

Кондратов С. А.,  
Аль Хамадани М. Д.

## УЧЕТ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ЗНАЧЕНИЙ ВХОДНЫХ ПЕРЕМЕННЫХ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССА НИТРОВАНИЯ БЕНЗОЛА В РЕАКТОРЕ НЕПРЕРЫВНОГО ДЕЙСТВИЯ

Разработана «мягкая» модель стационарного процесса нитрования бензола смесью серной и азотной кислот в реакторе идеального перемешивания в изотермическом и адиабатическом режимах. На модели выявлено влияние неопределенности значений «внутренних» и неконтролируемых входных переменных (теплоты и скорости процесса, теплопотерь) от величин управляющих переменных (времени пребывания, модуля реактора, температур масс на входе) на значения выходных переменных: стационарных температур и степени превращения.

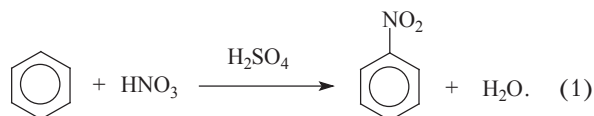
**Ключевые слова:** нитрование бензола, стационарный процесс, мягкая модель, влияние неопределенности, выходные переменные.

### 1. Введение

Нитробензол — один из базовых продуктов органического синтеза, исходное вещество для получения полимеров, пестицидов, красителей, лекарственных препаратов, химикатов для резины и других продуктов. В промышленности его производят взаимодействием бензола со смесью азотной и серной кислот. Учитывая масштабы производства, важнейшим подходом к поиску путей совершенствования технологии этого продукта является компьютерное моделирование. Поэтому разработка компьютерной модели ключевой стадии технологического процесса, непрерывного нитрования в реакторе идеального перемешивания, является актуальной задачей.

### 2. Анализ литературных данных

В технике процесс получения нитробензола проводят по реакции:



Процесс нитрования (1) является гетерогенным и проводится при интенсивном перемешивании в емкостных реакторах непрерывного действия при температуре 65–75 °С [1, 2]. Процесс сопровождается выделением большого количества тепла. Тепло выделяется не только в реакции (1) (148 КДж/моль [3]), но также в результате разбавления серной кислоты выделяющейся водой [2–5]. Избыток тепла можно снимать несколькими способами. В классическом варианте тепло снимают введением в процесс в качестве теплового буфера «отработанной кислоты» (70–72 %-ной серной кислоты, получающейся после нитрования и отделения нитробензола сепарацией),

обычно в сочетании с интенсивным охлаждением за счет теплообмена [2]. В адиабатическом процессе нитрование проводят в избытке бензола, а теплосъем осуществляют за счет испарения органических продуктов и воды [6].

Кинетика процесса гетерогенного нитрования весьма сложна и обычно ее описывают эмпирическими уравнениями [7, 8]. В зависимости от концентрации серной кислоты, можно выделить область медленной реакции (при концентрации ниже 66 %) и область быстрой реакции (при концентрации выше 70–72 %) [8]. В промышленном нитровании процесс обычно проводят в пограничной области.

В моделировании процесса нитрования имеются следующие тенденции. Во-первых, это попытка описания кинетики с учетом массопереноса между фазами, учет межфазных процессов и распределения размеров капель дисперсной фазы [8, 9]. Эти исследования представляют большой интерес с точки зрения понимания тонкого механизма сложного гетерогенного процесса, однако использование такого подхода к моделированию и управлению реальными процессами вряд ли возможно ввиду сложности контроля факторов массообмена в производственных условиях. Во-вторых, это использование для построения моделей процесса нитрования в промышленных реакторах статистических методов, прежде всего, регрессионного анализа [10]. Третий подход базируется на использовании имеющихся данных о физико-химических закономерностях нитрования в рамках модели идеального перемешивания. В рамках последнего подхода разработана модель реактора идеального перемешивания в виде системы нелинейных дифференциальных уравнений материального и теплового баланса [11–13]. С помощью численного моделирования исследованы некоторые свойства и особенности этой модели. Изучено влияние изменения плотности реакционной массы в процессе нитрования, показано, что реальный эффект невелик, и в первом приближении его можно не учитывать [11]. Показано, что модель имеет одно стацио-

нарное состояние [13]. Выявлены особенности перехода системы к стационарному состоянию в период пуска реактора [12]. При низкой начальной температуре реактора в переходном процессе происходит накопление в массе значительных количеств непрореагировавших азотной кислоты и бензола, концентрации которых, по мере приближения к стационарному состоянию, сокращаются в несколько раз. Этого накопления не происходит, если перед пуском содержимое реактора (отработанную кислоту) разогреть до температуры, близкой к стационарной [12].

### 3. Постановка задачи

При моделировании процесса нитрования в промышленном реакторе возникают проблемы, связанные с неточностью и неопределенностью информации о параметрах и условиях процесса. Можно выделить, с одной стороны, исходные данные, известные с погрешностью, которая известна или может быть оценена (теплота нитрования, скорость реакции). С другой стороны, имеются входные величины, точное значение которых оценить априори неизвестно, но можно оценить интервал возможного изменения (теплопотери). Это создает определенную «размытость» результатов моделирования, которые следует рассматривать не как жестко заданную зависимость, а как некую область возможных значений («толстую линию»). Такой взгляд находится в соответствии с концепцией «мягких вычислений» (Soft Computing), интенсивно развивающимся направлением современной кибернетики [14]. Сущность мягких вычислений состоит в том, что в отличие от традиционных, жестких вычислений, они нацелены на приспособление к всеобъемлющей неточности реального мира. Руководящим принципом мягких вычислений является: «терпимость к неточности, неопределенности и частичной истинности для достижения удобства манипулирования, робастности, низкой стоимости решения и лучшего согласия с реальностью» [14]. Методы мягких вычислений находят широкое применение в теории управления [15, 16], в современном анализе данных [17, 18], робототехнике [19, 20].

### 4. Объект, цель и задачи исследования

Объект исследования — процесс непрерывного мононитрования бензола смесью серной и азотной кислот в реакторе идеального перемешивания.

Целью настоящей работы является разработка «мягкой» модели процесса непрерывного нитрования бензола в реакторе идеального перемешивания непрерывного действия, которая позволила бы учесть неопределенность исходных данных и параметров процесса.

Для достижения поставленной цели необходимо выполнить такие задачи:

1. Разработать концепцию модели, ее описание и компьютерную реализацию.
2. Провести расчеты по модели, обобщить и интерпретировать результаты расчетов.

### 5. Описание «мягкой» модели процесса непрерывного нитрования бензола

В основу «мягкой» модели использована разработанная нами математическая модель процесса нитрования

бензола [13]. Эта модель описывается системой из двух нелинейных дифференциальных уравнений материального баланса и теплового баланса реактора [13]. С точки зрения практики наибольший интерес представляет стационарный режим работы реактора, который на модели реализуется при  $t \rightarrow \infty$ . При этом исходная система дифференциальных уравнений переходит в систему нелинейных алгебраических уравнений для стационарного состояния, являющиеся для рассматриваемого процесса единственным [13].

Выходными переменными модели являются стационарные значения степени превращения бензола и температуры. Входные переменные процесса и внутренние параметры можно условно разделить на 3 группы:

а) управляющие переменные, значения которых контролируются: время пребывания в реакторе ( $\tau$ , с), концентрация отработанной кислоты ( $C$ , %), добавляемая в реактор для снятия избытка тепла, модуль (расход отработанной кислоты на 1 кг бензола) ( $M$ , кг/кг), температура масс на входе в реактор ( $t_0$ , °C);

б) переменные процесса, которые не контролируются строго: теплопотери в реакторе ( $\beta$ , %);

в) внутренние параметры модели, для которых известны приближенные значения: теплота нитрования ( $Q$ , КДж/моль), скорость реакции ( $k$  моль/м<sup>3</sup>·с).

Результаты моделирования получали в виде табличной и точечной графической зависимости выходных переменных (степени превращения и температуры) от времени пребывания в реакторе по следующему алгоритму:

а) фиксировали значения управляемых переменных (модуля, концентрации отработанной кислоты, входной температуры), задавали интервал изменения времени пребывания, а также интервалы изменения теплопотерь, теплоты нитрования, скорости реакции;

б) в пределах заданного интервала генерировали по равномерному закону случайное значение времени пребывания;

в) при этом значении времени пребывания генерировали случайные значения теплопотерь, теплоты нитрования, скорости нитрования по равномерному закону в пределах заданных интервалов;

г) решали уравнения модели, получали и запоминали значения времени пребывания и выходных переменных;

д) повторяли вычисления 10000 раз, строили точечный график. Точки этого графика указывают искомую область допустимых значений выходных величин.

Для расчетов выбрали следующие интервалы изменения входных параметров процесса. В соответствии с [3] теплота нитрования бензола составляет  $148 \pm 7$  КДж, поэтому, с запасом, для этой величины выбрали интервал 137–159 КДж. Интервал для теплопотерь выбрали в диапазоне от 3 до 10 % от выделившегося количества тепла (сумма теплота нитрования и разбавления кислотной смеси [13]). Интервал значений скорости гетерогенного процесса нитрования, с запасом, выбрали от 25 до 400 % от величины, рассчитанной по уравнению скорости, приведенного в [2, 7, 13]. Выбранные интервалы относительно велики и позволяют получить одновременно «пессимистическую» и «оптимистическую» оценки величины области допустимых значений степени превращения и температуры, соответственно, как нижнюю и верхнюю граничные линии множества. В результате моделирования получили точечный

график (растровый образ), который, из-за большого количества точек, можно с хорошей точностью рассматривать, как закрашенную область («толстую кривую»).

### 6. Обсуждение результатов моделирования процесса нитрования бензола

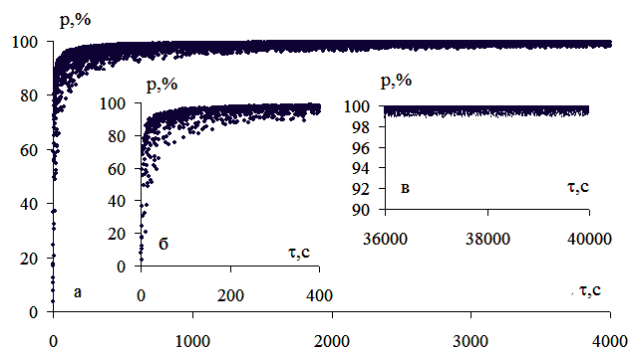
Авторы данной работы рассмотрели модель процесса нитрования бензола для двух вариантов два варианта его проведения: изотермического, когда избыток тепла снимается теплоносителем, и адиабатического, когда выделяемое тепло используется для нагрева реакционной массы.

Типичный растровый образ области допустимых значений стационарных степени превращения и температуры представлен на рис. 1 и 2. На графиках можно выделить следующие типовые участки:

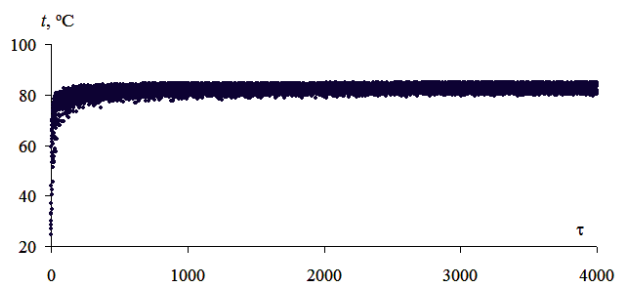
а) начальный участок (примерно до  $\tau = 200$  с, рис. 1). На этом участке происходит резкое возрастание степени превращения и температуры. При этом верхняя граница степени превращения и температуры изменяется до предельного значения;

б) срединный участок (примерно до  $\tau = 2000$  с), где верхняя граница достигает предельного значения, а нижняя продолжает возрастать;

в) область медленного изменения стационарного превращения ( $\tau > 2000$  с), где устанавливаются практически постоянными значения верхней границы, а нижняя граница изменяется очень медленно.



**Рис. 1.** Точечная зависимость степени превращения от времени пребывания (а) и начальный участок этой зависимости (б). Параметры процесса: модуль 10, концентрация отработанной серной кислоты 70 %, температура масс на входе 20 °С



**Рис. 2.** Точечная зависимость температуры нитромассы на выходе от времени пребывания. Параметры процесса: модуль 10, концентрация отработанной серной кислоты 70 %, температура масс на входе 20 °С

Для приближенной оценки верхней и нижней границ полученных множеств использовали их аппроксимацию по следующему алгоритму:

а) участок времени пребывания делили на  $n$  одинаковых частей;

б) массив выходной величины упорядочивали по возрастанию  $\tau$ ;

в) для значений выходной величины на каждом отрезке находили минимальное и максимальное значения.

При расчетах по этому алгоритму точечные границы внутри каждого отрезка заменяются прямолинейными, а граничные кривые заменяются «лестничными» ломаными. Это позволяет количественно оценить границы внутри каждого интервала и расстояние между ними. Результаты параллельных расчетов для одних и тех же входных данных показывают, что максимальная разность между нижними границами степени превращения на начальном участке не превышает 4 %, а на последующих участках — не более 1 %. Аналогичная разность для температуры не превышает 1 °С. Эти погрешности при практически важных значениях времени пребывания находятся на уровне экспериментальных ошибок определения. Поэтому рассмотренный метод можно использовать для анализа результатов моделирования.

Используя этот алгоритм, авторы данной работы исследовали, как с увеличением времени пребывания изменяются выходные стационарные характеристики процесса: степень превращения (для изотермического процесса) и степень превращения и температура (для адиабатного процесса). В табл. 1 приведены данные для процесса нитрования с участием отработанной кислоты, содержащей 64 % серной кислоты. В этом случае эффекты, описанные ниже, проявляются наиболее отчетливо. Как следует из табл. 1, с увеличением времени пребывания нижняя граница степени превращения в изотермическом и адиабатическом процессах при увеличении времени пребывания постепенно возрастает, и при  $\tau \rightarrow \infty$  стремится к совпадению с верхней границей. В отличие от степени превращения, нижняя граница стационарной температуры при  $\tau \rightarrow \infty$  не совпадает с верхней границей. При высоких значениях  $\tau$  наблюдаются колебания значений верхней границы стационарной температуры в пределах 1–2 °С, однако разница между верхней и нижней границами существенно выше размаха этих колебаний.

**Таблица 1**

Минимальные и максимальные значения степени превращения ( $P$ , %) и температуры ( $t$ , °С) в изотермическом ( $t = 70$  °С) и адиабатическом ( $t$  на входе 20 °С) процессах нитрования бензола при модуле  $M = 10$  и концентрации отработанной кислоты 64 %

Интервалы времени пребывания, с	Изотермический процесс		Адиабатический процесс			
	$P_{\min}$	$P_{\max}$	$P_{\min}$	$P_{\max}$	$t_{\min}$	$t_{\max}$
3800–4000	85,1	95,7	76,3	96,2	66,1	79,1
19800–20000	92,3	98,8	91,6	98,9	74,3	81
39800–40000	94,6	99,0	94,3	99,4	75,2	81,4
49800–50000	95,2	99,2	95,1	99,5	75,1	81,3
79800–80000	96,4	99,4	96,1	99,6	75,5	81,3
99800–100000	96,7	99,5	96,7	99,7	75,8	81,4
199800–200000	97,9	99,7	97,9	99,8	76,4	81,4
299800–300000	98,4	99,8	98,4	99,9	76	80,7
999800–1000000	99,3	99,9	99,3	99,9	74	78,6

Выявленные закономерности можно объяснить следующим образом. Поскольку реакция нитрования яв-

Таблица 2

Зависимость минимальных и максимальных границ стационарных степени превращения ( $P$ , %) и температуры ( $T$ , °C) внутри интервалов времени пребывания ( $\tau$ , с)

$T$	$P_{\min}$	$P_{\max}$	$T_{\min}$	$T_{\max}$	$\tau$	$P_{\min}$	$P_{\max}$	$T_{\min}$	$T_{\max}$
0–100	3,8	96,2	24,5	82,6	2000–2100	96,4	99,6	78,8	84,8
100–200	81,3	97,4	71,1	83,3	2100–2200	96,5	99,7	79,2	84,8
200–300	87,6	98,1	74,8	83,7	2200–2300	96,7	99,6	79,1	84,8
300–400	89,3	98,6	74,7	84,1	2300–2400	96,9	99,7	79,4	84,8
400–500	90,9	98,8	77,1	84,2	2400–2500	97,3	99,7	79,5	84,8
500–600	93,1	98,9	77,2	84,3	2500–2600	97,0	99,7	79,4	84,8
600–700	92,2	99,1	76,6	84,4	2600–2700	96,8	99,7	79,0	84,8
700–800	93,4	99,2	77,6	84,5	2700–2800	97,5	99,7	79,5	84,8
800–900	93,8	99,3	77,5	84,5	2800–2900	97,4	99,7	79,8	84,8
900–1000	94,2	99,3	78,2	84,5	2900–3000	97,2	99,7	80,0	84,8
1000–1100	95,3	99,4	78,4	84,6	3000–3100	97,5	99,7	79,6	84,8
1100–1200	95,0	99,4	78,8	84,6	3100–3200	97,6	99,8	79,6	84,8
1200–1300	95,2	99,4	78,1	84,6	3200–3300	97,6	99,8	79,6	84,8
1300–1400	95,6	99,4	78,7	84,6	3300–3400	97,8	99,8	80,0	84,8
1400–1500	95,7	99,5	78,8	84,6	3400–3500	97,5	99,8	79,4	84,8
1500–1600	96,2	99,5	78,7	84,7	3500–3600	97,5	99,8	79,8	84,8
1600–1700	96,0	99,5	78,9	84,7	3600–3700	97,6	99,8	79,9	84,8
1700–1800	96,2	99,6	78,8	84,7	3700–3800	97,7	99,8	79,9	84,8
1800–1900	96,2	99,6	78,8	84,7	3800–3900	97,8	99,8	80,1	84,8
1900–2000	96,4	99,6	78,8	84,7	3900–4000	97,7	99,8	79,5	84,8

ляется необратимой, а в модель не заложено побочных процессов, то при бесконечном времени пребывания следует ожидать 100 % превращения, как на верхней, так и на нижней границах при любой температуре. В отличие от этого, различия в прогнозных верхних и нижних границах температуры связаны с недостатком информации о точных значениях величин теплового эффекте и теплопотерь.

Авторы данной работы исследовали, как распределены точки внутри интервалов между верхней и нижней границами. На рис. 3 приведены эмпирические функции распределения степени превращения и температуры в адиабатическом процессе нитрования. Как следует из рис. 3, внутри интервалов между верхней и нижней границами точки распределены неравномерно. Так, 50 %-ный квантиль, располагается на удалении от левого края, составляющего 70–80 % от общей длины интервала.

Такие же закономерности распределения степени превращения наблюдаются в изотермическом процессе. Отсюда вытекает, что в условиях неопределенности шансы получить более высокие значения стационарных степени превращения температуры на выходе из реактора оказываются предпочтительными по сравнению с более низкими значениями.

*Влияние концентрации и модуля по отработанной кислоте.* Исследования проводили в диапазоне концентраций серной кислоты 64–72 % и модуля 5–14 (для изотермического процесса) и 8–14 (для адиабатического процесса).

Как следует из табл. 2, в изотермическом процессе при постоянных времени пребывания и концентрации отработанной кислота с увеличением модуля происходит снижение степени превращения одновременно на минимальном и максимальном уровнях. Этот эффект наиболее отчетливо проявляется при низкой концентрации отработанной кислота (64 %). По мере увеличения ее концентрации величина эффекта снижается, и при  $C = 72$  % он практически нивелируется. Это нивелирование связано с резким возрастанием скорости нитрования с увеличением концентрации серной кислоты в нитросмеси (в пересчете на отработанную кислоту) выше 70 %. В результате это повышение компенсирует снижение скорости за счет разбавления.

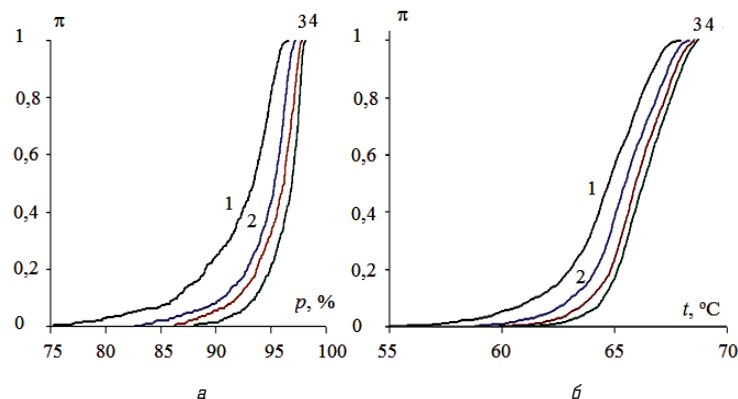


Рис. 3. Эмпирические функции распределения степени превращения (а) и температуры (б) в интервалах времени пребывания 200–400 с (1), 400–600 с (2), 600–800 с (3) и 800–1000 с (4) для процесса нитрования в адиабатических условиях. Модуль 14, концентрация отработанной кислоты 70 %, температура реагентов на входе 20 °C

С повышением температуры процесса степень превращения в изотермическом реакторе идеального перемешивания возрастает. Этот эффект также наиболее заметен при низкой концентрации отработанной кислота (64 %, табл. 2): повышение температуры на 10° позволяет увеличить стационарную степень превращения на верхнем и нижнем уровнях почти на 10 %. При высокой концентрации отработанной кислота изначальная степень превращения высока, поэтому дальнейшее повышение температуры сказывается мало.

Нитрования в адиабатическом реакторе идеального перемешивания имеет особенности, связанные с тем, что в этом процессе, протекающем без отвода тепла внешним теплоносителем, происходит одновременное изменение температуры и степени превращения. Кроме времени пребывания, управляющим фактором служит температура массы в входе в реактор, определяющая ее физическое тепло на входе и на выходе.

Как следует из табл. 3, в отношении степени превращения закономерности адиабатического и изотермического процесса качественно подобны: в обоих случаях наблюдается уменьшение степени превращения с увеличением модуля и ее возрастание с увеличением концентрации отработанной серной кислоты. Однако, в адиабатном процессе, в зависимости от модуля, наблюдается значительное увеличение температуры, существенно превосходящие нормативные значения (50–70 °C [1, 2]) даже при  $M = 12$ .



**Таблица 3**

Зависимость минимальных и максимальных границ стационарных степени превращения ( $P$ , %) внутри интервалов времени пребывания ( $\tau$ , с) для изотермического процесса

Условия	$\tau$ , с	$C = 64\%$		$C = 68\%$		$C = 72\%$	
		min	max	min	max	min	max
$M = 5$ , $60\text{ }^\circ\text{C}$	1000	67,5	86,6	83,6	95,1	93,4	98,6
	2000	73,2	90	87,5	96,6	95,0	99,2
	3000	76,5	91,7	89,3	97,3	96,2	99,4
	4000	78,5	92,7	90,8	97,8	96,6	99,5
$M = 8$ , $60\text{ }^\circ\text{C}$	1000	59,0	83,1	81,1	94,6	93,1	98,7
	2000	67,2	87,2	86,0	96,2	95,2	99,2
	3000	72,1	89,3	87,0	97,0	96,4	99,4
	4000	72,9	90,6	89,6	97,5	96,8	99,6
$M = 12$ , $60\text{ }^\circ\text{C}$	1000	52,5	79,8	78,8	93,9	92,9	98,7
	2000	59,7	84,6	84,3	95,9	95,2	99,2
	3000	64,5	87,2	86,7	96,8	95,4	99,3
	4000	69,0	88,7	88,2	97,3	96,9	99,6
$M = 5$ , $65\text{ }^\circ\text{C}$	1000	72,0	89,2	86,5	96,2	94,0	98,9
	2000	77,2	92,1	89,6	97,4	96,1	99,4
	3000	80,8	93,5	91,7	98,0	96,9	99,6
	4000	82,0	94,4	92,7	98,4	97,4	99,7
$M = 5$ , $70\text{ }^\circ\text{C}$	1000	76,1	91,5	88,7	97,1	95,1	99,3
	2000	81,3	93,8	91,3	98,1	96,8	99,6
	3000	83,2	95,0	93,6	98,6	97,5	99,7
	4000	85,3	95,7	93,8	98,8	98,0	99,8

Повышение температуры массы на входе с 20 до 40 °C (табл. 4) также вызывает значительное увеличение степени превращения и температуры на выходе из реактора.

Представляет интерес рассмотреть полученные результаты с позиции неопределенности. Если в качестве меры неопределенности степени превращения выбрать разницу между верхней и нижней границами на срезах времени пребывания 1000–4000 с, то можно сделать следующие выводы: неопределенность уменьшается с увеличением времени пребывания, концентрации отработанной серной кислоты и с уменьшением модуля. Одновременно снижение неопределенности сопровождается увеличением значения целевого показателя процесса — степени превращения. С точки зрения практики это указывает на пути оптимального проведения процесса в реакторе идеального перемешивания: его следует проводить в условиях изотермического процесса при минимально возможном модуле и достаточно высокой концентрации отработанной кислоты (~72 %), при времени пребывания до 4000 с.

**7. Выводы**

1. Разработана «мягкая» модель стационарного процесса нитрования бензола в реакторе идеального перемешивания, позволяющая учесть неопределенность значений входных переменных модели.
2. На модели выявлены закономерности разброса выходных величин (стационарной степени превращения и температуры) для изотермического и адиабатического вариантов проведения процесса.

**Литература**

1. Жилин, В. Ф. Синтез и технология нитропроизводных бензола и толуола [Текст] / В. Ф. Жилин, В. Д. Збарский // Российский химический журнал. — 2006. — Т. 50, № 3. — С. 104–115.
2. Беркман, Б. Е. Промышленный синтез ароматических нитросоединений и аминов [Текст] / Б. Е. Беркман. — М.: Химия, 1964. — 344 с.
3. Красильникова, А. А. Моделирование непрерывного адиабатического нитрования бензола [Текст] / А. А. Красильникова, С. А. Кондратов // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. — 2013. — № 6/6(66). — С. 15–19. — Режим доступа: \www/URL: <http://journals.urau.ru/eejet/article/view/19128>

**Таблица 4**

Влияние начальной температуры на входе в реактор на выходные характеристики для адиабатического процесса

Условия	$\tau$ , с	$C = 64\%$				$C = 68\%$				$C = 72\%$			
		$P$ , %		$^\circ\text{C}$		$P$ , %		$^\circ\text{C}$		$P$ , %		$^\circ\text{C}$	
		min	max	min	max	min	max	min	max	min	max	min	max
$M = 8$ , $t_0 = 20\text{ }^\circ\text{C}$	1000	68,7	95,8	69,2	90,4	93,1	99,2	86,3	95,1	98,4	99,9	92,9	98,3
	2000	83,1	97,5	78,4	91,6	96,2	99,6	89,2	95,3	99,1	99,9	92,9	98,4
	3000	87,0	98,1	80,9	92	96,8	99,7	89,0	95,4	99,3	100	93,0	98,4
	4000	89,3	98,5	82,2	92,3	97,4	99,8	89,4	95,5	99,5	100	93,2	98,4
$M = 12$ , $t_0 = 30\text{ }^\circ\text{C}$	1000	11,5	83,7	29,0	65,0	80,3	97,0	62,4	73,6	95,6	99,5	71,5	77,1
	2000	29,7	89,7	37,6	68,2	87,5	98,2	66	74,2	97,4	99,8	72,5	77,3
	3000	45,6	91,7	45,6	69,2	91,1	98,6	67,4	74,5	98,2	99,8	73,1	77,3
	4000	62,1	93,3	52,6	70,0	92,1	98,9	68,1	74,6	98,5	99,9	73,2	77,3
$M = 12$ , $t_0 = 40\text{ }^\circ\text{C}$	1000	71,8	95,5	77,0	91,4	94,4	99,2	89,9	95,3	98,4	99,9	93,6	97,8
	2000	83,8	97,2	83,2	92,3	96,1	99,5	90,7	95,3	99,1	99,9	93,7	97,8
	3000	86,5	97,8	84,8	92,6	97,0	99,7	91,0	95,4	99,4	100	93,9	97,8
	4000	88,4	98,3	85,1	92,8	97,5	99,8	91,1	95,5	99,5	100	94	97,8

4. Перевалов, В. П. Основы проектирования и оборудования производств тонкого органического синтеза [Текст] / В. П. Перевалов, Г. И. Колдобский. — М.: Химия, 1997. — С. 154.
5. Плановский, А. Н. Специальная аппаратура промышленности органических полупродуктов и красителей [Текст] / А. Н. Плановский. — М.-Л.: ГНТИХЛ, 1940. — С. 192.
6. Verner, A. Continuous adiabatic process for the mononitration of benzene [Текст] / A. Verner et al. // United States Patent. — May 23, 1978. — № 4091042.
7. Biggs, R. D. Rate of nitration of benzene with mixed acid [Text] / R. D. Biggs, R. R. White // AIChE Journal. — 1956. — Vol. 2, № 1. — P. 26–33. doi:10.1002/aic.690020106
8. Zaldivar, J. M. Aromatic nitrations by mixed acid. Fast liquid – liquid reaction regime [Text] / J. M. Zaldivar, E. Molga, M. A. Alós, H. Hernández, K. R. Westerterp // Chemical Engineering and Processing: Process Intensification. — 1996. — Vol. 35, № 2. — P. 91–105. doi:10.1016/0255-2701(95)04119-2
9. Quadros, P. A. Benzene nitration: validation of heterogeneous reaction models [Text] / P. A. Quadros, N. M. C. Oliveira, C. M. S. G. Baptista // Chemical Engineering Science. — 2004. — Vol. 59, № 22–23. — P. 5449–5454. doi:10.1016/j.ces.2004.07.107
10. Quadros, P. A. Different Modeling Approaches for a Heterogeneous Liquid-Liquid Reaction Process [Text] / P. A. Quadros, M. S. Reis, C. M. S. G. Baptista // Industrial & Engineering Chemistry Research. — 2005. — Vol. 44, № 25. — P. 9414–9421. doi:10.1021/ie050205m
11. Кондратов, С. А. Моделирование непрерывного нитрования бензола в реакторе с переменным временем пребывания [Текст] / С. А. Кондратов, М. Д. Аль Хамадани, Р. П. Савяк // Вісник Східноукраїнського національного університету ім. В. Даля. — 2011. — Вып. 10(164). — Ч. 2. — С. 132–141.
12. Кондратов, С. А. Моделирование пускового периода реактора непрерывного нитрования бензола [Текст] / С. А. Кондратов, А. Г. Ковган, М. Д. Аль Хамадани [Текст] // Вісник Східноукраїнського національного університету ім. В. Даля. — 2012. — Т. 17(188). — С. 153–158.
13. Кондратов, С. А. Модель процесса непрерывного нитрования бензола в реакторе идеального перемешивания [Текст] / С. А. Кондратов, М. Д. Аль Хамадани // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. — 2014. — № 2/6(68). — С. 16–22. — Режим доступа: \www/URL: http://journals.uran.ua/eejet/article/view/23334
14. Zadeh, L. A. Fuzzy logic, neural networks, and soft computing [Text] / L. A. Zadeh // Communications of the ACM. — 1994. — Vol. 37, № 3. — P. 77–84. doi:10.1145/175247.175255
15. Ульянов, С. В. Интеллектуальное робастное управление: технологии мягких вычислений [Текст] / С. В. Ульянов, Л. В. Литвинцева, В. Н. Добрынин, А. А. Мишин. — М.: PronetLabs, 2011. — 406 с.
16. Мишин, А. А. Технология мягких вычислений в проектировании интеллектуальных систем управления [Текст] / А. А. Мишин, В. Н. Добрынин, Л. В. Литвинцева // Программные продукты и системы. — 2001. — № 1. — С. 13–16.
17. Михалев, А. И. Компьютерные методы интеллектуальной обработки данных [Текст] / А. И. Михалев, Е. А. Винокурова, С. Л. Сотник. — Днепропетровск: НМетАУ, ИК «Системные технологии», 2014. — 209 с.
18. Аверкин, А. Н. Мягкие вычисления и измерения [Текст] / А. Н. Аверкин, С. В. Прокопчина // Интеллектуальные системы. — 1997. — Вып. 1–4. — С. 94–113.
19. Azvine, B. Intelligent systems and soft computing: prospects, tools and applications [Text] / B. Azvine, N. Azarmi, D. D. Nauck. — Berlin; Heidelberg; New York; Barcelona; Hong Kong; London; Milan; Paris; Singapore; Tokyo: Springer, 2000. — 369 p.
20. Николаева, А. В. Интеллектуальное управление роботоманипулятором на основе мягких вычислений [Текст] / А. В. Николаева, С. В. Ульянов // Программные продукты и системы. — 2013. — № 4(104). — С. 157–162.

#### ВЛИВ НЕВИЗНАЧЕНОСТІ ЗНАЧЕНЬ ВХІДНИХ ЗМІННИХ ПРИ МОДЕЛЮВАННІ ПРОЦЕСУ НІТРУВАННЯ БЕНЗОЛУ В РЕАКТОРІ НЕПЕРЕРВНОЇ ДІЇ

Розроблено «м'яку» модель стаціонарного процесу нітрування бензолу сумішню сульфатної та нітратної кислот у реакторі ідеального перемішування в ізотермічному та адіабатичному режимах. На моделі виявлено вплив невизначеності значень «внутрішніх» та неконтрольованих вхідних змінних (теплоти і швидкості процесу, тепловтрат) від величин керуючих змінних (часу перебування, модуля реактору, температур мас на вході) на значення вихідних змінних: стаціонарних температур та ступень перетворення.

**Ключові слова:** нітрування бензолу, стаціонарний процес, м'яка модель, вплив невизначеності, вихідні змінні.

*Кондратов Сергей Алексеевич, доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой высшей математики и компьютерной технологии, Институт химических технологий Восточноукраинского национального университета им. В. Даля, Рубежное, Украина, e-mail: kondratovsa@gmail.com.*

*Аль Хамадани Мохаммед Джамал, аспирант, Институт химических технологий Восточноукраинского национального университета им. В. Даля, Рубежное, Украина.*

*Кондратов Сергій Олексійович, доктор хімічних наук, професор, завідувач кафедри вищої математики та комп'ютерних технологій, Інститут хімічних технологій Східноукраїнського національного університету ім. В. Даля, Рубіжне, Україна.*

*Аль Хамадани Мохаммед Джамал, аспірант, Інститут хімічних технологій Східноукраїнського національного університету ім. В. Даля, Рубіжне, Україна.*

*Kondratov Serhii, Institute of Chemical Technology Volodymyr Dahl's East Ukrainian National University, Rubizhne, Ukraine, e-mail: kondratovsa@gmail.com.*

*Mohammed Jamal Al Hamadani, Institute of Chemical Technology Volodymyr Dahl's East Ukrainian National University, Rubizhne, Ukraine*