
АКАДЕМИЈА НАУКА И УМЈЕТНОСТИ РЕПУБЛИКЕ СРПСКЕ

НАУЧНИ СКУПОВИ

Књига ХЛП

ОДЈЕЉЕЊЕ ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИХ И ТЕХНИЧКИХ НАУКА

Књига 35

САВРЕМЕНИ МАТЕРИЈАЛИ



Бања Лука 2018

Научни скуп
САВРЕМЕНИ МАТЕРИЈАЛИ
Зборник радова

ACADEMY OF SCIENCES AND ARTS OF THE REPUBLIC OF SRPSKA

SCIENTIFIC CONFERENCES

Book XLII

DEPARTMENT OF NATURAL-MATHEMATICAL AND TECHNICAL SCIENCES

Book 35

CONTEMPORARY MATERIALS

EDITORIAL BOARD

Academician Rajko Kuzmanović, academician Ljubomir Zuković,
academician Vaskrsija Janjić, academician Dragoljub Mirjanić,
academician Branko Škundrić

EDITOR IN CHIEF

Academician Rajko Kuzmanović

EDITOR

Academician Dragoljub Mirjanić



Banja Luka 2018

АКАДЕМИЈА НАУКА И УМЈЕТНОСТИ РЕПУБЛИКЕ СРПСКЕ

НАУЧНИ СКУПОВИ

Књига ХЛП

ОДЈЕЉЕЊЕ ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИХ И ТЕХНИЧКИХ НАУКА

Књига 35

САВРЕМЕНИ МАТЕРИЈАЛИ

РЕДАКЦИОНИ ОДБОР

Академик Рајко Кузмановић, академик Љубомир Зуковић,
академик Васкрсија Јањић, академик Драгољуб Мирјанић,
академик Бранко Шкундрић

ГЛАВНИ УРЕДНИК

Академик Рајко Кузмановић

ОДГОВОРНИ УРЕДНИК

Академик Драгољуб Мирјанић



Бања Лука 2018.

ОРГАНИЗАЦИОНИ ОДБОР
НАУЧНОГ СКУПА

Академик Драгољуб Мирјанић, председник
Академик Васкрсија Јањић, потпредседник
Академик Рајко Кузмановић
Академик Бранко Шкундрић
Проф. др Неђо Ђурић, дописни члан АНУРС-а
Проф. др Лудвик Топлак
Проф. др Владо Ђајић
Проф. др Небојша Јованић
Проф. др Зоран Рајилић

НАУЧНИ ОДБОР
НАУЧНОГ СКУПА

Академик Драгољуб Мирјанић
Академик Бранко Шкундрић
Академик Јован Шетрајчић
Академик Стане Пејовник (Словенија)
Проф. др Неђо Ђурић, дописни члан АНУРС-а
Академик Томислав Павловић
Академик Ростислав Андриевски (Русија)
Академик Филип Говоров (Украјина)
Академик Цералд Полак (САД)
Проф. др Роумиана Тсенкова (Јапан)
Проф. др Мај Ван Хо (Велика Британија)
Проф. др Ифа Говен (Ирска)
Проф. др Јукио Косуги (Јапан)
Др Мајрон Д. Еванс (Канада)
Проф др Мартин Чаплин (Велика Британија)
Проф. др Ђуро Коруга (Србија)
Проф. др Драгица Лазич
Проф. др Перо Дугић
Проф. др Слободан Чупић

MODELOVANJE POLUŠARŽNIH PROCESA PROIZVODNJE POLIETERA ZA DOBIJANJE POLIURETANA

*Vladan Mičić¹, Stefan Pavlović¹, Jelena Pavličević², Olga Govedarica²,
Milovan Janković², Snežana Sinadinović Fišer², Jaroslava Budinski Simendić²*

¹Univerzitet u Istočnom Sarajevu, Tehnološki fakultet, Zvornik, Republika Srpska, BiH

²Univerzitet u Novom Sadu, Tehnološki fakultet, Novi Sad, Srbija

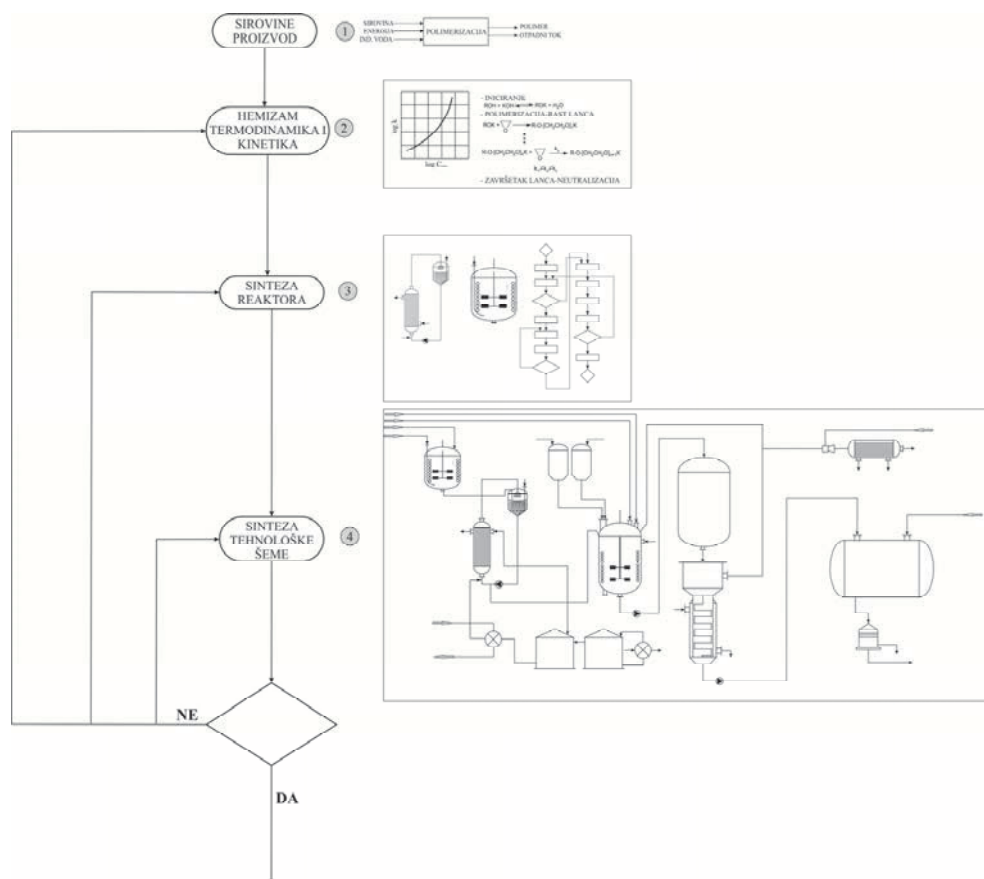
Apstrakt: U ovom radu prikazani su suštinski aspekti metodologije projektovanja hemijsko–tehnološkog procesa proizvodnje polietera kao jedne od osnovnih komponenata u proizvodnji poliuretana. Osnovni koncept procesa, u kojima se polieteri dobijaju od petrohemijskih sirovina ili od obnovljivih sirovina, zbog svoje kompleksnosti, zasniva se na razmatranju procesa preko četiri nivoa. Svaki nivo procesa objedinjavanja podvrgnut je definisanju odgovarajućih matematičkih modela koji ga opisuju na odogovarajući način. Takođe, predložena je tehnološka šema fleksibilnog polušaržnog procesa za proizvodnju polietera.

Ključne reči: polioli; modelovanje; proizvodnja polietera; projektovanje procesa.

1. POLUŠARŽNI PROCESI PROIZVODNJE POLIETERA

Do danas su razvijeni različiti procesi dobijanja polietera kao komponente za proizvodnju poliuretana. Prosesi na petrohemijskih sirovina su u praksi već odavno zastupljeni, ali sve više se radi na razvoju i procesa dobijanja polietera i poliuretana na osnovu obnovljivih sirovina. Principi rada ovako složenih procesa su razrađeni na kontinuiranim stanjima ovih procesa. Hemijska industrija, usled zahteva tržišta i ubrzanog razvoja novih proizvoda, sve više ima potrebu za pogonima relativno manjih kapaciteta, ali sa širokim spektrom asortimana proizvoda. Optimalno je graditi pogone sa fleksibilnim tehnološkim procesima za koje nije moguće organizovati kontinuiranu proizvodnju. Zato su ovi fleksibilni procesi u principu polušaržni jer ih čine aparati koji rade u šaržnom režimu rada i oprema koja ih povezuje u kontinuiranom režimu. Analiza algoritama složenih tehnoloških procesa i prethodno postavljen zadatak optimalne topološke strukture procesa proizvodnje polietera, omogućava postavljanje originalne metodologije objedinjavanja polušaržnih procesa proizvodnje. Kompleksnost polaznog zadatka uslovljava razmatranje procesa na četiri nivoa. Prvi nivo podrazumeva detaljnu analizu sirovinske osnove, kvaliteta gotovog proizvoda i kvaliteta energetskih fluida u cilju postavljanja tehničko–tehnoloških ograničenja matematičkog modela procesa. Drugi nivo obuhvata izbor optimalne trajektorije hemijske reakcije polimerizacije kao ključne

odrednice procesa. Analiziraju se sve faze sinteze od pripreme inicijatora, rasta lanca, završetka lanca, kao i sporedne reakcije i njihov uticaj na proces. Treći nivo je analiza i izbor optimalnog reaktora u kome će se realizovati polimerizacija. Za izbor reaktora su relevantni sledeći faktori: kinetički faktori, prenos mase i toplote, sigurnost, hidrodinamički i konstrukcioni parametri. Četvrti nivo predstavlja generalizaciju tehnološke šeme procesa na osnovu rezultata prethodnih koraka. Svaki od navedenih nivoa procesa sinteze optimalne strukture podvrgnut je kritičkoj oceni u odnosu na neki od pokazatelja kvaliteta funkcionisanja procesa. Na slici 1. data je struktura heurističko–evolucionog pristupa objedinjavanju polušaržnog procesa proizvodnje polietera.



Slika 1. Struktura procesa proizvodnje polietera.

Prvi nivo objedinjavanja procesa proizvodnje polietera obuhvata analizu sirovinke osnove, kvalitet gotovog proizvoda i analizu energetskih i pomoćnih fluida potrebnih za rad procesa. Detaljna analiza sirovina i njihov uticaj na ukupan proces polimerizacije posmatra se po pojedinim etapama. Posebno se analizi podvrgavaju inicijatori, monomeri, katalizator i kiseline za neutralizaciju. Inicijato-

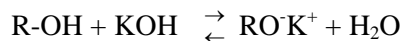
ri (npr. sorbitol), katalizator i kiselina za neutralizaciju su zbog svojih svojstava vođeni rastvori, ali kako voda u reakcijama polimerizacije nije poželjna, njeno izdvajanje iz sistema zahteva dodatna opterećenja. To dodatno opterećenje može da se odnosi na konstrukciju aparata, povećanu ogrevnu površinu ili na povećanje upotrebnog veka. Skladištenje sirovina treba da obezbijedi kombinovan rad postrojenja. Faktori koji definišu veličinu skladišta su udaljenost sirovina, pouzdanost isporučioaca i veličina isporuke. Minimum zapremine skladišta je jednak maksimalnoj količini isporuke. Kvalitet gotovog proizvoda se daje u polaznom zadatku i on je bazni kriterijum funkcionisanja sistema. Kapacitet postrojenja definiše tržište na kome se može plasirati određeni asortiman polietera. Kapacitet, sa druge strane, zavisi od niza tehničkih i ekonomskih pokazatelja o kojima treba voditi računa. Ukoliko je poznat asortiman polietera I , godišnji kapacitet Q i broj radnih dana u godini N_{RDG} , onda se kapacitet jedne šarže određuje iz jednačine 1:

$$Q_s = \sum_{i=1}^n Q_i \cdot \frac{\sum_{i=1}^n \tau_i}{n} \cdot \frac{I}{N_{RDG}} \quad (\text{t/šarži}) \quad (1)$$

gde je: Q_i godišnji kapacitet određenog proizvoda iz ukupnog asortimana, a τ_i predstavlja trajanje proizvodnje određenog proizvoda iz asortimana.

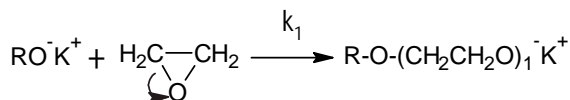
Rashladna voda kao pomoćni fluid se koristi u izmenjivačima toplote. Ona se obično ne zagreva iznad 70°C da bi se postrojenje zaštitilo od korozije. Ako je na raspolaganju velika količina čiste vode (jezero, more, reka), koristi se jedan prolaz. Međutim, uobičajen je način cirkulacije rashladne vode u sistemu preko rashladnog tornja. Vodena para se upotrebljava obično do temperature 260°C a za temperature između 260 i 400°C primjenjuju ulja (Dowtherm A) kao ogrevni medij. Vakuum sistem u postrojenju se obezbeđuje pomoću vakuum pumpi i ejektora. Donji prag vakuuma u industriji je $0,01$ bar. Navedeni zahtevi i uslovi nastali kao rezultat tržišnih, lokacijskih ili tehnoloških razloga, su obično izvan projektantskog uticaja, a veoma su bitni za polaznu koncepciju objedinjavanja topološke strukture procesa. Ove odrednice predstvaljaju tehnološka ograničenja. Fundamentalna etapa procesa proizvodnje polietera je reakcija polimerizacije. Potpuno definisati ovaj nivo znači obezbediti optimalnu trajektoriju hemijske reakcije i izvršiti pravilan izbor aparata u kojima će se ona realizovati. Ovaj tip reakcija anjonske polimerizacije alkilen oksida (etilen oksida, propilen oksida) pripada lančanim reakcijama polimerizacije. Inicijator se prvo katalizuje hidroksidima alkalnih ili zemnoalkalnih metala u koncentraciji od $0,005$ – $0,5$ mola po molu inicijatora. Naročitu aktivnost pokazuje hidroksid kalijuma [1].

Hemijska reakcija kataliziranja inicijatora se odvija po sledećoj formuli:

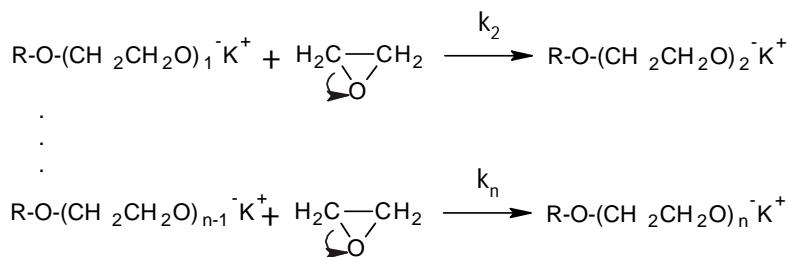


U ovoj etapi veoma je važno obezbediti potpuno odstranjivanje vode, ne samo zbog pomeranja ravnoteže reakcije u pravcu nastajanja alkoholata, već i zbog reakcije polimerizacije vode sa alkilen oksidima i stvaranja neželjenih produkata.

Anjon nastao u prethodnoj etapi kao nukleofil, dovodi do otvaranja oksiranskog prstena monomera alkilen oksida i formiranja novog anjona:



Rast lanca se dalje odvija sukcesivnim napadima nastalog anjona na monomer:



Polimerizacija po anjonskom mehanizmu se ostvaruje praktično bez završetka lanca. Reakcija je praćena sa izdvajanjem toplote, ($Q_r = 96,37$ kJ/mol izreagovanog monomera), što direktno utiče na porast temperature reakcione mase i može da ugrozi ne samo osnovnu reakciju polimerizacije, zbog odvijanja sporednih neželjenih reakcija, već i sigurnost procesa. Dokazano je [2, 3] da u homogenim sistemima u širokom dijapazonu koncentracija, brzina reakcije ne zavisi od molekulske mase u intervalu od 300 do 4500 Da, strukture radikala R u inicijatoru (R-OH) i koncentracije slobodnih hidroksilnih grupa u reakcionoj masi. Brzina reakcije polimerizacije se može opisati kinetičkim modelom za reakciju drugog reda i to kao funkcija koncentracija monomera C_M i katalizatora C_K (jednačina 2):

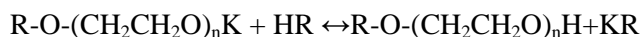
$$r_i = k_1 \cdot C_M \cdot C_k \quad (2)$$

Konstanta brzine hemijske reakcije k_1 , kao funkcija temperature reakcije T_R , prikazuje se eksponencijalnom jednačinom 3:

$$\ln k_1 = 26,616 - 9153,34/T_R \quad (3)$$

Važno je istaći da je reakcija polimerizacije heterogena zbog vrlo male rastvorljivosti monomera u alkoholatu i tek kod polietera sa molekulskom masom većom od 300 Da monomer se rastvara u svim odnosima. Kod anjonske polimerizacije, uporedo sa osnovnom reakcijom rasta lanca, odvijaju se i sporedne reakcije pri kojima se pojavljuju dvostruke veze u polieteru. Ako se koristi trifunkcionalni alkohol (glicerol) kao inicijator, onda u toku reakcije polimerizacije, mogu nastati tri tipa polimera: trioli, dioli i monooli. Triol nastaje polispajanjem na primer propilen oksida na glicerol i on je ciljani proizvod hemijske reakcije, diol nastaje polispajanjem propilen oksida na vodu, a monool nastaje spajanjem propilen

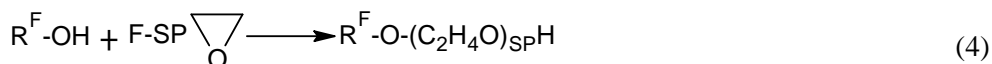
oksida na alil alkohol. Mera učešća monoola u polieteru koji sada sadrži nezasićene dvostruke veze se može iskazati preko jednog broja. Do prekida lanca dolazi u momentu kada je prekinut dotok monomera, i takav polieter je potrebno neutralisati jednostavnim vezivanjem polimernog anjona za prsten. Neutralizacija se vrši mineralnim kiselinama, a nastale soli se odvajaju filtriranjem:



Prisutnu vodu u gotovom proizvodu (unešenu sa kiselinom za neutralizaciju i za obezbeđenje suspenzije kristala) i zaostali neproreagovani monomer, potrebno je izdvojiti jer su uslovi za primenu polietera u sistemima za dobijanje poliuretana veoma strogi. Pri projektovanju sušenja treba voditi računa o visokim tačkama ključanja polietera (preko 300°C) i o temperaturi ključanja smese u funkciji pritiska.

2. RASPODELA MOLEKULSKIH MASA POLIMERA PRI ANJONSKOJ POLIMERIZACIJI

Funkcija raspodele molekulskih masa polimera pri anjonskoj polimerizaciji (MMR) je jedan od najosetljivijih parametara o kome se mora voditi računa pri objedinjavanju tehnološke topologije procesa polimerizacije (broju reaktora, tipu reaktora, uslova polimerizacije, itd). Kod anjonske polimerizacije, kojoj pripada i reakcija sinteze polietera, obrazovani polimer ima takav MMR koji se može opisati Poassonovom raspodelom [4-6]. Ova vrsta raspodele se postiže ispunjenjem sledećih uslova: konstanta brzine reakcije ne zavisi od dužine makromolekula, brzina reakcije inicijacije je veoma velika, svi aktivni centri su identični i reakcioni sistem je homogen. Na osnovu stehiometrijskih zakona, potrebno je definisati materijalni bilans procesa polimerizacije kao dijela matematičkog modela cjelokupnog procesa. Osnovna reakcija polimerizacije širokog spektra kvaliteta polietera, funkcionalnost F i stepena polimerizacije SP prikazana je jednačinom 4:



Na osnovu zadanog kapaciteta svedenog na zapreminu šarže polietera Q_s i molekulske mase M_M , izračunava ju se masa inicijatora (jednačina 5), masa monomera (jednačina 6), kao i stepen polimerizacije (jednačina 7):

Masa inicijatora m_{in} :

$$m_{in} = Q_s \cdot \frac{M_{in}}{M_M} \quad (5)$$

Masa monomera m_M :

$$m_M = (M_M - M_{in}) \cdot \frac{Q_s}{M_M} \quad (6)$$

Stepen polimerizacije SP :

$$SP = m_M \cdot \frac{M_M}{Q_\xi} \cdot \frac{M_{in}}{F} \quad (7)$$

3. IZBOR OPTIMALNOG REAKTORA ZA PROCES POLIMERIZACIJE

U ovoj etapi objedinjavanja tehnološke topologije procesa potrebno je projektovati reaktor koji treba da zadovolji niz uslova koji su često kontradiktorni. Analizom procesa polimerizacije polietera na dugom nivou objedinjavanja HTS, uočavaju se dva problema: potrebno je obezbediti intenzivno mešanje reakcione mase po celoj zapremini reaktora radi obezbeđivanja ravnomernog rasta polimernog lanca i veoma efikasno odvođenje toplote zbog egzotermne reakcije i činjenice da je brzina odvođenja toplote iz reaktora limitirajući faktor brzine procesa. Toplotni bilans reaktora može se prikazati jednačinom 8:

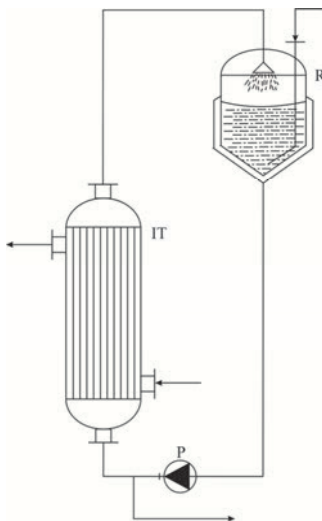
$$Q_r \cdot m_M = K \cdot F \cdot \Delta T_{sr} \cdot \tau \quad (8)$$

gde je Q_r toplotni efekat reakcije, koji odnosi se na 1 kg izreagovanog monomera i obično iznosi oko 1900 kJ/kg (projektna je varijabla i zadaje se u zavisnosti od tipa monomera); m_M je masa izreagovanog monomera, kg, je računska varijabla, a zavisi od potrebe tržišta za određenim polieterom; K je koeficijent prolaza toplote $W/(m^2 \cdot ^\circ C)$, računska je varijabla i kompleksna je funkcija režima strujanja reakcione mase i rashladnog medija; ΔT_{sr} je srednja temperaturna razlika između reakcione mase i fluida za hlađenje računska je varijabla i obično se kreće oko $20^\circ C$; F je površina za razmenu toplote isključivo je računska varijabla, a izvodi se uz motiv „ista zapremina reaktora – maksimalna površina”; τ je vreme trajanja reakcije polimerizacije i s je varijabla definisana najsporijim stadijumom u procesu polimerizacije i projektna je varijabla. Oslobođena količina toplote procesa polimerizacije u potpunosti se prenosi na rashladni medij preko površine za razmenu toplote. Sa stanovišta projektovanja i tehnoloških ograničenja treba analizirati profil pojedinih varijabli u jednačini (8). Na osnovu prethodnih zahteva i svojstava polietera da na temperaturi reakcije ($\sim 120^\circ C$) ima relativno malu viskoznost ($\mu < 0,1$ Pa·s) razvijeni su matematički modeli za dva tipa reaktora (reaktor sa mešalicom i unutrašnjim elementima za razmenu toplote i reaktor sa spoljašnjom cirkulacijom). Oba tipa reaktora su polušaržni reaktori. Reaktori sa unutrašnjim elementima za razmenu toplote su veoma česti zbog jednostavne konstrukcije. Kao elementi za razmenu toplote najčešće se koriste zmijača (koncentrična ili segmentna) ili snop cevi. Ugradnja zmijače se ne preporučuje ukoliko je viskoznost fluida veća od 1 do 2 Pa·s [7]. Rezultat proračuna daje listu tehnoloških i geometrijskih parametara reaktora: materijalni bilans, toplotni bilans, hidrodinamiku strujanja rashladne vode, hidrodinamiku strujanja reakcione mase, dimenzije reaktora, dimenzije zmijače i ostale parametre vezane za prenos mase i toplote. [8] Kao merilo efikasnosti reaktora obično se koristi specifični kapacitet, koji predstavlja masu monomera

polimerizovanog u jedinici vremena i jedinici zapremine reaktora, $\text{kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$. Ako se ne uzima u obzir vreme punjenja i pražnjenja reaktora, vrednost specifičnog kapaciteta q_s se može izračunati (jednačina 9):

$$q_s = \frac{m_M}{V_R \cdot \tau} = \frac{K \cdot \Delta T_{sr}}{Q_R} \cdot \frac{F}{V_R} = 0,00316 \cdot \frac{F}{V_R} \quad (9)$$

Prethodna jednačina je izvedena uz uslov pretpostavljenih vrednosti za $K = 300 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$ i $\Delta T_{sr} = 20^\circ\text{C}$. Odnos površine F prema zapremini reaktora V_R u zavisnosti od dimenzija reaktora se menja u intervalu od 5 do 15. Maksimalni specifični kapacitet barbotážnog reaktora sa mešalicom i zmijačom iznosi $q_s = 0,0474 \text{ kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$. U praksi, realno se može računati da on iznosi $0,02 \text{ kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$ jer su uslovi razmene toplote otežani (viskoznost, više redova cijevi u zmijači, itd.). Intenziviranje rada reaktora za polimerizaciju alkilen oksida postiže se izvlačenjem rashladne površine izvan reakcione posude i njena izrada u obliku cevnog izmenjivača toplote (IT). U ovom slučaju je površina za razmenu toplote teorijski neograničena pa samo vrednost koeficijenta prolaza toplote ograničava kapacitet reaktora. Reakcioni sistem prikazan na slici 2 sastoji se od reaktora, posude za akumulaciju produkta reakcije i spoljašnje cirkulacione konture, izmenjivača toplote i cirkulacione pumpe koja se dimenzionira na osnovu kapaciteta postrojenja i ukupnog toplotnog efekta reakcije.



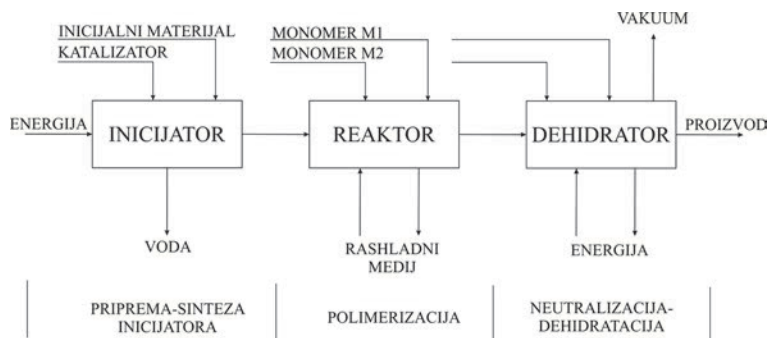
Slika 2. Reaktor sa spoljašnjom cirkulacijom.

Matematički model polimerizacije koji se odvija u reaktoru sa spoljašnjom cirkulacijom (slika 3) predstavlja skup jednačina koje opisuju: materijalni i toplotni bilans procesa polimerizacije, materijalni i toplotni bilans izmenjivača toplote, konstruktivne karakteristike reaktora, konstruktivne karakteristike razmenjivača toplote, hidrodinamička karakteristika cirkulacione konture, kapacitet cirkulacione pumpe, kapacitet pumpe rashladnog medija. Ovako koncipiran matematički model

podrazumeva niz pretpostavki: temperatura i koncentracija monomera u reaktoru je konstantna, pad temperature na krajevima izmenjivača je proporcionalan izdvojenj oj toploti u reaktoru, u reaktor se dodaje samo monomer koji se troši reakcijom, a reakcija polimerizacije je jedini izvor toplote u sistemu. Specifični kapacitet reaktora sa spoljašnjom cirkulacionom konturom zavisi od stepena polimerizacije i smanjuje se sa porastom makromolekula. Za kraće lance, specifični kapacitet ovog tipa reaktora u poređenju sa barbotaznim je veći, dok se porastom lanca izjednačava sa barbotaznim.

4. GENERALIZACIJA TEHNOLOŠKE ŠEME DOBIJANJA POLIETERA

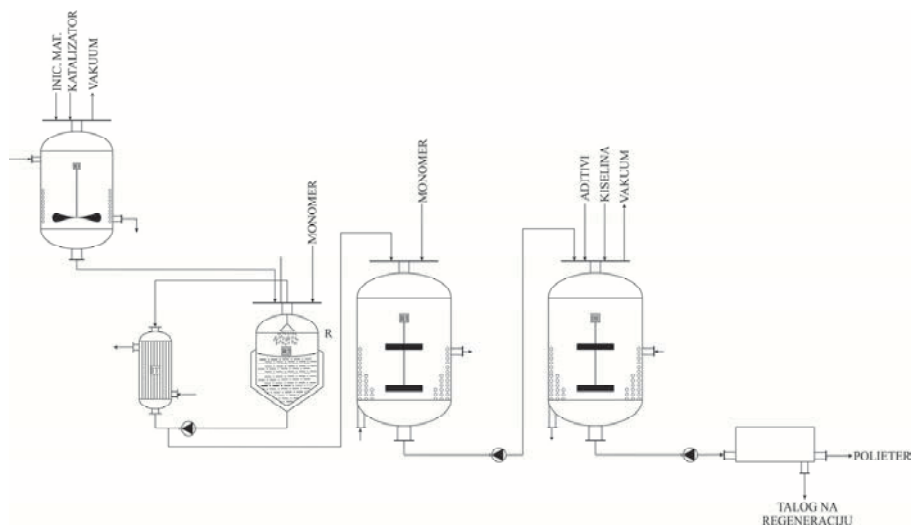
U poslednjoj etapi potrebno je uvrstiti sva rešenja iz prethodna tri nivoa imajući na umu da se proizvodnja polietera može podeliti na niz nezavisnih operacija: sinteze inicijatora, reakcije polimerizacije, neutralizacije, izdvajanja vode iz produkta (sušenje ili dehidratacija) i iz monomera (filtriranje). Projektovanje kompletnog postrojenja zavisi od specifičnosti hemijske reakcije, hidrodinamičkih uslova, temperaturnih uslova i trajanja pojedinih operacija. Koristeći osnovna pravila definisana u prvoj, drugoj i trećoj etapi objedinjavanja polušaržnih procesa za proizvodnju polietera, u četvrtoj etapi se dobija finalna šema procesa proizvodnje polietera prikazan na slici. 3.



Slika. 3. Blok šema procesa proizvodnje polietera.

Matematički model bloka „asortiman” određuje na osnovu projektnih varijabli, asortimana i godišnjeg kapaciteta linije, materijalni bilans svih sirovina potrebnih za sintezu polietera. Matematički model bloka „sinteza polietera” određuje i tehnološke i konstruktivne parametre dehidratora i tehnološke i konstrukcione parametre linije za sintezu koja može da se sastoji od reaktora sa unutrašnjim elementima za razmenu toplote ili od reaktora sa spoljašnjom cirkulacijom. Matematički model „reaktor za sintezu inicijatora” definiše konstrukcione parametre reaktora za sintezu inicijatora. Fleksibilni hemijsko-tehnološki sistem za proizvodnju polietera kao polušaržni proces prikazan je na slici 4. Njegova fleksibilnost se sastoji u tome da je moguće proizvesti polietera različite molekulske mase i funkcionalnosti. Razvijen je algoritam objedinjavanja fleksibilnog procesa dobijanja poli-

etera koji uzima u obzir sve karakteristike procesa i što je najvažnije daje rezultate koji odgovaraju zahtevima projektanta. Kao što se sa slike 4 vidi, dobijena tehnološka šema procesa u kome se dobijaju molekulske mase u intervalu od 1000 Da do 5000 Da i funkcionalnosti od 2 do 6, sastoji se od šest etapa: sinteza inicijatora (reaktor R), sinteza predpolimera (reaktor R₂), sinteza polietera (reaktor R₃), neutralizacija i dehidratacija polietera, kao i filtracija gotovog proizvoda.



Slika 4. Šema fleksibilnog polušaržnog procesa za proizvodnju polietera.

5. ZAKLJUČCI

U ovom radu je analizirana metodologija objedinjavanja tehnološkog procesa proizvodnje polietera kao komponente u proizvodnji poliuretana zbog niske cene i mogućnosti većeg uticaja na svojstva finalnog proizvoda. Kompleksnost procesa uslovljava njegovo razmatranje sa aspekta četiri nivoa: analize sirovina i proizvoda, osnovnih hemijskih i tehnoloških fenomena procesa, sinteze optimalnog reaktora, kao i sinteze tehnološke šeme procesa. Takođe, razvijen je algoritam objedinjavanja fleksibilnog procesa dobijanja polietera koji uzima u obzir sve karakteristike procesa i što je najvažnije daje rezultate koji odgovaraju zahtevima projektovanja.

6. LITERATURA

- [1] W. Satkowsky, C. Hsu, *Polyoxyethylation of Alcohol*, Industrial & Engineering Chemistry, 49-11 (1957) 1875-1878.
- [2] V. Švec, D. Civinskij, *Kinetika oksietilovanja spirtova v izbytko okisi etilena*, Hemičeskaja promyšlenost, 5 (1978) 330.

[3] V. Švec, *Modelirovanie processa oksytilirovanija spirtov v trubčatom reaktore nepreryvnogo dejstvija*, Teoretičeskie osnovy himičeskoja tehnologii, 17-3 (1983), 342-346.

[4] M. Platonov, *Universalnaja sistema koordinatdlja opredelenija analitičeskih funkcij MMR i ih parametrov*, Vysokomolekuljarnye Soedinenija, 22-4 (1980) 887-892.

[5] A. Dubrovskij, *Molekuljarno-massovoje raspredelenije vysokomolekuljnogo polietilenoksida*, Vysokomolekuljarnye Soedinenija, 17-12 (1975) 2733-2741.

[6] M. Platonov, J. Frenkel, *Ob analize molekuljarno-massovogo raspredelenija polidispersnyh polimerov*, Vysokomolekuljarnye Soedinenija, 18-11 (1976) 2369-2371.

[7] S. Jovanović, V. Džunuzović, Ž. Stojanović *Polymers Based on Renewable Raw Materials*, Part I, *Kemija u Industriji*, 62 - (9-10) (2013) 307-314.

[8] W. Cui, K. Mc Auley, R. Spence, T. Xie, *Mathematical Modeling of Polyether Production from 1,3-Propanediol: Accounting for Linear Oligomers*, *Macromolecular Reaction Engineering*, 9 - 3 (2015) 186–204.

V. Mičić, S. Pavlović, J. Pavličević, O. Govedarica, M. Janković,
S. Sinadinović Fišer, J. Budinski Simendić

MODELING OF SEMIBATCH PROCESSES OF POLYETHERS PRODUCTION FOR POLYURETHANE FABRICATION

Abstract: In this study, the essential aspects of technological processes design for polyether production are presented. The basic concept of the process, in which the polyethers obtained by synthesis from petrochemical raw materials or from renewable resources, was integrated from four basic levels. Each level of reactive process was defined and the appropriate mathematical models were developed. Also, technological scheme of semi-batch flexible process for the production of polyether is given.

Key words: polyols; modeling; polyether fabrication; processes design.