УДК 66.10 – 503.4.001.57

С. И. Дуев

РАСЧЕТ СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ РЕАКТОРА 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 $A + B \leftrightarrow C + D$, протекающей в реакторе идеального вытеснения в системе реактор - блок разделения. Показано, что на режиме с полным использованием исходных расчетов A и B существует континуум стационарных состояний. Определена минимальная величина режима, при которой возможен режим с полным использованием исходных реагентов A и B.

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

The recycle system reactor – separation unit is considered. Analysis of the steady states for the reaction $A + B \leftrightarrow C + D$ takes place in the tubular reactor is done. It is proved that a continuum of the steady states exists on the regime with the full using of basic reactions A and B. The minimum of the value of the recycle for the regime with the full using of basic reactants is defined.

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,

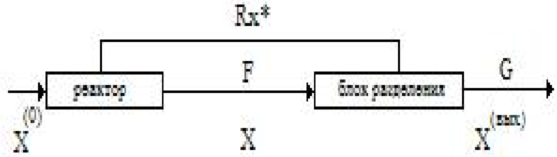

Рис. 1 - Блок-схема рециркуляционной системы реактор-блок разделения

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, экстрация 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, непрорегировавшие 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 ацетилена 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 $A + B \leftrightarrow C + D$.

Математическая модель реактора в стационарном состоянии может быть представлена следующей системой дифференциальных уравнений:

$$\frac{F}{S}\frac{dx_1}{dl} = -r_1(x_1, x_2) + r_2(x_3, x_4) \qquad (1)$$

$$\frac{F}{S}\frac{dx_2}{dl} = -r_1(x_1, x_2) + r_2(x_3, x_4)$$

$$\frac{F}{S}\frac{dx_3}{dl} = r_1(x_1, x_2) + r_2(x_3, x_4)$$

$$\frac{F}{S}\frac{dx_4}{dl} = r_1(x_1, x_2) + r_2(x_3, x_4)$$

где -площадь поперечного сечения реактора, x_1, x_2, x_3, x_4 – концентрации реагентов A, B, C и D в реакторе. l - текущая длина реактора, $r_1(i = 1.2)$ – функции, определяющие скорости прямой и обратной стадий реакции.

Для простоты анализа будем полагать, что $r_1 = k_1x_1x_2$, $r_2 = k_2x_3x_4$, где $x_1(i = 1.2)$ -

константы скоростей для прямой и обратной стадии реакции. Заметим, что для случая более сложной зависимости функции $r_1 = (x_1, x_2)$ и $r_2 = (x_3, x_4)$ качественные результаты будут такими же. Граничные условия для реактора, функционирующего в рециркуляционной системе запишутся следующим образом:

$$Fx_1(0) = Gx_1^{(0)} + Rx_1^* \tag{2}$$
$$Fx_2(0) = Gx_2^{(0)} + Rx_2^*$$
$$Fx_3(0) = Gx_3^{(0)} + Rx_3^*$$
$$Fx_4(0) = Gx_4^{(0)} + Rx_4^*$$

где $x_i^{(0)}, x_i^* (i = 1.4)$ - концентрация реагентов на входе в систему и в рецикле.

Предположим, что системы разделения обладает достаточно высокой разделительной способностью для полного отделения непрореагировавших реагентов A и B от конечных продуктов реакции.

Рассмотрим режим, при котором в рецикле присутствуют три компонента реакции A, B и C. Причем, непрореагировавшие в реакторе исходные расчеты A и B полностью рециркулируют в реактор после стадии отделения их от конечных продуктов реакции, а один из конечных продуктов реакции C 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 A и B можно записать:

$$Rx_1^* = Fx_1(L) \tag{3}$$
$$Rx_2^* = Fx_2(L)$$
$$Rx_3^* = R(1 - x_1^* - x_2^*)$$
$$Rx_4^* = 0$$

Тогда на режиме с полным использованием исходных реагентов A и B математическая модель реактора (1) и граничные условия (2) запишутся так:

$$\frac{F}{S}\frac{dx_1}{dl} = -k_1x_1x_2 + k_2x_3x_4 \tag{4}$$
$$\frac{F}{S}\frac{dx_2}{dl} = -k_1x_1x_2 + k_2x_3x_4$$
$$\frac{F}{S}\frac{dx_3}{dl} = k_1x_1x_2 - k_2x_3x_4$$

$$x_1(0) = \frac{G}{F}x_1^{(0)} + x_1(L) \tag{5}$$
$$x_2(0) = \frac{G}{F}x_2^{(0)} + x_2(L)$$
$$x_3(0) = \frac{G}{F}x_3^{(0)} + (R - x_1(L) - x_2(L))/F$$
$$x_4 = 1 - x_1 - x_2 - x_3$$

Для функционирования этого режима необходимо, чтобы исходные реагенты A и B подавались в систему в стехиометрическом соотношении, т.е. $x_1^{(0)} = x_2^{(0)}$. [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 A и B 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 x_1x_2

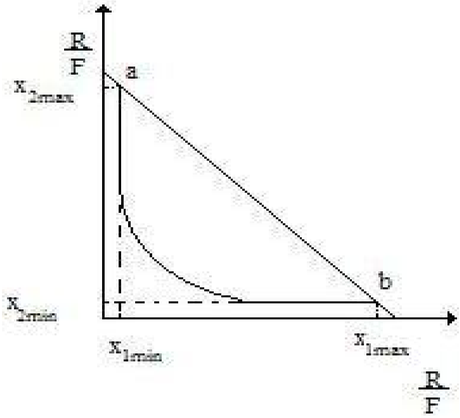

Рис. 2 - Вид семейства стационарных состояний (кривая ab) на выходе реактора на плоскости x_1x_2

Стационарные концентрации исходных реагентов A и B на выходе реактора могут приносить значения в интервале $x_{imin} \le x_i \le x_{imax}, i = 1.2$. Границы интервала возможных стационарных значений концентрации $x_i - x_{imin}, x_{imax}, i = 1.2$ определяется из условия существования режима с полным использованием исходных реагентов A и B [5]

$$x_1 + x_2 \le \frac{R}{R+G} \tag{6}$$

Максимальные значения концентрации целевого продукта $D - x_4$ достигается при равенстве концентрации A и $B: x_1 = x_2$. 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 A и B в рецикле [6]

$$F(x_1 + x_2) = R \tag{7}$$

Так как F = R + G, то из равенства (7) можно получить выражение для определения минимальной величины рецикла:

$$R_{min} = \frac{G(x_1 + x_2)}{1 - x_1 - x_2} \tag{8}$$

В случае, если на режиме существует семейство стационарных состояний и концентрации $x_i, i=1.2$ могут принимать различные значения в интервале $x_{imin} \le x_i \le x_{imax}, i=1.2$ необходимо решить задачу минимизации

$$R_{min} = \frac{\min}{x_1 x_2} \frac{G(x_1 + x_2)}{1 - x_1 - x_2} \qquad (9)$$

Здесь варьируемыми переменными являются концентрации исходных реагентов A и B. Задача минимизации выражения (9) должны решаться с учетом системы уравнений для определения концентраций (4),(5). Для данной реакции она определится при равенстве концентраций $x_1 = x_2$ и равна:

$$R_{min} = \frac{2Gx_1}{1 - 2x_1} \qquad (10)$$

Заключение

Таким образом, доказано существование континуума стационарных состояний на режиме с полным использованием исходных реагентов A и B, для реакции A + B ↔ 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.

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. Суркова, А.В. Аспекты экологических проблем хромового дубления / А.В.Суркова, И.Ш.Абдуллин,Б.Л.Журавлев, Ю.С.Парсанов // Вестник Казан. технол. ун-та.-2009 - №6-С.91-94.
4. 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
5. Дуев, С.И Исследование режимов с полным использованием исходных и промежуточных реагентов в системе реактор-узел разделения / С.И.Дуев, А.И.Бояринцев, В.В. Кафаров // Системный анализ процессов химической технологии – М.,МХТИ-1979.- Вып.106.
6. 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.

© **С. И. Дуев** – д-р тхн. наук, проф., каф. информатики и прикладной математики КНИТУ, douev@mail.ru.