

# Расчёт реактора идеального вытеснения

Практическое занятие №2

# Характеристика реактора идеального вытеснения (РИВ)

- Реактор идеального вытеснения характеризуется тем, что любой элемент объема реагирующей среды движется по высоте (длине) реактора параллельно другим элементам, не смешиваясь с предыдущими и последующими элементами объема.

# Изменение степени превращения и материальный баланс реактора РИВ

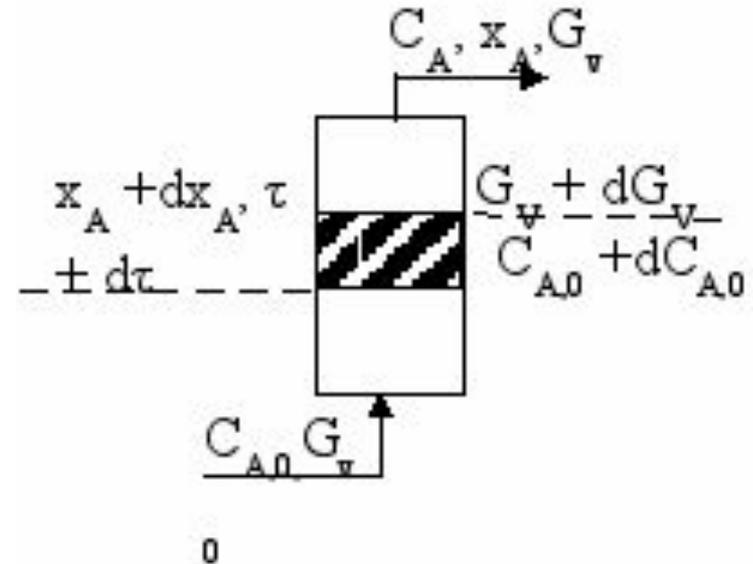
На рис. 1 схематично показано изменение степени превращения  $x_A$ , исходных концентраций  $C_A$  и других параметров в реакторе идеального вытеснения. Материальный баланс такого реактора при  $G_{нч} = 0$  запишется в виде:

$$G_{пр} = G_{yx} + G_{xp} \quad (1)$$

$$G_{np} = C_A \cdot G_v (1 - x_A) \quad (2)$$

$$G_{yx} = C_A \cdot G_v (1 - x_A - dx_A) \quad (3)$$

$$G_{xp} = \vartheta_p \cdot dV \quad (4)$$



# Расчёт времени реакции в реакторе РИВ

- После подстановки значений составляющих материального баланса в уравнение (1) и преобразований получим:

- $$\tau = \frac{V}{G_V} = C_{A,0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{\nu_p} \quad (5)$$

- Приведенное уравнение с начальным условием  $V=0$ ,  $C_A = C_{A0}$  для некоторых видов простых химических реакций имеет аналитическое решение. В таблице 1 приведены решения уравнения (5) как расчетные формулы для реактора, работающего в режиме идеального вытеснения при проведении в нем необратимых химических реакций, когда реакционный объем остается постоянным.

Таблица 1. Расчетные уравнения для реактора идеального вытеснения

Схема реакции	Кинетическая модель	Расчетные уравнения
$A \rightarrow S$	$k \cdot C_A$	$\tau = \frac{1}{k} \ln \frac{C_{A,0}}{C_A} = \frac{1}{k} \ln \frac{1}{1-x_A}$ $C_A = C_{A,0} \exp(-k\tau); x_A = 1 - \exp(-k\tau)$
$A \rightarrow S$	$k \cdot C_A^n$ при $n \neq 1$	$\tau = \frac{C_A^{1-n} - C_{A,0}^{1-n}}{k \cdot (n-1)}$ $\tau = \frac{C_{A,0}^{1-n}}{k \cdot (n-1)} [(1-x_A)^{1-n} - 1]$

$A + B \rightarrow S$	$k \cdot C_A \cdot C_B$ $\frac{C_{B,0}}{C_{A,0}} = b \quad C_{A0} \neq C_{B0}$	$\tau = \frac{1}{k(C_{B,0} - C_{A,0})} \ln \frac{C_{B,0} \cdot C_{A,0}}{C_{B,0} \cdot C_A}$ $\tau = \frac{1}{k \cdot C_{A,0} (b-1)} \ln \frac{b - x_A}{b(1 - x_A)}$
$A \rightleftharpoons S$	$k \cdot C_A - k^* C_S$ $C_{S0} \neq 0$	$C_A = \frac{k_1}{k_1 + k^*} C_{A,0} \left[ \frac{k_1}{k^*} + e^{-(k_1 + k^*)\tau} \right]$ $x_A = \frac{k_1}{k_1 + k^*} \left[ 1 - e^{-(k_1 + k^*)\tau} \right]$ $\tau = \frac{1}{k} \ln \frac{C_{A,0}}{C_A} = \frac{1}{k} \ln \frac{1}{1 - x_A}$
$A \rightarrow S \rightarrow F$	$k_1 \cdot C_A$ $k_1 \cdot C_A - k_2 C_S$ $k_2 \cdot C_S$	$C_A = C_{A,0} \exp(-k\tau); \quad x_A = 1 - \exp(-k\tau)$ $C_S = \frac{k_1}{k_2 - k_1} C_{A,0} \left[ e^{-k_1\tau} - e^{-k_2\tau} \right]$ $\tau_{S \max} = \frac{\ln \frac{k_1}{k_2}}{k_2 - k_1}$
$A \rightarrow S$ $A \rightarrow F$	$(k_1 + k_2) \cdot C_A$	$\tau = \frac{1}{k_1 + k_2} \ln \frac{C_{A,0}}{C_A} = \frac{1}{k_1 + k_2} \ln \frac{1}{1 - x_A}$ $C_A = C_{A,0} \exp[(-k_1 + k_2)\tau]$ $C_S = \frac{k_1}{k_1 + k_2} C_{A,0} \left[ 1 - e^{-(k_1 + k_2)\tau} \right]$ $x_A = 1 - \exp[(-k_1 + k_2)\tau]$

# Примеры расчётов

# Пример 1

- Определить объем реактора идеального вытеснения для реакции протекающего без изменения объема реакционной массы.

Дано:

реакция  $A \rightarrow S$ ;

порядок реакции  $n=1$ ;

объемный расход исходного вещества  $G_v = 30$  л/мин;

начальная концентрация исходного вещества  $C_{A0} = 0,2$  моль/л;

константа скорости реакции  $k = 0,25$  мин<sup>-1</sup>;

степень превращения  $x_A = 0,82$ .

# Решение:

- По базовому уравнению РИВ (5) определяем время реакции:

$$\begin{aligned}\tau &= C_{A,0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{v_p} = C_{A,0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{kC_A(1-x_A)} = \frac{1}{k} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{1-x_A} = \\ &= \frac{1}{0,25} [\ln(1-0,98) - \ln(1-0)] = 15,64 \text{ мин.}\end{aligned}$$

Рассчитываем объем РИВ:

$$\tau = \frac{V}{G_V} \quad V = G_V * \tau = 30 \cdot 15.64 = 469,2 \text{ л}$$

# Пример 2

- Определить мольную нагрузку на реактор по веществу А и степень превращения в реакторе вытеснения.

Дано:



порядок реакции  $n=2$ ;

объемный расход исходного вещества  $G_v = 6 \text{ м}^3/\text{ч}$ ;

концентрация продукта R на выходе из реактора равна  $2.5 \text{ кмоль}/\text{м}^3$ ;

константа скорости реакции  $k_1 = 0,3 \text{ мин}^{-1}$ ,  $k_2 = 0,2 \text{ мин}^{-1}$ ;

$V_{\text{РИВ}} = 300 \text{ л}$ .

# Решение

- Находим время пребывания:

$$\tau = \frac{V_{PIB}}{Gv} = \frac{300 \cdot 60}{6 \cdot 1000} = 3 \text{ мин.}$$

- Рассчитываем начальную концентрацию вещества А:

$$C_{A,0} = \frac{C_R}{\frac{k_1}{k_1 + k_2} \cdot C_{A,0} \{1 - \exp[-(k_1 + k_2) \cdot \tau]\}} =$$
$$= \frac{2,5}{\frac{0,3}{0,3 + 0,2} \{1 - \exp[-(0,3 + 0,2) \cdot 3]\}} = 5,43 \text{ кмоль} / \text{ м}^3$$

# Решение

- Находим мольную нагрузку на реактор:

$$N_{A,0} = G_v \cdot C_{A,0} = 6 \cdot 5,43 = 32,58 \text{ кмоль / ч.}$$

- Определяем концентрацию вещества А на выходе из реактора исходя из базового уравнения для реактора вытеснения:

$$\frac{dCA}{d\tau} = -(k_1 + k_2) \cdot C_A$$

- Интегрируя это уравнение и решая относительно  $C_A$ , получаем:

$$C_A = C_{A,0} \cdot e^{-(k_1+k_2) \cdot \tau} = 5,43 e^{-(0,3+0,2) \cdot 3} = 1,21 \text{ кмоль / м}^3.$$

# Решение

- Рассчитываем степень превращения вещества А:

$$x_A = \frac{C_{A,0} - C_A}{C_{A,0}} = \frac{5,43 - 1,21}{5,43} = 0,78.$$

# Задача 1

Жидкофазная реакция типа  $A \rightarrow R \rightarrow S$  имеет константы скоростей, равные  $k_1 = \dots \text{с}^{-1}$  и  $k_2 = \dots \text{с}^{-1}$ . Объемный расход исходного вещества  $A$  с концентрацией  $\dots$  моль/л составляет  $\dots$  м<sup>3</sup>/ч.

Рассчитать объем реактора вытеснения для получения максимального количества вещества  $R$ , степень превращения по продукту  $R$ .

## Задания по вариантам к задаче 1

Вариант	к1 к2	Объёмный расход А, м <sup>3</sup> /ч	Концентрация С <sub>А</sub> , моль/л
1;12	2; 0,8	18	1,8
2;13	1,5; 0,6	17	1,6
3;14	3; 2,1	25	3
4; 15	2.5; 1,2	21	2,2
5; 16	2,1; 0,9	19	2
6; 17	2,1; 1	22	1,9
7; 18	1.9; 0,6	17	1,7
8; 19	2,2; 1,2	19,5	2,3
9; 20	3; 1,9	23	2,1
10; 21; 22	3; 2,5	24	3,1
11; 23	2,4; 1,2	19,9	2,8

## Задача 2

В непрерывном реакторе смешения проводится последовательная реакция типа  $A \rightarrow R \rightarrow S$  с константами скоростей  $k_1=0,5 \text{ ч}^{-1}$  и  $k_2=0,8 \text{ ч}^{-1}$ . Исходная концентрация вещества  $A$  равна  $5 \text{ кмоль/м}^3$ . Продукты  $R$  и  $S$  на входе в реактор отсутствуют. Рассчитать необходимый объем реактора вытеснения, степень превращения вещества  $A$ .

## Задания по вариантам к задаче 2

Вариант	K1	K2	Концентрация $C_A$ , моль/л
1;12	0,5	0,8	1
2;13	0,6	0,9	1,3
3;14	0,4	0,7	0,9
4; 15	0,8	1,4	1,5
5; 16	0,7	1,1	1,2
6; 17	0,4	0,9	0,8
7; 18	0,9	1,4	1,6
8; 19	0,9	1,6	2
9; 20	0,7	1,3	1,5
10; 21; 22	0,6	1	1,4
11; 23	0,5	0,9	1,1