

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.[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).

2. Математическое моделирование режимов функционирования реактора идеального смешения с рециклом. Пусть в политропическом реакторе идеального смешения, функционирующем в рециркуляционной системе реактор-блок разделения протекает последовательная реакция Математическая модель политропического реактора идеального смешения в стационарном состоянии в рециркуляционной системе может быть представлена следующей системой уравнений. (1) где – концентрации реагентов A , B , C и P соответственно, – скорости элементарных стадий реакции, – тепловые эффекты элементарных стадий реакции. Полагаем, что концентрации измеряются в мольных долях, тогда концентрацию конечного продукта P можно определить следующим образом: (2) На режиме с полным использованием исходных и промежуточных реагентов A , B и C должны выполняться следующие условия [5]: (3) где Для организации этого режима необходимо также, чтобы исходные реагенты A и B подавались в систему в стехиометрическом соотношении [5]: Тогда система уравнений (1) на рассматриваемом режиме запишется так: (4) Пусть скорости элементарных стадий реакции имеют следующий вид: где – константы скоростей элементарных стадий реакции, определяющиеся по формуле Аррениуса: (5) Тогда, концентрация промежуточного продукта C определяется так: (6) Для определения концентраций исходных реагентов A и B имеется только одно уравнение, которое можно записать как: (7) Здесь концентрация реагента имеет роль параметра, который может принимать любые значения в пределах интервала стационарных значений, границы которого определяются из условия существования режима с полным использованием исходных и промежуточных реагентов [5]: (8) При равенстве соотношения (8) с учетом формул (6) и (7) определяем минимальные и максимальные значения стационарных значений концентраций a следовательно, и (9) (10) Вид континуума стационарных

состояний (кривая ab) представлен на рис.2а. При этом стационарное значение температуры на режиме определяется однозначно из уравнения теплового баланса: (11) Минимальная величина рецикла, при которой возможен рассматриваемый режим определяется при равенстве стационарных значений концентраций А и В (12) из условия (8): (13) Рассматривается реакция интересна еще и тем, что континуум стационарных состояний существует также и на режиме с полным использованием только исходных реагентов А и В, когда промежуточный продукт реакции С присутствует как в рецикле, так и на выходе системы. В этом случае концентрацию промежуточного продукта С в рецикле можно определить так: (14) и следовательно, уравнение материального баланса реактора на этом режиме запишутся так: (15) Отсюда можно выразить концентрации и через концентрацию-параметр (16) (17) Так как концентрация может принимать любые значения, ограниченные условием существования этого режима: , (18) то на этом режиме также существует континуум стационарных состояний, в котором не только концентрации и но и концентрация промежуточного продукта может принимать любые стационарные значения из интервалов, ограниченных условием существования режима (18). Границы интервала стационарных значений для концентраций и определяются из решения системы уравнений (16), (17) и следующего уравнения: (19) Вид континуума стационарных состояний на плоскости представлен на рис.2б. Минимальная величина рецикла на этом режиме определяется при равенстве концентраций из равенства (19). При расчетах показано, что Рис. 2а - Вид континуума стационарных состояний (кривая ab) на плоскости при Рис. 2б - Вид континуума стационарных состояний (кривая) на плоскости при Заключение Таким образом, показано, что для реакции проводимой в реакторе идеального смешения в рециркуляционной системе реактор-блок разделения на режимах с полным использованием исходных реагентов существует континуум (бесконечное множество) стационарных состояний. Причем в зависимости от величины рецикла в системе может существовать одномерный континуум (кривая на плоскости) на режиме с полным использованием исходных и промежуточных реагентов А, В и С и двухмерный континуум (поверхность в пространстве) на режиме с полным использованием только исходных реагентов А и В.