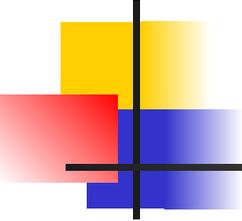


Химические реакторы

лекция №6



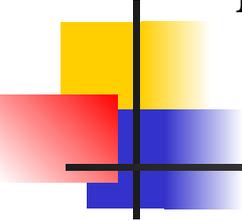
Химический реактор – аппарат для проведения химического превращения.

Классификация реакторов

- по гидродинамической обстановке;
- по условиям теплообмена;
- по фазовому составу реагентов;
- по способу организации процесса;
- по характеру изменения параметров процесса во времени;
- по конструктивным характеристикам.

по гидродинамической обстановке различают:

- Реакторы смешения — это емкостные аппараты с перемешивающим устройством (механическая мешалка, барботер, циркуляционный насос).
- Реакторы вытеснения — трубчатые, колонные аппараты, неподвижный слой твердого (катализатора).



по условиям теплообмена:

- **адиабатические** — при отсутствии теплообмена с окружающей средой;
- **изотермические** — за счет теплообмена с окружающей средой в реакторе обеспечивается постоянство температуры;
- **с промежуточным тепловым режимом** — существует теплообмен с окружающей средой, а температура не поддерживается постоянной,
- **автотермические** — температура поддерживается постоянной только за счет теплоты химического процесса без использования внешних источников энергии.

Классификация химических реакторов:

• Организация материальных потоков:

■ количество фаз реагентов:

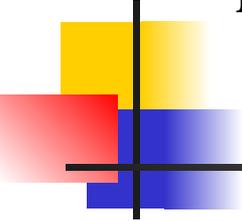
- однофазные;
- многофазные;

■ движение потоков через реактор:

- проточный;
- периодический (непроточный);
- полупериодический;

■ режим движения потоков в реакционной зоне:

- идеальное вытеснение;
- идеальное смешение;
- неидеальный;



по способу организации процесса:

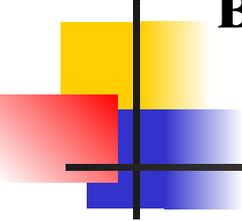
- периодические,
- непрерывнодействующие,
- полунепрерывные (полупериодические).

В реакторе **периодического действия** все реагенты загружаются в аппарат до начала реакции, а смесь продуктов выгружается после окончания процесса.

В реакторе **непрерывного действия** (проточном) подача реагентов, химическая реакция, вывод готового продукта осуществляются одновременно.

В реактор **полунепрерывного действия** один из реагентов поступает непрерывно, а другой — периодически (или реагенты поступают периодически, а продукты выводятся непрерывно).

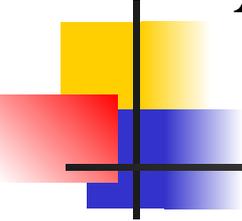
по характеру изменения параметров процесса во времени различают режимы работы реакторов:

- 
-
- стационарный,
 - нестационарный.

Режим работы реактора называют стационарным, если в любой момент времени концентрации реагентов или продуктов, температуры, скорости и другие параметры процесса в произвольно выбранной точке остаются постоянными.

Если в произвольно выбранной точке происходит изменение параметров химического процесса во времени - это нестационарный режим.

Нестационарные реакторы характеризуются положительным или отрицательным накоплением вещества или энергии в реакторе.

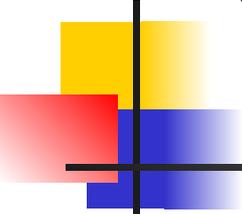


Анализ процесса в химическом реакторе

- исследование влияния **условий процесса** и характеристик (свойств) его составляющих на показатели работы реактора,
- способы управления процессом (изменение условий и свойств для достижения желаемых показателей),
- выявление особенностей процесса и режима (например, критические режимы, их существование, неустойчивость).

Условия процесса

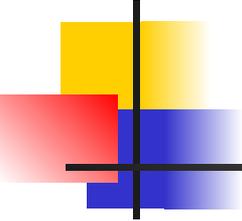
- состав исходной реакционной смеси (начальные концентрации реагентов – c_{i0}),
- объём поступающего потока (нагрузка на реактор – V_0),
- температуры T в реакторе (для изотермического процесса),
- температуры входного потока T_0 ,
- температура теплоносителя (хладоагента) T_X (для процессов с теплоотводом).



Свойства составляющих процесса

- характеристики химического процесса:
 - ❖ схема превращения,
 - ❖ тип реакций (вид кинетического уравнения),
 - ❖ энергия активации,
 - ❖ тепловой эффект;
 - ❖ для неизотермических процессов – параметры теплоотвода (коэффициенты теплопередачи, поверхность теплообмена, теплофизические свойства потока).

Показатели процесса



- степень превращения x ,
- селективность S ,
- выход продукта E ,
- профили концентраций, степени превращения и температуры в реакторе, их изменение во времени.

Зная эти показатели, можно далее определить конструктивные параметры реактора, энергетические затраты, экономические показатели.

Математическая модель процесса в химическом реакторе

Математическое описание процесса в реакторе строится на основе законов сохранения массы и энергии. Материальный баланс составляется по каждому компоненту- участнику реакции

$$dN/dt = \sum N_{\text{вх/вых}} + \sum N_{\text{ист}}; \quad (3.1)$$

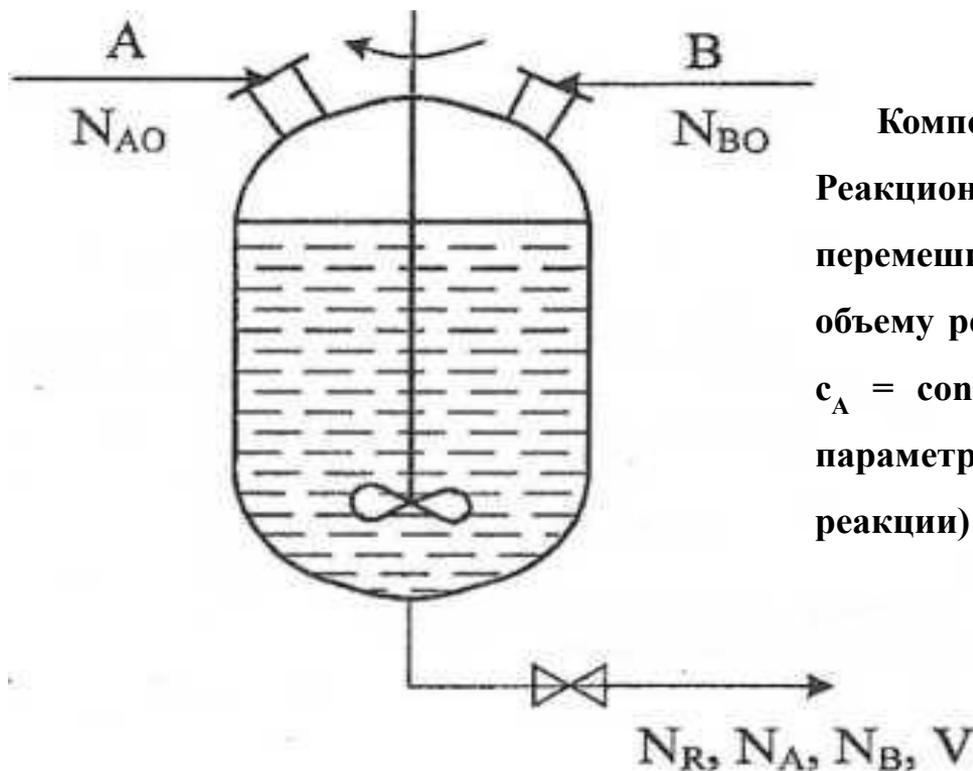
$$dq/dt = \sum Q_{\text{вх/вых}} + \sum Q_{\text{ист}}, \quad (3.2)$$

где dN/dt и dq/dt - накопление вещества и теплоты в выделенном элементарном объеме; $N_{\text{вх/вых}}$, $Q_{\text{вх/вых}}$ - материальные и тепловые потоки, входящие в выделенный объем (покидающие объем потоки имеют отрицательное значение); $N_{\text{ист}}$, $Q_{\text{ист}}$ - источники вещества и тепла внутри выделенного объема соответственно.

Источником вещества является химическая реакция, источником тепла - химическая реакция и фазовые превращения.

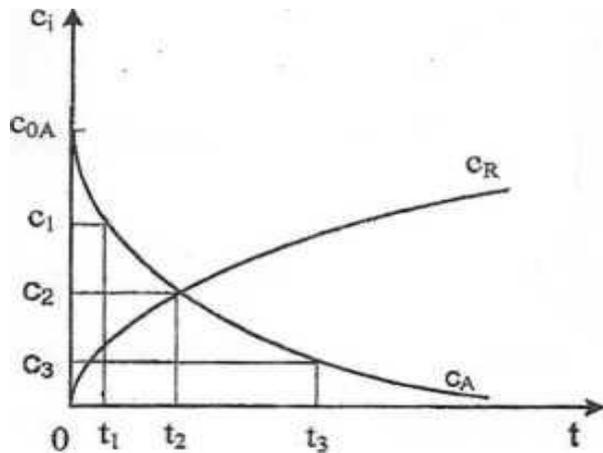
Основные математические модели химических реакторов

1. РЕАКТОР ИДЕАЛЬНОГО СМЕШЕНИЯ ПЕРИОДИЧЕСКИЙ (РИС-П)

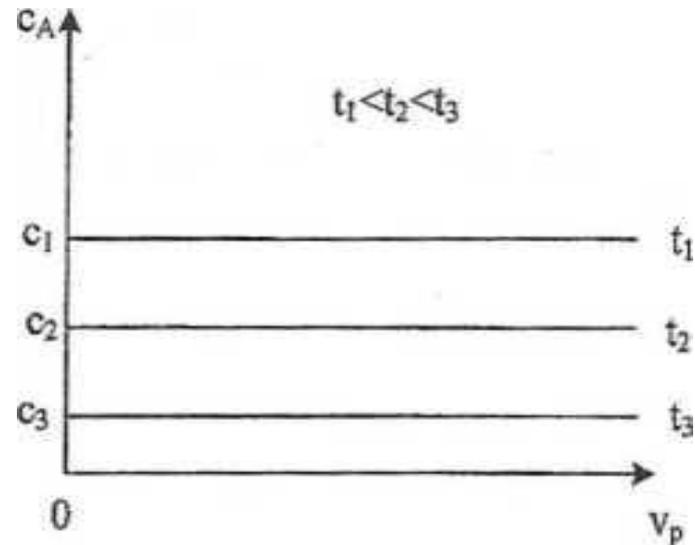


Компоненты загружаются одновременно. Реакционная масса в реакторе интенсивно перемешивается мешалкой так, что по объему реактора в любой момент времени t $c_A = \text{const}$, $c_R = \text{const}$, $\gamma = \text{const}$, но, все параметры (концентрации и скорость реакции) меняются во времени.

РЕАКТОР ИДЕАЛЬНОГО СМЕШЕНИЯ ПЕРИОДИЧЕСКИЙ (РИС-п)



Зависимость концентрации в РИС-п от времени



Профили концентраций c_A в объёме РИС-п в различные моменты времени : $t_1 < t_2 < t_3$

Периодический процесс в емкостном реакторе идеального смешения РИС-п.

В ходе процесса возможен теплообмен с теплоносителем, имеющим температуру T_X . Площадь поверхности теплообмена - F_T и коэффициент теплообмена - K_T .

Процесс – нестационарный: $dN_i/dt \neq 0$. Нет входящих и выходящих потоков $\sum N_{\text{вх/вых}} = 0$. Источником i -го вещества является химическое превращение: $\sum N_{\text{ист},i} = W_i(C, T)V_p$. Уравнение (3.1) будет примет вид:

$$dN_i/dt = W_i(C, T)V_p$$

Количество вещества в реакторе $N_i =$

$V_p C_i$. Объем реагирующей смеси, равный V_p , не меняется

$$dC_i/dt = W_i(C, T), \quad \text{при } t = 0 \quad C = C_{i0}$$

Источник тепла –тепловой эффект химического превращения $Q_{\text{ист}} = Q_p r(C, T)V_p$ и теплообмен с теплоносителем $Q_{\text{ист}} = K_T F_T (T_X - T)$. Тогда:

$$dq/dt = Q_p r(C, T)V_p + K_T F_T (T_X - T)$$

Изменение количество

теплоты в реакторе: $dq = c_p V_p dT$ (теплоемкость c_p неизменна) удельная поверхность теплообмена $F_{\text{уд}} = F_T/V_p$.

$$c_p dT/dt = Q_p r(C, T) - K_T F_{\text{уд}} (T - T_X), \quad \text{при } t = 0 \quad T = T_0$$

Основные математические модели химических реакторов

2. ПРОТОЧНЫЙ (НЕПРЕРЫВНЫЙ) РЕАКТОР ИДЕАЛЬНОГО СМЕШЕНИЯ (РИС-Н)

Допущения:

- ❑ идеальное перемешивание реакционной смеси по всему объему реактора;
- ❑ вследствие мгновенной реакции изменение концентраций, степени превращения, температуры в реакторе происходит мгновенно (скачкообразно);
- ❑ установление абсолютно одинаковых условий (концентрации, температуры, степени превращения) в любой точке реактора;
- ❑ концентрации в выходном потоке в рассматриваемый момент времени строго равны концентрациям в реакционном объеме.

Проточный реактор идеального смешения РИС-н

Процесс стационарный ($dN_i/dt = 0$ и $dq/dt = 0$). В реактор в единицу времени входит поток реагентов $N_{i,вх} = V_0 C_{i0}$. $V_p = \text{const}$. На выходе поток V_0 с содержанием каждого компонента $N_{i,вых} = V_0 C_i$. Элементарный объем - вся реакционная зона. Источник веществ - химическое превращение: $\sum N_{i,ист} = W_i(C, T) V_p$. Уравнение материального баланса

$$0 = V_0 C_{i0} - V_0 C_i + W_i(C, T) V_p.$$

Если $V_p/V_0 = \tau$ - условное время реакции (процесса).

$$(C_i - C_{i0})/\tau = W_i(C, T)$$

Поток

теплоты, входящий вместе с реакционной смесью

$$Q_{вх} = V_0 c_p T_0, \text{ выходящий} - Q_{вых} = V_0 c_p T.$$

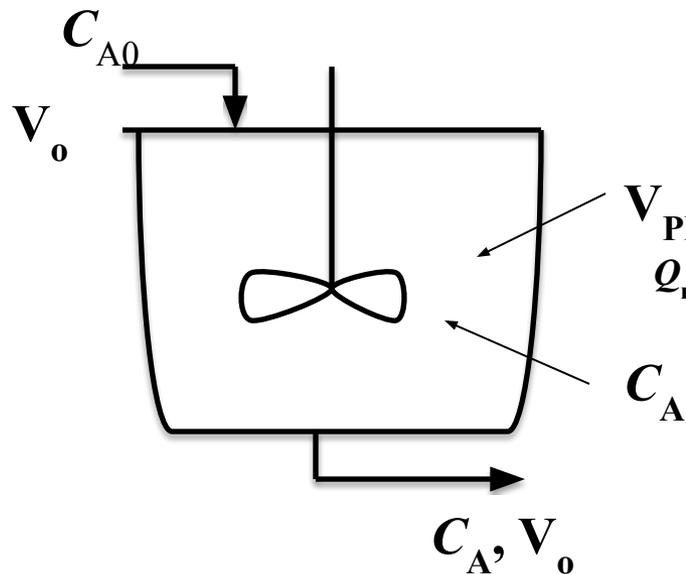
Уравнение

теплового баланса:

$$0 = V_0 c_p T_0 - V_0 c_p T + Q_p r(C, T) V_p + K_T F_T (T_X - T)$$

после преобразования получим:

$$c_p (T - T_0)/\tau = Q_p r(C, T) - K_T F_{уд} (T - T_X)$$

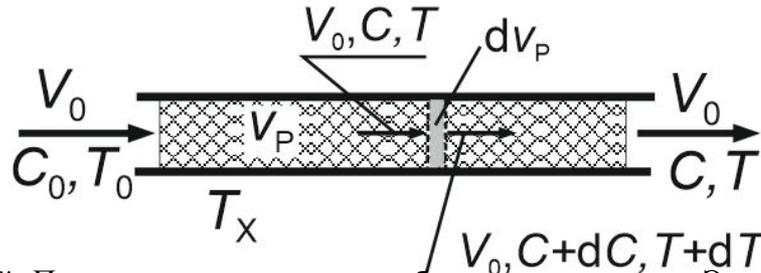


Реактор идеального вытеснения

Допущения модели РИВ:

- процесс в реакторе непрерывный и стационарный;
- идеальное перемешивание по сечению реактора;
- продольное перемешивание отсутствует;
- профиль скорости по сечению – плоский (поршневой).

Реактор идеального вытеснения



Процесс в реакторе вытеснения - непрерывный. Поток течет через реактор без перемешивания. Элементарный объём - участок толщиной dl и объемом $dV_p = Sdl$. Компонент i в количестве $N_{i,вх} = V_0 C_i$ входит в выделенный объём и выходит из него в количестве $N_{i,вых} = V_0(C_i + dC_i)$. Источник вещества в выделенном объеме - химическое превращение $\sum N_{ист,j} = W_j(C, T)dV_p$. Процесс протекает стационарно ($dN/dt = 0$ и $dq/dt = 0$), $V_p = \text{const}$.

$$0 = V_0 C_i - V_0(C_i + dC_i) + W_i(C, T)dV_p. \quad V_p/V_0 = \tau - \text{условное время реакции (процесса)}$$

$$dC_i/d\tau = W_i(C, T), \quad \text{при } \tau = 0 \quad C = C_{i0}$$

τ пропорционально длине реактора l и связано со скоростью потока u выражением $\tau = l/u$.

В тепловом уравнении процесса $Q_{вх} = V_0 c_p T$ - тепловой поток, входящий в элементарный объем, и $Q_{вых} = V_0 c_p (T + dT)$ - выходящий из него; $Q_{ист} = Q_p r(C, T)dV_p + K_T dF_T (T_x - T)$ - источники теплоты (реакция и теплообмен через боковую поверхность dF_T в выделенном объёме). Получаем:

$$0 = V_0 c_p T - V_0 c_p (T + dT) + Q_p r(C, T)dV_p + K_T dF_T (T_x - T).$$

Определив удельную поверхность теплообмена $F_{уд} = dF_T/dV_p$, и используя приведенное выше определение τ , получим:

$$c_p \cdot dT/d\tau = Q_p r(C, T) - K_T F_{уд} (T - T_x) \quad \text{при } \tau = 0 \quad T = T_0 \quad (3.11)$$

Химические реакторы

лекция №7

РИС-П

$$dC/dt = W(C)$$

РИС-Н

$$(C - C_0)/\tau = W(C)$$

РИВ

$$dC/d\tau = W(C)$$

Изотермический процесс в химическом реакторе

Режимы идеального смешения периодический и идеального вытеснения

Режимы идеального смешения периодический (РИС-п) и идеального вытеснения (РИВ) принципиально различаются по способу организации процесса. Математические модели процессов РИС-п и РИВ – идентичны.

t - астрономическое время, $\tau = l/u$ - переменная, пропорциональная длине реактора.

РИС-п

РИВ

$$dC/dt = W(C)$$

$$dC/d\tau = W(C)$$

$$\text{при } t = 0 \quad C = C_0 \quad \text{при } \tau = 0 \quad C = C_0$$

Поскольку проводим анализ модели, то в дальнейшем будем использовать следующий вид уравнения:

$$dC/d\tau = W(C), \text{ при } \tau = 0 \quad C = C_0,$$

полагая $\tau \equiv t$, t в зависимости от процесса.

Простая необратимая реакция $A = B$. $W(C) = -kC$ Математическая модель

$$dC/d\tau = -kC, \text{ при } \tau = 0 \quad C = C_0.$$

Решением уравнения являются зависимости:

$$\tau = \frac{1}{k} \ln \frac{C_{A0}}{C_A} = \frac{1}{k} \ln \frac{1}{1 - x_A}$$

$$C_A = C_{A0} \cdot \exp(-k\tau); \quad x_A = 1 - \exp(-k\tau)$$

Изотермический процесс в химическом реакторе

Режимы идеального смешения периодический и идеального вытеснения

РИС–п

Нестационарный процесс.

время процесса $t_{пр}$:

$$t_{пр} = t_{загр} + t + t_{выгр},$$

где:

$t_{загр}$ – время загрузки;

t – время проведения реакции;

$t_{выгр}$ – время выгрузки.

$$dc/dt = w(c) = r_A$$

$c = c_{A0}$, при $t = 0$

$$t = c_{A0} \cdot \int_0^{X_A} dx_A / k \cdot c_A^n \cdot (1 - x_A)^n$$

РИВ

Стационарный процесс:

$$v_0 \cdot c_A = v_0 \cdot (c_A - dc_A) - r_A \cdot dV_{РИВ}$$

$$dV_{РИВ}/v_0 = d\tau_{РИВ}$$

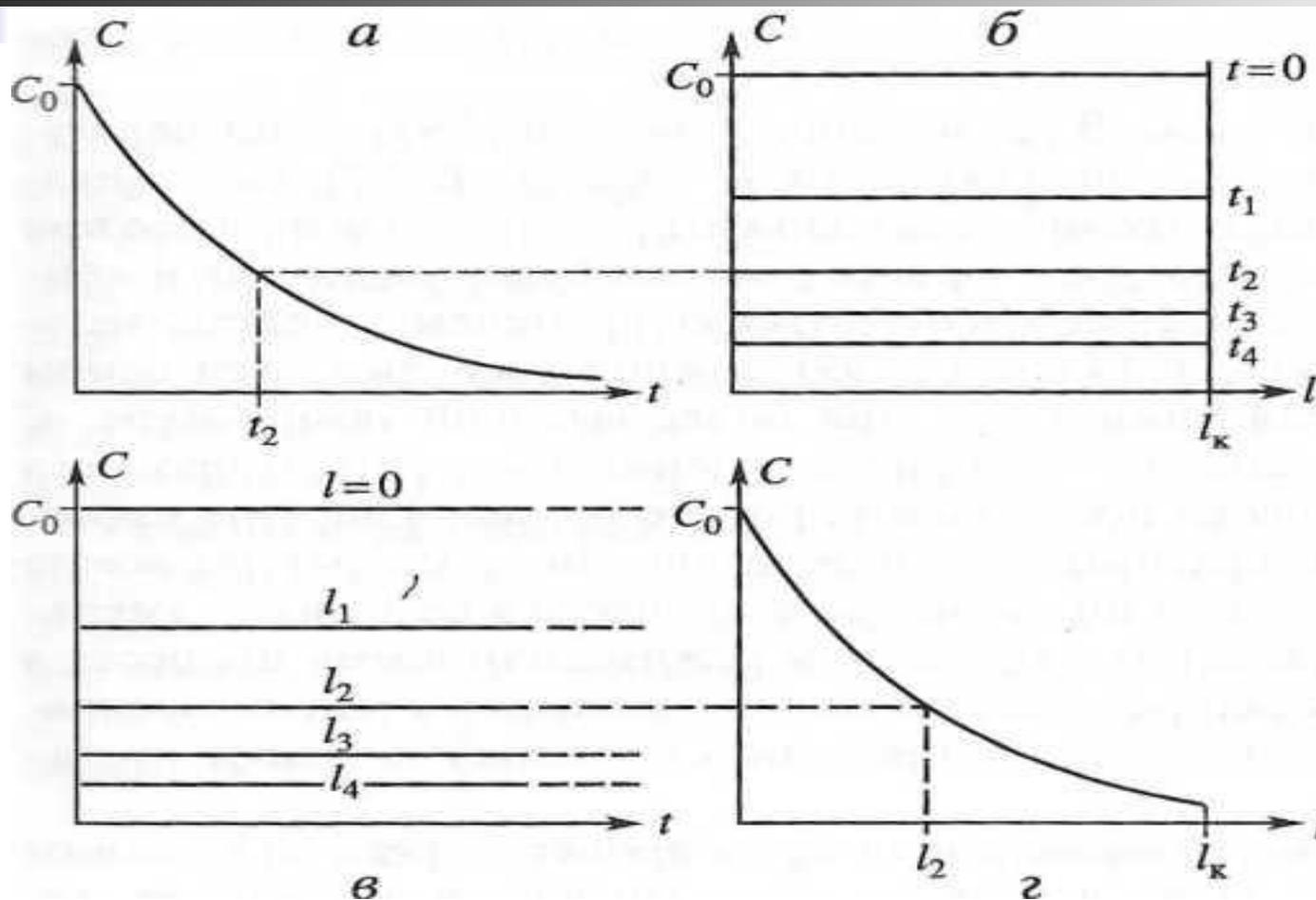
$$d\tau = - dc_A / r_A$$

$$\int_0^\tau d\tau = - c_{A0} \int^{c_A} dc_A / r_A$$

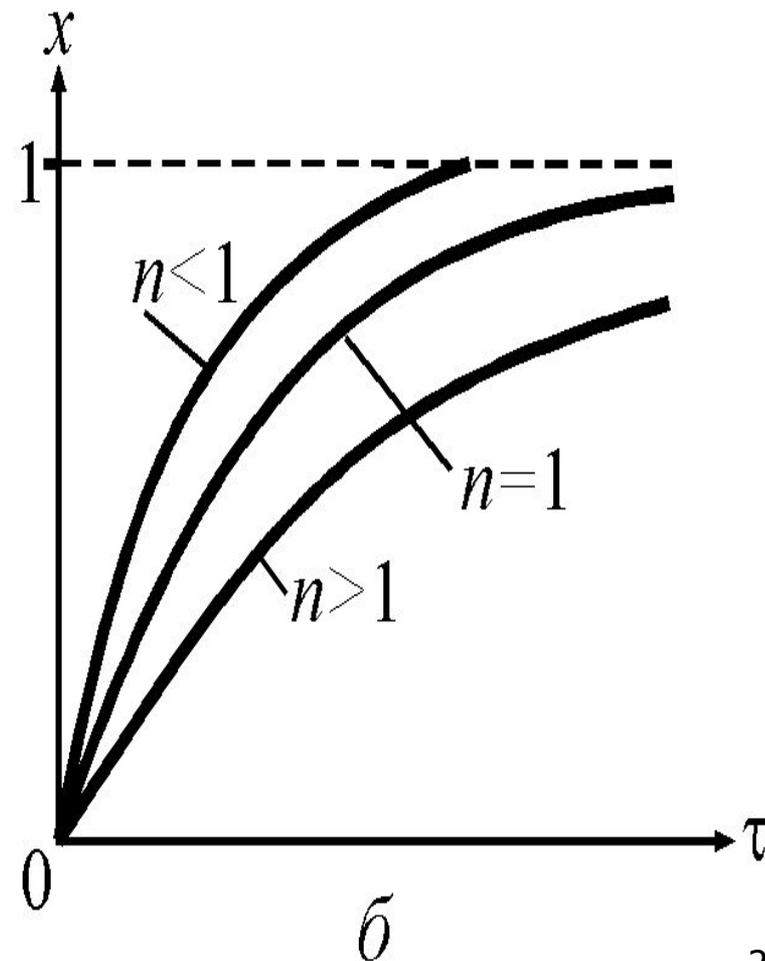
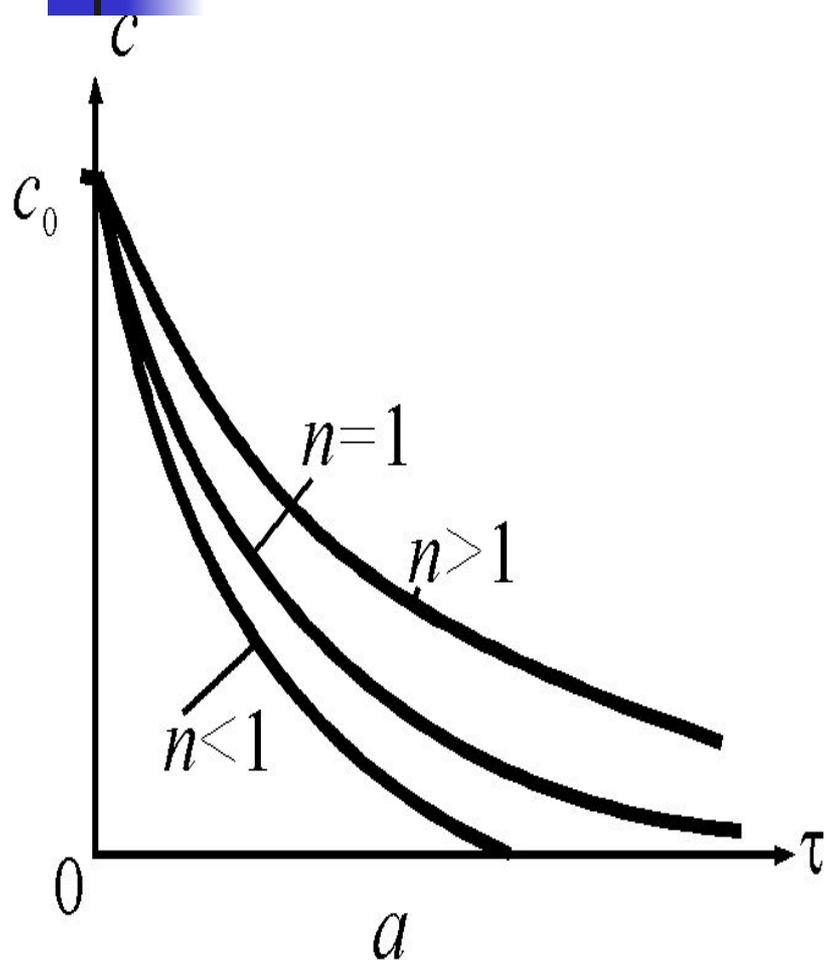
$$\tau = \int_0^{X_A} d(c_{A0} \cdot (1 - x_A)) / -r_A$$

$$\tau_{РИВ} = c_{A0} \int_0^{X_A} dx_A / k \cdot c_A^n \cdot (1 - x_A)^n$$

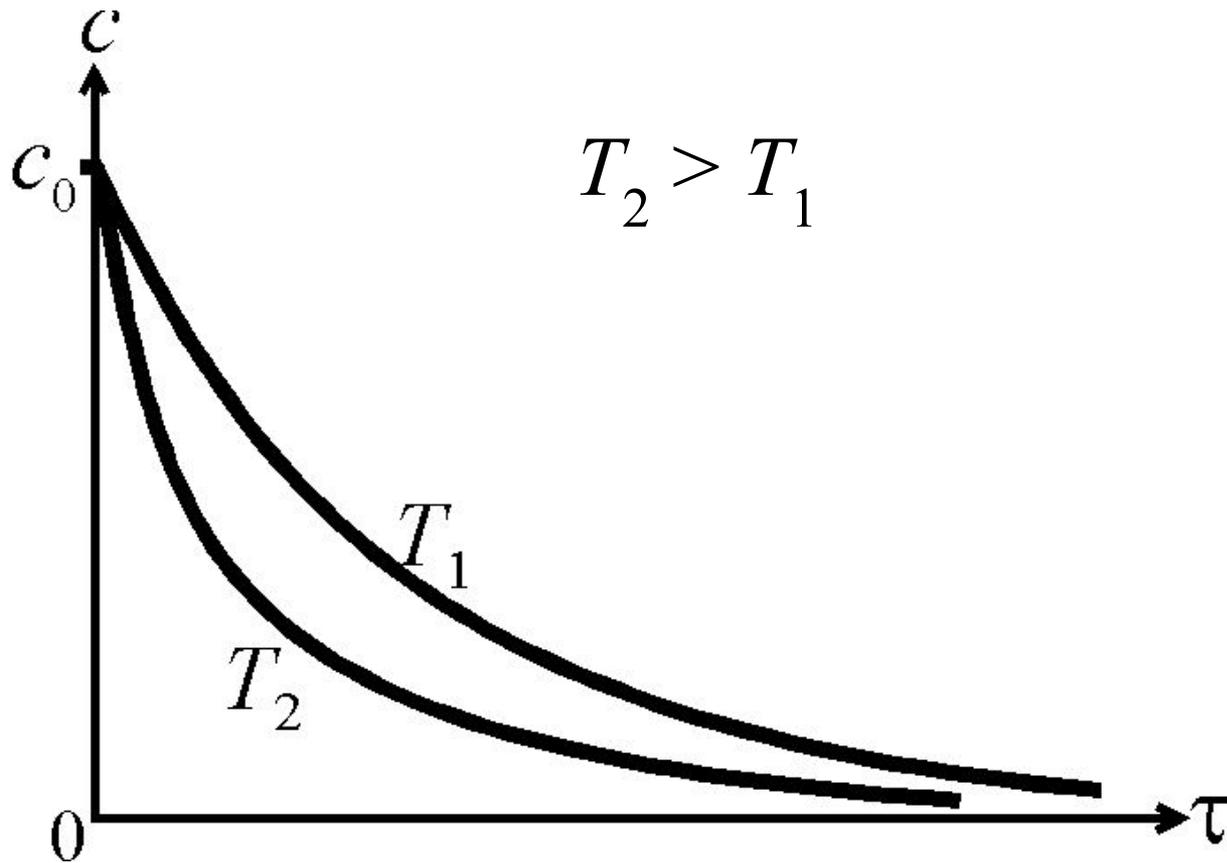
Изменение концентрации C от времени t (а, в) и по длине реактора (б, г) в реакторе периодическом идеального смешения {а, б) и проточном реакторе идеального вытеснения (в, г)



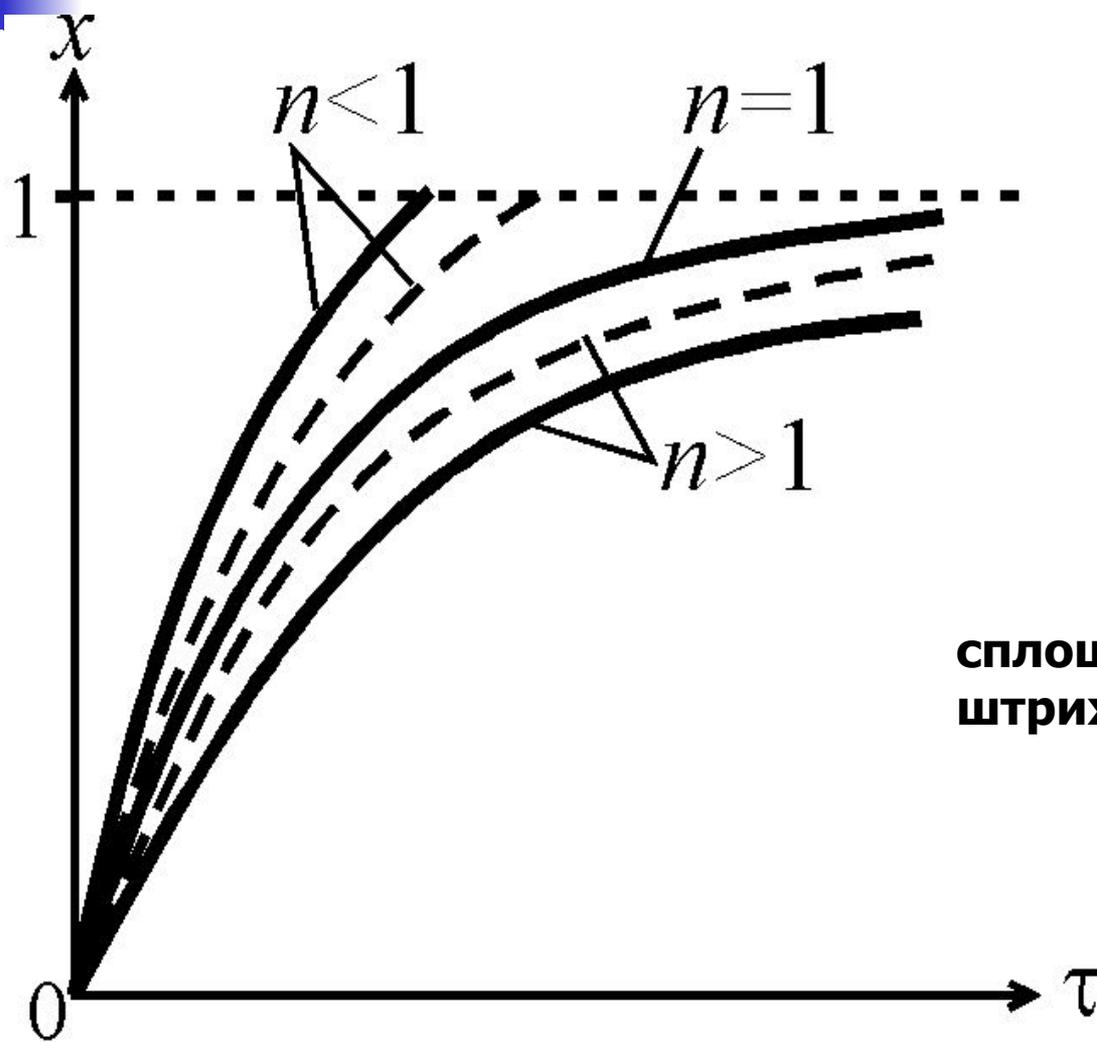
Зависимость концентрации исходного вещества c (а) и степени превращения x (б) от τ для простых необратимых реакций разного порядка n в реакторе ИВ



Зависимость концентрации C от условного времени процесса τ для режима ИВ при разных температурах T



Зависимость степени превращения x от
условного времени процесса τ для реакции
 n -го порядка



Изотермический процесс в химическом реакторе

Режимы идеального смешения периодический и идеального вытеснения

РИВ

При $n = 0$:

$$\tau = c_{A0} \cdot x_A / k$$

При $n = 1$:

$$\tau = 1/k \cdot \ln (1/(1 - x_A))$$

При $n = 2$:

$$\tau = x_A / (k \cdot c_{A0} \cdot (1 - x_A))$$

РИС-п

При $n = 0$:

$$t = c_{A0} \cdot x_A / k$$

При $n = 1$:

$$t = 1/k \cdot \ln (1/(1 - x_A))$$

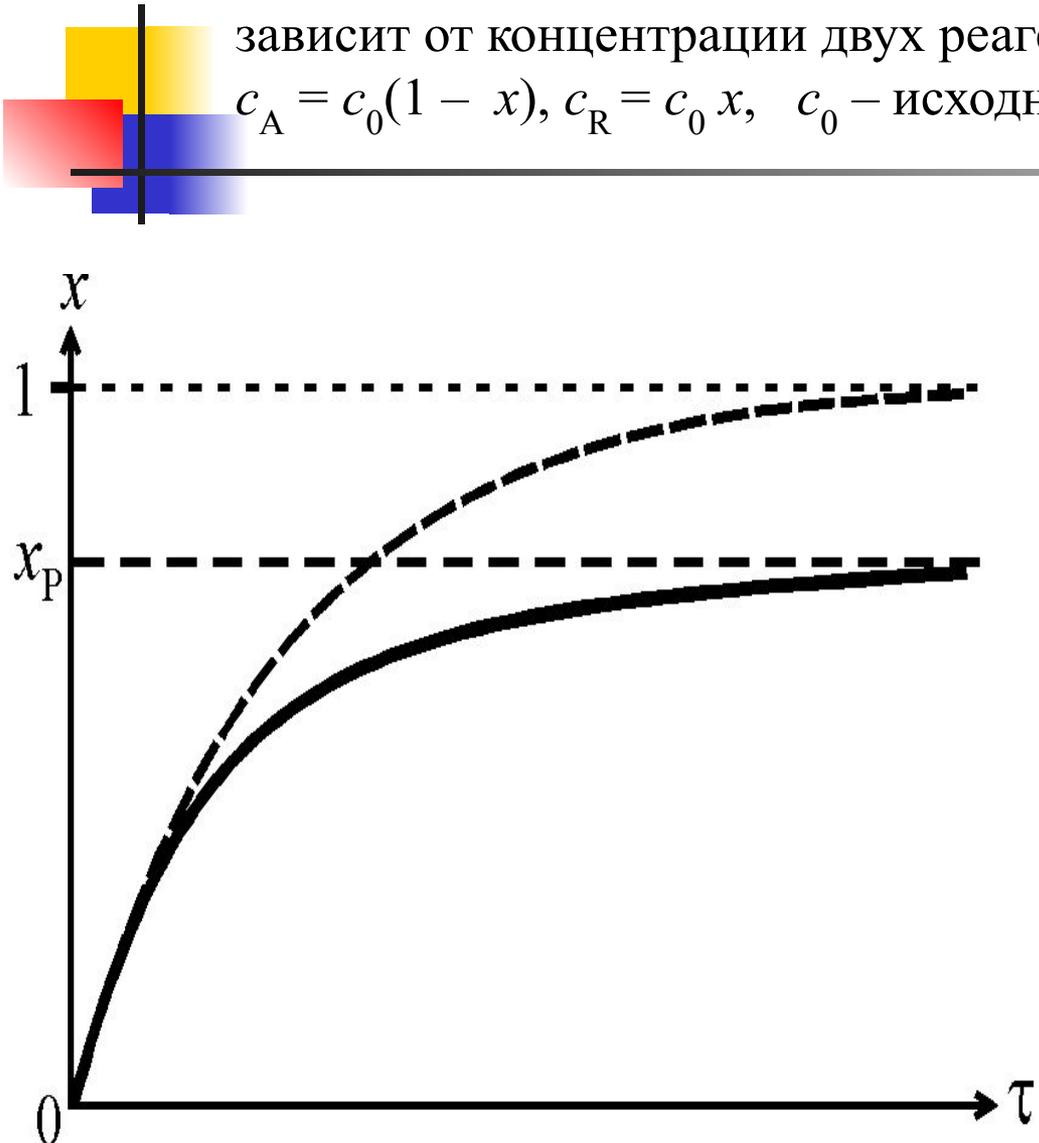
При $n = 2$:

$$t = x_A / (k \cdot c_{A0} \cdot (1 - x_A))$$

Простая обратимая реакция $A = R$.

Скорость простой обратимой реакции $r(c) = k_1 c_A - k_2 c_R$ зависит от концентрации двух реагентов.

$c_A = c_0(1 - x)$, $c_R = c_0 x$, c_0 – исходная концентрация реагента А):



$$\frac{dx}{d\tau} = k_1(1 - x) - k_2 x, \text{ при } \tau = 0 \text{ } x = 0.$$

После интегрирования

$$x = \frac{k_1}{k_1 + k_2} \left[1 - e^{-(k_1 + k_2)\tau} \right]$$

Зависимость степени превращения x от условного времени процесса τ для простой обратимой (сплошная линия) и для необратимой реакции (штриховая линия) в реакторе ИВ

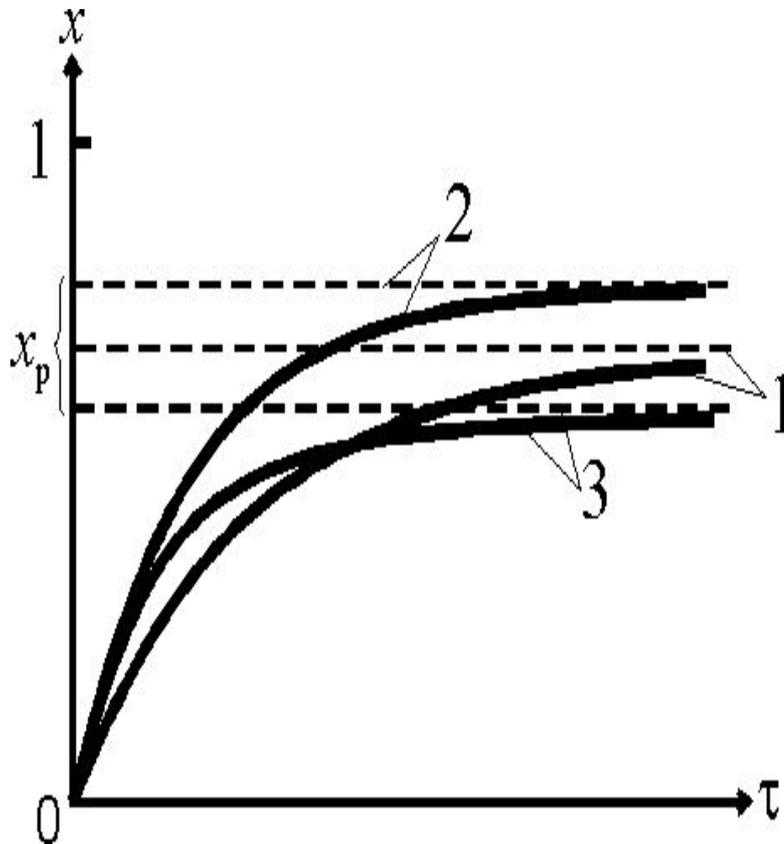
В отличие от простой необратимой реакции,
протекающей до конца,

обратимая реакция протекает до предельной
степени превращения - равновесной:

$$x|_{\tau \rightarrow \infty} = 1$$

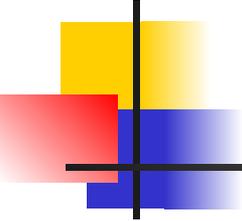
$$x|_{\tau \rightarrow \infty} = \frac{k_1}{k_1 + k_2} = \frac{\frac{k_1}{k_2}}{\frac{k_1}{k_2} + 1} = \frac{K_p}{K_p + 1} \equiv x_p$$

Влияние температуры. Повышение температуры приводит к росту константы скорости как прямой k_1 , так и обратной k_2 реакции. Их влияние на общую скорость реакции определяется соотношением их энергий активации (соответственно E_1 и E_2).



Зависимость $x(\tau)$ при температурах T_1 (1) и $T_2 > T_1$ (2, 3) для обратимых эндотермической (2) и экзотермической (3) реакций в реакторе ИВ или ИС-п; штриховыми линиями показаны равновесные степени превращения x_p

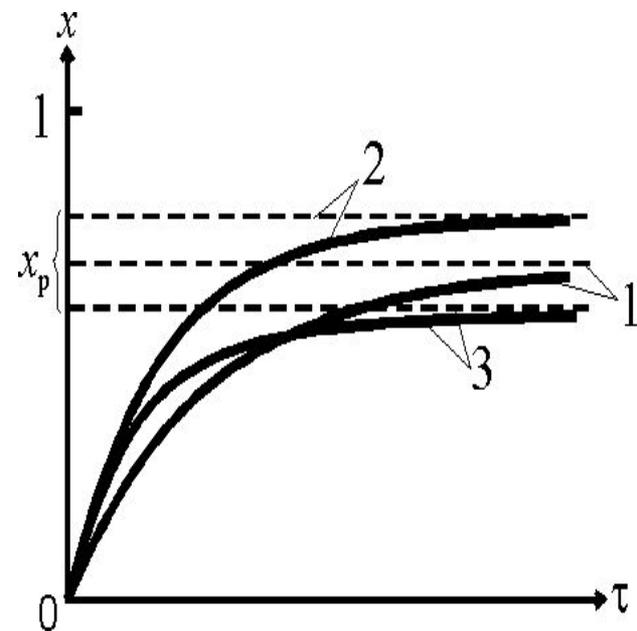
Для эндотермической реакции, $E_2 < E_1$ ($Q_p < 0$, $Q_p = E_2 - E_1$) и k_1 (и скорость прямой реакции) увеличивается с температурой сильнее, чем k_2 (и скорость обратной реакции). Также с увеличением температуры увеличивается равновесная степень превращения x_p . Поэтому с увеличением температуры скорость реакции возрастает, и, соответственно, с увеличением температуры будет меняться быстрее степень превращения (кривые 2)



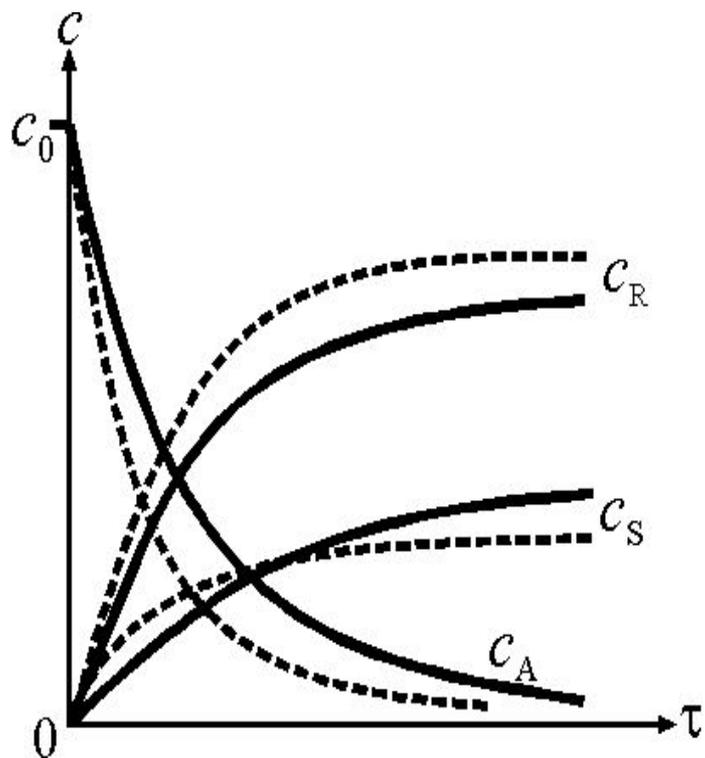
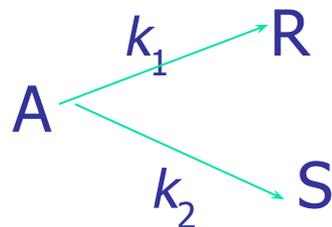
Для экзотермической реакции $E_2 > E_1$ ($Q_p > 0$,
 $Q_p = E_2 - E_1$)

и k_2 (и скорость обратной реакции) увеличивается с температурой сильнее, чем k_1 (и скорость прямой реакции).

Равновесная степень превращения x_p с увеличением температуры уменьшается. Но по мере протекания реакции (увеличения τ и x) возрастает влияние обратной реакции. Поэтому изменение степени превращения замедляется— кривые 3.



Сложная реакция с параллельной схемой превращения



- Математически процесс описывается уравнениями ($n = 1$):

- $$\frac{dc_A}{d\tau} = -(k_1 + k_2)c_A;$$

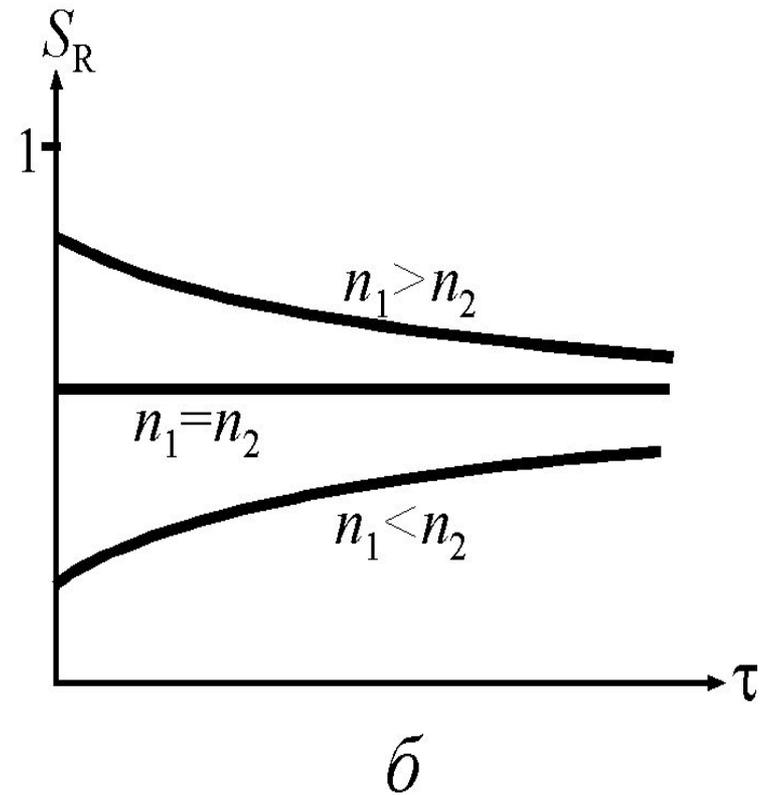
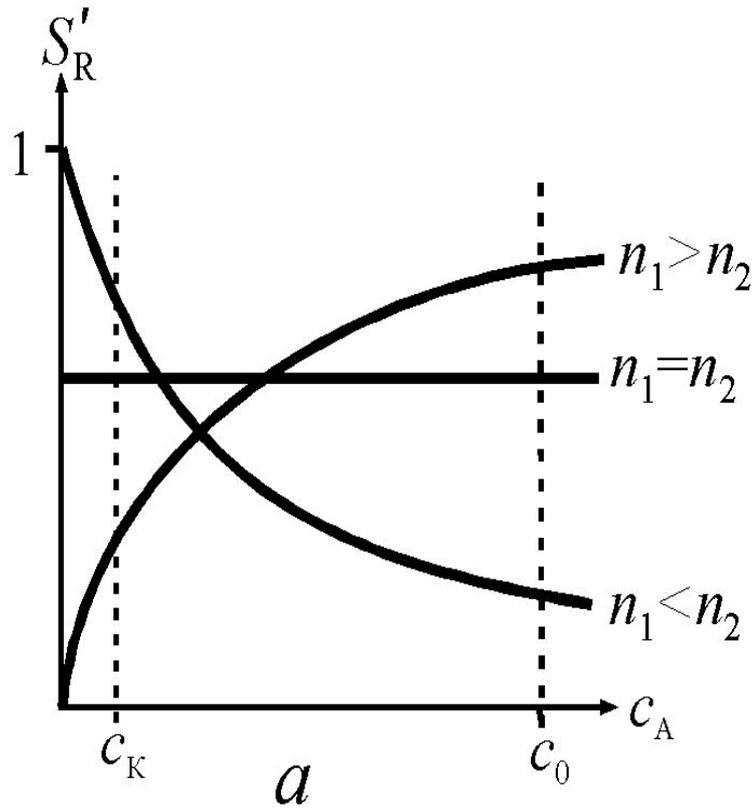
- $$\frac{dc_R}{d\tau} = k_1 c_A;$$

- $$= k_2 c_A;$$

- при $\tau \rightarrow 0$ $c_A = c_0, c_R = c_S = 0.$

Зависимость концентраций реагентов в реакторе ИВ или ИС-п от условного времени процесса τ при параллельной реакции: сплошные линии получены при температуре T_1 , штриховые линии – при $T_2 > T_1$ и $E_1 > E_2$

Зависимость дифференциальной селективности S'_R для параллельной реакции от концентрации c_A (а) и интегральной селективности S_R от τ (б) в реакторе ИВ при различном соотношении порядков частных реакций n_1 и n_2



Практические выводы

- При $n_1 = n_2$ достигаемая в реакторе степень превращения не будет влиять на селективность процесса.
- Если $n_1 > n_2$, то достижение высоких степеней превращения может быть нецелесообразным из-за уменьшения избирательности по продукту R.
- Если $n_1 < n_2$, то увеличение степени превращения благоприятно для селективности по продукту R.
- Если $E_1 > E_2$, повышение температуры благоприятно и для интенсивности, и для селективности процесса.
- Если $E_1 < E_2$, то снижение температуры благоприятно для селективности процесса, но не благоприятно для его интенсивности.

Сложная реакция с последовательной схемой превращения



Математически процесс описывается системой уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dc_A}{d\tau} &= -k_1 c_A; \\ \frac{dc_R}{d\tau} &= k_1 c_A - k_2 c_R; \\ \frac{dc_S}{d\tau} &= k_2 c_R; \\ \text{при } \tau = 0 \quad c_A &= c_0, \quad c_R = c_S = 0 \end{aligned} \right\}$$

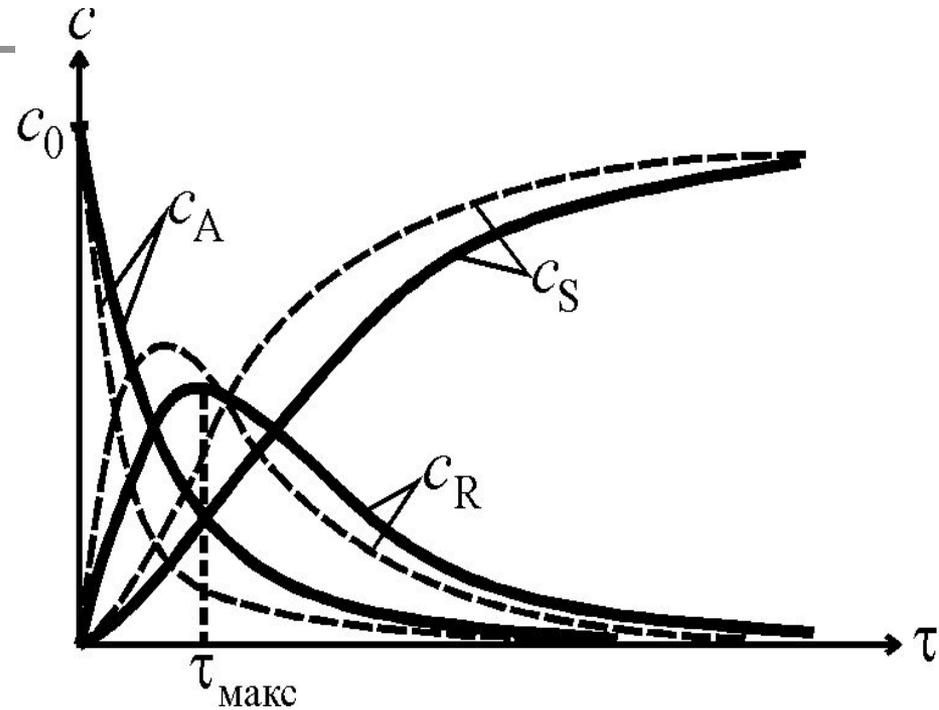
Сложная реакция с последовательной схемой превращения

Решение системы уравнений относительно концентраций реагентов А, R и S:

$$c_A = c_0 e^{-k_1 \tau}$$

$$c_R = \frac{k_1}{k_1 - k_2} c_0 \left[e^{-k_1 \tau} - e^{-k_2 \tau} \right]$$

$$c_S = c_0 \left(1 - \frac{k_2 e^{-k_1 \tau} - k_1 e^{-k_2 \tau}}{k_2 - k_1} \right)$$



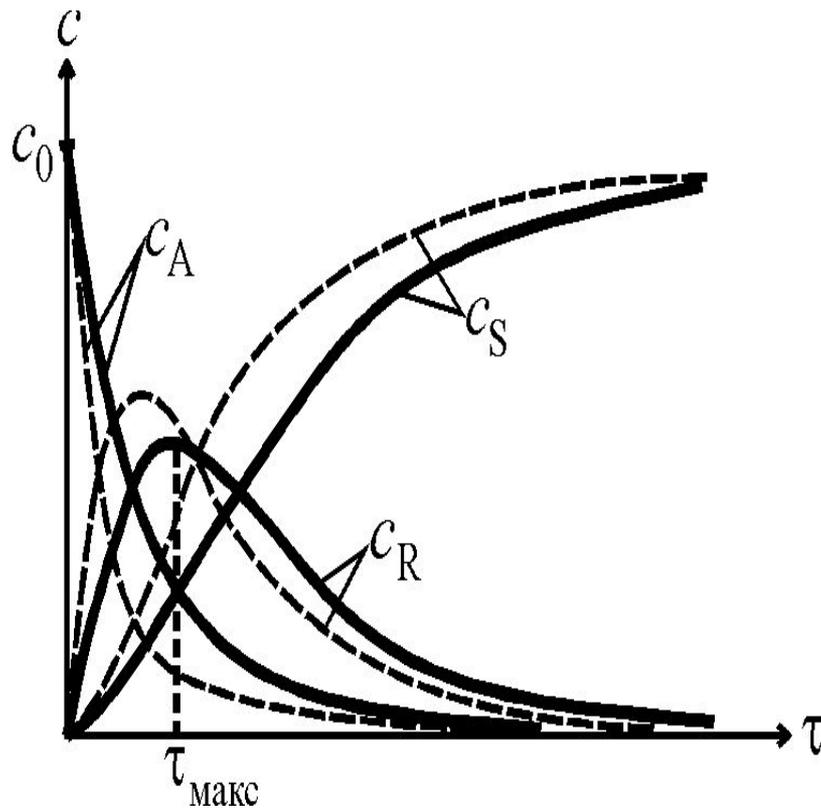
Зависимость концентрации реагентов в РИВ от условного времени пребывания или в РИС-п от времени процесса;
 сплошные линии - при T_1 и E_1 ,
 штриховые - при $T_2 > T_1$ и $E_1 > E_2$

Сложная реакция с последовательной схемой превращения

Максимум на кривой c_R соответствует τ_{\max} – моменту, когда скорости

образования и расходования промежуточного продукта R равны, а также соответствует максимальному содержанию продукта R в смеси.

Интегральная селективность по продукту R уменьшается с глубиной превращения.

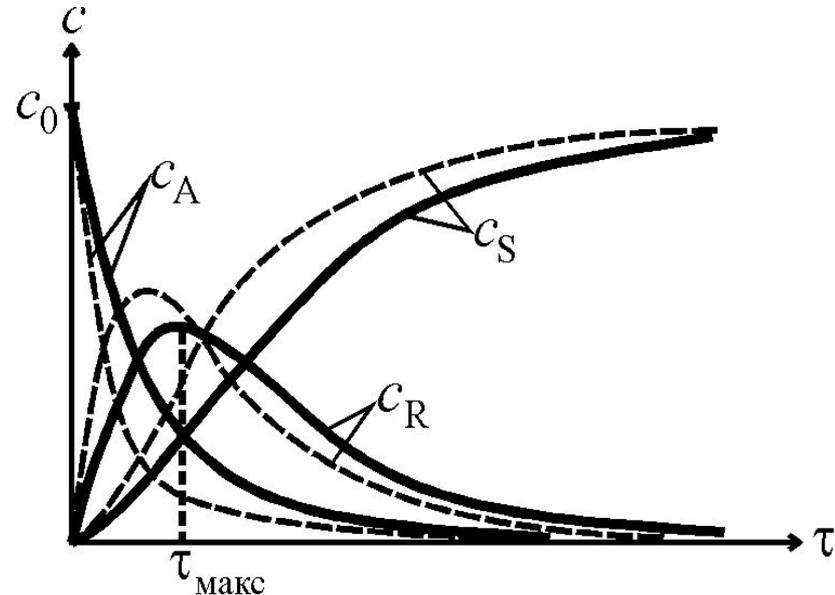


$$\tau_{R_{\max}} = \frac{\ln \frac{k_1}{k_2}}{k_1 - k_2}$$

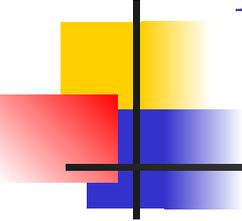
Влияние температуры

При увеличении температуры изменение концентрации любого компонента происходит за меньшее время, следовательно, τ_{\max} – время достижения максимального количества продукта R уменьшается (штриховые линии).

Если $E_1 > E_2$, то увеличение температуры способствует большему выходу промежуточного продукта R, а также увеличению селективности по R. В случае $E_2 > E_1$ максимальная концентрация и селективность по R уменьшатся.



Практические выводы



- ❖ Максимальный выход промежуточного продукта R обеспечивает проведение процесса при τ_{\max} .
- ❖ Уменьшение τ приведет к увеличению селективности по R в ущерб общему превращению.
- ❖ Увеличение τ приведет к потере как селективности S_R , так и выхода продукта R.
- ❖ Увеличение температуры целесообразно, если $E_1 > E_2$ – в этом случае возрастет интенсивность, выход промежуточного продукта R и селективность по продукту R.

Изотермический проточный реактор идеального смешения РИС-н

Простая необратимая реакция



$$\frac{c_A - c_0}{\tau} = W_A(c)$$

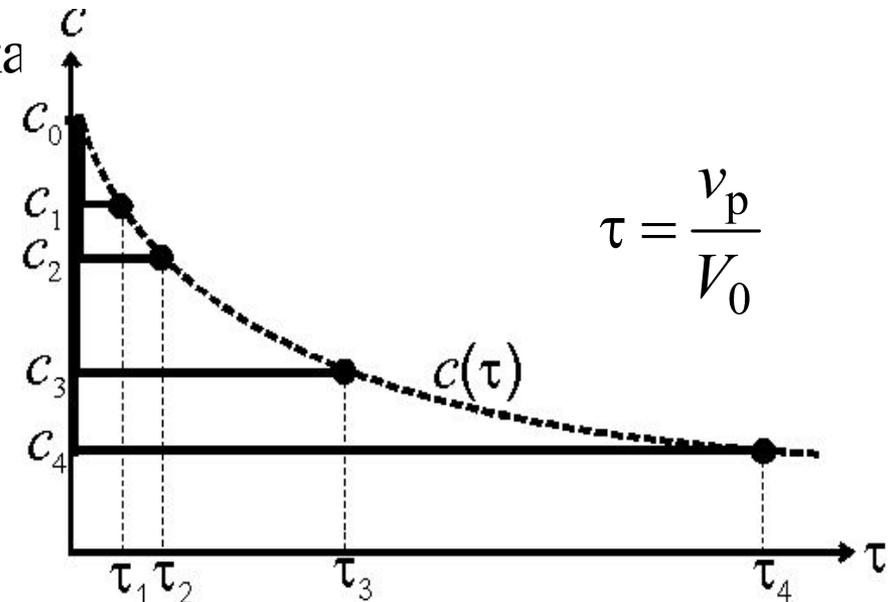
Для реакции первого порядка

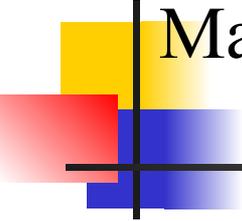
$$W_A(c) = -kc$$

$$c_A = \frac{c_0}{1 + k\tau}, \quad x_A = \frac{k\tau}{1 + k\tau}$$

Характер влияния T , c_0 , n на $c(\tau)$ такой же, как в РИВ

Кривая $c(\tau)$ - геометрическое место точек для реакторов с различным τ (для реакторов разного объёма v_p или для одного реактора при разной нагрузке на него V_0 .)
Распределение концентрации внутри реактора - горизонтальная





Материальный баланс для элементарного объема:

$$v_0 \cdot c_{A0} = v_0 \cdot c_A - r_A \cdot V_{puc}$$

$$v_0 \cdot (c_{A0} - c_A) = k \cdot c_A^n \cdot V_{puc}$$

$$\tau = V_p / v_0$$

τ - условное время пребывания

$$c_{A0} - c_A / \tau_{puc} = k \cdot c_A^n$$

$$c_{A0} - c_A / \tau_{puc} = k \cdot c_{A0}^n \cdot (1 - x_A)^n$$

$$\tau_{puc} = c_{A0} \cdot x_A / k \cdot c_{A0}^n \cdot (1 - x_A)^n$$

При $n=0$:

$$\tau = c_{A0} \cdot x_A / k$$

При $n=1$:

$$\tau = x_A / k \cdot (1 - x_A)$$

При $n=2$:

$$\tau = x_A / k \cdot c_{A0} \cdot (1 - x_A)^2$$

Простая обратимая реакция $A \rightleftharpoons R$.

Скорость превращения описывается уравнением

$$W(c) = -(k_1 c_A - k_2 c_R).$$

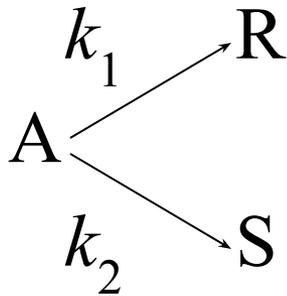
Переходя к степени превращения x компонента A из решения уравнения:

$$x = \frac{k_1 \tau}{1 + (k_1 + k_2)}$$

Характер зависимости $x(\tau)$ и влияние на неё температуры - как в РИВ

Сложные реакции.

(при протекании частных реакций первого порядка)



$$\frac{c_A - c_0}{\tau} = -(k_1 + k_2)c_A; \quad c_A = \frac{c_0}{1 + (k_1 + k_2)\tau};$$

$$\frac{c_R}{\tau} = k_1 c_A; \quad c_R = \frac{k_1 \tau c_0}{1 + (k_1 + k_2)\tau};$$

$$\frac{c_S}{\tau} = k_2 c_A; \quad c_S = \frac{k_2 \tau c_0}{1 + (k_1 + k_2)\tau}.$$

$$\frac{c_A - c_0}{\tau} = -k_1 c_A;$$

$$\frac{c_R}{\tau} = k_1 c_A - k_2 c_R;$$

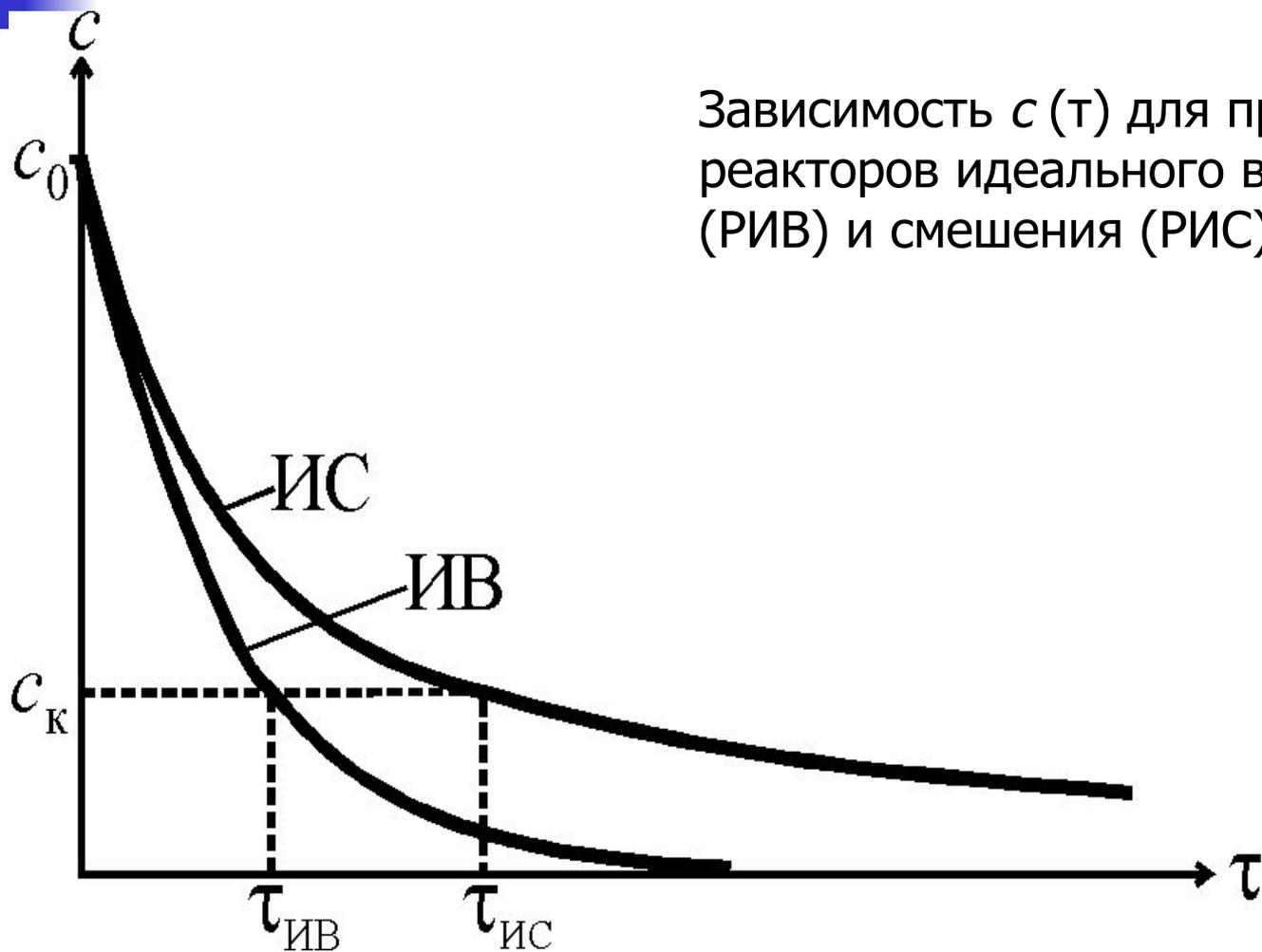
$$\frac{c_S}{\tau} = k_2 c_R;$$

$$c_A = \frac{c_0}{1 + k_1 \tau};$$

$$c_R = \frac{k_1 \tau c_0}{(1 + k_1 \tau)(1 + k_2 \tau)};$$

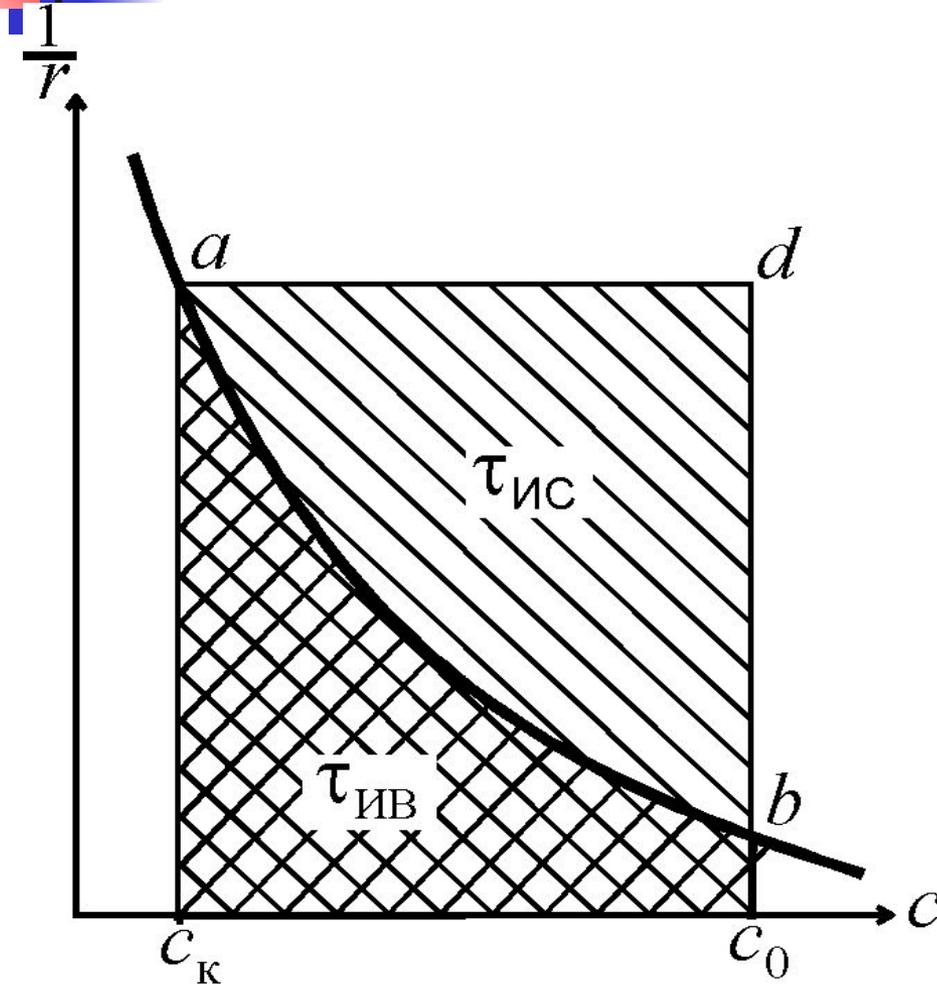
$$c_S = \frac{k_1 k_2 \tau^2 c_0}{(1 + k_1 \tau)(1 + k_2 \tau)}.$$

Сопоставление непрерывных процессов в РИС и РИВ



Зависимость $c(\tau)$ для проточных реакторов идеального вытеснения (РИВ) и смешения (РИС)

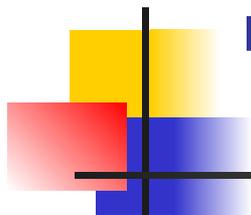
Графический метод определения условного времени в реакторах идеального смешения ($\tau_{ИС}$) и вытеснения ($\tau_{ИВ}$)



$$\tau_{ИВ} = \int_{C_K}^{C_0} \frac{dC}{r(C)}$$

$$\tau_{ИС} = \frac{C_0 - C_K}{r(C_K)}$$

При протекании сложных реакций реакторы сравнивают не только по интенсивности режимов в них, но и по селективности.



В РИС интегральная селективность процесса равна дифференциальной при конечной концентрации $S'_R(c_K)$.

В РИВ интегральная селективность процесса равна среднеинтегральной величине между $S'_R(c_0)$ и $S'_R(c_K)$.

Из этого следует:

- при $n_1 = n_2$: $S'_R(c_0) = S'_R(c_K)$, $S_{ИВ} = S_{ИС}$;
- при $n_1 > n_2$: $S'_R(c_0) > S'_R(c_K)$, $S_{ИВ} > S_{ИС}$;
- при $n_1 < n_2$: $S'_R(c_0) < S'_R(c_K)$, $S_{ИВ} < S_{ИС}$.

В случае последовательной схемы превращения **режим идеального вытеснения и более интенсивен, и более селективен по промежуточному продукту.**

