

Тема № 5

Математические модели химических реакторов

Характеристика химических реакторов

1. В зависимости от фазового состояния реагирующих веществ
2. По характеру операций питания (загрузки) реагентами и удаления (выгрузки) продуктов реакции
3. По режиму движения реакционной среды или по структуре потоков вещества,
4. По тепловому режиму
5. По конструктивным признакам

Математическая модель реактора идеального смешения

модель идеального смешения

$$\frac{dC}{dt} = \frac{1}{\tau} \cdot (C_0 - C)$$

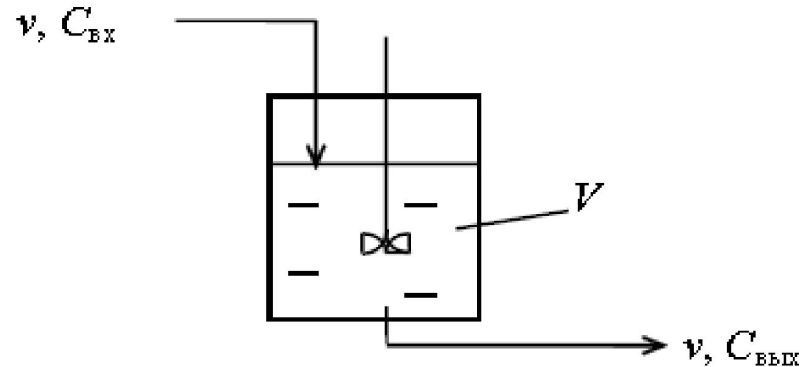


Схема реактора идеального смешения

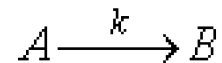
Динамическая модель изотермического реактора идеального смешения непрерывного действия

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{1}{\tau} \cdot (C_{\text{вх}} - C_{\text{вых}}) \pm W_i.$$

где C_i – концентрация i -го вещества, кмоль/м³; W_i – скорость реакций по i -му веществу, кмоль/м³

Математическая модель реактора идеального смешения

Математическая модель реактора идеального смешения для реакции для динамического режима работы



$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{1}{\tau} (C_{A_0} - C_A) - kC_A;$$

Начальные условия: $t=0 \quad C_A(0) = C_{A_0}; \quad C_B(0) = 0$

$$\frac{dC_B}{dt} = \frac{1}{\tau} (C_{B_0} - C_B) + kC_A.$$

Стационарный режим работы аппарата:

$$\frac{dC_A}{dt} = 0; \quad \frac{dC_B}{dt} = 0$$

Математическая модель реактора идеального смешения

При решении данных уравнений можно найти следующие основные параметры:

- время контакта, характеризующее объем аппарата;
- степень превращения и селективность процесса;
- изменение концентраций реагирующих веществ как функцию от времени контакта

$$\frac{1}{\tau}(C_{A_0} - C_A) - kC_A = 0,$$

$$C_{A_0} - C_A = \tau k C_A,$$

$$\tau = \frac{C_{A_0} - C_A}{kC_A};$$

$$C_A = \frac{C_{A_0}}{1 + \tau k},$$

$$x_A = \frac{C_{A_0} - C_A}{C_{A_0}};$$

$$C_A = C_{A_0}(1 - x_A);$$

$$\tau = \frac{C_{A_0} - C_{A_0}(1 - x_A)}{kC_{A_0}(1 - x_A)};$$

$$\tau = \frac{x_A}{k(1 - x_A)}.$$

Математическая модель реактора идеального смешения

Уравнение теплового баланса:

адиабатический реактор

$$\rho^{\text{см}} C_{\text{p}}^{\text{см}} \frac{dT}{dt} = \frac{\rho^{\text{см}} C_{\text{p}}^{\text{см}}}{\tau} \cdot (T_{\text{вх}} - T) + \sum_{j=1}^N (\pm \Delta H_i) \cdot W_i,$$

политропический реактор:

$$C_{\text{p}}^{\text{см}} \frac{dT}{dt} = \frac{C_{\text{p}}^{\text{см}}}{\tau} \cdot (T_{\text{вх}} - T) + \sum_{j=1}^N (\pm \Delta H_i) \cdot W_i + KF\Delta T,$$

где W_i – скорость i -й химической реакции; ΔH_i – тепловой эффект i -й химической реакции; $C_{\text{p}}^{\text{см}}$ – теплоемкость реакционной смеси; $T_{\text{вх}}$ – температура на входе в реактор; T – текущее значение температуры.

Математическая модель реактора идеального смешения

Теплоемкость i -го вещества как функция температуры описывается следующим уравнением:

$$C_{pi} = (a_i + b_i \cdot T + c_i \cdot T^2 + d_i \cdot T^3) \cdot 4,1887.$$

Теплоемкость смеси вычисляется по правилу аддитивности:

$$C_p^{\text{см}} = \sum_{i=1}^{IV} C_{pi} \cdot C_i,$$

где C_i – концентрация i -го вещества смеси

Математическая модель реактора идеального вытеснения

Динамическая модель изотермического реактора идеального вытеснения непрерывного действия

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -u \frac{\partial C_i}{\partial l} \pm W_i,$$

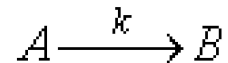
где C_i – концентрация соответствующего i -го вещества; W_i – скорость реакции по i -му веществу.

Уравнение теплового баланса *адиабатического* реактора идеального вытеснения

$$\rho^{\text{см}} \cdot C_p^{\text{см}} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = -U \cdot \rho^{\text{см}} \cdot C_p^{\text{см}} \cdot \frac{\partial T}{\partial l} + \sum_{i=1}^N \left(\pm \Delta H_i \right) \cdot W_i.$$

Математическая модель реактора идеального вытеснения

Для реакции:



протекающей в изотермическом реакторе идеального вытеснения, математическая модель (динамический режим) будет иметь вид:

$$\begin{aligned}\frac{\partial C_A}{\partial t} &= -u \cdot \frac{\partial C_A}{\partial l} - k \cdot C_A, \\ \frac{\partial C_B}{\partial t} &= -u \cdot \frac{\partial C_B}{\partial l} + k \cdot C_A.\end{aligned}$$

В установившемся (стационарном) режиме работы реактора: $\frac{dC_A}{dt} = 0$; $\frac{dC_B}{dt} = 0$

Тогда уравнения примут следующий вид:

$$\begin{aligned}u \frac{dC_A}{dl} &= -k \cdot C_A; \\ u \frac{dC_B}{dl} &= k \cdot C_A.\end{aligned}$$

Математическая модель реактора идеального вытеснения

Так как $\frac{l}{u} = \tau$ то уравнения примут вид:

$$\frac{dC_A}{d\tau} = -k \cdot C_A;$$

$$\frac{dC_B}{d\tau} = k \cdot C_A,$$

где τ – время контакта, с

При решении системы уравнений можно найти следующие параметры:

- время контакта;
- степень превращения и селективность процесса;
- изменение концентраций реагирующих веществ как функцию от времени контакта;

$$\tau = -\frac{1}{K} \int_{C_{A_0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A};$$

$$\tau = -\frac{1}{K} (\ln C_{A_0});$$

$$\tau = -\frac{1}{K} \ln \frac{C_A}{C_{A_0}}; \tau = \frac{1}{K} \ln \frac{C_{A_0}}{C_A};$$

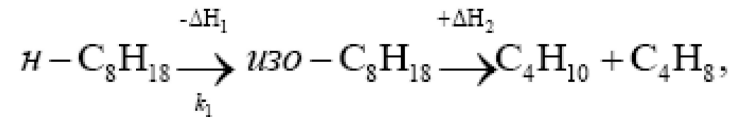
$$C_A = C_{A_0} e^{-K\tau};$$

$$C_A = C_{A_0} (1 - x_A);$$

$$\tau = \frac{1}{K} \ln \frac{C_{A_0}}{C_{A_0} (1 - x_A)};$$

$$\tau = \frac{1}{K} \ln \frac{1}{1 - x_A}.$$

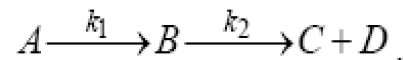
Исследование химического процесса, протекающего в гомогенном реакторе идеального смешения



где $\Delta H_1 = -7,03$ Дж/моль при (700 К) – экзотермическая реакция;

$\Delta H_2 = +85,89$ Дж/моль – эндотермическая реакция

Представим химическую реакцию в виде:



Математическая модель процесса

$$\begin{aligned} \frac{dC_A}{dt} &= \frac{1}{\tau} \cdot (C_{A_0} - C_A) - k_1 \cdot C_A; \\ \frac{dC_B}{dt} &= \frac{1}{\tau} (C_{B_0} - C_B) + k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_B; \\ \frac{dC_C}{dt} &= \frac{1}{\tau} (C_{C_0} - C_C) + k_2 \cdot C_B; \\ \frac{dC_D}{dt} &= \frac{1}{\tau} (C_{D_0} - C_D) + k_2 \cdot C_B; \\ \frac{dT}{dt} &= \frac{1}{\tau} (T_0 - T) + \frac{(Q_1 \cdot k_1 \cdot C_A + Q_2 \cdot k_2 \cdot C_B) \cdot R \cdot T / p}{C_p}, \end{aligned}$$

P – давление в реакторе, Мпа

Исследование химического процесса, протекающего в гомогенном реакторе идеального смешения

Начальные условия:

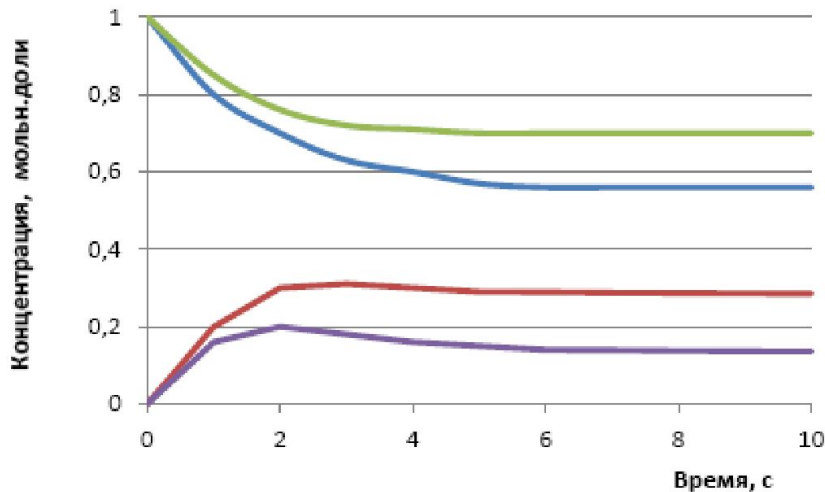
при $t=0$ $C_A(0)=C_{A,0}$; $C_B(0)=C_C(0)=C_D(0)=0$, R – универсальная газовая постоянная

Так как тепловой эффект реакции (Q_i) равен величине энтальпии i -й реакции (ΔH_i) с обратным знаком:

$$Q_i = -\Delta H_i,$$

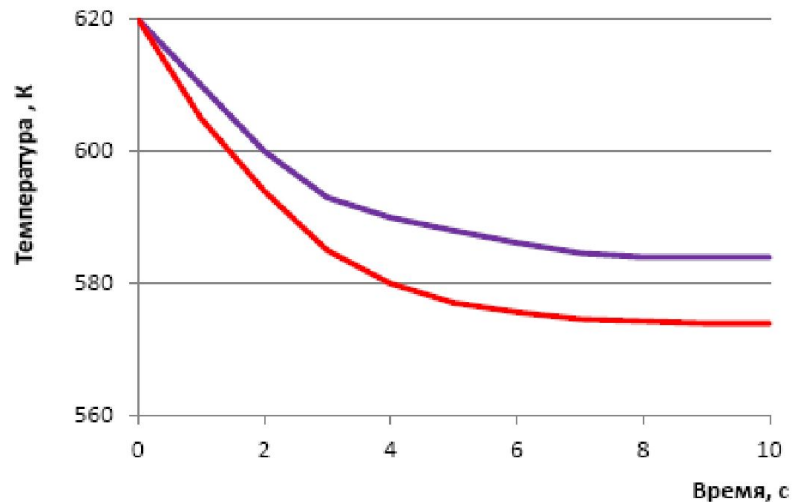
то $Q_1=7,03$ Дж/моль, $Q_2 = - 285,89$ Дж/моль

Исследование химического процесса, протекающего в гомогенном реакторе идеального смешения



Зависимость концентраций реагирующих веществ от времени

— n-C8H18, время контакта 6с. — и-C8H18, время контакта 6с.
— n-C8H18, время контакта 3с. — и-C8H18, время контакта 3с.

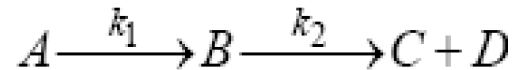


Зависимость изменения температуры от времени

— время контакта 3с — время контакта 6с

Исследование химического процесса, протекающего в реакторе идеального вытеснения в стационарном режиме

Пусть в реакторе идеального вытеснения (РИВ) протекает химическая реакция

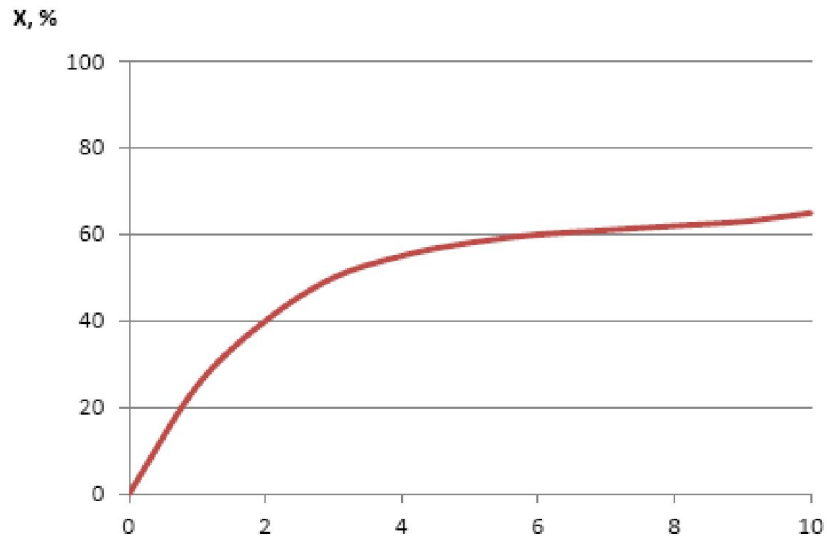


Математическая модель химического процесса:

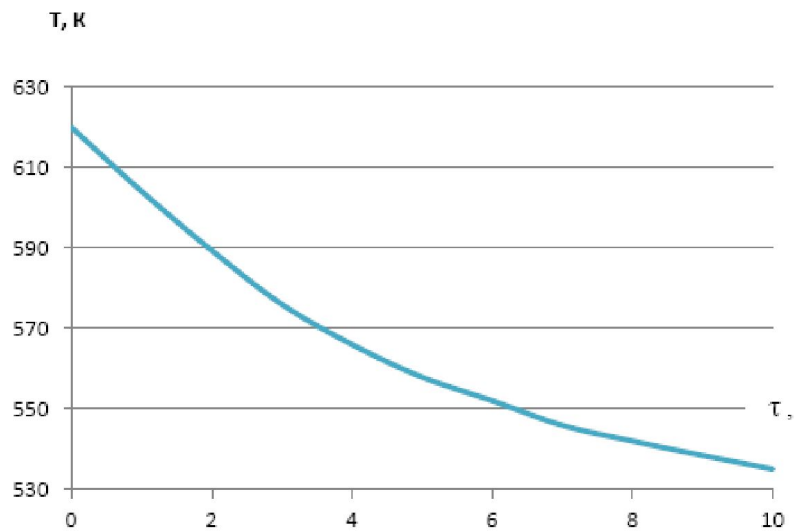
$$\begin{aligned}\frac{dC_A}{d\tau} &= -k_1 \cdot C_A; \\ \frac{dC_B}{d\tau} &= k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_B; \\ \frac{dC_C}{d\tau} &= k_2 \cdot C_B; \\ \frac{dC_D}{d\tau} &= k_2 \cdot C_B; \\ \frac{dT}{d\tau} &= \frac{(Q_1 \cdot k \cdot C_A - Q_2 \cdot k_2 \cdot C_B) \cdot R \cdot T / p}{C_p},\end{aligned}$$

где k_1, k_2 – константы скоростей реакций; C_A, C_B, C_C, C_D – концентрации компонентов

Исследование химического процесса, протекающего в реакторе идеального вытеснения в стационарном режиме

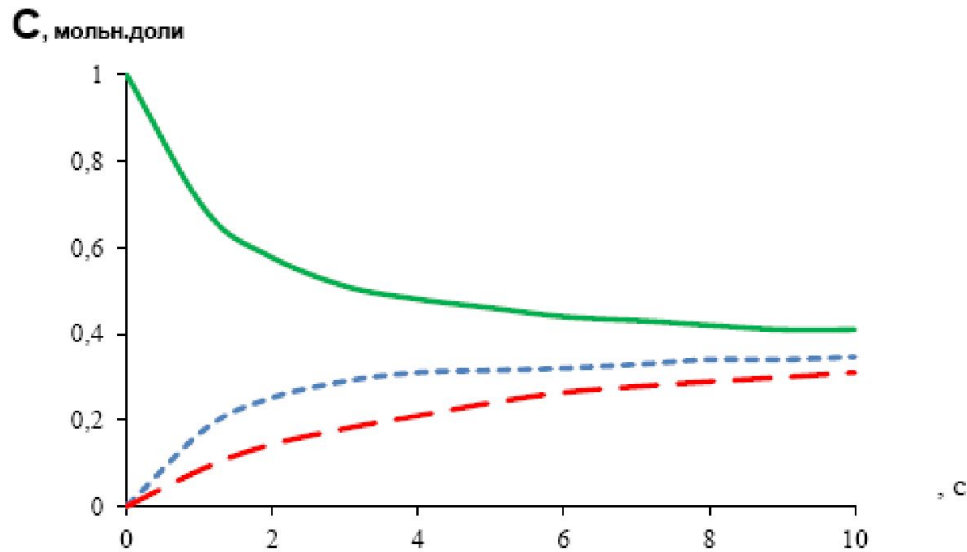


Зависимость степени превращения от времени контакта



Зависимость изменения температуры в реакторе идеального вытеснения от времени контакта

Исследование химического процесса, протекающего в реакторе идеального вытеснения в стационарном режиме



Изменение концентрации компонентов в реакторе идеального вытеснения от времени контакта: