

Введение При создании химических производства 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 здесь, G - количество смеси, поступающими в систему в единицу времени, F - количество смеси поступающей в реактор в единицу времени, x - вектор концентрации 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, абсорбация, экстракция и т.п. его функционирования 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. Типичными примерами данной рециркуляционной системы являются химико-технологические системы синтеза аммиака, синтезов этилового спирта из оксида углерода и водорода, этилового спирта, каталитической гидратации этилена в паровой фазе, производства ацетальдегида, гидратация ацетилен в жидкой фазе и другие. Математическое моделирование реактора идеального вытеснения с рециклом Пусть в изотермическом реакторе идеального вытеснения функционирующем в рециркуляционной системе протекает обратимая реакция второго порядка $A + B \rightleftharpoons C + D$. Математическая модель реактора в стационарном состоянии может быть представлена следующей системой дифференциальных уравнений: (1) где S - площадь поперечного сечения реактора, C_A, C_B, C_C, C_D - концентрации реагентов A, B, C и D в реакторе. l - текущая длина реактора, k_1, k_2 - функции, определяющие скорости прямой и обратной стадий реакции. Для простоты анализа будем полагать, что, $k_1 = k_1^0 \exp(-E_1/RT)$, $k_2 = k_2^0 \exp(-E_2/RT)$, где k_1^0, k_2^0 - константы скоростей для прямой и обратной стадии реакции. Заметим, что для случая более сложной зависимости функции и качественные результаты будут такими же. Граничные условия для реактора, функционирующего в рециркуляционной системе запишутся следующим образом: (2) где C_{A0}, C_{B0} - концентрация реагентов на входе в систему и в рецикле. Предположим, что

системы разделения обладает достаточно высокой разделительной способностью для полного отделения непрореагировавших реагентов А и В от конечных продуктов реакции. Рассмотрим режим, при котором в рецикле присутствуют три компонента реакции А, В и С. Причем, непрореагировавшие в реакторе исходные реагенты А и В полностью рециркулируют в реактор после стадии отделения их от конечных продуктов реакции, а один из конечных продуктов реакции С является распределяющимся, т.е. присутствует и в рецикле и на выходе системы. Полагая, что концентрации компонентов во всех потоках измеряются в мольных долях для режима с полным использованием исходных реагентов А и В можно записать: (3) Тогда на режиме с полным использованием исходных реагентов А и В математическая модель реактора (1) и граничные условия (2) запишутся так: (4) (5) Для функционирования этого режима необходимо, чтобы исходные реагенты А и В подавались в систему в стехиометрическом соотношении, т.е. . [4] Поскольку первые два уравнения системы (4) и соответствующие или граничные условия (5) совпадают, то краевая задача (4), (5) будет иметь бесконечное множество (континуум) решений. Поэтому, на рассматриваемом режиме будет существовать семейство стационарных состояний, в котором концентрации реагентов А и В будут принимать континуум стационарных значений. Результаты расчета краевой задачи (4), (5) представлены на рис.2., где представлен вид семейства стационарных состояний на выходе реактора в проекции на плоскость Рис. 2 - Вид семейства стационарных состояний (кривая ab) на выходе реактора на плоскости Стационарные концентрации исходных реагентов А и В на выходе реактора могут приносить значения в интервале. Границы интервала возможных стационарных значений концентрации определяется из условия существования режима с полным использованием исходных реагентов А и В [5] (6) Максимальные значения концентрации целевого продукта достигается при равенстве концентрации . Как доказано в работе [7] это семейство стационарных состояний может в лучшем случае находиться на границе области устойчивости. Минимальная величина рецикла, при которой возможен режим с полным использованием исходных реагентов определяется при условии отсутствия конечных продуктов А и В в рецикле [6] (7) Так как $F = R + G$, то из равенства (7) можно получить выражение для определения минимальной величины рецикла: (8) В случае, если на режиме существует семейство стационарных состояний и концентрации могут принимать различные значения в интервале необходимо решить задачу минимизации (9) Здесь варьируемыми переменными являются концентрации исходных реагентов А и В. Задача минимизации выражения (9) должны решаться с учетом системы уравнений для определения концентраций (4),(5). Для данной реакции она определится при равенстве концентраций и равна: (10) Заключение Таким образом, доказано существование континуума стационарных состояний на режиме с полным

использованием исходных реагентов А и В, для реакции $A + B \leftrightarrow C + D$, проводимой в реакторе идеального вытеснения. Этот континуум стационарных состояний может быть устойчивым только на границе области устойчивости, поэтому для реализации рассматриваемого режима необходима система автоматического регулирования.