot [\text{Au}]}{1 + 1,75 \cdot [\text{Au}]}$	$0,075 + 0,018 \cdot [\text{Au}]$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Мирзаев, Э. С., & Самадов, А. Х. (2022). Обоснование применения облегченной буровой смеси, используемой при бурении пластей низкого давления. Экономика и социум, (2-2 (93)), 764-768.
2. Djuraeva, G., & Kamolov, B. (2023, June). Technology for obtaining Glauber's salt and sodium sulfate on the basis of mirabilite. In AIP Conference Proceedings (Vol. 2789, No. 1). AIP Publishing.
3. Камолов, Б. С., Ахмедович, Қ. А., & Исоков, Ю. В. (2023). Ультразвуковая обработка пород. o'zbekistonda fanlararo innovatsiyalar va ilmiy tadqiqotlar jurnali, 2(19), 508-511.

4. Sirozhovich, K. B., Akhmedovich, K. A., Djuraevna, T. O., & Valijonovich, I. Y. (2023). Features of filtration of industrial gases from dust with a basalt filter. *o'zbekistonda fanlararo innovatsiyalar va ilmiy tadqiqotlar jurnali*, 2(19), 497-507.
5. Kamolov, B. S., Kurbanov, A. A., & Sattorov, L. K. (2023). Features of filtration of industrial gases from dust with a basalt filter. In *E3S Web of Conferences* (Vol. 411, p. 01036). EDP Sciences.
6. Курбанов, А. Т., & Камолов, Б. С. (2022). Поисковые работы и геолого-геофизическая изученность площади яйлов (Южный омад). *Экономика и социум*, (12-1 (103)), 1388-1392.
7. Eshkobilov, K. K., Berdiev, S. A., & Kamolov, B. S. (2021). Micro structural and X-ray analysis of nitro-oxidated antened steels. *ACADEMICIA: An International Multidisciplinary Research Journal*, 11(3), 1711-1720.
8. Курбанов, А. Т., Самадов, А. Х., & Эшкабилов, О. Х. (2016). Бипланетарный механизм для приготовления бурильных растворов и смесей. in *автоматизация технологических процессов механической обработки, упрочнения и сборки в машиностроении* (pp. 182-185).
9. Курбанов, А. Т. (2023). Босим таъсирида бурғилаш аралашмаси филъратларини қатламга филътрацияланиш ҳолатлари. *JOURNAL OF INNOVATIONS IN SCIENTIFIC AND EDUCATIONAL RESEARCH*, 6(1), 413-417.
10. Курбанов, А. Т. (2023). Нефт ва газ кудуқларини бурғилашда ювувчи суюқликнинг роли. *JOURNAL OF INNOVATIONS IN SCIENTIFIC AND EDUCATIONAL RESEARCH*, 6(2), 353-356.
11. Бурунов, Ф. Э., & Курбанов, А. Т. (2017). Математическая модель процесса перемешивания буровых растворов и смесей. In *Новые технологии-нефтегазовому региону* (pp. 246-248).
12. Курбанов, А. Т., & Эшкабилов, О. Х. (2016). Компоновка низа бурильной колонны. in *автоматизация технологических процессов механической обработки, упрочнения и сборки в машиностроении* (pp. 341-344).
13. Бурунов, Ф. Э., & Курбанов, А. Т. Математическое модель процесса перемешивания бурильных растворов и смесей. in *Конференция-симпозиум* (p. 98).
14. Бердиев, Ш. А., Курбанов, А. Т., & Эшкабилов, О. Х. (2016). МОНТАЖ ЦЕНТРОБЕЖНЫХ НАСОСОВ. *ББК 34.4+ 34.5 А92*, 40.
15. Курбанов, А. Т. (2021). НЕФТ КОМПОНЕНТЛАРИ АСОСИДА ФТАЛЛ КИСЛОТА ЭФИРЛАРИНИ СИНТЕЗИ. *Интернаука*, (19-6), 40-42.
16. Бердиев, Ш. А., Султанов, Н. Н., Курбанов, А. Т., & Бурунов, Ф. Э. (2016). Применение автоматического регулятора в скважинах. In *Автоматизация технологических процессов механической обработки, упрочнения и сборки в машиностроении* (pp. 44-46).

17. Абдирахимов, И. Э., Оглы, Т. Ш. К., & Курбанов, А. Т. (2020). Тепловые насосы для подогрева сетевой воды. *Science Time*, (3 (75)), 55-58.
18. Эшкабилов, Х. К., Эшкабилов, О. Х., & Курбанов, А. Т. (2016). Технология изготовления рабочих органов буровых инструментов из мелкодисперсных порошков карбида вольфрама и кобальта. in *Автоматизация технологических процессов механической обработки, упрочнения и сборки в машиностроении* (pp. 329-335).
19. Курбанов, А. Т. (2023). Нефт ва газ кудуқларини бурғилашда ювувчи суюқликнинг роли. *JOURNAL OF INNOVATIONS IN SCIENTIFIC AND EDUCATIONAL RESEARCH*, 6(2), 353-356.
20. Курбанов, А. Т. (2023). Босим таъсирида бурғилаш аралашмаси филтратларини қатламга филтрацияланиш ҳолатлари. *Journal of innovations in scientific and educational research*, 6(1), 413-417.
21. Бурунов, Ф. Э., & Абдирахимов, И. Э. (2018). Природные битумы и тяжелые нефти, проблемы их освоения. In *Фундаментальные и прикладные исследования: от теории к практике* (pp. 212-215).
22. Buronov, F., & Fayzullayev, N. (2022, June). Synthesis and application of high silicon zeolites from natural sources. In *AIP Conference Proceedings* (Vol. 2432, No. 1). AIP Publishing.
23. Бердиев, Ш. А., Султанов, Н. Н., Курбанов, А. Т., & Бурунов, Ф. Э. (2016). Применение автоматического регулятора в скважинах. In *автоматизация технологических процессов механической обработки, упрочнения и сборки в машиностроении* (pp. 44-46).
24. Файзуллаев, Н. И., Бурунов, Ф. Э., Мусулмонов, Н. Х., Кодиров, О. Ш., & Тошбоев, Ф. Н. (2021). Влияние количества активных компонентов катализатора на выход продукта при синтезе винилацетата из этилена и уксусной кислоты. *Bulletin of Science and Practice*, 7(4), 301-311.
25. Рахматов, Х. Б., Султонов, Н. Н., & Бурунов, Ф. Э. (2018). Исследование процесса конверсии сульфата калия из хлорида калия Тюбегатанского месторождения и мирабилита Тумрукского месторождения. *Техника. Технологии. Инженерия*, (1), 35-39.
26. Дустов, А. Ю., Султонов, Н. Н., & Бурунов, Ф. Э. (2020). Расширение шуртанского гхк с производством дополнительного полиэтилена. *Международный академический вестник*, (3), 96-99.
27. Бурунов, Ф. Э., Тухташев, У. Ф., & Нурматов, А. С. (2015). Разработка кинематики компактного смесителя с бипланетарным механизмом для приготовления бурильных растворов и смесей. *Наука, техника и образование*, (9 (15)), 21-23.
28. Buronov, F., & Fayzullayev, N. (2021). Optimization of vinyl acetate production process. *ГРААЛЬ НАУКИ*, (4), 187-191.

29. Firdavsiy, B. (2021). Influence of the Nature of the Retainer (Carrier) on the Catalytic Activity of the Catalyst in the Gas-Phase Synthesis of Vinyl Acetate from Ethylene. *Turkish Journal of Computer and Mathematics Education (TURCOMAT)*, 12(10), 2262-2270.
30. Файзуллаев, Н., & Бурунов, Ф. (2021). Исследование каталитической активности катализатора в синтезе винилацетата из этилена при различных носителях. *Збірник наукових праць ЛОГОС*.
31. Normurot, F., & Firdavsiy, B. (2021). The Effect of Catalytic Activity of Catalyst (Carrier) Nature in the Synthesis of Vinyl Acetate. *International Journal of Human Computing Studies*, 3(10), 16-19.
32. Normurot, F., Firdavsii, B., Noriigit, M., Orif, Q., & Feruz, T. (2021). Effect of the Number of Active Components of the Catalyst on the Yield of the Product During the Synthesis of Vinyl Acetate From Ethylene and Acetic Acid. *Бюллетень науки и практики*, 7(4), 301-311.
33. Buronov, F. E. (2018). Abdiraximov IE Prirodnyye bitумы i tyajelyye nefti, problemy ixosvoyeniya. Fundamentalnyye i prikladnyye issledovaniya: ot teorii k praktike: materialy II mezhdunarodnoy nauchno-prakticheskoy konferensii, priurochennoy/T. 3.
34. Firdavsiy, B., & Farhod, S. (2021). MATHEMATICAL MODEL OF THE EFFICIENCY OF THE CATALYST IN THE SYNTHESIS OF VINYL ACETATE. *Universum: технические науки*, (5-6 (86)), 82-85.
35. Бурунов Ф.Э., & Шукруллаев Д.Д. (2023). Сущность и преимущества мембранного разделения гелийсодержащих природных газов. *Экономика и социум*, (4-1 (107)), 485-489.
36. Buronov, F. E., & Fayzullaev, N. I. (2023). Mathematical modeling of ethylene oxidative acetylation process. In *E3S Web of Conferences* (Vol. 411, p. 01037). EDP Sciences.
37. Ortikov, N., Fayzullaev, N., Hamidov, D., & Buronov, F. (2023). Study of methane carbonate conversion process in fixed catalyst layer in different membrane reactors. In *E3S Web of Conferences* (Vol. 402, p. 14013). EDP Sciences.
38. F.E.Buronov (2023). KINETICS AND MECHANISM OF THE VAPOR-PHASE SYNTHESIS OF VINYL ACETATE FROM ETHYLENE. *Sanoatda raqamli texnologiyalar / Цифровые технологии в промышленности*, 1 (1), 131-138. doi: 10.5281/zenodo.8379113
39. Бурунов, Ф. (2021). Виналацетат синтезида катализатор самарадорлигининг математик модели. *Збірник наукових праць SCIENTIA*.
40. Firdavsiy, B., & Normurot, F. (2021). OPTIMIZATION OF VINYL ACETATE PRODUCTION PROCESS. *GRAIL OF SCIENCE*.
41. Firdavsiy, B., & Normurod, F. (2021). ACTIVE CATALYSTS FOR PRODUCING VINYL ACETATE MONOMERS. *Universum: технические науки*, (5-6 (86)), 79-81.

42. Дустов, А. Ю., Султонов, Н. Н., Бурунов, Ф. Э., & Шукуров, А. Ш. (2020). Расчёт технологических и технико-экономических показателей разработки газовых месторождений. *Международный академический вестник*, (4), 64-66.
43. Самадов, А. Х., & Мирзаев, Э. С. (2021). ПРИМЕНЕНИЕ ИНГИБИРОВАННЫЙ БУРОВЫХ СМЕСЕЙ ДЛЯ ПОДДЕРЖАНИЯ ПРОЧНОСТИ СКВАЖИНЫ. *Экономика и социум*, (4-2 (83)), 1328-1331.
44. Мирзаев, Э. С., & Самадов, А. Х. (2023). ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ БУРЕНИЯ РАПАЛЬНЫХ ОТЛОЖЕНИЙ В СЛОЖНЫХ УСЛОВИЯХ. *Universum: технические науки*, (2-3 (107)), 64-66.
45. Салохиддинов, Ф. А., & Самадов, А. Х. (2018). Процессы деформации коллектора, влияющие на продуктивность скважин с авпд. In *Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент* (pp. 309-311).
46. Самадов, А. Х., & Салохиддинов, Ф. А. (2021). Состояние изученности проблемы и геолого-физическое условия объектов исследования. *Школа Науки*, (1), 27-29.