

С. И. Дуев

## О СУЩЕСТВОВАНИИ ОПТИМАЛЬНОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ РЕЦИКЛА НА РЕЖИМЕ С ПОЛНЫМ ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИСХОДНЫХ РЕАГЕНТОВ В РЕЦИРКУЛЯЦИОННОЙ СИСТЕМЕ «РЕАКТОР-БЛОК РАЗДЕЛЕНИЯ»

*Ключевые слова:* реактор с рециклом, множественность стационарных состояний, устойчивость реактора с рециклом.

*Рассматривается рециркуляционная система: реактор идеального смешения – блок разделения. В адиабатическом реакторе идеального смешения протекает параллельная реакция второго порядка  $A+B \rightarrow P$ ,  $A+B \leftrightarrow C$ . Показано, что на режиме с полным использованием реагентов  $A$  и  $B$  может существовать бесконечное множество (континуум) стационарных значений концентраций реагентов и температуры в реакторе. Найдено оптимальное значение температуры рецикла при которой достигается максимальное значение концентрации целевого продукта  $C$ .*

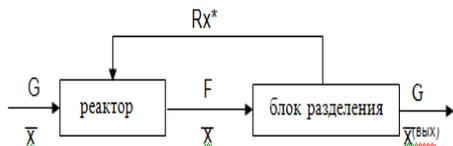
*Key words:* reactor with recycle, multiplicity of steady states, stability of reactor with recycle.

*The recycle system reactor - separation unit is considered. Reaction  $A+B \rightarrow P$ ,  $A+B \leftrightarrow C$  takes place in the continuous stirred tank reactor. The existence of continuums of steady states at the regimes with a full using of basic reactants  $A$  and  $B$  is shown. Optimal value of a temperature of the recycle is found. Maximum value of the concentration of a final product  $C$  is defined.*

### Введение

Одним из эффективных путей решения проблемы сведения к минимуму отходов производства, в частности непрореагировавших исходных и промежуточных продуктов реакции, является использование рециркуляции [1]. При функционировании рециркуляционной системы реактор - блок разделения большой интерес вызывает режим, при котором достигается полное использование исходных реагентов.

Однако, как показано в работах [2-6] на этом режиме возможно существование континуума стационарных состояний, что обуславливает нестабильность этого режима при его функционировании. Покажем, что это явление характерно для реакции  $A+B \rightarrow P$ ,  $A+B \leftrightarrow C$ , проводимой в адиабатическом реакторе идеального смешения в рециркуляционной системе реактор-блок разделения. Типичная структура 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).

1. Математическое моделирование реактора идеального смешения в

рециркуляционной системе реактор-блок разделения.

Предположим, что в адиабатическом реакторе идеального смешения протекает параллельная реакция  $A+B \rightarrow P$ ,  $A+B \leftrightarrow C$ . Математическую модель реактора стационарном состоянии можно записать так:

$$Gx_1^{(0)} - Vr_1 - Vr_2 - Vr_3 - Fx_1 + Rx_1^* = 0 \quad (1)$$

$$Gx_2^{(0)} - Vr_1 - Vr_2 + Vr_3 - Fx_2 + Rx_2^* = 0$$

$$Vr_2 - Vr_3 - Fx_3 + Rx_3^* = 0$$

$$C_p \rho (GT^{(0)} + RT^* - FT) + V((-\Delta H_1))r_1 + (-\Delta H_2)(r_2 - r_3) = 0$$

где  $x_1, x_2, x_3$  – концентрации реагентов  $A, B, C$  соответственно,  $r_i$  ( $i=1, 2, 3$ ) – скорости элементарных стадий реакции,  $-\Delta H_i$  ( $i=1, 2$ ) – тепловой эффект стадии реакции,  $C_p$  – удельная теплоёмкость,  $\rho$  – плотность смеси  $T^{(0)}$  – температура смеси на входе в систему,  $T^*$  – температура смеси в рецикле

Для простоты анализа полагаем, что концентрация компонентов во всех потоках измеряются в мольных долях и в реакторе отсутствуют инертные компоненты. Тогда концентрацию конечного продукта  $P$  –  $x_4$  в реакторе можно определить так:

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

Рассмотрим режим, с полным использованием исходных реагентов  $A$  и  $B$ .

Пусть скорости элементарных стадий реакции выражаются следующими зависимостями:

$$r_1 = k_1 x_1 x_2, \quad r_2 = k_2 x_1 x_2, \quad r_3 = k_3 x_3.$$

Предположим, что в силу неидеальности

разделения в рецикле также может присутствовать один из конечных продуктов реакции С. Тогда его концентрацию в рецикле можно найти следующим образом:

$$x_3^* = 1 - x_1^* - x_2^* \quad (3)$$

С учётом того, что на этом режиме для концентраций исходных реагентов А и В должно выполняться условие [6]:

$$F x_i^* = R x_i^*, i=1,2 \quad (4)$$

математическая модель режима с полным использованием исходных реагентов А и В запишется так:

$$G x_1^{(0)} - V k_1 x_1 x_2 - V k_2 x_1 x_2 + V k_3 x_3 = 0$$

$$G x_2^{(0)} - V k_1 x_1 x_2 - V k_2 x_1 x_2 + V k_3 x_3 = 0 \quad (5)$$

$$V k_2 x_1 x_2 - V k_3 x_3 - F x_3 + R x_3^* = 0$$

$$c_p \rho (G T^{(0)} + R T^* - F T) + V ((-\Delta H_1) k_1 x_1 x_2 + (-\Delta H_2) (k_2 x_1 x_2 - k_3 x_3)) = 0$$

Учитывая, что исходные реагенты А и В полностью рециркулируют в реактор и выполняется равенство (4), концентрацию реагента С в рецикле находим так

$$x_3^* = 1 - (F/R)(x_1 + x_2) \quad (6)$$

Тогда концентрацию реагента С можно выразить через концентрации реагентов А и В

$$x_3 = \frac{V k_2 x_1 x_2 + R - F(x_1 + x_2)}{F + V k_3} \quad (7)$$

Концентрацию реагента А -  $x_1$  можно представить через концентрацию реагента В -  $x_2$ :

$$x_1 = \frac{(G/(2V))(F + V k_3) + R k_3 - k_3 F x_2}{(F + V k_3)(k_1 + k_2) x_2 + F k_3 - 2 k_2 k_3 x_2} = \varphi(x_2) \quad (8)$$

Тогда концентрация  $x_3$  может быть выражена только через концентрацию  $x_2$ , т.е.  $x_3 = f(x_2)$ , где  $f$  - функция, которая получается в результате подстановки  $x_1$ , согласно формулы(8), в (7).

Подставляя  $x_1$  и  $x_3$  в уравнение теплового баланса системы (5), получим следующее уравнение для определения температуры в реакторе:

$$c_p \rho (G T^{(0)} + R T^* - F T) + (G/2)(-\Delta H_2) + ((-\Delta H_1) - (-\Delta H_2)) k_1 \varphi(x_2) x_2 = 0 \quad (9)$$

Таким образом, для четырех неизвестных: концентрации реагентов  $x_1, x_2, x_3$  и температуры в реакторе имеется только три соотношения (7), (8), (9) в которых концентрация реагента В -  $x_2$  можно рассматривать как параметр, который может принимать любые значения, удовлетворяющие условию существования режима с полным использованием исходных реагентов:

$$x_1 + x_2 \leq \frac{R}{F} \quad (10)$$

Следовательно на рассматриваемом режиме существует однопараметрическое семейство (континуум) стационарных состояний, в котором концентрации реагентов А, В, С и температура в реакторе могут принимать любые значения в пределах ограничений условием (10):  $[x_{i\min} \leq x_i \leq x_{i\max}], i=1, 2, [T_{\min} \leq T \leq T_{\max}]$ .

Вид континуума стационарных состояний на плоскости  $x_1, x_2$  и  $T, x_2$  представлен на рис.2 и рис.3.

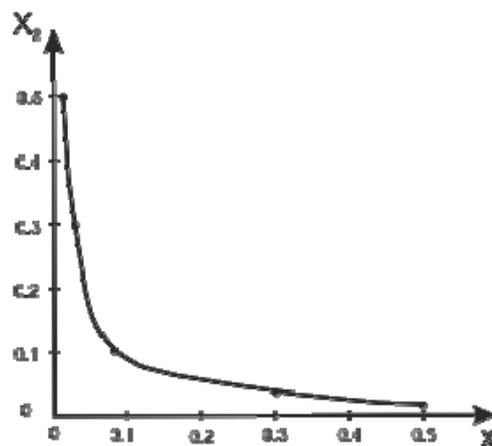


Рис. 2 - Вид континуума стационарных состояний на плоскости  $x_1, x_2$

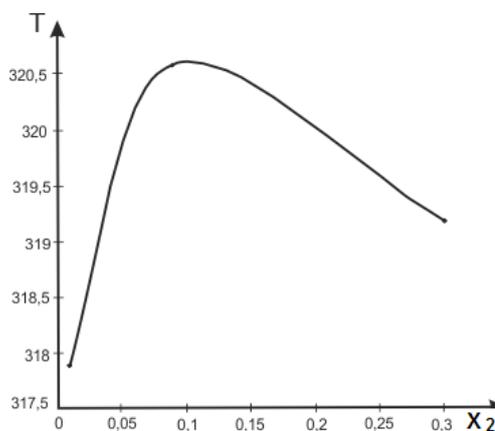


Рис. 3 - Вид континуума стационарных состояний на плоскости  $T, x_2$

Численные расчеты так же показывают, что на этом режиме существует оптимальная температура рецикла, при котором достигается максимальное значение концентрации конечного продукта С.

В рассмотренном случае оптимальная величина температуры рецикла равна  $T^* = 310^0 K$ , при которой стационарное значение концентрации конечного продукта  $x_3$  принимает максимальное значение  $x_{3\max} = 0,34$  моль/моль .

Вид зависимости концентрации конечного продукта С от температуры рецикла представлен на рис.4.

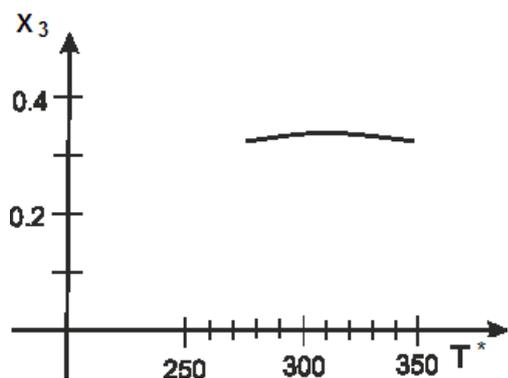


Рис. 4 - Вид зависимости концентрации конечного продукта С от температуры рецикла

### Заключение

Таким образом, показано, что для реакции  $A+B \rightarrow C$ ,  $A+B \leftrightarrow C$  проводимой в рециркуляционной системе: реактор идеального смешения – блок разделения в режиме с полным использованием исходных реагентов А и В существует континуум стационарных состояний, в котором концентрации реагентов и температура в реакторе принимают бесконечное число стационарных значений в интервалах  $[X_{i\min}, X_{i\max}]$ ,  $i = 1, 2, 3, 4$ ,  $[T_{\min}, T_{\max}]$ .

На рассматриваемом режиме, также существует оптимальная температура рецикла, при которой достигается максимальное значение концентрации конечного продукта С.

### 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 КГТУ, 2010 – №10.
3. Дуев, С.И. Расчет стационарных состояний реактора в рециркуляционной системе реактор – блок разделения / Дуев, С.И. // Вестник КГТУ, 2012 – №16 - С.151-153.
4. Duev, S.I. Dinamic behaviour of the recycle system reactor-distillation column / S.I. Duev, A.I. Boyarinov // Proc.Int.conf. Distillation and absorpion. Baden-Baden. Germany – 2002.
5. Duev, S.I. Study of an influence of the parameters on multiplicity of steady stats the recycle system: reactor-separating unit / S.I. Duev, A.I. Boyarinov // Proc.Int.conf. ESCAPE-15. Barselona. Spain – 2005.
6. 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.