

С. И. Дуев

НАХОЖДЕНИЕ МАКСИМУМА ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ РЕАКТОРА ПО КОНЕЧНОМУ ПРОДУКТУ НА РЕЖИМЕ С ПОЛНЫМ ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИСХОДНЫХ РЕАГЕНТОВ В РЕЦИРКУЛЯЦИОННОЙ СИСТЕМЕ «РЕАКТОР-БЛОК РАЗДЕЛЕНИЯ»

Ключевые слова: реактор с рециклом, множественность стационарных состояний, устойчивость реакторных систем.

Рассматривается рециркуляционная система, состоящая из реактора и блока разделения. Проведен анализ стационарных состояний для реакции $A + B \rightarrow 2C$, протекающей в адиабатическом реакторе идеального вытеснения. Показано, что на режиме с полным использованием исходных реагентов A и B существует континуум стационарных состояний. Найдем максимум производительности реактора по конечному продукту C .

Keywords: reactor with recycle, multiplicity of steady states, stability of reactor system.

The recirculation system consisting of the reactor and the block of division is considered. Analysis of the steady states for the reaction $A + B \rightarrow 2C$ takes place in the adiabatic tubular reactor is done. It is proved that a continuum of the steady states exists on the regime is the full using of basic reactants A and B . The maximum of the output of the final product C is defined.

Введение

При создании химических производств большой мощности особое значение приобретают вопросы интенсификации процессов, возможно более полного использования исходного сырья, минимального загрязнения окружающей среды непрореагировавшими исходными, промежуточными и побочными продуктами химических процессов [1]. Экологические проблемы приобретают в последнее время особую значимость [2,3].

Эффективным способом решения проблемы минимизации отходов химического производства является рециркуляция непрореагировавших исходных веществ.

Блок-схема рециркуляционной системы реактор-блок разделения представлена на рис. 1,

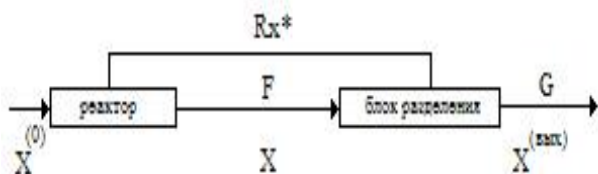


Рис. 1 - Блок-схема рециркуляционной системы реактор-блок разделения

На рис. 1: G - количество смеси, поступающей в систему в единицу времени, F - количество смеси поступающей в реактор в единицу времени, X - вектор концентраций в реакторе (со значком «0» - на входе в систему, со значком «*» - в рецикле, со значком «вых» - на выходе системы).

Предполагается, что блок разделения в общем случае может включать любые процессы разделения, такие как ректификация, абсорбции, экстракция и т.п. его функционирование определяется только заданием режимных параметров процессов разделения, таких как флегмовое число, величина орошения в абсорберах

и т.п., не регулируемых по составу получаемых продуктов. Поставленные условия соответствует принципу стабилизации потоков в системе разделения. Между потоками существует однозначные соответствия: $F = R + G$. В этой системе, выделив целевой продукт в технологическом операторе разделения, непрореагировавшие химические компоненты сырья через оператор смешения возвращают в оператор химического превращения.

Математическое моделирование адиабатического реактора в рециркуляционной системе «реактор-блок разделения»

Пусть в изотермическом реакторе идеального вытеснения функционирующем в рециркуляционной системе протекает реакция второго порядка $A + B \rightarrow 2C$.

Математическая модель этого реактора в стационарном состоянии может быть записана в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{F}{S} \frac{dx_1}{dl} &= -r(x_1, x_2) \\ \frac{F}{S} \frac{dx_2}{dl} &= -r(x_1, x_2) \\ \frac{F}{S} \frac{dx_3}{dl} &= 2r(x_1, x_2) \\ C_p \rho \frac{F}{S} \frac{dT}{dl} &= Qr \end{aligned} \quad (1)$$

где x_1, x_2, x_3 - концентрации реагентов A, B, C в реакторе. l - текущая длина реактора, r - функция, определяющая скорость реакции, S - площадь поперечного сечения реактора, ρ - плотность смеси, C_p - удельная теплоемкость, Q - тепловой эффект реакции.

Для простоты анализа предположим, что $r(x_1, x_2) = kx_1x_2$, где k - константа скорости

реакции (заметим, что для случая более сложной зависимости $\Gamma(x_1, x_2)$ качественные свойства сохраняются. Граничные условия для реактора, функционирующего в рециркуляционной системе на режиме с полным использованием исходных реагентов А и В [4] запишутся следующим образом:

$$\begin{aligned} Fx_1(0) &= Gx_1^{(0)} + F_1x_1(L) \\ Fx_2(0) &= Gx_2^{(0)} + Fx_2(L) \end{aligned} \quad (2)$$

$$T(l=0) = \frac{RT^*}{F} + \frac{GT^{(0)}}{F}$$

Для нахождения стационарного значения температуры на выходе реактора сложим первые два уравнения системы (1), умноженные на Q с третьим уравнением и проинтегрируем полученное соотношение от 0 до L. Получим:

$$T(l=L) = \frac{1}{F} \left(\frac{Gx_1^{(0)}Q}{CpS} + RT^* + GT^{(0)} \right) \quad (3)$$

где T^* - температура в рецикле – постоянная величина.

Решение первых двух уравнений системы (1) имеет вид [4]:

$$x_1(l) = \frac{c_1}{1 - c_2 \exp(-akc_1 l)} \quad (4)$$

$$x_1(l) = \frac{c_1}{1 - c_2 \exp(-akc_1 l)} - c_1$$

Здесь:

$$k = A \exp \left(-\frac{E}{TR_r} \right); \quad (5)$$

где E – энергия активации, R_r – газовая постоянная, A – предэкспоненциальный множитель.

Подставив решение (4) в граничные условия (2), соответствующие режиму с полным использованием реагентов А и В, получим систему уравнений для нахождения произвольных постоянных c_1 и c_2 :

$$\frac{c_1}{1 - c_2} = \frac{G}{F} x_1^{(0)} \frac{c_1}{1 - c_2 \exp(-akc_1 l)} \quad (6)$$

$$\frac{c_1}{1 - c_2} = \frac{G}{F} x_1^{(0)} \frac{c_1}{1 - c_2 \exp(-akc_1 l)} - c_1$$

Отсюда находим выражение c_2 через c_1 :

$$c_2 = \frac{\eta}{2} \pm \sqrt{\frac{\eta^2}{2} - \exp(-akc_1 L)} \quad (7)$$

Подставив найденное значение c_2 в (4) можно определить стационарное значение концентраций x_1 и x_2 на выходе реактора так:

$$x_1(L) = \frac{c_1}{1 - \left(\frac{r}{2} - \sqrt{\frac{r^2}{2} - \exp(akc_1 L)} \right) \exp(-akc_1 L)} \quad (8)$$

$$x_2(L) = x_1(L) - c$$

Так, как произвольный параметр c_1 может принимать любые значения, то концентрации исходных реагентов А и В могут принимать континуум стационарных значений, ограниченный

условием существования режима с полным использованием исходных реагентов[5]:

$$x_1 + x_2 \leq \frac{R}{F} \quad (9)$$

Из физических соображений в качестве решения берем только положительные значения x_1 и x_2 .

Вид континуума стационарных состояний (кривая ab) на плоскости x_1, x_2 представлен на рис. 2.

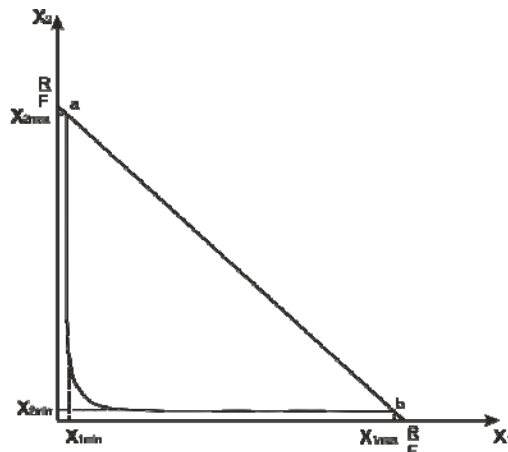


Рис. 2 - Вид континуума стационарных состояний (кривая ab) на выходе реактора на плоскости x_1, x_2

Согласно условию существования режима (9), кривая стационарных состояний ограничена в точках «а» и «в» прямой линией, уравнение которой $x_1 + x_2 = \frac{R}{F}$ есть граница режима. Концентрация

конечного продукта

$C - x_3$ на выходе реактора достигает максимального значения при минимуме суммы концентраций $s = (x_1 + x_2)$. Минимум суммы s достигается при равенстве концентрации $x_1 = x_2$. В этом случае концентрации реагентов А и В на выходе реактора определяются так (с учетом того, что объем реактора $V = SL$, и $x_1^{(0)} = 0.5$).

$$x_1(L) = x_2(L) = \frac{1}{\frac{Vk}{2F} - 1 + \sqrt{\left(\frac{Vk}{2F} \right)^2 + \frac{2Vk}{G}}} \quad (10)$$

Тогда максимум концентрации конечного продукта $C - x_3$ на выходе реактора определяется (в предположении что концентрации измеряются в мольных долях) так:

$$x_{3\max}(L) = 1 - \frac{2}{\frac{Vk}{2F} - 1 + \sqrt{\left(\frac{Vk}{2F} \right)^2 + \frac{2Vk}{G}}} \quad (11)$$

где константа скорости k определяется по формуле Аррениуса (5), при $T = T(L)$. При этих значениях концентраций, определяется минимальное значение рецикла на режиме:

$$R_{\min} = \frac{G}{\left(\frac{Vk}{2F} - 1 \right)} \quad (12)$$

Закключение

Определив максимум концентрации конечного продукта, находим максимум производительности реактора по конечному продукту С:

$$\Phi = Fx_{3\max} \quad (13)$$

Так как континуум стационарных состояний в лучшем случае может находиться лишь на границе области устойчивости, то для поддержания функционирования системы в оптимальной точке необходима система автоматического регулирования.

Литература

1. Кафаров, В.В. Принципы создания безотходных химических производств / В.В.Кафаров //М.: Химия – 1982-288с.
2. Гафаров, А.Х. Мониторинг вредных выбросов при сжигании природного газа предприятий по выработке тепловой энергии в районах РТ // А.Х.Гафаров, Л.И.Лаптева // Вестник Казан. технол. ун-та.-2010 - №1-С/463-467.
3. С.И.Дуев Расчет стационарных состояний реактора в рециркуляционной системе «реактор-блок разделения». Вестник Казан. технол. ун-та.- №16, 2012 - С .151-153
4. Бояринов, А.И. Анализ стационарных состояний реактора идеального вытеснения с рециклом/ А.И.Бояринов, С.И.Дуев // Теор.основы хим.технол. – 1988. – Т.22.-С402-404.
5. Бояринов, А.И. Множественность стационарных состояний в системе: смеситель – реактор – узел разделения /А.И.Бояринов, С.И.Дуев // Теоретические основы химической технологии – 1980 - №6 – Т.14 – С.903