

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 [1,2,3]. 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). В работе [5] доказано, что для реакции, проводимой в рециркуляционной системе «реактор-блок разделения» на режимах с полным использованием исходных реагентов, существует континуум стационарных состояний. Покажем, что этот факт справедлив и в случае, когда разделительная способность блока разделения конечна. В качестве блока разделения использовалась ректификационная колонна. Математическая модель реактора Пусть в реакторе идеального смешения протекает реакция Математическая модель политропического реактора идеального смешения в стационарном состоянии в рециркуляционной системе может быть представлена следующей системой уравнений. (1) где - концентрации реагентов А, В, С и Р соответственно, - скорости элементарных стадий реакции, - тепловые эффекты элементарных стадий реакции, - концентрации реагентов А, В, С и Р в рецикле, значения которых определяются в результате расчета ректификационной колонны. Полагаем, что концентрации измеряются в мольных долях, тогда концентрацию конечного продукта Р можно определить следующим образом: (2) Расчет рециркуляционной системы реактор - колонна ректификации В качестве модели ректификационной колонны использовалась модель со следующими допущениями: 1) колонна оборудована парциальными кипятильниками и полными конденсаторами; 2) ректификация ведется при атмосферном давлении в конденсаторах колонны; 3) коэффициенты активности компонентов разделяемой смеси принимались равными 1; 4) эффективность тарелок (к.п.д. Мерффри) принималась одинаковой для всех компонентов смеси и всех тарелок колонны и равной 0,5; 5) давление паров чистых компонентов зависит от температуры на тарелках и описывается уравнением Антуана: (3) 6) тепловые балансы по высоте колонны не учитываются. 7) число тарелок в верхней секции колонны-15, в нижней - 15, флегмовое число - 10. Расчет замкнутой химико-технологической системы реактор идеального смешения - ректификационная колонна производился путем разрыва обратной связи методом

последовательных итераций. Значения коэффициентов в уравнении Антуана для компонентов А, В, С, Р приведены в табл. 1. Таблица 1 - Значения коэффициентов, входящих в уравнение Антуана

Значения коэффициентов

Компоненты а b с А 6,912 1214,64 221,20 В 6,953 1343,94 219,38 С 6,957 1424,26 213,21 Р 6,951 1540,17 205,10

Численные расчеты стационарных состояний системы были произведены для двух режимов. Режим АВС: Для существования режима с полным использованием исходных и промежуточных реагентов удовлетворялись следующие условия: 1) концентрации исходных реагентов А и В в питании подаются в стехиометрическом соотношении: 2) при расчетах величина рецикла ($R=1$ моль/с.) принималась большей, чем минимальная $R_{min1}=0,85$ [5]. Результаты расчетов представлены в табл. 2, зависимость значений концентраций в реакторе от начального приближения показана на рис. 2. Таблица 2 - Результаты расчетов системы «реактор-колонна ректификации» (режим АВС)

№ варианта	Число итераций	Начальное приближение	Конц-я в исходном сырье	Конц-я комп-в в реакторе	Конц-я комп-в в рецикле	Конц-я комп-в в кубе
1	49	0,25	0,25	0,25	0,25	0,5
2	45	0,7	0,3	0,0	0,0	0,5
3	45	0,3	0,7	0,0	0,0	0,5
4	47	0,7	0,1	0,1	0,1	0,5
5	47	0,1	0,7	0,1	0,2	0,5

Из таблицы 2 видно, что интервал возможных стационарных значений концентраций x_1, x_2 на этом режиме (0,1;0,2). Рис. 2 - Зависимость расчетных концентраций на выходе реактора от начального приближения ($R=1$ моль/с., $x_1(0)=x_2(0)$)

Режим АВ: Минимальное значение рецикла, при котором существует режим с полным использованием исходных реагентов А и В, $R_{min2}=0,16$, при расчетах полагалось $R=0,2$. Результаты расчетов представлены в табл. 3, зависимость конечных значений концентраций в реакторе от начальных приближений показана на рис. 3. Таблица 3 - Результаты расчетов системы «реактор - колонна ректификации» (режим АВ)

№ варианта	Число итераций	Начальн. пригл-ие	Концен-я в исходн. сырье	Концен-я компонен тов в реакторе	Концентрация компонентов в рецикле	Концентрация компонентов в кубе
1	40	0,5	0,5	0,0	0,0	0,5
2	33	0,7	0,3	0,0	0,0	0,5
3	33	0,3	0,7	0,0	0,0	0,5
4	37	0,1	0,7	0,1	0,2	0,5
5	37	0,7	0,1	0,1	0,2	0,5
6	35	0,9	0,1	0,0	0,0	0,5
7	35	0,1	0,9	0,0	0,0	0,5

Окончание табл. 3

1	2	3	4	5	6	7	4	37	0,1	0,7	0,1	0,2	0,5	0,5	0,0	0,0	0,081	0,247	0,252	0,420	0,243	0,741	0,017	1,3	0,8	0,8	0,369	0,630	5	37	0,7	0,1	0,1	0,2	0,5	0,5	0,0	0,0	0,247	0,080	0,252	0,420	0,769	0,228	0,003	7	0,8	0,8	0,370	0,629	6	35	0,9	0,1	0,0	0,0	0,5	0,5	0,0	0,0	0,246	0,080	0,252	0,421	0,738	0,243	0,019	1,4	0,1	0,5	0,368	0,631	7	35	0,1	0,9	0,0	0,0	0,5	0,5	0,0	0,0	0,246	0,080	0,252	0,421	0,738	0,243	0,019	1,4	0,1	0,5	0,368	0,631	7	35	0,1	0,9	0,0	0,0	0,5	0,5	0,0	0,0	0,246	0,080	0,252	0,421	0,738	0,243	0,019	1,4	0,8	0,7	0,369
---	---	---	---	---	---	---	---	----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-----	-----	-----	-------	-------	---	----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	---	-----	-----	-------	-------	---	----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-----	-----	-----	-------	-------	---	----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-----	-----	-----	-------	-------	---	----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-----	-----	-----	-------

0,630 Из таблицы 3 видно, что интервал возможных стационарных значений концентраций x_1 , x_2 на этом режиме (0,08;0.246). Рис. 3 - Зависимость расчетных концентраций на выходе реактора от начального приближения ($R=0,2$ моль/с., $x_1(0)=x_2(0)$)

Заключение Таким образом, численными расчетами показано, что для реакции проводимой в реакторе идеального смешения в рециркуляционной системе реактор-колонна ректификации на режимах с полным использованием исходных реагентов, существует континуум (бесконечное множество) стационарных состояний и при конечной разделительной способности блока разделения. Это проявляется, как зависимость расчет ных значений концентраций x_1 , x_2 в реакторе от начальных значений итерационной процедуры.