

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 $A + B \rightarrow C$, 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 $A + B \rightarrow C$. Математическую модель реактора стационарном состоянии можно записать так: (1) где A, B, C соответственно, - концентрации реагентов А, В, С соответственно, k_1, k_2 - скорости элементарных стадий реакции, Q - тепловой эффект стадии реакции, ρ - удельная теплоёмкость, ρ_0 - плотность смеси - 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 - в реакторе можно определить так: (2) Рассмотрим режим, с полным использованием исходных реагентов А и В. Пусть скорости элементарных стадий реакции выражаются следующими зависимостями: $k_1 = k_1^0 \exp(-E_1/RT)$, $k_2 = k_2^0 \exp(-E_2/RT)$. 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: (3) С учётом того, что на этом режиме для концентраций исходных реагентов А и В должно выполняется условие [6]: $x_i = 0, i=1,2$ (4) математическая модель режима с полным использованием исходных реагентов А и В запишется так: $x_A + x_B = 0$ $x_A + x_B = 0$ (5) $x_A + x_B = 0$ Учитывая, что исходные реагенты А и В полностью рециркулируют в реактор и выполняется равенство (4), концентрацию реагента С в рецикле находим так (6) Тогда концентрацию реагента С можно выразить через концентрации реагентов А и В (7) Концентрацию реагента А - можно представить через концентрацию реагента В - : (8) Тогда концентрация может быть выражена только через концентрацию ,

т.е. , где - функция, которая получается в результате подстановки , согласно формулы(8), в (7). Подставляя и в уравнение теплового баланса системы (5), получим следующее уравнение для определения температуры в реакторе: (9) Таким образом, для четырех неизвестных: концентрации реагентов и температуры в реакторе имеется только три соотношения (7), (8), (9) в которых концентрация реагента - можно рассматривать как параметр, который может принимать любые значения, удовлетворяющие условию существования режима с полным использованием исходных реагентов: (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): $[]$, $[]$. Вид континуума стационарных состояний на плоскости и представлен на рис.2 и рис.3. Рис. 2 - Вид континуума стационарных состояний на плоскости Рис. 3 - Вид континуума стационарных состояний на плоскости 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 , при которой стационарное значение концентрации конечного продукта принимает максимальное значение . 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 $A+BC$, $A+BC$ 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 , , . На рассматриваемом режиме, также существует оптимальная температура рецикла, при которой достигается максимальное значение концентрации конечного продукта С.