

УДК 66.091.2

ОПТИМИЗАЦИЯ ОПЫТНО-ПРОМЫШЛЕННОЙ ТЕХНОЛОГИИ ПРОИЗВОДСТВА СУБСТАНЦИЙ КРЕМНИЙСОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ ПОЛИОЛОВ

А.А. Бойко^{1*}, С.В. Морданов², Т.Г. Хонина¹, О.Н. Чупахин¹

Резюме. На примере создания опытно-промышленной технологии производства субстанции лекарственного средства «Силативит» оптимизирован процесс проведения синтеза кремнийсодержащих производных глицерина состава $\text{Si}(\text{O}_3\text{C}_3\text{H}_7)_4 \cdot 6\text{C}_3\text{H}_8\text{O}_3$. Главным критерием оптимизации являлось сокращение временных и энергетических затрат на проведение синтеза, представляющего собой гетерофазную реакцию алкохолиза исходного алкоксисилана полиолом. Оптимизация была проведена по таким показателям процесса, как температурный режим, режим удаления легколетучего продукта реакции, режим смешения реакционной массы и тип используемого перемешивающего устройства.

Ключевые слова: переэтерификация силанов, кремнийсодержащие производные полиолов, катализ, вычислительная гидродинамика.

OPTIMIZATION OF EXPERIMENTAL INDUSTRIAL TECHNOLOGY OF SILICON-CONTAINING DERIVATIVES OF POLYOL SUBSTANCES PRODUCTION

A.A. Boyko¹, S.V. Mordanov², T.G. Khonina¹, O.N. Chupahin¹

Abstract. The process of the synthesis of silicon-containing glycerol derivatives of $\text{Si}(\text{C}_3\text{H}_7\text{O}_3)_4 \cdot 6\text{C}_3\text{H}_8\text{O}_3$ composition was optimized on the example of creation of the experimental industrial technology of the drug substance «Silativit» production. The main criterion of optimization was reducing a time and energy expenditure on carrying out the synthesis, representing heterophase reaction of alcoholysis of initial alkoxy silane by polyol. Optimization was performed on such indicators of process as temperature condition, the mode of removal of an easily volatile product of reaction, the mode of mixture of reactionary weight and type of the used mixing device.

Keywords: transesterification of silanes, silicon derivatives of polyols, catalysis, computational hydrodynamics.

1 – ФГБУН Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения Российской академии наук, 620137, Россия, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, д. 22 / ул. Академическая, д. 20

2 – Химико-технологический институт Уральского федерального университета, кафедра «Машины и аппараты химических производств», 620078, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 28

1 – I.Ya. Postovsky Institute of Organic Synthesis of Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, b. 22, Sophia Kovalevskaya str. / b. 20, Academicheskaya str., Ekaterinburg, 620137, Russia

2 – Chemical Engineering Institute of the Ural Federal University, Department of «Machinery and equipment of chemical plants», b. 28, Mira str., Ekaterinburg, 620078, Russia

* адресат для переписки:

E-mail: aaboiko@list.ru

Тел.: 8 (343) 362 34 85

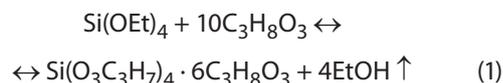
ВВЕДЕНИЕ

За последние десять лет в Институте органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН была разработана серия биологически активных элементсодержащих производных полиолов и мягких лекарственных форм на их основе. Наиболее широко изучены и апробированы кремнийсодержащие производные полиолов. Прежде всего это относится к глицеролатам кремния в избытке глицерина состава $\text{Si}(\text{O}_3\text{C}_3\text{H}_7)_4 \cdot 6\text{C}_3\text{H}_8\text{O}_3$, являющимся ключевым полупродуктом в производстве лекарственного средства «Силативит». Глицеролаты указанного состава обладают репаративным, регенерирующим, транскутанным и противовоспалительным действием и могут использоваться в качестве биологически активной гидрофильной основы для целого ряда мягких лекарственных форм: от классических лекарст-

венных гелей и линиментов до суппозиторий и трансдермальных терапевтических систем [1].

Ключевым условием успешного внедрения мягких лекарственных форм в медицинскую практику наряду с высокой терапевтической эффективностью является их конкурентоспособная цена, которая напрямую зависит от стоимости используемых при её производстве субстанций.

В основе синтеза глицеролатов кремния состава $\text{Si}(\text{O}_3\text{C}_3\text{H}_7)_4 \cdot 6\text{C}_3\text{H}_8\text{O}_3$ лежит обратимая реакция переэтерификации двух несмешивающихся между собой жидкостей – исходного тетраэтоксисилана многоатомным спиртом глицерином [2]. Данная реакция протекает в избытке глицерина по следующему уравнению:



Указанный процесс на этапе лабораторного синтеза был оптимизирован по таким параметрам, как выбор оптимального температурного режима проведения реакции (110 °С); определение оптимального избытка глицерина для проведения переэтерификации (4-мольный избыток глицерина в процессе переэтерификации с последующим добавлением 2 молей глицерина к продукту); выбор оптимального катализатора [Ti(OBu)₄] [3].

На этапе масштабирования процесса в условиях опытно-промышленного производства ввиду изменения геометрии и объёма используемого оборудования возникла необходимость решения следующих задач:

- выбор типа перемешивающего устройства;
- выбор режима (скорости) смешения реакционной массы;
- определение режима удаления образующегося этилового спирта.

Таким образом, целью данной работы явилась оптимизация опытно-промышленной технологии синтеза глицеролатов кремния состава Si(O₃C₃H₇)₄ · 6C₃H₈O₃ по критерию сокращения временных и энергетических затрат.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Опытно-промышленный синтез глицеролатов кремния состава Si(O₃C₃H₇)₄ · 6C₃H₈O₃ осуществляли на производственном участке технологической лаборатории Института органического синтеза им. И.Я. Пастовского УрО РАН.

Используемое сырьё

- Тетраэтоксисилан (ч.д.а., ТУ 6-09-11-2153-94);
- глицерин (ос.ч., ГОСТ 6259-75);
- предварительно очищенный перегонкой в вакууме тетрабутоксититан (тех., ТУ 6-09-2738-89).

Используемое оборудование

Синтез проводили на универсальном синтетическом комплексе Minipilot 10 (BuchiGlassUster, Швейцария), имеющем следующие характеристики:

- материал в контакте со средой: боросиликатное стекло 3.3, PFA, PTFE, PEEK;
- рабочий объём реактора: 10 литров. Реактор оборудован рубашкой, термопарой Pt100, донным сливом, верхнеприводным перемешивающим устройством с возможностью регулирования скорости вращения вала перемешивающего устройства, сменным комплектом перемешивающих элементов;
- обвязка реактора: мерная градуированная ёмкость объёмом 1 л, загрузочные люки и штуцеры на

крышке реактора, система охлаждения паров легколетучих веществ и сбора конденсата.

Удаление остаточного количества этилового спирта из реакционной массы проводили на тонкоплёночном испарителе TFE50-04J (Asahi, Япония). Для обогрева и охлаждения реактора и тонкоплёночного испарителя использовались циркуляционные термостаты FPW55-SL-150C (Julabo, Германия).

Описание процесса синтеза

Проводили шесть различных опытно-промышленных синтезов в трёх повторениях каждый. Общим для всех синтезов являлось одинаковое мольное (1 моль Si(OEt)₄ / 8 моль C₃H₈O₃) и массовое (1,96 кг Si(OEt)₄ / 6,73 кг C₃H₈O₃) соотношение исходных компонентов, температура реакционной массы 110±2 °С и использование в качестве катализатора реакции переэтерификации тетрабутоксититана Ti(OBu)₄ в мольном соотношении 0,06 моль Ti(OBu)₄ / 1 моль исходного алкоксисилана. Различия касались типа перемешивающего устройства (пропеллер или якорь) и скорости вращения вала перемешивающего устройства (240, 300, 400 об/мин).

Нижняя выбранная граница скорости вращения вала 240 об/мин обусловлена тем, что при этой скорости применительно к использованному оборудованию достигалось полное и равномерное диспергирование исходных реагентов, тетраэтоксисилана и глицерина, которые являются жидкостями. Верхняя выбранная граница скорости вращения вала 400 об/мин была определена экспериментально и обусловлена тем, что при большей скорости вращения вала происходило чрезмерное разбрызгивание реакционной массы и создавалась дополнительная нагрузка на вал перемешивающего устройства.

Синтез глицеролатов кремния состава Si(O₃C₃H₇)₄ · 6C₃H₈O₃ проводили по следующей схеме:

- внесение в реактор глицерина, установление скорости вращения вала перемешивающего устройства 50±5 об/мин;
- внесение в реактор смеси тетраэтоксисилана с катализатором со скоростью 20–25 мл/мин (общее время внесения смеси 1,5–2,0 ч);
- постепенный нагрев реакционной массы до температуры 110±2 °С и увеличение скорости вала перемешивающего устройства до заданных параметров;
- выдержка реакционной массы при температуре 110±2 °С и активном перемешивании, удаление образующегося этилового спирта путем отгонки при атмосферном давлении;
- после удаления большей части теоретического объёма этилового спирта при атмосферном давлении охлаждение реакционной массы до 60 °С и удаление остатка этилового спирта на тонкоплёночном испарителе.

Учёт отогнанного этилового спирта вели количественно. Общее время проведения процесса определяли по времени завершения удаления этилового спирта.

Контроль качества глицеролатов кремния состава $\text{Si}(\text{O}_3\text{C}_3\text{H}_7)_4 \cdot 6\text{C}_3\text{H}_8\text{O}_3$ проводили по таким показателям качества, как элементный состав, совпадение полос поглощения ИК-спектра образца с полосами поглощения на ИК-спектре стандартного образца, показателю преломления.

Моделирование процесса смешения реакционной массы

Выбор наиболее эффективного типа перемешивающего устройства и режима смешения реакционной массы проводили с применением методов и средств вычислительной гидродинамики, основным применением которых является описание механики сплошных сред. Моделирование с использованием методов и средств вычислительной гидродинамики широко распространено в зарубежной практике проектирования и модернизации технологического оборудования, так как позволяет при относительно малых материальных и временных затратах определить оптимальные параметры конструкции и гидродинамические режимы работы химических реакторов. В частности, опыт расчета оптимальных геометрических параметров и технологических режимов работы химических реакторов и массообменного оборудования методами такого моделирования представлен в работах [4–8].

Для моделирования процесса перемешивания реакционной массы использовали применяемое в вычислительной гидродинамике программное обеспечение ANSYS Fluent (ver. 14.5), ANSYS Inc., США, в основе которого лежит описание модели смеси [9, 10].

Данная модель представляет собой уравнения Навье – Стокса с усредненными по объемным долям компонентов смеси плотностью, вязкостью и скоростью. Усреднение свойств многокомпонентного потока проводится следующим образом:

$$\rho_m = \sum_{\varphi=1}^n \alpha_{\varphi} \rho_{\varphi}, \tag{2}$$

$$\mu_m = \sum_{\varphi=1}^n \alpha_{\varphi} \mu_{\varphi}, \tag{3}$$

$$\vec{u}_m = \frac{\sum_{\varphi=1}^n \alpha_{\varphi} \rho_{\varphi} \vec{u}_{\varphi}}{\rho_m}, \tag{4}$$

где ρ – плотность, $\text{кг}/\text{м}^3$; μ – вязкость, $\text{Па} \cdot \text{с}$; α – объемная доля; u – скорость течения, $\text{м}/\text{с}$; t – индекс величин, усредненных по объемным долям компонентов

дисперсной системы; φ – индекс величин, относящихся к компоненту дисперсной системы (глицерину или тетраэтоксисилану).

Уравнение неразрывности для модели смеси из n компонентов имеет при этом следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m) + \text{div}(\rho_m \vec{u}_m) = \dot{m}, \tag{5}$$

$$\sum_{\varphi=1}^n \alpha_{\varphi} = 1, \tag{6}$$

где \dot{m} – поток массы (расход), $\text{кг}/(\text{м}^3 \cdot \text{с})$.

Уравнение сохранения импульса (количества движения) вдоль декартовой оси i для смеси может быть получено как сумма уравнений для всех фаз [9, 10]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_m u_{mi}) + \left[(\rho_m u_{mj}) \frac{\partial u_{mi}}{\partial x_j} - \sum_{\varphi=1}^n (\alpha_{\varphi} \rho_{\varphi} u_{dr\varphi}) \frac{\partial u_{dr\varphi}}{\partial x_j} \right] = \\ = - \frac{dp}{dx_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_m \left(\frac{\partial u_{mj}}{\partial x_i} + \frac{\partial u_{mi}}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_{mi}}{\partial x_i} \right) \right] + \\ + \rho_m g_i + S_{mi}, \tag{7} \end{aligned}$$

$$u_{dr\varphi} = u_{\varphi i} - u_{mi}, \tag{8}$$

где i, j – индексы продольного и поперечного направлений течения; t – время, s ; x – координата, m ; δ_{ij} – метрический тензор в декартовых координатах; g – ускорение силы тяжести, $\text{м}/\text{с}^2$; S_m – источник количества движения, $\text{Н}/\text{м}^3$.

Для моделирования турбулентных пульсаций технологических потоков в аппаратном комплексе программного обеспечения применяется стандартная k - ϵ -модель турбулентности Лаундера и Сполдинга [11–14]. При использовании k - ϵ -модели система уравнений Навье – Стокса дополняется двумя уравнениями переноса (9, 10) удельной турбулентной кинетической энергии k , $\text{Дж}/\text{кг} (\text{м}^2/\text{с}^2)$, и диссипации данной энергии ϵ , $\text{Дж}/(\text{кг} \cdot \text{с}) (\text{м}^2/\text{с}^3)$.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_m k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_m k u_{mi}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu_m + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \\ + G_k + G_b - \rho_m \epsilon, \tag{9} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_m \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_m \epsilon u_{mi}) = \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu_m + \frac{\mu_t}{\sigma_{\epsilon}} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\epsilon} (G_k + C_{3\epsilon} G_b) - C_{2\epsilon} \rho_m \frac{\epsilon^2}{k}, \tag{10} \end{aligned}$$

где

$$G_k = \mu_t S^2, \quad (11)$$

$$G_b = -\frac{1}{\rho_m} \left(\frac{\partial \rho_m}{\partial T} \right)_p g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad (12)$$

$$S \equiv \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}, \quad (13)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_{mj}}{\partial x_i} + \frac{\partial u_{mi}}{\partial x_j} \right), \quad (14)$$

$$\mu_t = \rho_m C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}. \quad (15)$$

Значения модельных констант для расчетов при помощи программного обеспечения ANSYS Fluent принимались по данным Маршалл и Баккера [11]:

$$C_{1\varepsilon}=1,44, C_{2\varepsilon}=1,92, C_{3\varepsilon}=0,09, \sigma_k=1,0, \sigma_\varepsilon=1,3, Pr_t=0,85.$$

Также проводили модельный расчет полезной мощности перемешивания, классическое инженерное решение которого связано с использованием чисто эмпирических данных. Для снижения зависимости от эмпирических данных и расчета мощности перемешивания на основе результатов численного моделирования по уравнениям (2–15) использовали методику [12]. В соответствии с методикой [12] расчет полезной мощности перемешивания N проводился путем интегрирования полученных в результате численного моделирования значений удельного крутящего момента по рабочей поверхности перемешивающего устройства:

$$N = \frac{2\pi n}{60} \int_0^S \frac{\rho_m u_{mi}^2}{2} \sqrt{x_i^2 + y_i^2} dS, \quad (16)$$

где x, y – координаты поверхности мешалки относительно оси вращения вала, m ; n – частота вращения вала мешалки, об/мин.

Для оценки эффективности перемешивания использовали значение абсолютной неусредненности плотности реакционной массы $\Delta\rho$, кг/м³:

$$\Delta\rho = \rho_{\max} - \rho_{\min}, \quad (17)$$

где ρ_{\max}, ρ_{\min} – соответственно максимальная и минимальная плотности реакционной смеси во всем расчетном объеме реактора, кг/м³.

Использование в качестве критерия оценки абсолютной неусредненности плотности реакционной массы в данном случае было оправданно, так как плотности исходных реагентов, глицерина и тетраэтоксисилана, отличались в 1,35 раза (330 кг/м³ в абсолют-

ном выражении при плотности глицерина 1260 кг/м³ и плотности тетраэтоксисилана 930 кг/м³).

Энергетическая эффективность процесса оценивалась по совокупности времени усреднения плотности реакционной смеси и значению крутящего момента на валу мешалки. Расчет для всех рассмотренных вариантов проводился до получения установившейся картины распределения фаз в объеме перемешивания.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

По результатам проведения экспериментальных опытно-промышленных синтезов глицеролов кремния состава $Si(O_3C_3H_7)_4 \cdot 6C_3H_8O_3$ были получены следующие результаты.

Таблица 1.

Время проведения опытно-промышленного синтеза глицеролов кремния, ч

Тип перемешивающего устройства	Скорость вращения вала перемешивающего устройства		
	240 об/мин	300 об/мин	400 об/мин
Пропеллер	42	42	42
Якорь	8	8	8

Экспериментальные данные указывают на то, что применительно к рассматриваемому синтезу использование якорного типа перемешивающего устройства взамен пропеллерного позволяет сократить общее время проведения процесса с 42 до 8 часов. При этом достаточной скоростью перемешивания реакционной массы является значение 240 об/мин. Увеличение скорости перемешивания до 400 об/мин не оказало никакого влияния на скорость проведения синтеза. С учетом того, что исходные компоненты реакционной смеси являются несмешивающимися в нормальных условиях между собой жидкостями, ключевым фактором, обеспечивающим протекание реакции, является обеспечение полного и равномерного диспергирования компонентов реакционной массы

Экспериментальным путем также удалось установить, что применительно к используемой системе оборудования целесообразно удаление 70% образующегося этилового спирта проводить при атмосферном давлении. Оставшиеся 30% образующегося этилового спирта возможно удалять на тонкоплёночном испарителе.

Поскольку проведение реальных опытно-промышленных синтезов предполагает значительные финансовые и временные затраты, с применением программного обеспечения ANSYS Fluent было проведено моделирование процесса смешения компонентов реакционной смеси. В модели была рассмотрена задача смешения исходных реагентов, тетраэтоксисилана (плотностью 930 кг/м³, вязкостью $7 \cdot 10^{-4}$ Па · с) и глицерина (плотностью 1260 кг/м³, вязкостью

0,945 Па · с), в мольном соотношении 1 к 8. Изменения характеристик компонентов реакционной массы с учетом их нагрева и изменения количественного соотношения в ходе протекания реакции не учитывались. При этом в модели процесса в начальный момент времени перемешивания тяжелая фаза (глицерин) находилась на дне аппарата.

Геометрические размеры реактора, его внутренних элементов, перемешивающих устройств измерялись фактически по реальным габаритам и далее учитывались в программном обеспечении при обработке данных. Эффекты деформации поверхности реакционной массы, связанные с образованием центральной воронки при перемешивании, не учитывались. Геометрическая модель для обоих рассмотренных вариантов конструкции перемешивающего устройства представлена на рисунке 1.

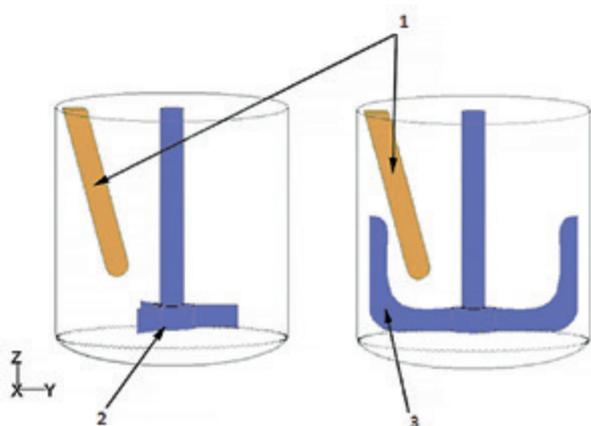


Рисунок 1. Геометрическая модель реактора Minipilot 10:

1 – гильза термопары; 2 – пропеллерная мешалка; 3 – якорная мешалка

Для обоих вариантов конструкции перемешивающего устройства были рассмотрены скоростные режимы работы 240, 300, 400 об/мин. Скоростные режимы были приняты с учетом рекомендаций справочной литературы [13].

При выборе конструкции и режима работы перемешивающего устройства необходимо было достичь выполнения следующих условий:

1. Максимально полного увеличения той доли объема реактора, в которой смешение компонентов протекает наиболее интенсивно.
2. интенсификации циркуляции исходных реагентов, то есть обеспечения их равномерного распределения по реакционной зоне.
3. обеспечения эффективного смещения химического равновесия реакции в сторону целевого продукта за счет усиления осевой циркуляции компонентов реакционной среды в реакторе, в итоге

приводящей к ускорению отвода легколетучих продуктов реакции (паров этилового спирта) из реакционной зоны.

4. Снижения удельного энергопотребления как за счет снижения затрат мощности на перемешивание, так и за счет снижения продолжительности синтеза. При достижении данного условия также снижаются и расходы на поддержание температуры теплоносителя, подаваемого в рубашку реактора.

Таким образом, выбор конструкции и режима работы перемешивающего устройства должен был обеспечить максимальную полноту протекания реакции при минимальном времени синтеза и минимальных энергетических затратах.

Корректный выбор режима работы перемешивающего устройства для опытно-промышленного реактора осложнялся его относительно небольшими габаритами. Классическая справочная литература по перемешиванию [14] ориентирована в первую очередь на промышленные реакторы, объем которых не менее 0,16 м³. Аналитическое масштабирование процессов перемешивания в таких случаях крайне затруднительно, так как процессы перемешивания не поддаются корректному описанию методами теории подобия [15]. Классические инженерные методики расчета механических перемешивающих устройств оперируют чисто эмпирическими коэффициентами и статистическими зависимостями, действующими зачастую в достаточно узких диапазонах.

Использование методов и средств вычислительной гидродинамики позволило решить задачу с максимальным приближением к реальной геометрии оборудования, то есть в данном случае удалось уйти от необходимости использования экспериментальных масштабных факторов и коэффициентов.

Путем обработки исходных данных о компонентах реакционной смеси и моделирования процесса смешения были получены расчетные значения, коррелирующие с результатами практических экспериментов.

На рисунках 2 и 3, полученных в результате обработки данных с использованием программного обеспечения ANSYS FLUENT, показаны линии течения реакционной массы для скорости вращения вала перемешивающего устройства 240 об/мин. На модельных рисунках четко видна та область реактора, где смешение компонентов осуществляется наиболее интенсивно.

Для пропеллерной мешалки (рисунок 2) область интенсивного перемешивания занимает лишь малую часть объема реактора, при этом осевое перемешивание крайне слабое. Фактически можно говорить о том, что при использовании пропеллерной мешалки

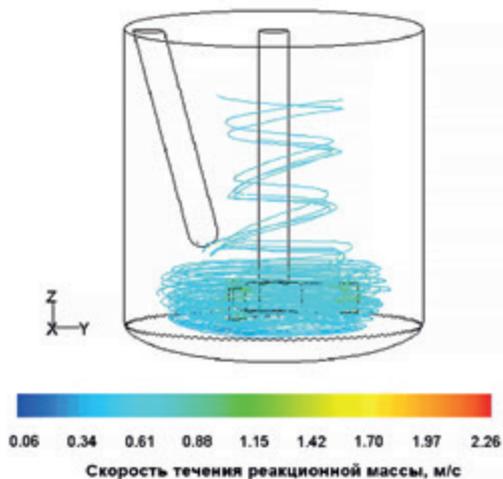


Рисунок 2. Линии течения реакционной массы в аппарате с пропеллерной мешалкой при скорости 240 об/мин

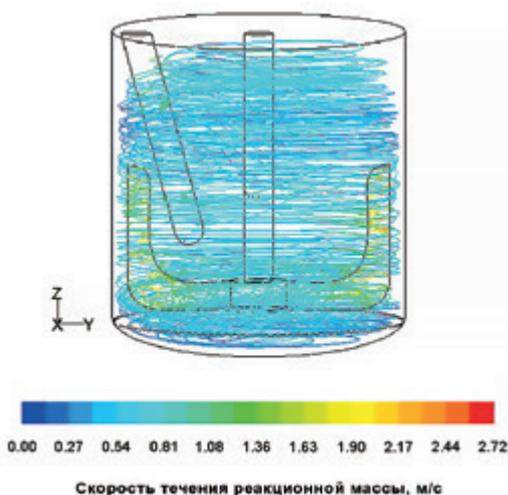


Рисунок 3. Линии течения реакционной массы в аппарате с якорной мешалкой при скорости 240 об/мин

реакция протекает только в 1/8–1/10 объема реактора. Остальной объем представляет собой застойную зону.

Для якорной мешалки наблюдается качественная иная картина движения компонентов реакционной смеси (рисунок 3). В этом случае интенсивное перемешивание происходит практически во всем объеме реактора как в радиальном, так и в осевом направлении.

Также стоит отметить тот факт, что в описываемой модели в реакторе с якорной мешалкой практически полное усреднение плотности реакционной массы ($\Delta\rho = 6 \text{ кг/м}^3$) наступало за 15–20 мин перемешивания. Через час перемешивания в аппарате с якорной мешалкой неусредненность плотности реакционной массы практически достигла нуля. В то же время в реакторе с пропеллерной мешалкой усреднения плотности реакционной массы за весь рассмотренный в

модели временной интервал так и не наступило. Через 60 мин перемешивания максимальная неусредненность плотности составила около 180 кг/м^3 .

На рисунках 4 и 5 представлена динамика снижения неусредненности плотности реакционной массы в аппаратах с пропеллерной и якорной мешалками при скорости вращения 240 об/мин.

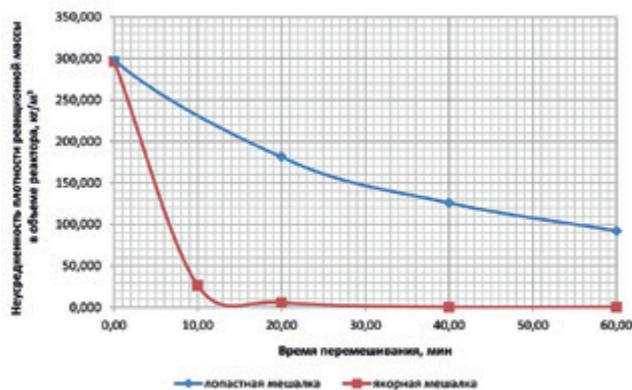


Рисунок 4. Динамика снижения расчетной неусредненности плотности реакционной массы при скорости 240 об/мин

Расчетная мощность, затрачиваемая на перемешивание якорной мешалкой, на рассмотренном временном интервале выше потребляемой мощности для пропеллерной мешалки в среднем в 4,9 раза. Однако с учетом продолжительности смешения полные затраты электроэнергии на смешение 1 кг реакционной смеси в случае применения якорной мешалки будут ниже, чем при применении пропеллерной мешалки, примерно в 1,2 раза.

Увеличение при моделировании скорости вращения вала перемешивающего устройства при существенном росте энергетических затрат на перемешивание не показало существенного ускорения снижения неусредненности реакционной смеси. Кроме того, дальнейшее повышение скорости связано с риском развития центральной воронки до состояния, которое может негативно сказаться на устойчивости вала мешалки. В связи с этим для дальнейших экспериментальных синтезов подобных смесей может быть рекомендован скоростной режим работы перемешивающего устройства 240 об/мин.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспериментальные работы по моделированию и оптимизации синтеза глицеролатов кремния состава $\text{Si}(\text{O}_3\text{C}_3\text{H}_7)_4 \cdot 6\text{C}_3\text{H}_8\text{O}_3$ позволили установить оптимальные параметры проведения опытно-промышленного синтеза:

- температура реакционной массы – $110 \pm 2 \text{ }^\circ\text{C}$;

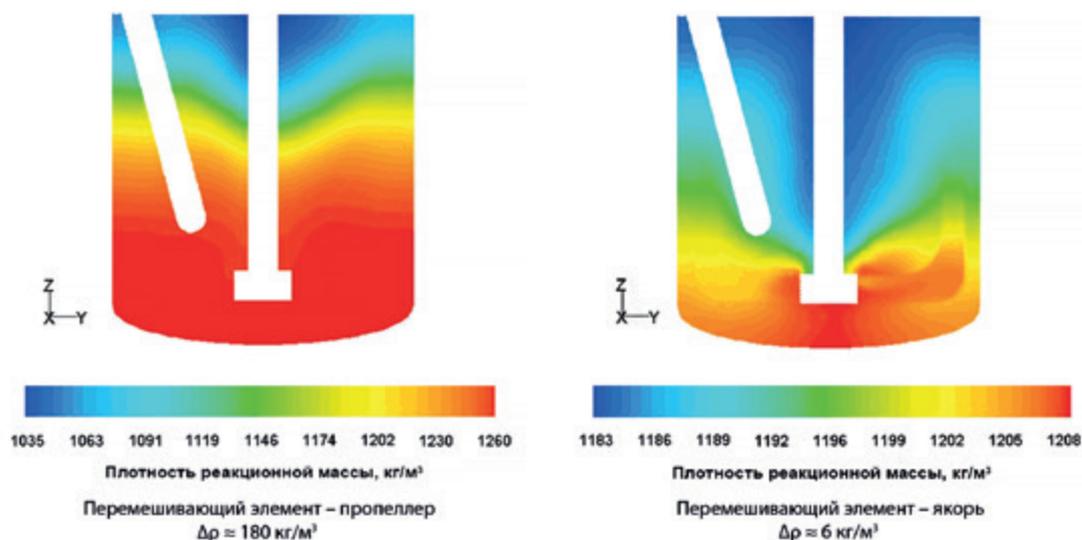


Рисунок 5. Изменение максимального различия плотностей в объёме перемешивания при скорости 240 об/мин

– удаление образующегося этилового спирта по следующей схеме: 70% от теоретического объёма образующегося спирта удалять при атмосферном давлении, оставшиеся 30% удалять из реакционной массы путём её передачи на тонкоплёночный испаритель при остаточном давлении в системе порядка 50 мм рт. ст.;

– режим смешения реакционной массы при скорости вращения вала перемешивающего устройства 240 об/мин, перемешивающий элемент типа «якорь».

Применение современных программ, базирующихся на методах и средствах вычислительной гидродинамики, значительно сокращает временные и трудовые затраты при выборе конструкции и режима работы перемешивающих устройств. Полученные результаты коррелируют с экспериментальными данными и подтверждают пригодность данного подхода к моделированию процесса производства субстанций кремнийсодержащих производных полиолов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Т.Г. Бояковская, Т.Г. Хонина, Л.П. Ларионов, Е.В. Филиппова, Е.В. Шадрина. Кремнийорганический глицерогидрогель как новая основа лекарственных и косметических средств // Новые материалы для медицины: кол. монография / НИСО УрО РАН. – Екатеринбург, 2006. С. 108–134.
2. Т.Г. Хонина, О.Н. Чупахин, Л.П. Ларионов, Т.Г. Бояковская, А.Л. Суворов, Е.В. Шадрина. Синтез, токсичность и трансдермальная проницаемость глицератов кремния и гидрогелей на их основе // Химико-фармацевтический журнал. 2008. № 11. С. 5–9.
3. А.А. Бойко, С.В. Морданов, Т.Г. Хонина, О.Н. Чупахин. Технологические аспекты производства субстанций кремнийсодержащих производных полиолов // Всероссийская конференция «Органический синтез: химия и технология». Екатеринбург. 2012. Уб.
4. M. Ahsan. Computational fluid dynamics (CFD) prediction of mass fraction profiles of gas oil and gasoline in fluid catalytic cracking (FCC) riser // Ain Shams Engineering Journal. 2012. № 3. P. 403–409.
5. J.-Z. Luo, Y. Luo, G.-W. Chu, M. Arowo, Y. Xiang, B.-C. Sun, J.-F. Chen. Micromixing efficiency of a novel helical tube reactor: CFD prediction and experimental characterization // Chemical Engineering Science. 2016. № 155. P. 386–396.
6. C. Abagnale, M.C. Cameretti, R. De Robbio, R. Tuccillo. CFD Study of a MGT Combustor supplied with Syngas // Energy Procedia. 2016. № 101. P. 933–940.
7. L. Khamar, K. Samrane. The use of the CFD for the hydrodynamic flow diagnostic and study in a Phosphoric Acid Reactor // Procedia Engineering. 2016. № 138. P. 369–377.
8. J. van Walsem, S.W. Verbruggen, B. Modde, S. Lenaerts, S. Denys. CFD investigation of a multi-tube photocatalytic reactor in non-steady state conditions // Chemical Engineering Journal. 2016. № 304. P. 808–816.
9. M. Manninen, V. Taivassalo. On the mixture model for multiphase flow. – Espoo: Technical research center of Finland. VTT Publications. 1996. P. 67.
10. H.A. Jacobsen. Chemical Reactor Modeling: multiphase reactive flows. – Berlin: Springer, 2008. P. 1244.
11. E.M. Marshall, A. Bakker. Computational Fluid Mixing. – Lebanon: Fluent Inc., 2003. P. 154.
12. С.В. Морданов, С.Н. Сыромятников, А.П. Хомяков. Методика определения полезной мощности привода механического перемешивающего устройства // Сборник научных трудов «Информационная школа молодого ученого». – Екатеринбург. Уральский центр академического обслуживания. 2011. С. 228–237.
13. А.А. Лашинский, А.Р. Толчинский. Основы конструирования и расчета химической аппаратуры. – Л.: Машиностроение, 1970. С. 752.
14. Ф. Стренк. Перемешивание и аппараты с мешалками. – Л.: Химия, 1975. С. 384.
15. З. Штербачек, П. Туаск. Перемешивание в химической промышленности. – Л.: ГХИ, 1963. С. 416.