

**TÍNH LƯỢNG AXETON TÁCH NHIỆT TRONG THIẾT BỊ PHÂN HỦY  
CUMEN HYDROPEROXIT**  
COMPUTE THE MASS OF ACETON FOR REMOVE HEAT FROM CLEAVE  
CUMENE HYDROPEROXIDE REACTOR

*Nguyễn Minh Thư, Nguyễn Thị Minh Hiền.*

*Phòng thí nghiệm Công nghệ Lọc Hóa dầu và Vật liệu Xúc tác – Đại học Bách khoa Hà Nội  
[petrochemlab@mail.hut.edu.vn](mailto:petrochemlab@mail.hut.edu.vn)*

**TÓM TẮT**

*Sử dụng ngôn ngữ lập trình Visual Basic xây dựng chương trình tính toán lượng axeton cần thiết để tách nhiệt phản ứng trong thiết bị phân hủy cumen hydroperoxit, một trong 2 giai đoạn chính của quá trình công nghệ sản xuất Phenol từ Cumen. Việc sử dụng ngôn ngữ lập trình Visual Basic cho phép tính toán chính xác các thông số động học và nhiệt động học như  $\Delta H$ ,  $\Delta C_p$ ,  $\Delta G$ ,  $K_p$ .*

**ABSTRACT**

*Using Visual Basic Programming Language to compute the mass of acetone for remove heat from cleave cumene hydroperoxide reactor which is one of 2 main steps in production Phenol from Cumene. Applying this Programming Language to allow to calculate more exactly thermal and kinetic parameters such as  $\Delta H$ ,  $\Delta C_p$ ,  $\Delta G$ ,  $K_p$  of each reactions or each components.*

**I. MỞ ĐẦU**

Vấn đề tách nhiệt phản ứng là vấn đề rất quan trọng đối với cả quá trình sản xuất phenol từ cumen cũng như trong giai đoạn phân hủy cumen hydroperoxit thành phenol và axeton vì đều là các phản ứng tỏa nhiệt mạnh.

Axeton được chọn làm tác nhân tách nhiệt trong thiết bị phân hủy. Tính toán lượng axeton thích hợp là rất quan trọng và phức tạp. Tính toán thiết kế bằng phương pháp mô phỏng cho phép giải quyết những bài toán phức tạp với độ chính xác và tin cậy cao [1-3].

**II. TÍNH TOÁN LƯỢNG AXETON CẦN THIẾT ĐỂ TÁCH NHIỆT TRONG THIẾT BỊ PHÂN HỦY.**

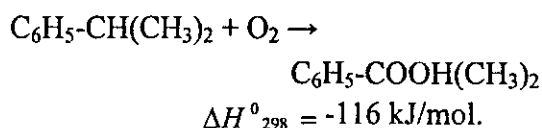
**1. Cơ sở hóa lý.**

Hiện nay, công nghệ sản xuất phenol từ cumen là công nghệ phổ biến nhất trên thế giới (chiếm trên 92% tổng sản lượng). Đặc điểm nổi bật của công nghệ này là thu được sản phẩm phụ axeton rất có giá trị cùng với sản phẩm chính phenol. Với ưu thế về tính kinh tế cũng như hiệu quả của công nghệ,

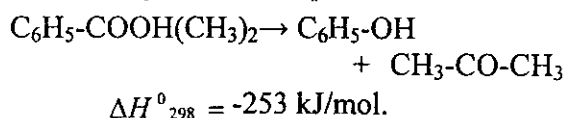
các nhà máy cũng như các tập đoàn hóa chất trên thế giới đều sản xuất phenol từ nguồn nguyên liệu cumen [4-6].

Công nghệ gồm có 2 giai đoạn chính:

a. Oxy hoá cumen tạo thành cumen hydroperoxit (CHP):



b. Phân hủy CHP thành phenol và axeton:



Cả hai giai đoạn chính của quá trình đều tỏa nhiệt mạnh, nhiệt độ có ảnh hưởng rất lớn đến độ chọn lọc của quá trình. Khi nhiệt độ tăng lên quá cao sẽ kìm hãm quá trình, giảm hiệu suất sản phẩm và đồng thời gây nguy hiểm cho sự vận hành sản xuất, nguy cơ nổ cao. Nhiệt độ thích hợp cho phản ứng oxy hóa cumen tạo thành cumen hydroperoxit là 90 – 120°C, phản ứng phân hủy cumen hydroperoxit thực hiện thuận lợi trong khoảng 50 – 90°C, thích hợp nhất là 50 – 65°C [7].

Để tách nhiệt phản ứng có thể kết hợp nhiều phương pháp hoặc sử dụng một trong các cách sau: có ống xoắn làm lạnh trong thiết bị, bay hơi một phần môi trường phản ứng, sử dụng thiết bị vỏ áo nhiệt... Nhưng sau khi nghiên cứu, phân tích thì người ta thấy rằng phương pháp bay hơi axeton để tách nhiệt phản ứng là rất hiệu quả và thích hợp đối với công nghệ này vì nhiệt hóa hơi của axeton là 225 Btu/lb (~ 125 kcal/kg) và nhiệt độ hóa hơi axeton là 60 °C, nằm trong khoảng nhiệt độ tối ưu của giai đoạn phân hủy cumen hydroperoxit. Lượng axeton sau khi hóa hơi được làm lạnh tuần hoàn lại thiết bị phản ứng.

Hiệu ứng nhiệt của các phản ứng được tính theo công thức:

$$\Delta H_{pu} = \Delta H_0 + \int_{298}^T \Delta C_{pu} dT$$

Trong đó:

- $\Delta H_{pu}$ : Nhiệt lượng của phản ứng, kcal/mol.
- $\Delta H_0$ : Nhiệt lượng tại điều kiện 298K của phản ứng, kcal/mol.
- $\Delta C_{pu}$ : Nhiệt dung riêng của phản ứng, kcal/mol.do.
- T: Nhiệt độ của phản ứng, K.

Tổng nhiệt lượng của các phản ứng:

$$Q_{pu} = -\sum (n_i \cdot \Delta H_{pu(i)})$$

Trong đó:

- $Q_{pu}$ : Nhiệt lượng tỏa ra trong quá trình phản ứng.
- $n_i$ : Số mol của phản ứng.
- i: Phương trình i.

Nhiệt lượng của các cấu tử được tính theo công thức:

$$Q_i = G_i \cdot C_{p_i} \cdot t$$

Trong đó:

- $Q_i$ : nhiệt lượng của cấu tử i, kcal/h
- $G_i$ : lưu lượng của cấu tử i, kmol/h
- $C_{p_i}$ : Nhiệt dung của cấu tử i, kcal/kmol.độ
- T: nhiệt độ, °C.

Từ đó tính toán được nhiệt lượng của quá trình và đưa ra được lượng axeton thích hợp với năng suất công nghệ, đạt hiệu quả tách nhiệt cần thiết, đảm bảo được hiệu suất quá trình cũng như tính kinh tế của công nghệ.

## 2. Mô phỏng quá trình.

Trước khi tính toán lượng axeton cần phải tính toán cân bằng vật chất của quá trình vì quá trình gồm có giai đoạn oxy hóa cumen thành cumen hydroperoxit sau đó đến giai đoạn phân hủy cumen hydroperoxit thành phenol và axeton. Từ kết quả tính cân bằng vật chất, nhận được thành phần hỗn hợp đầu vào thiết bị phân hủy, chạy vòng lặp với bước lặp khối lượng của axeton là 5 kg, tính toán được tổng lượng nhiệt vào và ra, kết quả đưa ra được lượng axeton cần thiết với điều kiện tổng lượng nhiệt ra bằng tổng lượng nhiệt vào với sai số cho phép.

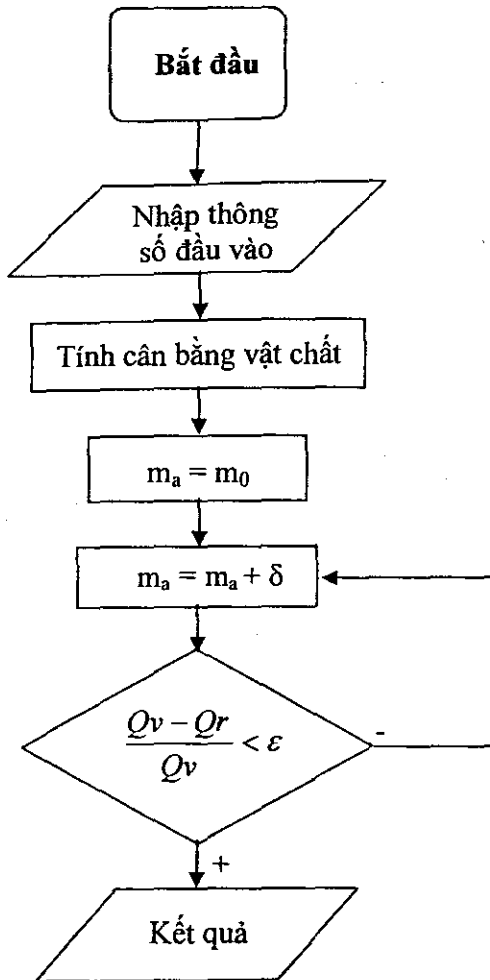
Quá trình tính toán được thể hiện trong sơ đồ thuật toán đưa ra trên hình 1.

Trong module tính toán này, mỗi khi thay đổi năng suất đầu vào thì sẽ có một lượng axeton thích hợp tương ứng. Lượng axeton cần thiết được tính toán dựa trên các công cụ sau:

- Ngôn ngữ lập trình Visual Basic.
- Microsoft SQL - lưu trữ cơ sở dữ liệu.
- Crystal Report – báo cáo kết quả.

Giao diện chương trình gồm có:

- Giao diện mở đầu biểu diễn sơ đồ tổng quát dây chuyền công nghệ sản xuất phenol từ cumen.
- Giao diện thể hiện kết quả tính toán với các bộ số liệu khác nhau.
- Phần nhập các thông số đầu vào: nhập thành phần nguyên liệu, thông số công nghệ năng suất, ngày làm việc, nhiệt độ vào của hỗn hợp đầu, hiệu suất sử dụng oxy...
- Phần kết quả tính toán: cân bằng vật chất, cân bằng nhiệt lượng, tính thiết bị chính...

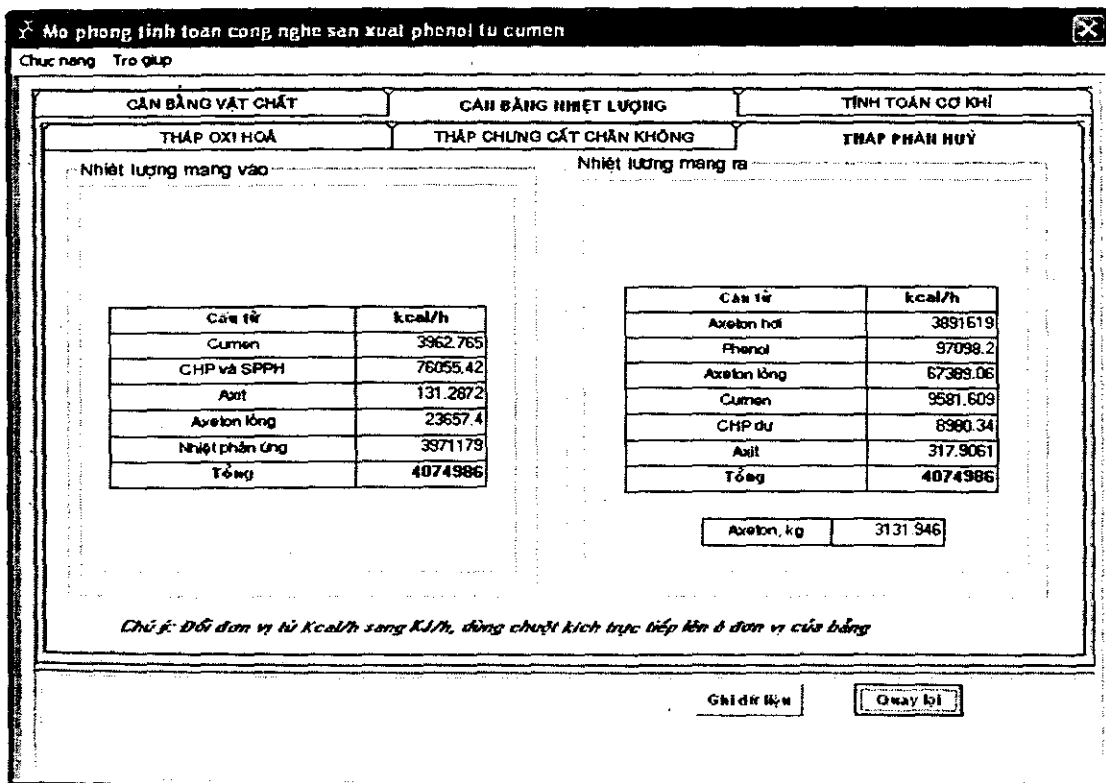


Hình 1. Sơ đồ thuật toán tính lượng axeton tách nhiệt phản ứng trong thiết bị phân hủy CHP

Trong đó:

- $m_a$ : khối lượng axeton
- $m_0$ : khối lượng ban đầu giả sử  $10^{-6}$
- $\delta$ : bước khối lượng,  $\delta = 5$
- $Q$ : Nhiệt lượng.
- $\epsilon$ : độ sai lệch cho phép,  $10^{-8}$

Kết quả tính toán lượng axeton được thể hiện trong giao diện cân bằng nhiệt lượng tháp phân hủy (hình 2).



Hình 2. Giao diện kết quả cân bằng nhiệt lượng tháp phân hủy.

### III. KẾT LUẬN.

Với module tính toán này, đưa ra được lượng axeton cần thiết để tách nhiệt phản ứng sinh ra trong giai đoạn phân hủy cumen hydroperoxit thành phenol và axeton. Kết quả tính toán nhận được có độ chính xác cao và phù hợp đối với từng năng suất công nghệ.

Tính toán lượng axeton có ý nghĩa quan trọng đối với công nghệ sản xuất phenol từ cumen vì đã tách được lượng nhiệt phản ứng sinh ra, điều khiển được nhiệt độ trong thiết bị phản ứng là yếu tố tác động mạnh đến hiệu suất cũng như sự vận hành an toàn của quá trình.

Ứng dụng tin học có khả năng tính toán những bài toán phức tạp, kết quả có độ chính xác cao vì có thể tính với vòng lặp lớn, có khi lên tới hàng trăm lần. Giao diện sử dụng ngôn ngữ tiếng Việt, có hướng dẫn, với những cảnh báo, nên rất thân thiện với người sử dụng. Đây là công cụ tính toán mạnh và hiệu quả được sử dụng rất phổ biến hiện nay.

Đây là một module có thể giúp giải quyết bài toán về tính thiết kế công nghệ một cách chính xác và nhanh chóng.

Công trình được thực hiện với sự tài trợ của Bộ Giáo dục và Đào tạo.

### TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. A. Kayode Coker. “*Modeling of Chemical Kinetics and Reactor Design*”. Gulf Professional Publishing, 2001.
2. William L. Luyben “*Process modeling, Simulation, and Control for Chemical Engineers*”. McGraw Hill, 1990.
3. Franks Roger G. E. “*Modeling and Simulation in Chemical Engineering*”, New York, Wiley – Interscience, 1972.
4. Ullman’s Encyclopedia of Industrial Chemistry, Vol. A1, 1988.
5. Ullman’s Encyclopedia of Industrial Chemistry, Vol. A19, 1988.
6. Alain Chauvel, Gilles Lefebvre. “*Petrochemical Processes*”, Vol. 2 “*Major Oxygenated, Chlorinated and Nitrated Derivaties*” Gulf Professional Publishing Company, 1989.
7. Fleming J.B., Lambrix J.R., Nixon J.R. *Hydrocarbon Processing*, January 1976, 185 – 196.