

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. Блок-схема рециркуляционной системы реактор-блок разделения представлена на рис. 1, Рис. 1 - Блок-схема рециркуляционной системы реактор-блок разделения На рис. 1: G - количество смеси, поступающей в систему в единицу времени, F - количество смеси поступающей 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). Предполагается, что блок разделения в общем случае может включать любые процессы разделения, такие как ректификация, абсорбции, экстракция и т.п. его функционирование 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. Математическое моделирование адиабатического реактора в рециркуляционной системе «реактор-блок разделения» Пусть в изотермическом реакторе идеального вытеснения функционирующем в рециркуляционной системе протекает реакция второго порядка $A + B \rightarrow 2C$. Математическая модель этого реактора в стационарном состоянии может быть записана в следующем виде: (1) $S \frac{dx}{dl} = -r$ где x_1, x_2, x_3 - концентрации реагентов A, B, C в реакторе. l - текущая длина реактора, r - функция, определяющая скорость реакции, S - площадь поперечного сечения реактора, ρ - плотность смеси, C_p - удельная теплоемкость, Q - тепловой эффект реакции. Для простоты анализа предположим, что, где k - константа скорости реакции (заметим, что для случая более сложной зависимости качественные свойства сохраняются. Граничные условия для реактора, функционирующего в рециркуляционной системе на режиме с полным использованием исходных реагентов A и B [4] запишутся следующим образом: (2) Для нахождения стационарного значения температуры на выходе реактора сложим первые два уравнения системы (1), умноженные на Q с третьим уравнением и проинтегрируем полученное соотношение от 0 до L . Получим: (3) $Q(T - T^*) = \rho C_p (T - T_0) + \Delta H x_3$ где T^* - температура в рецикле - постоянная величина. Решение первых двух

уравнений системы (1) имеет вид [4]: (4) Здесь: (5) где E = энергия активации, R_g – газовая постоянная, A - предэкспоненциальный множитель. Подставив решение (4) в граничные условия (2), соответствующие режиму с полным использованием реагентов A и B , получим систему уравнений для нахождения произвольных постоянных c_1 и c_2 : (6) Отсюда находим выражение c_2 через c_1 : (7) Подставив найденное значение c_2 в (4) можно определить стационарное значение концентраций x_1 и x_2 на выходе реактора так: (8) $x_2(L) = x_1(L) - c$ Так, как произвольный параметр c_1 может принимать любые значения, то концентрации исходных реагентов A и B могут принимать континуум стационарных значений, ограниченный условием существования режима с полным использованием исходных реагентов[5]: (9) Из физических соображений в качестве решения берем только положительные значения x_1 и x_2 . Вид континуума стационарных состояний (кривая ab) на плоскости x_1x_2 представлен на рис. 2. Рис. 2 - Вид континуума стационарных состояний (кривая ab) на выходе реактора на плоскости Согласно условию существования режима (9), кривая стационарных состояний ограничена в точках «а» и «в» прямой линией, уравнение которой есть граница режима. Концентрация конечного продукта $C - x_3$ на выходе реактора достигает максимального значения при минимуме суммы концентраций $s=(x_1+x_2)$. Минимум суммы s достигается при равенстве концентрации $x_1=x_2$. В этом случае концентрации реагентов A и B на выходе реактора определяются так (с учетом того, что объем реактора $V=SL$, и $x_1(0)=0.5$). (10) Тогда максимум концентрации конечного продукта $C - x_3$ на выходе реактора определяется (в предположении что концентрации измеряются в мольных долях) так: (11) где константа скорости k определяется по формуле Аррениуса (5), при $T = T(L)$. При этих значениях концентраций, определяется минимальное значение рецикла на режиме: (12) Заключение Определив максимум концентрации конечного продукта, находим максимум производительности реактора по конечному продукту C : $\Phi = Fx_{3\max}$ (13) Так как континуум стационарных состояний в лучшем случае может находиться лишь на границе области устойчивости, то для поддержания функционирования системы в оптимальной точке необходима система автоматического регулирования.