

С. И. Дуев, С. М. Чернявский

РАСЧЕТ РЕЖИМОВ С ПОЛНЫМ ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИСХОДНЫХ РЕАГЕНТОВ В ХТС «РЕАКТОР ИДЕАЛЬНОГО СМЕШЕНИЯ - РЕКТИФИКАЦИОННАЯ КОЛОННА»

Ключевые слова: химико-технологическая система, реактор – ректификационная колонна, множественность стационарных состояний, реактор с рециклом.

Проведен численный расчет химико-технологической системы реактор-ректификационная колонна. В реакторе идеального смешения протекает реакция $A + B \leftrightarrow C \rightarrow P$. Численными расчетами показано, что на режимах с полным использованием исходных реагентов и при конечной разделительной способности существует континуум стационарных состояний. При расчете системы это проявляется как зависимость расчетных значений концентраций реагентов в реакторе от начального приближения.

Key words: reactor with recycle, multiplicity of steady states, chemical-technological system, reactor-distillation column.

Numerical calculation of chemical-technological system reactor-distillation column is done. The reaction $A + B \leftrightarrow C \rightarrow P$ takes place in the continuous stirred tank reactor. Numerical calculations proved, that continuum of the steady states exists for the regimes with the full using of basic reactants. It is displayed as a dependence of calculated concentrations of the reactants in the reactor on the initial values of iteration procedure.

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 [1,2,3].

Эффективным способом решения проблемы минимизации отходов химического производства является рециркуляция непрореагировавших исходных веществ [4].

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

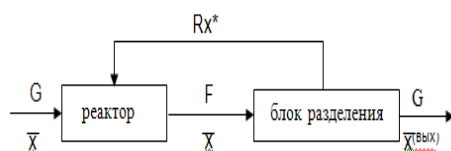


Рис. 1 - Блок-схема рециркуляционной системы реактор – блок разделения

Здесь G – количество смеси, поступающее в систему в единицу времени, R – количество рециркуляционной смеси в единицу времени, F – количество смеси, поступающее 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).

В работе [5] доказано, что для реакции $A + B \leftrightarrow C \rightarrow P$, проводимой в рециркуляционной системе «реактор-блок разделения» на режимах с полным использованием исходных реагентов, существует континуум стационарных состояний. Покажем, что этот факт справедлив и в случае, когда разделительная способность блока разделения конечна. В качестве блока разделения использовалась ректификационная колонна.

Математическая модель реактора

Пусть в реакторе идеального смешения протекает реакция $A + B \leftrightarrow C \rightarrow P$.

Математическая модель политропического реактора идеального смешения в стационарном состоянии в рециркуляционной системе может быть представлена следующей системой уравнений.

$$\begin{aligned} Gx_1^{(0)} - Vr_1 + Vr_2 - Fx_1 + Rx_1^* &= 0 \\ Gx_2^{(0)} - Vr_1 + Vr_2 - Fx_2 + Rx_2^* &= 0 \\ Vr_1 - Vr_2 - Vr_3 - Fx_3 + Rx_3^* &= 0 \\ Vr_3 - Fx_4 + Rx_4^* &= 0 \\ c_p \rho (GT^{(0)} + RT^* - FT) + U(T_x - T) + \\ V((Q_1 - Q_2)r_1 + Q_3r_3) &= 0 \end{aligned} \quad (1)$$

где x_1, x_2, x_3, x_4 – концентрации реагентов A, B, C и P соответственно, r_i ($i = 1, 2, 3$) – скорости элементарных стадий реакции, Q_i ($i = 1, 2, 3$) – тепловые эффекты элементарных стадий реакции, $x_i^*, i = 1, 2, 3, 4$ – концентрации реагентов A, B, C и P в рецикле, значения которых определяются в результате расчета ректификационной колонны.

Полагаем, что концентрации измеряются в мольных долях, тогда концентрацию конечного продукта P можно определить следующим образом:

$$x_4 = 1 - x_1 - x_2 - x_3. \quad (2)$$

Расчет рециркуляционной системы реактор – колонна ректификации

В качестве модели ректификационной колонны использовалась модель со следующими допущениями:

- 1) колонна оборудована парциальными кипятильниками и полными конденсаторами;
- 2) ректификация ведется при атмосферном давлении в конденсаторах колонны;

3) коэффициенты активности компонентов разделяемой смеси принимались равными 1;

4) эффективность тарелок (к.п.д. Мерфри) принималась одинаковой для всех компонентов смеси и всех тарелок колонны и равной 0,5;

5) давление паров чистых компонентов зависит от температуры на тарелках и описывается уравнением Антуана:

$$\lg(P_j^0(T_i)) = a_j - 2,888 - \frac{b_j}{T_i - c_j} \quad (3)$$

6) тепловые балансы по высоте колонны не учитываются.

7) число тарелок в верхней секции колонны-15, в нижней – 15, флегмовое число – 10.

Расчет замкнутой химико-технологической системы реактор идеального смешения - ректификационная колонна производился путем разрыва обратной связи методом последовательных итераций.

Значения коэффициентов в уравнении Антуана для компонентов А, В, С, Р приведены в табл. 1.

Таблица 1 - Значения коэффициентов, входящих в уравнение Антуана

Значения коэффициентов			
Компоненты	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>
А	6,912	1214,64	221,20
В	6,953	1343,94	219,38
С	6,957	1424,26	213,21
Р	6,951	1540,17	205,10

Численные расчеты стационарных состояний системы были произведены для двух режимов.

Режим АВС: Для существования режима с полным использованием исходных и промежуточных реагентов удовлетворялись следующие условия:

1) концентрации исходных реагентов А и В в питании подаются в стехиометрическом соотношении: $x_1^{(0)} = x_2^{(0)} = 0,5$;

2) при расчетах величина рецикла ($R=1$ моль/с.) принималась большей, чем минимальная $R_{\min 1}=0,85$ [5].

Результаты расчетов представлены в табл. 2, зависимость значений концентраций в реакторе от начального приближения показана на рис. 2.

Таблица 2 - Результаты расчетов системы «реактор–колонна ректификации» (режим АВС)

№ ва р и а н т а	Чис ло и те ра ций	На- чаль ное при бли же ние	Кон- ц-я в ис- ход ном сы- рье	Конц- я комп- в в реак- торе	Конц-я комп-в в ре- цикле	Конц-я комп-в в кубе
1	49	0,25 0,25 0,25 0,25	0,5 0,5 0,0 0,0	0,144 0,144 0,416 0,295	0,193 0,193 0,610 0,003	$0,4 \cdot 10^{-9}$ $0,4 \cdot 10^{-5}$ $0,1 \cdot 10^{-2}$ 0,998
2	45	0,7 0,3 0,0 0,0	0,5 0,5 0,0 0,0	0,198 0,108 0,423 0,270	0,250 0,115 0,602 0,001	$0,6 \cdot 10^{-8}$ $0,8 \cdot 10^{-6}$ $0,1 \cdot 10^{-2}$ 0,999

3	45	0,3 0,7 0,0 0,0	0,5 0,5 0,0 0,0	0,107 0,198 0,422 0,273	0,145 0,251 0,602 0,001	$0,3 \cdot 10^{-9}$ $0,7 \cdot 10^{-5}$ $0,1 \cdot 10^{-2}$ 0,999
4	47	0,7 0,1 0,1 0,2	0,5 0,5 0,0 0,0	0,200 0,100 0,421 0,278	0,254 0,144 0,601 0,002	$0,6 \cdot 10^{-9}$ $0,5 \cdot 10^{-5}$ $0,1 \cdot 10^{-2}$ 0,999
5	47	0,1 0,7 0,1 0,2	0,5 0,5 0,0 0,0	0,101 0,200 0,420 0,278	0,144 0,252 0,601 0,002	$0,6 \cdot 10^{-9}$ $0,5 \cdot 10^{-5}$ $0,1 \cdot 10^{-2}$ 0,999

Из таблицы 2 видно, что интервал возможных стационарных значений концентраций x_1 , x_2 на этом режиме (0,1;0,2).

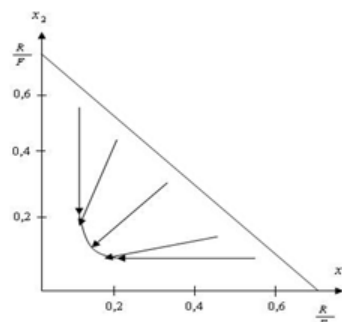


Рис. 2 - Зависимость расчетных концентраций на выходе реактора от начального приближения ($R=1$ моль/с., $x_1^{(0)}=x_2^{(0)}$)

Режим АВ: Минимальное значение рецикла, при котором существует режим с полным использованием исходных реагентов А и В, $R_{\min 2}=0,16$, при расчетах полагалось $R=0,2$.

Результаты расчетов представлены в табл. 3, зависимость конечных значений концентраций в реакторе от начальных приближений показана на рис. 3.

Таблица 3 - Результаты расчетов системы «реактор – колонна ректификации» (режим АВ)

№ ва р и а н т а	Чис ло и те ра ций	На- чаль ное при бли же ние	Кон- цен- ция в ис- ход ном сы- рье	Кон- цен-я ком- понен тов в реак- торе	Концен- трация компо- нентов в рецикле	Концен- трация компо- нентов в кубе
1	2	3	4	5	6	7
1	40	0,5 0,5 0,0 0,0	0,5 0,5 0,0 0,0	0,142 0,140 0,269 0,448	0,427 0,421 0,152 $3 \cdot 10^{-6}$	$0,6 \cdot 10^{-8}$ $0,9 \cdot 10^{-4}$ 0,328 0,672
2	33	0,7 0,3 0,0 0,0	0,5 0,5 0,0 0,0	0,218 0,092 0,353 0,431	0,654 0,275 0,071 $2,8 \cdot 10^{-6}$	$0,1 \cdot 10^{-7}$ $0,8 \cdot 10^{-4}$ 0,353 0,647
3	33	0,3 0,7 0,0 0,0	0,5 0,5 0,0 0,0	0,094 0,214 0,260 0,433	0,281 0,641 0,079 $2,3 \cdot 10^{-6}$	$0,5 \cdot 10^{-8}$ $0,2 \cdot 10^{-3}$ 0,350 0,649

Окончание табл. 3

1	2	3	4	5	6	7
4	37	0,1	0,5	0,081	0,243	$0,8 \cdot 10^{-8}$
		0,7	0,5	0,247	0,741	$0,8 \cdot 10^{-3}$
		0,1	0,0	0,252	0,017	0,369
		0,2	0,0	0,420	$1,3 \cdot 10^{-6}$	0,630
5	37	0,7	0,5	0,247	0,769	$0,8 \cdot 10^{-8}$
		0,1	0,5	0,080	0,228	$0,8 \cdot 10^{-3}$
		0,1	0,0	0,252	0,003	0,370
		0,2	0,0	0,420	$7 \cdot 10^{-7}$	0,629
6	35	0,9	0,5	0,246	0,738	$0,1 \cdot 10^{-8}$
		0,1	0,5	0,080	0,243	$0,5 \cdot 10^{-3}$
		0,0	0,0	0,252	0,019	0,368
		0,0	0,0	0,421	$1,4 \cdot 10^{-6}$	0,631
7	35	0,1	0,5	0,081	0,244	$0,8 \cdot 10^{-8}$
		0,9	0,5	0,246	0,737	$0,7 \cdot 10^{-3}$
		0,0	0,0	0,252	0,019	0,369
		0,0	0,0	0,420	$1,4 \cdot 10^{-6}$	0,630

Из таблицы 3 видно, что интервал возможных стационарных значений концентраций x_1 , x_2 на этом режиме (0,08;0,246).

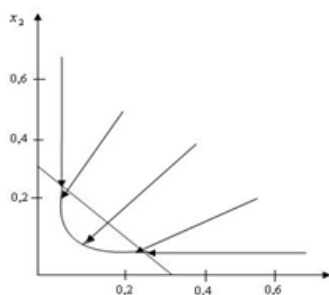


Рис. 3 - Зависимость расчетных концентраций на выходе реактора от начального приближения ($R=0,2$ моль/с., $x_1^{(0)}=x_2^{(0)}$)

Заключение

Таким образом, численными расчетами показано, что для реакции $A + B \leftrightarrow C \rightarrow P$, проводимой в реакторе идеального смешения в рециркуляционной системе реактор-колонна ректификации на режимах с полным использованием исходных реагентов, существует континуум (бесконечное множество) стационарных состояний и при конечной разделительной способности блока разделения.

Это проявляется, как зависимость расчетных значений концентраций x_1 , x_2 в реакторе от начальных значений итерационной процедуры.

Литература

1. Кафаров, В.В. Принципы создания безотходных химических производств / В. В. Кафаров // М.: Химия – 1982 – 288с.
2. Дуев, С.И. Исследование режима с полным использованием исходных реагентов в рециркуляционной системе реактор-блок разделения / С.И. Дуев // Вестник Казан. технол. ун-та. 2010 – №10.
3. 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.
4. Boyarinov A.I., Duev S.I. Phenomenon of the existence of continuum of steady states in the recycle system: reactor – separation unit. Proc. Int. Conf. FOCAPO, Coral-springs, USA, 2003 – P.407-500.
5. Дуев, С.И. Расчет режимов с полным использованием исходных реагентов в рециркуляционной системе «реактор-блок разделения»// С.И. Дуев // Вестник Казан. технол. ун-та. 2013 – Т. 16. №10.

© С. И. Дуев - д.т.н., проф. каф. информатики и прикладной математики КНИТУ, douev@mail.ru; С. М. Чернявский - д.т.н., проф. каф. математики КНИТУ-КАИ.

© S. I. Duev - doctor., professor of department of applied mathematics, KNRTU, douev@mail.ru; S. M. Chernavskii - doctor., professor of department of mathematics, KNRTU-KAI.