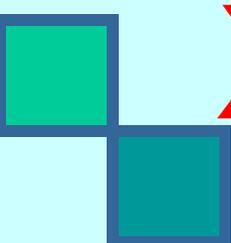
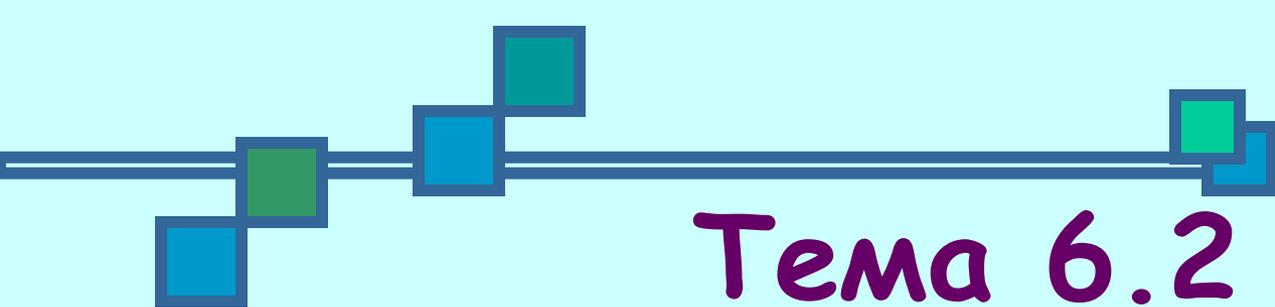


Тема 6



Химический процесс на уровне реакционного объема





Тема 6.2

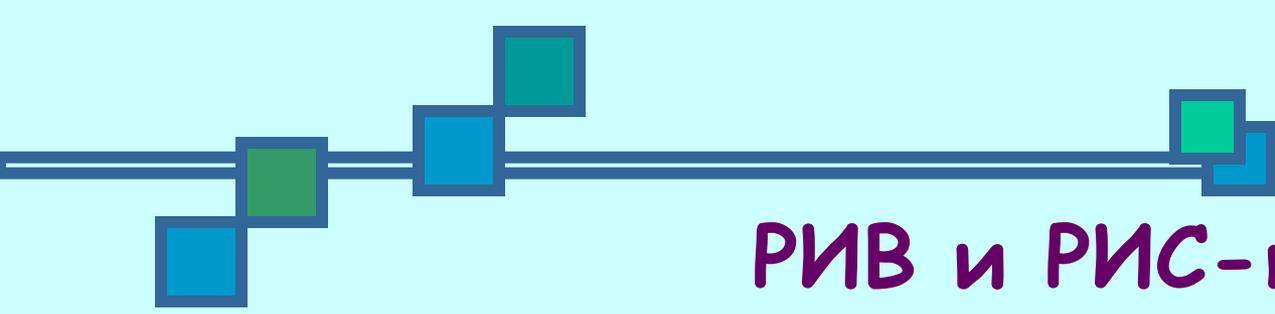
Изотермический процесс в реакционном объеме

- *Режимы идеального вытеснения и периодический идеального смешения*
 - *Режим проточный идеального смешения*
 - *Сопоставление непрерывных изотермических процессов в РИВ и РИС-н*
- 



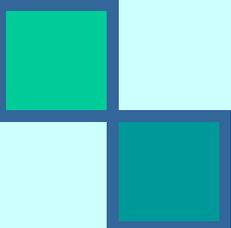
Изотермический процесс в реакционном объеме

- Отсутствуют тепловые изменения
 - Происходящие явления отражаются только в состоянии материальных потоков
- 



РИВ и РИС-п

- Математическая модель РИВ и РИС-п

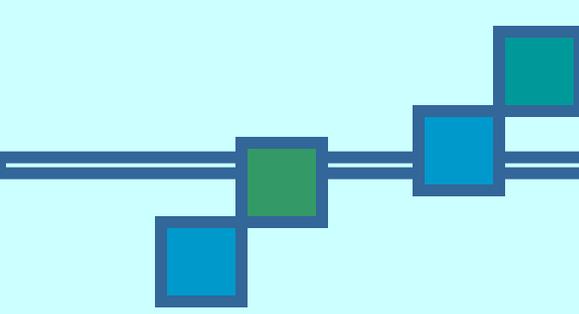

$$\frac{dC}{d\tau} = W(C)$$

при $\tau = 0, C = C_0$

Переходя к конверсии, при $\tau = 0, x = 0$



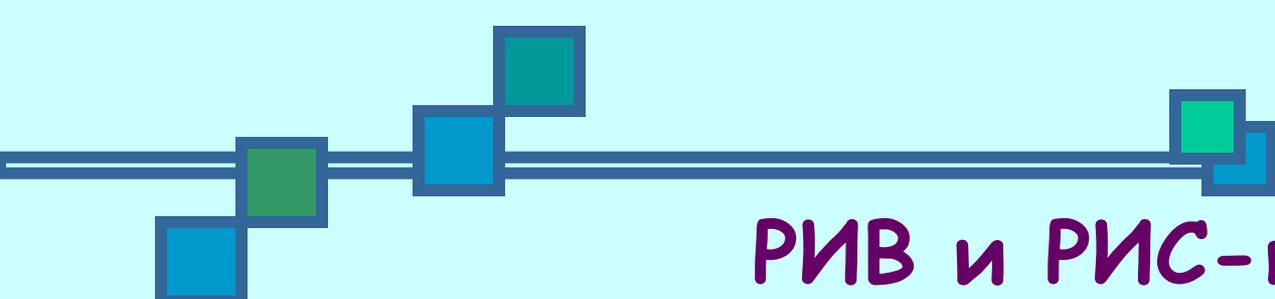
$$d\tau = \frac{C_0 dx}{W(C)}$$



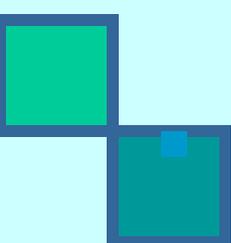
РИВ и РИС-п

- *Характеристическое уравнение идеального режима (РИС-п или РИВ)*

$$\tau = C_0 \int_0^x \frac{dx}{W(C)}$$

РИВ и РИС-п
Простая необратимая реакция
 $A = R$



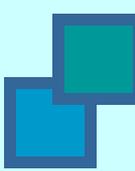
Кинетическое уравнение

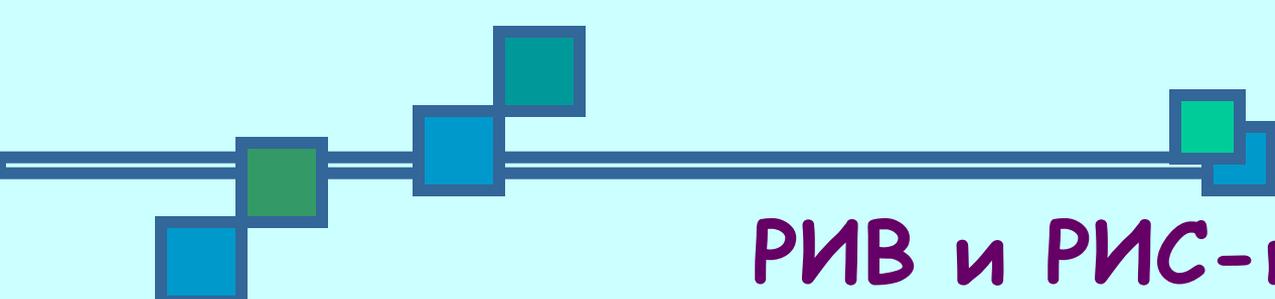
$$W(C) = kC^n$$

- Модель процесса при $\tau = 0, C = C_0$

$$\frac{dC}{d\tau} = -kC^n$$

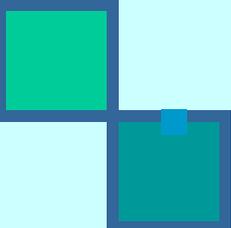
- при $\tau = 0, x = 0$

$$\frac{dx}{d\tau} = -kC_0^{n-1}(1-x)^n$$




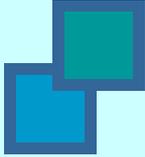
РИВ и РИС-п

Простая необратимая реакция



Интегрируем и получаем

$$\frac{1}{n-1} \left(C^{1-n} - C_0^{1-n} \right) = -k\tau$$

- Получаем зависимость $C(\tau)$
- 

$$C = \left[C_0^{1-n} - (1-n)k\tau \right]^{1/(1-n)}$$

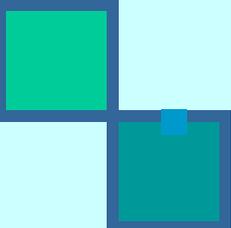
и

$$C = \frac{1}{\left[C_0^{1-n} + (n-1)k\tau \right]^{1/(n-1)}}$$



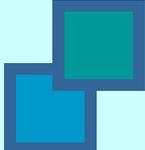
РИВ и РИС-п

Простая необратимая реакция



Вводим конверсию вместо концентрации

$$\frac{1}{1-n} \left[1 - (1-x)^{1-n} \right] = kC_0^{n-1} \tau$$

- *Получаем зависимость $x(\tau)$*
- 

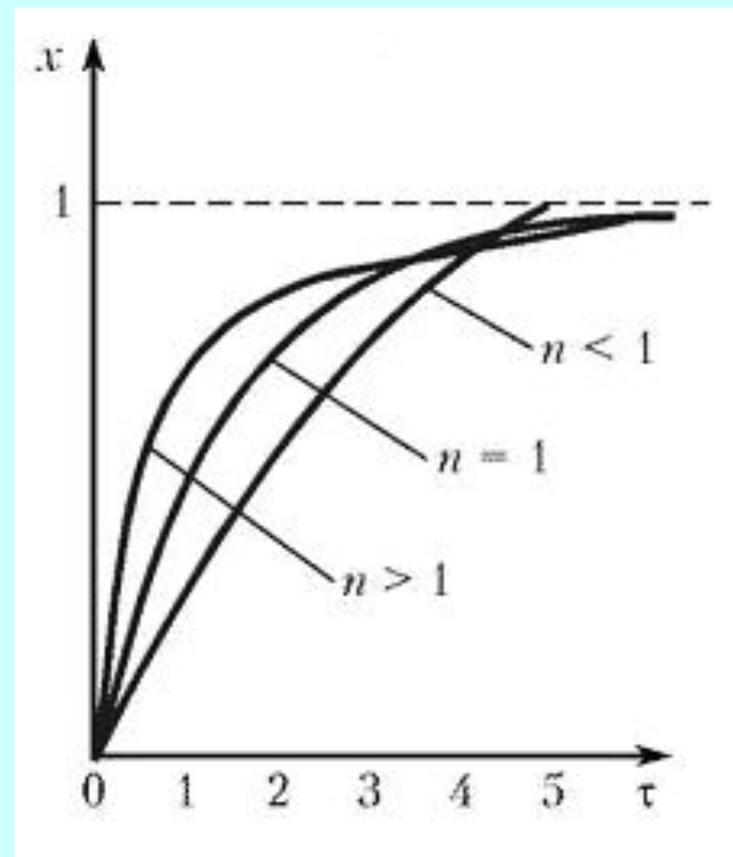
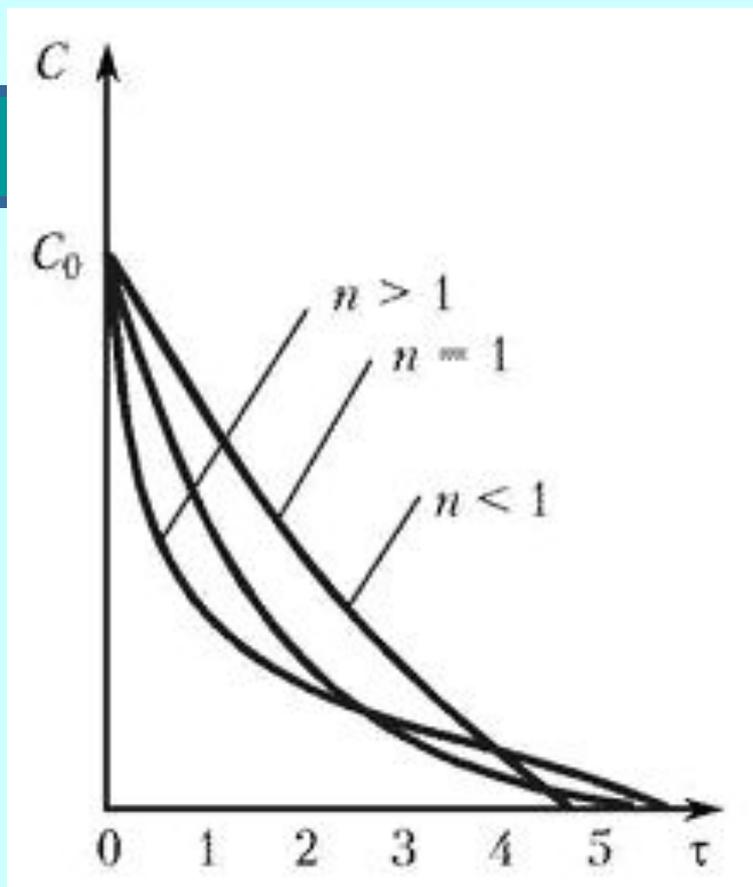
$$x = 1 + \left[\frac{k(1-n)}{C_0^{1-n}} \tau - 1 \right]^{1/(1-n)}$$

и

$$x = 1 - \frac{1}{\left[1 - k(n-1)C_0^{n-1} \tau \right]^{1/(n-1)}}$$

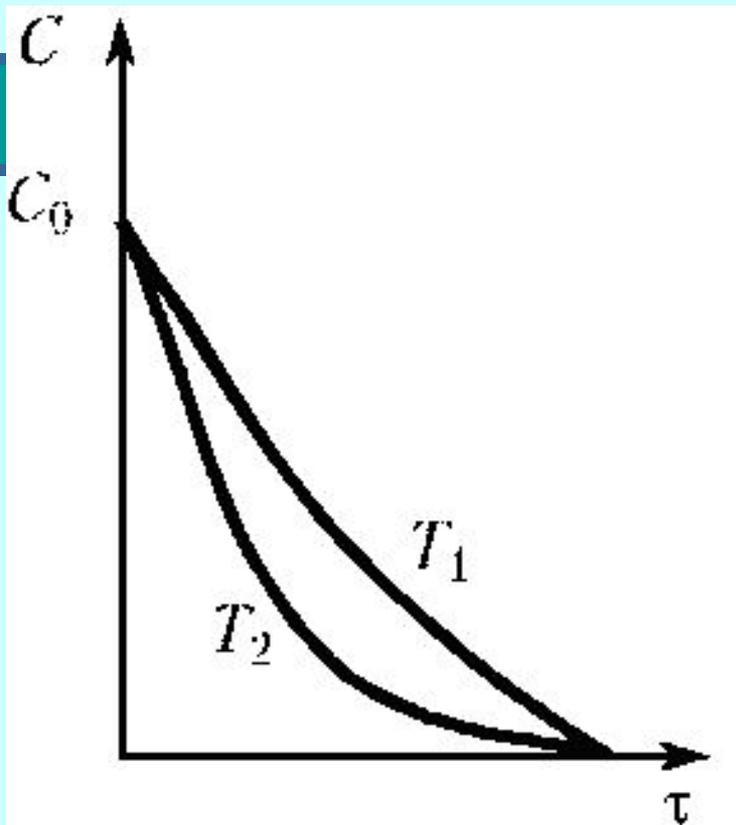
РИВ и РИС-п

Простая необратимая реакция

$$A = R$$


РИВ и РИС-п

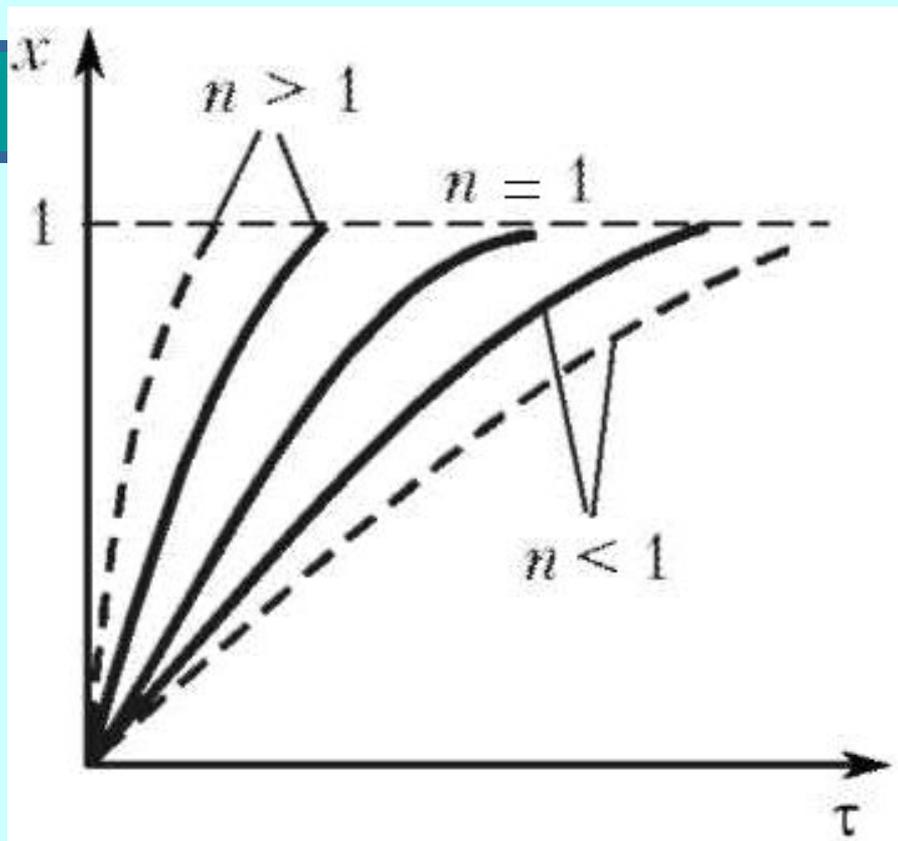
Простая необратимая реакция



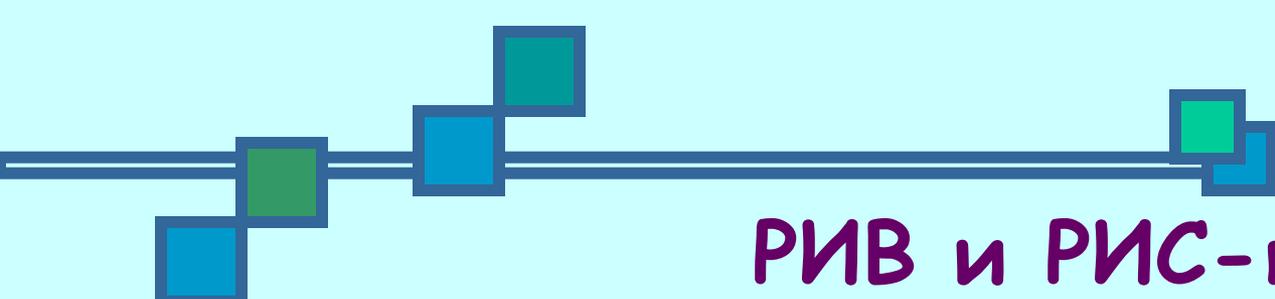
- Влияние температуры на зависимость C (τ)
- $T_2 > T_1$

РИВ и РИС-п

Простая необратимая реакция

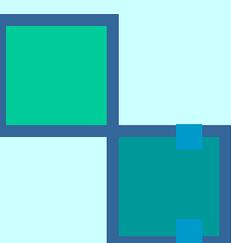
$$A = R$$


- Влияние C_0 на зависимость $x(\tau)$ для реакции порядка n
- $C_{02} > C_{01}$ (сплошные линии – при C_{01} , пунктирные – при C_{02})



РИВ и РИС-п

Простая необратимая реакция

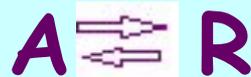


Анализ зависимости $C(\tau)$ и $x(\tau)$ показывает:

- в РИС-п - влияние условий процесса на изменение C и x во времени,
 - - в РИВ - распределение C и x по длине реакционной зоны.
 - Эти особенности режимов существенно сказываются при переносе свойств моделей на процесс в промышленном реакторе.
- 

РИВ и РИС-п

Простая обратимая реакция



Кинетическое уравнение (для реакций 1-го порядка в обоих направлениях)

$$W(C) = k_1 C_A - k_2 C_R$$

- *Модель процесса при $\tau = 0, x = 0$ с учетом*

$$C_A = C_0(1-x) \text{ и } C_R = C_0 x$$

- $\frac{dx}{d\tau} = k_1(1-x) - k_2 x$ *ИЛИ*

$$\frac{dx}{d\tau} = k_1 - (k_1 + k_2)x$$

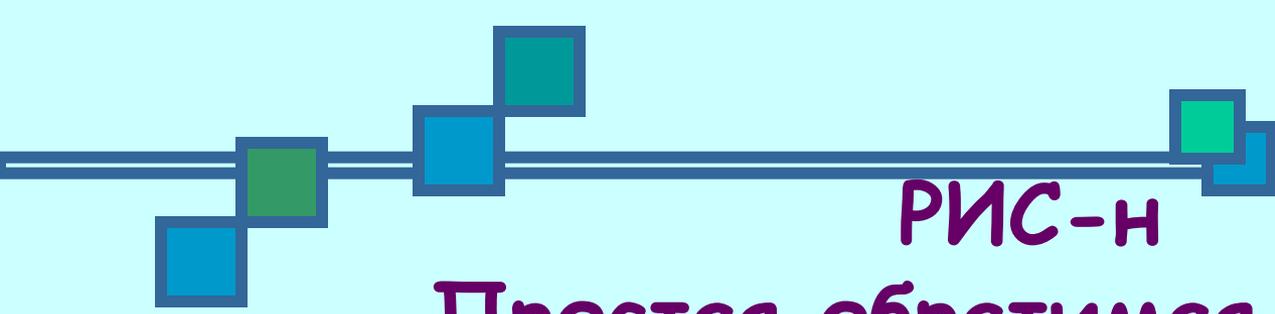
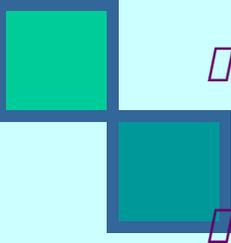
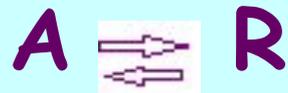


РИС-н

Простая обратимая реакция



□ Интегрируем и получаем

$$-\frac{\ln[k_1 - (k_1 + k_2)x] - \ln k_1}{k_1 + k_2} = \tau \quad \text{или}$$

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


□ При $\tau \rightarrow \infty$ достигается равновесие и конверсия равна

$$x_p = \frac{k_1}{k_1 + k_2}$$

РИВ и РИС-п

Простая обратимая реакция

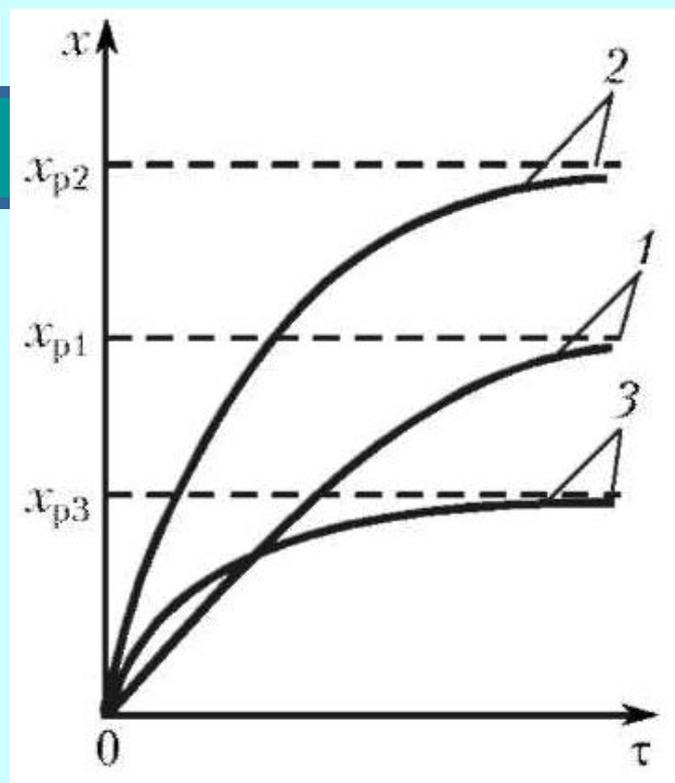
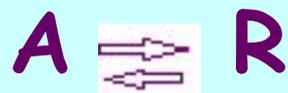


Анализ

- C_0 : Начальная концентрация реагента не влияет на степень превращения
- T : k_1 и k_2 увеличиваются в повышением T , но k_1 увеличивает, а k_2 уменьшает скорость. Суммарный эффект определяется интенсивностью увеличения k_1 и k_2 , зависящей от E_1 и E_2 . При повышении T более интенсивно растет k реакции с большей E .

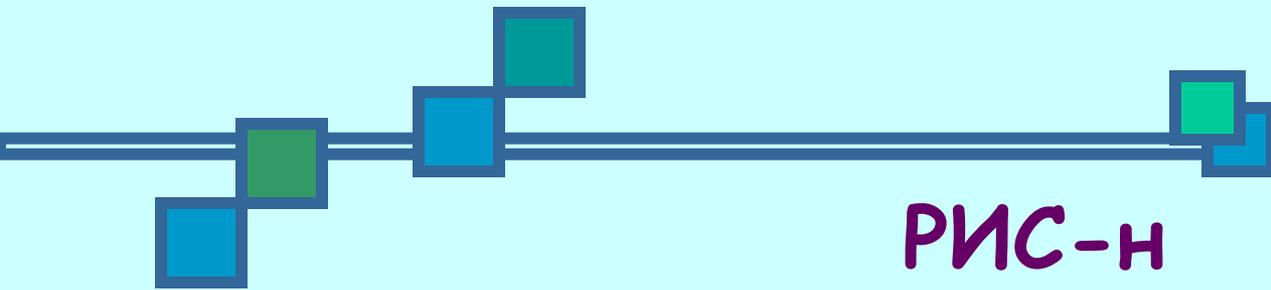
РИВ и РИС-п

Простая обратимая реакция



Зависимость $x(\tau)$ для обратимых реакций при $T_1 < T_2$

- 1, 3 – эндотермическая обратимая реакция при T_1 и T_2 соответственно;
- 2 – экзотермическая обратимая реакция при T_2 .
- Пунктирные линии – равновесные степени превращения x_p для тех же условий



- Математическая модель РИС-н

$$\frac{C_0 - C}{\tau} = W(C)$$

ИЛИ

$$\tau = \frac{C_0 - C}{W(C)}$$

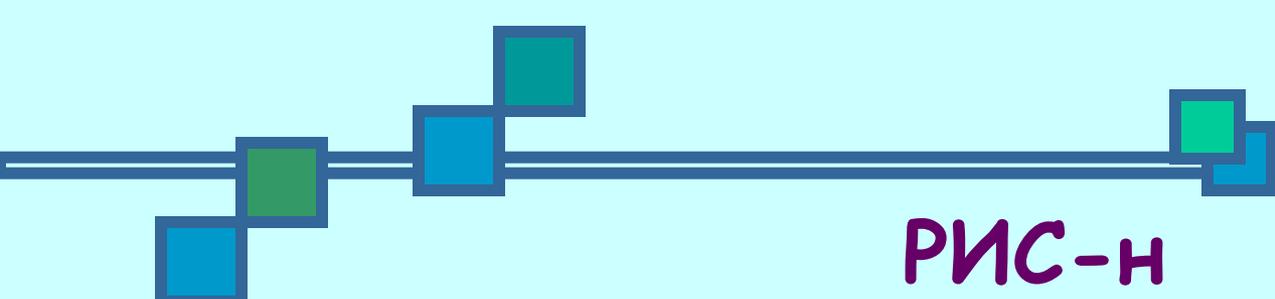
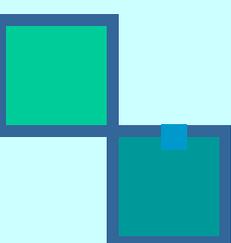


РИС-н

Простая необратимая реакция



Кинетическое уравнение (для реакции 1-го порядка)

$$\frac{C_0 - C}{\tau} = kC \quad \text{или} \quad \frac{x}{\tau} = k(1 - x)$$

■ Модель процесса

$$C = \frac{C_0}{1 + k\tau} \quad \text{или} \quad x = k\tau(1 + k\tau)$$

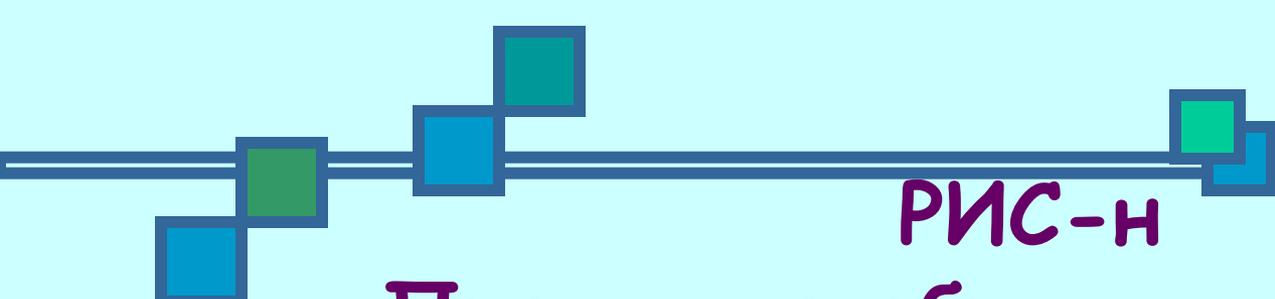
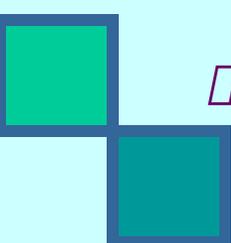



РИС-н

Простая необратимая реакция



- 
- При заданном значении нагрузки V_0 время реакции - фиксированная величина

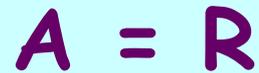
$$\tau = \frac{V_p}{V_0}$$

концентрация реагентов при постоянном C_0 во всем объеме одинакова и равна C (область перехода от C_0 до C на входе очень мала, ею можно пренебречь)



РИС-н

Простая необратимая реакция

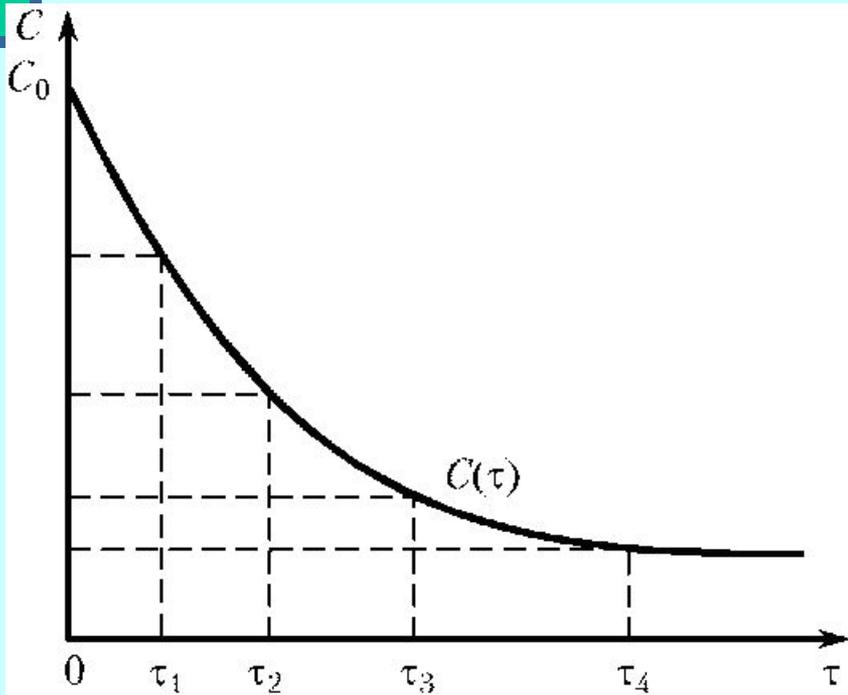


□ Зависимость $C(\tau)$

□ Зависимость $C(\tau)$
получают
изменением V_p

при $V_0 = \text{const}$, или
нагрузки V_0

при $V_p = \text{const}$



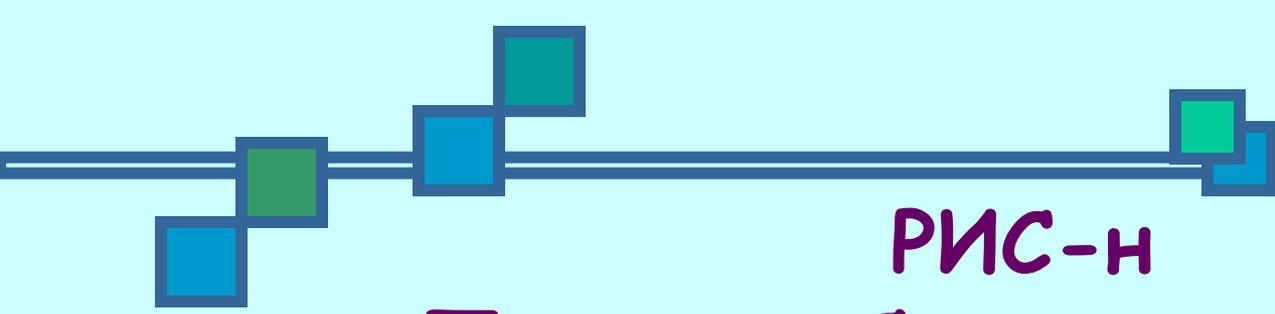
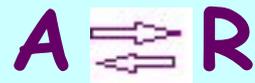


РИС-н

Простая обратимая реакция



Кинетическое уравнение (для реакций 1-го порядка в обоих направлениях)

$$W(C) = k_1 C_A - k_2 C_R$$

- *Модель процесса*

$$\frac{C_0 - C}{\tau} = k_1 C_A - k_2 C_R \text{ или } \frac{x}{\tau} = k_1(1 - x) - k_2 x$$

или

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

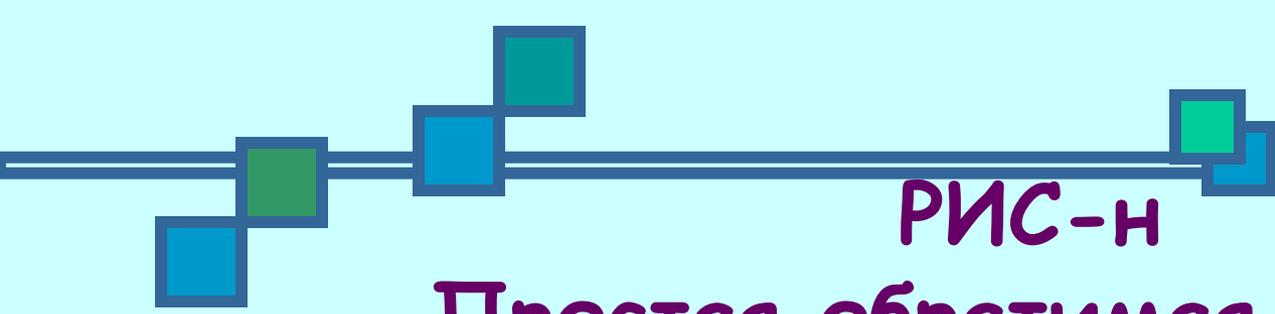
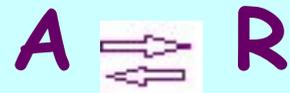



РИС-н

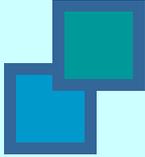
Простая обратимая реакция



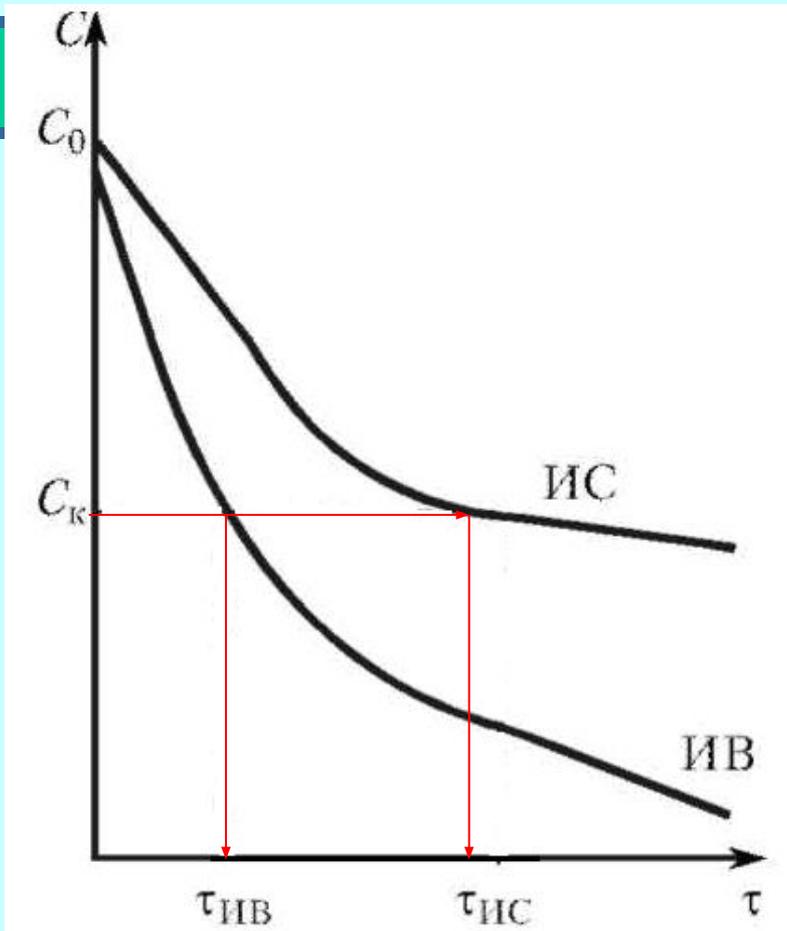
□ При $\tau \rightarrow \infty$ достигается равновесие и конверсия равна

$$x_p = \frac{k_1}{k_1 + k_2}$$

□ Равновесная конверсия в РИС-н совпадает с x_p в РИВ
Следовательно, зависимость $X(\tau)$ и влияние на нее
условий процесса, будут такими же, как и в режиме
РИВ



Сопоставление РИВ и РИС-н

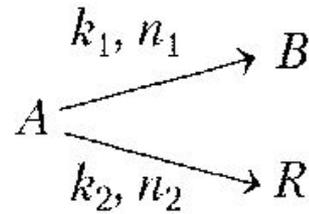


- Зависимость концентрации C в РИВ и РИС-н
- Из графика видно:
- $T_{РИВ} < T_{РИС}$ и $V_{РИВ} < V_{РИС}$

Сопоставление РИВ и РИС-н

- Для сложных реакций режим движения потоков влияет на селективности превращения.

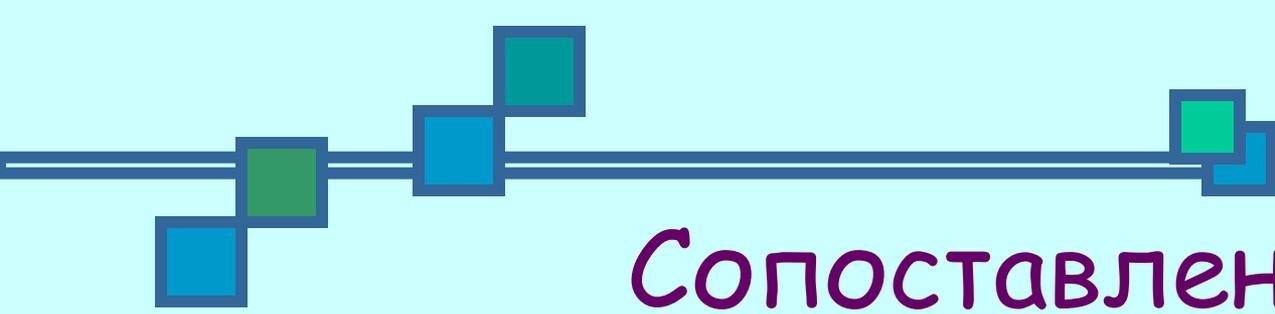
- Для реакции



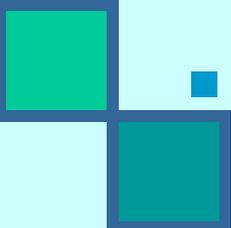
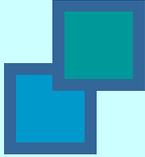
интегральная

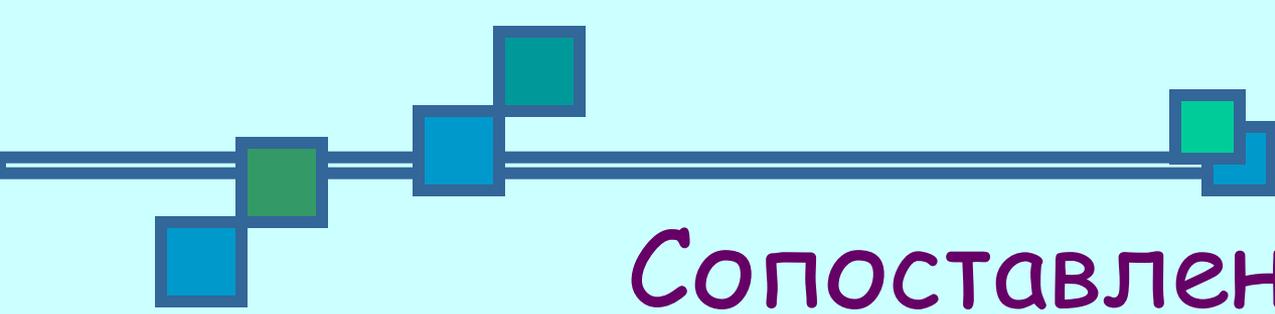
селективность превращения A в B

$$S = \frac{W_B}{W_R} = \frac{k_1 C_A^{n_1}}{k_2 C_A^{n_2}} = \frac{k_1}{k_2} C_A^{n_1 - n_2}$$

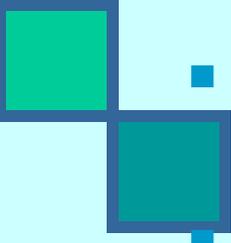


Сопоставление РИВ и РИС-н

- 
- Следовательно, при проведении процесса в РИВ и РИС возможны три варианта:
 - $S_{РИВ} = S_{РИС}$ для $n_1 = n_2$;
 - $S_{РИВ} > S_{РИС}$ для $n_1 > n_2$;
 - $S_{РИВ} < S_{РИС}$ для $n_1 < n_2$
- 



Сопоставление РИВ и РИС-н

- 
- Таким образом, процесс в РИВ всегда интенсивнее,
а при $n_1 > n_2$ и $n_1 = n_2$ - селективность его выше, чем в РИС.
 - При $n_1 < n_2$ увеличение селективности в РИВ достигается за счет некоторого снижения интенсивности процесса.
 - РИС удобен для процессов с медленной реакцией, когда в емкостях с перемешиванием можно обеспечить достаточно большое τ .
- 