

Программа "ОХТ-reactor"

РЕАКТОРЫ ИДЕАЛЬНОГО СМЕШЕНИЯ И ВЫТЕСНЕНИЯ

Задачи лабораторного практикума

- I. Изучение изотермического процесса в химическом реакторе при протекании простой необратимой реакции: сопоставление показателей процессов при его осуществлении в режимах идеального вытеснения (ИВ) и смешения (ИС), в каскаде реакторов (ИС-к); влияние условий и параметров процесса на его показатели.
- II. Изучение изотермического процесса в химическом реакторе при протекании простой обратной реакции: влияние условий и параметров процесса на его показатели.
- III. Изучение изотермического процесса в химическом реакторе при протекании сложной реакции: сопоставление показателей процессов при его осуществлении в режимах идеального вытеснения (ИВ) и смешения (ИС) ; влияние условий и параметров процесса на его показатели.
- IV. Изучение процесса в химическом реакторе с тепловыми явлениями (тепловыделение реакции, теплоотвод из зоны реакции)
- V. Расчет химического реактора: технологические параметры процесса в реакторе, выбор режима процесса.

Общие пояснения к лабораторной работе

Математические модели процессов в химическом реакторе

В табл. 1 и 2 приведены математические модели процесса в реакторе в различных режимах.

Процесс в реакторе при протекании простой реакции (табл. 1).

Математические модели в табл. 1 приведены в двух видах:

- "исходная модель", в которую входят химические и физические величины и параметры – концентрация, объем реактора, величина потока, коэффициенты переноса и т.д.
- "расчетная модель", в которую входят параметры в виде комбинаций первоначальных химических и физических величин. Расчетная модель используется в программе "Реакторы идеального смешения и вытеснения".

*Таблица 1. Математические модели процесса в химическом реакторе
(простая реакция)*

Режим	Исходная модель	Расчетная модель
ИС Изотермич.	$\frac{C - C_H}{\tau} = w(C)$	$\frac{x - x_H}{\tau} = r(x)$
ИБ Изотермич.	$\frac{dC}{d\tau} = w(C)$ при $\tau = 0 \quad C = C_H$	$\frac{dx}{d\tau} = r(x)$ при $\tau = 0 \quad x = x_H$
ИС Политропич.	$\frac{C - C_H}{\tau} = w(C, T)$ $c_p \frac{T - T_H}{\tau} = Q_p r(C, T) - K_T F_T (T - T_x)$	$\frac{x - x_0}{\tau} = r(x)$ $\frac{T - T_0}{\tau} = \Delta T_{ад} r(x, T) - B(T - T_x)$
ИБ Политропич.	$\frac{dC}{d\tau} = w(C, T)$ $c_p \frac{dT}{d\tau} = Q_p r(C, T) - K_T F_T (T - T_x)$ при $v_p = 0 \quad C = C_H, T = T_H$	$\frac{dx}{d\tau} = r(x)$ $\frac{dT}{d\tau} = \Delta T_{ад} r(x, T) - B(T - T_x)$ при $\tau = 0 \quad x = x_H, T = T_H$

Обозначения:

Режимы: ИБ – идеального вытеснения; ИС – идеального смешения;

C_H, C – концентрация исходного реагента на входе и текущая в реакторе;

T_H, T – температура на входе и текущая в реакторе;

$w(C), w(C, T)$ – кинетическая модель скорости реакции;

$r(x) = w(C(x))/C_0$ – приведенная скорость реакции.

$\tau = v_p/V_0$ – условное время реакции;

V_0 – объемная нагрузка на реактор (н.у.);

v_p – объем реактора;

C_0 – начальная концентрация реагента в исходной непрореагировавшей смеси (C_0 может отличаться от C_H , если на вход в реактор подается частично прореагировавшая реакционная смесь);

Q_p – тепловой эффект реакции;

c_p – теплоемкость реакционной смеси;

T_x – температура теплоносителя;

K_T – коэффициент теплопередачи из реакционного объема к теплоносителю;

F_T – поверхность теплообменной поверхности в реакторе;

Параметры расчетной модели:

$x = (C_0 - C)/C_0$ – степень превращения исходного компонента;

x_H – степень превращения исходного компонента на входе в реактор;

$\Delta T_{ад} = Q_p \cdot C_0 / c_p$ – величина адиабатического изменения температуры;

$B = K_T F_{T,уд} / c_p$ – параметр теплообмена;

$F_{T,уд} = F_T / v_p$ – удельная поверхность теплообмена в реакторе;

Простая реакция описывается одним стехиометрическим уравнением:



Ключевым веществом является компонент A. Скорость его превращения описывается кинетическим уравнением $w(C, T)$

В расчетной модели процесса используется приведенное кинетическое уравнение

$$r(x, T) = w(C(x), T)/C_0. \quad (2)$$

Для простой необратимой реакции

$$r(x, T) = K(T) \cdot f(x). \quad (3)$$

Здесь $K(T)$ – параметр, имеющий смысл константы скорости реакции и зависящей от температуры;

$f(x)$ – функциональная зависимость скорости реакции от x .

Для простой обратимой реакции

$$r(x, T) = K(T) \cdot f(x) \left[1 - \frac{\varphi(C)}{K_p} \right] \quad (4)$$

где $K(T) \cdot f(x)$ – кинетическое выражение для скорости прямой реакции;

K_p – константа химического равновесия в химическом превращении (1);

$\varphi(C)$ – выражение закона действующих масс для обратимого процесса. Для стехиометрического уравнения (1) функция $\varphi(C)$ имеет вид:

$$\varphi(C) = \frac{C_R^{\nu_R} \cdot C_S^{\nu_S}}{C_A \cdot C_B^{\nu_B}}. \quad (5)$$

Процесс в реакторе при протекании сложной реакции (табл. 2).

Сложная реакция описывается несколькими стехиометрическими уравнениями. Использована последовательно-параллельная схема превращения с необратимыми частными реакциями:



Исходные модели процесса в реакторе при протекании сложной реакции подобны приведенным в табл. 1, но число уравнений изменения концентраций будет больше – для схемы превращений (6) математическая модель процесса представляет собой систему двух уравнений для превращения веществ, к которому для неизотермического процесса добавляется уравнение изменения температуры.

В табл. 2 представлены только "расчетные модели" процесса.

Таблица 2. Математические модели процесса в химическом реакторе (сложная реакция)

Режим процесса	"Расчетная модель"
Идеальное смешение Изотермический	$\frac{x - x_H}{\tau} = r_1(x) + r_2(x)$ $\frac{y - y_H}{\tau} = r_1(x) - r_3(y)$
Идеальное вытеснение Изотермический	$\frac{dx}{d\tau} = r_1(x) + r_2(x)$ $\frac{dy}{d\tau} = r_1(x) - r_3(y)$ <p style="text-align: center;">при $\tau = 0 \quad x = x_H, \quad y = y_H$</p>
Идеальное смешение Политропический	$\frac{x - x_H}{\tau} = r_1(x) + r_2(x)$ $\frac{y - y_H}{\tau} = r_1(x) - r_3(y)$ $\frac{T - T_0}{\tau} = \sum_{i=1}^3 \Delta T_{ад,i} r_i(x, T) - B(T - T_x)$ <p style="text-align: center;">при $\tau = 0 \quad x = x_H, \quad y = y_H, \quad T = T_H$</p>
Идеальное вытеснение Политропический	$\frac{dx}{d\tau} = r_1(x, T) + r_2(x, T)$ $\frac{dy}{d\tau} = r_1(x, T) - r_3(y, T)$ $\frac{dT}{d\tau} = \sum_{i=1}^3 \Delta T_{ад,i} r_i(x, y, T) - B(T - T_x)$ <p style="text-align: center;">при $\tau = 0 \quad x = x_H, \quad T = T_H$</p>

Обозначения:

$x = (C_0 - C)/C_0$ – общая степень превращения А;

$y = C_R/C_0$ – степень превращения А в R;

$r_j(x, y) = w_j(C(x, y))/C_0, \quad j = 1, 2, 3$

Особенность использования выражений $r(x, T)$, $r_j(x, y)$, а также $K(T)$, $f(x)$, $\Phi(C)$ в вычислительной программе описана далее.

Кинетические модели химического превращения

а) Простые необратимая и обратимая реакции

В расчетной модели реактора кинетическая модель $r(x, T)$ простой необратимой реакции представлена выражением

$$r(x, T) = K(T) \cdot f(x), \quad (7)$$

простой обратимой реакции – выражением

$$r(x, T) = K(T) \cdot f(x) \left[1 - \frac{\varphi(C)}{K_p} \right] \quad (8)$$

Множитель в квадратных скобках учитывает обратимость реакции.

Общий вид функции $K(T) \cdot f(T)$ в (7) и (8) в программе представлен в виде

$$K(T) \cdot f(x) = K(T) \cdot \frac{(1-x)^{n_1} (1-ax)^{n_2}}{(1+bx)^{n_3}}, \quad (9)$$

что позволяет проводить расчеты для самых разнообразных кинетических уравнений.

Параметр $K(T)$ зависит от температуры T и имеет смысл константы скорости реакции в расчетном уравнении, но в общем случае не равен константе скорости реакции $k(T)$.

При подготовке к вычислениям кинетическое уравнение $w(C, T)$ надо привести к расчетному виду $r(x, T)$.

Параметры функции $K(T) \cdot f(T)$ в "расчетной модели".

Реакция первого порядка, $w(C) = -kC$.

В расчетном виде $r(x) = -\frac{w(C)}{C_0} = \frac{kC_0(1-x)}{C_0} = k(1-x)$. Это выражение для $r(x)$ получим, если в функции (9) используем такие коэффициенты:

$$K = k, \quad a = b = 0, \quad n_1 = 1, \quad n_2 = n_3 = 0.$$

Реакция второго порядка, $w(C) = kC^2$.

В расчетном виде $r(x) = \frac{k[C_0(1-x)]^2}{C_0} = kC_0(1-x)^2$. Это выражение для $r(x)$ получим, если в (9) используем такие коэффициенты:

$$K = kC_0, \quad a = b = 0, \quad n_1 = 2, \quad n_2 = n_3 = 0.$$

Реакция $A + B = R + S$.. первого порядка по компонентам А и В, $w(C) = kC_A C_B$.

Начальные концентрации компонентов А и В: C_{A0} и C_{B0} ;

Исходный компонент – вещество А, и его степень превращения – x .

Текущие концентрации: $C_A = C_{A0}(1-x)$, $C_B = C_{B0} - C_{A0} \cdot x$.

$$\text{В расчетном виде } r(x) = \frac{kC_{A0}(1-x)(C_{B0} - C_{A0}x)}{C_{A0}} = kC_{B0}(1-x) \left(1 - \frac{C_{A0}}{C_{B0}} x \right).$$

Это выражение для $r(x)$ получим, если в функции (9) используем такие коэффициенты:

$$K = kC_{B0}, \quad a = C_{A0}/C_{B0}, \quad b = 0, \quad n_1 = n_2 = 1, \quad n_3 = 0.$$

Реакция $A = \nu R$ первого порядка $w(c) = -kc$ протекает в газовой фазе с изменением объема реакционной смеси.

Концентрации компонентов меняются как в результате химического превращения, так и вследствие изменения объема смеси. Для компонента А:

$$C = \frac{C_0(1-x)}{1 + \Delta\nu \cdot C_0 \cdot x},$$

где $\Delta\nu$ – изменение числа молей в реакции (в данном случае $\Delta\nu = \nu - 1$).

В расчетном виде $r(x) = \frac{kC_{A0}(1-x)}{C_{A0}(1 + \Delta\nu C_{A0}x)} = \frac{kC_{A0}(1-x)}{1 + \Delta\nu C_{A0}x}$. Это выражение для $r(x)$ получим, если в

функции (9) используем такие коэффициенты:

$$K = k, \quad a = 0, \quad b = \Delta\nu C_0, \quad n_1 = 1, \quad n_2 = 0, \quad n_3 = 1.$$

Функция $\phi(C)/K_P$ для обратимой реакция.

Функциональная зависимость $\phi(C)$ (см. (5)) определяется только стехиометрическим уравнением (1) и не зависит от вида выражения $Kf(x)$. Предусмотрен расчет $\phi(C)$ для стехиометрического уравнения (1). Надо задать стехиометрические коэффициенты, ν_B, ν_R, ν_S и начальные концентрации исходных компонентов А и В – C_{A0} и C_{B0} . Расчет функции $\phi(C)$ предусмотрен в программе.

б) Сложная реакция

Сложная реакция представлена схемой превращения (6) с кинетическими уравнениями:

$$r_1 = k_1 C_A^{n_1}; \quad r_2 = k_2 C_A^{n_2}; \quad r_3 = k_3 C_R^{n_3}, \quad (10)$$

где k_1, k_2, k_3 – константы скорости частных реакций;

n_1, n_2, n_3 – порядки частных реакций.

Параметры функции $K_i(T) \cdot f_i(T)$ в "расчетной модели"

Скорости превращения в расчетной модели получим, используя выводы $r(x)$ для простой реакции, приведенные выше:

$$r_1(x) = K_1(1-x)^{n_1}, \quad r_2(x) = K_2(1-x)^{n_2}, \quad r_3(x) = K_3 y^{n_3}.$$

Здесь $K_1 = k_1 C_0^{n_1-1}, \quad K_2 = k_2 C_0^{n_2-1}, \quad K_3 = k_3 C_0^{n_3-1}.$

В сложной модели можно выбрать схему превращений:

если $K_2 = 0$, то получим последовательную схему превращений



если $K_3 = 0$, то получим параллельную схему превращений



если заданы все значения K_i , то схема превращений – последовательно-параллельная (6).

в) Константы скорости реакции $K(T)$ и равновесия $K_p(T)$

Константа скорости реакции $K(T)$ зависит от температуры по уравнению Аррениуса $K = K_0 \cdot e^{-\frac{E}{RT}}$, где E – энергия активации.

В программе надо ввести параметры кинетической модели: константу скорости K^* при температуре T^* и энергию активации E .

Константа скорости K при температуре T рассчитывается по уравнению

$$K = K^* \cdot \exp \left[\frac{E}{R} \left(\frac{1}{T^*} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (13)$$

Изотермический процесс рассчитывается при температуре T , задаваемой в условиях процесса. Если задать значение $E = 0$, то изотермический процесс рассчитывается при значении K^* , заданной в параметрах модели. При этом значения T^* и T могут быть любые, но не задавайте их равными нулю!

Константа равновесия K_p зависит от температуры $K_p = K_{p0} \cdot \exp \left(\frac{Q_p}{RT} \right)$ и рассчитывается по уравнению, подобному (13):

$$K_p = K_p^* \cdot \exp \left[-\frac{Q_p}{R} \left(\frac{1}{T^*} - \frac{1}{T} \right) \right], \quad (14)$$

где K_p^* – константа равновесия при температуре T^* (вводятся в программе).

Внимание! При расчете параметров кинетической модели в расчетном уравнении надо учитывать размерности задаваемых исходных параметров – $k(T)$, $K_p(T)$, C_0 , C_{A0} и C_{B0} . Например, если размерность $k(T)$ – $[с^{-1}]$, а размерность C_0 – $[моль/л]$, то концентрацию надо перевести в размерность [об. доля].

Описание программы "Реакторы идеального смешения и вытеснения"

Возможности программы

Программа рассчитывает:

- степень превращения в реакторе при заданном условном времени реакции – $x(\tau)$;
- необходимое τ для достижения заданной степени превращения – $\tau(x)$;
- распределение степени превращения, селективности по продукту R (для сложных реакций) и температуры (в политропическом процессе) в химическом реакторе.

Варианты расчета

Режим движения потока:

- идеального смешения, проточный;
- идеального вытеснения;
- идеального смешения, периодический; рассчитывается по модели идеального вытеснения (в этом случае условное время реакции τ – астрономическое время протекания процесса).

Тепловой режим:

- изотермический;
- адиабатический;
- политропический (с теплообменом).

Кинетическая модель:

- простая реакция необратимая;
- простая реакция обратимая;
- сложная реакция.

Порядок расчета:

- $x(\tau)$ (кроме режима ИС с тепловыми явлениями для сложной реакции);
- $\tau(x)$ (только для режимов изотермического и адиабатического с простой реакцией).

Вводимые параметры

Параметры кинетической модели. При температуре T^* задают константы скорости реакций K_i^* и равновесия K_p^* , а также E_i и Q_p .

Тепловые параметры (для расчета адиабатического и политропического процессов) – величина адиабатического разогрева $\Delta T_{ад}$ и параметр теплоотвода В. Если $B = 0$, то процесс – адиабатический. Для сложной реакции задают $\Delta T_{ад1}$ и $\Delta T_{ад2}$, ибо $\Delta T_{ад3} = \Delta T_{ад2} - \Delta T_{ад1}$.

Условия процесса – начальные условия x_n , y_n , T_n ; температура теплоносителя T_x (для процесса с тепловыми явлениями); конечные условия – τ_k , если проводится расчет $x(\tau)$, или x_k , если рассчитывается $\tau(x)$.

Вид меню программы приведен в "Примере выполнения лабораторной работы".

Результаты расчета

Результаты расчета выводятся в виде таблицы " τ - x - y - S - T " ($S = y/x$ – селективность процесса) или в графической форме. Набор выводимых данных зависит от варианта кинетического уравнения и модели процесса. Возможно, результаты разных расчетов вывести на один график для их сопоставления. Для этого после задания "График" будет запрос: "Обновить график?". Ответ "Да" – будет построен новый график, ответ "Нет" – результаты расчета будут выведены на график, полученный в предыдущем расчете. Это позволит наглядно сопоставить результаты расчета разных режимов и условий процесса.

Вывод на печать не предусмотрен. Результаты нужных расчетов (таблица результатов) надо выписать и использовать при составлении отчета.

Вид результатов приведен в "Примере выполнения лабораторной работы".

Защита от ошибок

Если время реакции τ_k в реакторе ИВ настолько большое, что процесс завершается вблизи входа в реактор, то на этом участке возникает большой градиент концентрации или температуры. Программа предупредит об этом: "Большой градиент $x...$ ". Надо изменить условия расчета (уменьшить τ_k). Также будет предупреждение о невозможности расчета, если при расчете $\tau(x)$ для обратимого процесса задано x_k , превышающее равновесную степень превращения.

Также будут предупреждения о других неправильных и ошибочных действиях.

Инструкция пользователя

Для всех предполагаемых расчетов определите или рассчитайте исходные данные:

- Кинетические уравнения привести к расчетному виду, как объяснено выше.
- Все параметры рассчитывают предварительно, как они указаны в расчетной математической модели.

При расчете параметров соблюдайте размерности исходных величин (C , v_p , V_0 , K , K_p , Q_p , c_p и т.д.) так, чтобы размерности членов уравнений математического модели процесса в табл 1 и 2 совпадали. Например, размерности переменных и параметров в расчетной модели такие:

τ [с], $r(x, T)$ [с⁻¹], $\Delta T_{ад}$ [град], B [с⁻¹].

В программе можно получить помощь – описание процесса и программы и инструкцию пользователя – кнопка «SOS» на экране основного меню.

Завершение работы – кнопка «Выход».

Пример выполнения лабораторной работы

Задание. Сопоставьте интенсивности реакторов ИВ, ИС-н и каскад реакторов ИС для получения этилацетата



Константа скорости прямой реакции равна $k = 7,93 \cdot 10^{-5} \cdot \text{м}^3/(\text{кмоль} \cdot \text{с})$, константа равновесия $K_p = 2,93$. Водный раствор реакционной смеси содержит 46 масс.% кислоты и 25 масс.% спирта. Необходимая степень превращения кислоты составляет 35%. Температура процесса 373 К. Плотность реакционной смеси $\rho = 1020 \text{ кг/м}^3$ и остается постоянной. Производительность по этилацетату 25 т/сут. Для каскада реакторов ИС принять объем одного реактора равным 30% от объема одиночного реактора ИС.

Выполнение задания. Для данного задания выбор реактора для проведения указанного процесса состоит в расчете объемов реакторов РИВ, РИС-н, РИС-каскад для получения заданной степени превращения кислоты. Система, обладающая наименьшим объемом, будет отвечать заданным требованиям.

1. Подготовка к расчету

Преобразуем исходную модель процесса к расчетному виду. Здесь модели изотермического процесса в реакторах идеального вытеснения (ИВ, изотермич.) и идеального смешения (ИС, изотермич.) – см. табл. 1.

Приведение кинетического уравнения протекающей реакции к расчетному виду.

Реакция получения этилацетата – обратимая реакция первого порядка по исходным компонентам.

Исходное кинетическое уравнение $w(C) = -kC_A C_B [1 - \varphi(C)/K_p].$

Расчетное кинетическое уравнение $r(x) = -w(C)/C_{A0} = K f(x) [1 - \varphi(x)/K_p]$

где C_A, C_B – концентрации, соответственно, кислоты и спирта;

C_{A0} – начальная концентрация кислоты;

x – степень превращения ключевого компонента А (кислоты).

Текущие концентрации: $C_A = C_{A0}(1 - x); \quad C_B = C_{B0} - C_{A0} \cdot x,$

где C_{B0} – начальная концентрация спирта.

Зависимость скорости прямой реакции $r_1(x) = K f(x)$ от степени превращения x реагента А будет иметь вид:

$$r_1(x) = kC_{A0}(1 - x)(C_{B0} - C_{A0}x)/C_{A0} = k C_{B0}(1 - x)[1 - (C_{A0}/C_{B0}) \cdot x].$$

В кинетической функции (9), используемой в программе:

$$K = kC_{B0}, \quad a = C_{A0}/C_{B0}, \quad b = 0, \quad n_1 = n_2 = 1, \quad n_3 = 0.$$

Расчет параметров приведенной кинетической модели.

В соответствии с заданной размерностью константы скорости реакции переводим размерность концентраций веществ из масс.% в кмоль/м³. Учитываем, что третьим компонентом исход-

ной смеси является вода (компонент Р). Используя значения молекулярной массы компонентов ($M_A = 60$, $M_B = 46$, $M_P = 18$ кг/кмоль) и плотность смеси, получим:

$$C_{A0} = 0,46/60 \cdot 1020 = 7,82 \text{ кмоль/м}^3,$$

$$C_{B0} = 0,25/46 \cdot 1020 = 5,54 \text{ кмоль/м}^3,$$

$$C_{P0} = (1 - 0,46 - 0,25)/18 \cdot 1020 = 16,4 \text{ кмоль/м}^3.$$

Концентрации в мольных долях:

$$C_{A0} = 7,82/(7,82 + 5,54 + 16,4) = 0,263,$$

$$C_{B0} = 5,54/(7,82 + 5,54 + 16,4) = 0,186.$$

Рассчитываем: $K = kC_{B0} = 7,93 \cdot 10^{-5} \cdot 5,54 = 4,39 \cdot 10^{-4}$, s^{-1} ; $a = C_{A0}/C_{B0} = 7,82/5,54 = 1,41$.

2. Расчет реактора идеального смешения

Ввод исходных данных

В первом окне программы вводим исходные данные.

Процесс и реактор:

движение потока – идеальное смешение

тепловой режим – изотермический

расчет – $\tau(x)$,

реакция – простая обратимая

Параметры кинетической модели

$T^* = 373$ К, $K_p^* = 2,93$, $E = 0$ (режим изотермический)

$a = 1,41$, $b = 0$, $n_1 = n_2 = 1$, $n_3 = 0$.

· для обратимой реакции:

$$K^* = 4,39 \cdot 10^{-4}, \quad Q_P = 0 \text{ (режим изотермический)}$$

$$\nu_B = \nu_R = \nu_S = 1 \text{ (стехиометрические коэффициенты)}$$

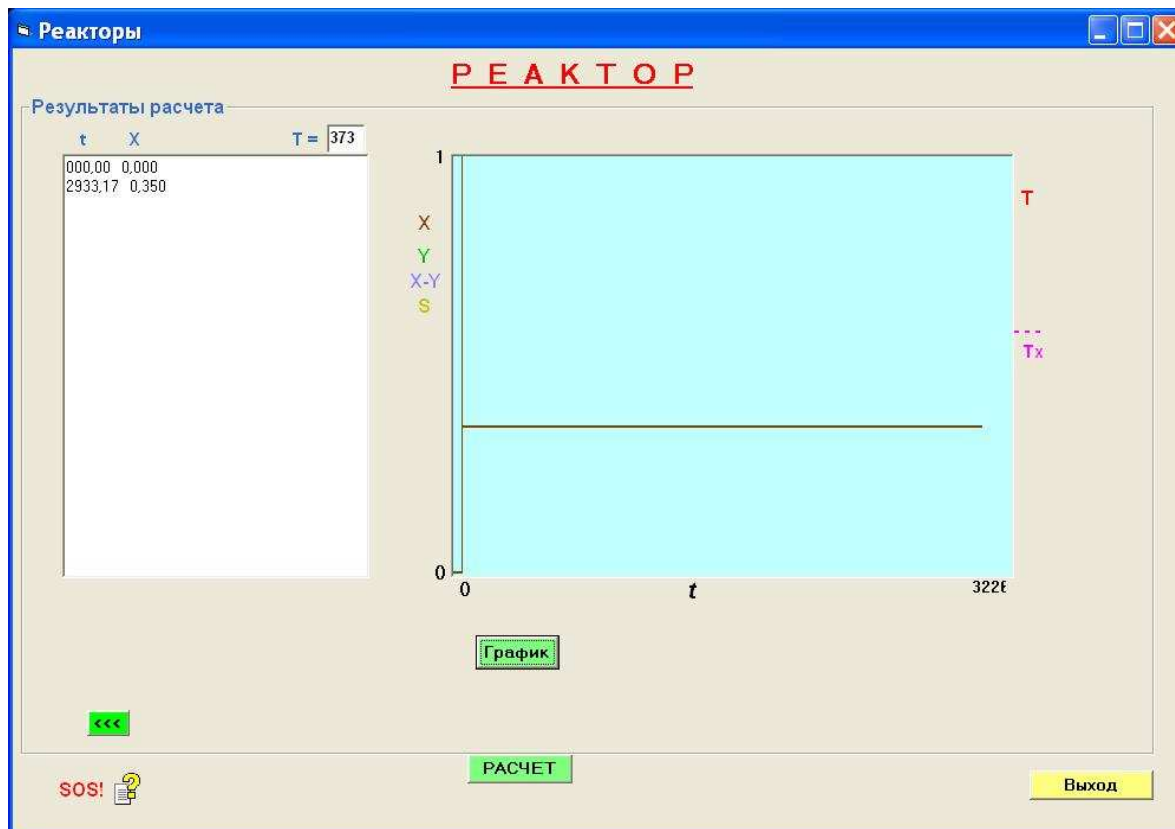
$$C_{A0} = 0,263, \quad C_{B0} = 0,186$$

Параметры процесса:

$$T = 373 \text{ K}; \quad x_n = 0; \quad x_k = 0,35.$$

Расчет

Нажимаем кнопку «Расчет» на экране.



Получим результат $\tau_{ис} = 2933$ с.

Записываем результат (таблица) и выводим результаты на график – кнопка «График» (при запросе “Обновить график?” выбираем «Да»).

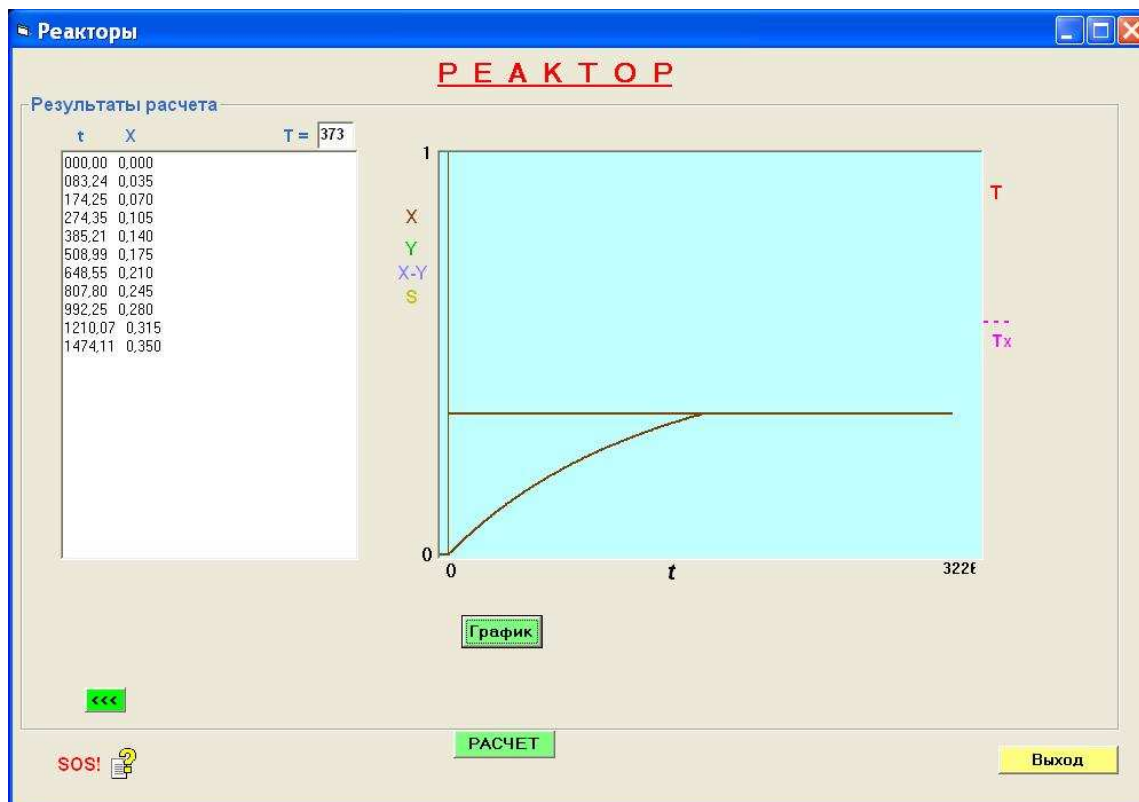
3. Расчет реактора идеального вытеснения

Возвращаемся в меню условий расчета – кнопка "<<<").

Меняем условия расчета:

движение потока Остальные условия расчета, параметры и условия процесса оставляем.

Нажимаем кнопку «Расчет» на экране.



В таблице слева приведено распределение $x(\tau)$ и конечная цифра – $\tau_{\text{ИВ}} = 1474$ с.

Записываем результат (таблица) и выводим результаты на график – кнопка «График» (при запросе “Обновить график?” выбираем «Нет» – результаты этого расчета будут выведены в окне предыдущего графика).

Горизонтальная линия – распределение степени превращения x в реакторе ИС, кривая – распределение x в реакторе ИВ. Слева – таблица результатов.

Примечание. Поскольку $\tau_{\text{ИС}} > \tau_{\text{ИВ}}$, то целесообразно вначале рассчитать реактор ИС, а затем – реактор ИВ, чтобы оба графика разместились в окне, полученном в первом расчете.

4. Обработка результатов расчета.

Объем реактора v_p находим из определения $\tau = v_p/V_0$. Объем реакционной смеси V_0 получим из заданной производительности Π – количества полученного продукта: $\Pi = V_0 C_{\text{ЭА}} = V_0 C_A x_k$ (здесь $C_{\text{ЭА}}$ – концентрация этилацетата). Если учесть размерности V_0 [м³/с], Π [т/сут] и C_A [вес. %], то

$$\Pi = V_0 \rho C_{A0} x \cdot \frac{M_{\text{ЭА}}}{M_A} \cdot \frac{3600 \cdot 24}{10^3}$$

где $M_{\text{ЭА}}$, M_A – молекулярные массы, соответственно, этилацетата и кислоты;

3600 с/ч, 24 ч/сут, 10³ кг/т – пересчетные коэффициенты.

Отсюда объем реакционной смеси:

$$V_0 = 25 \cdot 10^3 \cdot 60 / (1020 \cdot 0,25 \cdot 0,35 \cdot 88 \cdot 24 \cdot 3600) = 2,21 \cdot 10^{-3} \text{ м}^3/\text{с}.$$

Объемы реакторов:

$$V_{\text{РИВ}} = \tau_{\text{РИВ}} V_0 = 1474 \cdot 2,21 \cdot 10^{-3} = 3,26 \text{ м}^3;$$

$$V_{\text{РИС}} = \tau_{\text{РИС}} V_0 = 2933 \cdot 2,21 \cdot 10^{-3} = 6,48 \text{ м}^3.$$

5. Расчет процесса в каскаде реакторов ИС.

Объем реактора в каскаде РИС составит $v_1 = 0,3 \cdot 3,26 = 0,98 \text{ м}^3$, время пребывания нем $\tau_{\text{РИС},i} = v_i/V_0 = 0,98/(2,21 \cdot 10^{-3}) = 443 \text{ с}$. Расчет каскада РИС состоит в определении числа реакторов заданного объема в каскаде для получения заданной степени превращения. Проводим ряд последовательных расчетов РИС, принимая значение x_n на входе в последующий реактор, равное значению x_k на выходе из предыдущего реактора. Расчет заканчивается по достижению $x_k = 0,35$.

Возвращаемся в меню условий расчета (" $<<<$ ")

Меняем данные в разделе "Процесс и реактор":

движение потока – идеальное смешение

расчет – $x(\tau)$,

и в разделе "Параметры процесса"

$\tau_k = 443 \text{ с}$.

Остальные условия процесса – такие же.

Нажимаем кнопку «Расчет» и получим степень превращения после первого реактора в каскаде

$x_1 = 0,136$

Возвращаемся в меню условий расчета (" $<<<$ ") и вводим в разделе "Параметры процесса"

$x_n = 0,136$

Нажимаем кнопку «Расчет» и получим степень превращения после второго реактора в каскаде

$x_2 = 0,231$

Повторяем предыдущее с $x_n = 0,231$ и получаем

$x_3 = 0,301$.

Расчет следующего реактора с $x_n = 0,301$ дает

$x_4 = 0,352$.

Заданная степень превращения достигнута.

Таким образом, для достижения требуемой степени превращения требуется четыре реактора в каскаде РИС. Тогда объем каскада составит

$v_{\text{каскад}} = 0,98 \cdot 4 = 3,92 \text{ м}^3$.

6. Выводы.

Результаты расчета:

$v_{\text{ИВ}} = 3,26 \text{ м}^3$; $v_{\text{ИС}} = 6,48 \text{ м}^3$; $v_{\text{каскад}} = 3,92 \text{ м}^3$

Наименьший объем реактора ($3,26 \text{ м}^3$) и, следовательно, **максимальная интенсивность процесса**, равная $\Pi/v_p = 25/3,26 = 7,67 \text{ т. продукта с кубометра реактора в сутки}$, **в реакторе идеального вытеснения**. В реакторе идеального смешения интенсивность процесса минимальная. Процесс в каскаде реакторов имеет промежуточное значение.

РЕАКТОРЫ ИДЕАЛЬНОГО СМЕШЕНИЯ И ВЫТЕСНЕНИЯ

Задания к лабораторным работам

1. Изотермический процесс в реакторе (простая необратимая реакция)

Задание I-1

Необратимая реакция $A + B \rightarrow R + S$ протекает в реакторе идеального вытеснения. Константа скорости реакции при 298К составляет 4,8 л/(моль·мин). Растворы реагентов А и В (потоки V_{0A} и V_{0B} соответственно) подаются в реактор отдельно. Концентрация исходных веществ в потоках одинакова и равна 0,1 моль/л.

Объем реактора 200 см³.

Определить влияние объемного расхода реакционной смеси V_0 на степень превращения исходных реагентов. Принять значения V_0 (л/час) = 2; 4; 6; 8; 10; соотношение потоков с реагентами А и В $\lambda = V_{0A}/V_{0B} = 1$.

Определить влияние соотношения λ потоков растворов А и В на степень превращения исходных реагентов. Принять значения $\lambda = 5:1; 3:1; 1:1; 1:3; 1:5$. Объемный расход реакционной смеси $V_0 = 6$ л/час..

Результаты представить в графическом виде и объяснить полученные зависимости.

Задание I-2

Необратимая реакция $A + B \rightarrow R + S$ протекает в реакторе идеального вытеснения. Константа скорости реакции при 298К составляет 4,8 л/(моль·мин). Растворы реагентов А и В (потоки V_{0A} и V_{0B} соответственно) подаются в реактор отдельно. Концентрация исходных веществ в потоках одинакова и равна 0,1 моль/л.

Степени превращения реагента А в реакторе $x_A = 80\%$.

Определить влияние объемного расхода реакционной смеси V_0 на объем реактора. Принять значения V_0 (л/час) = 2; 4; 6; 8; 10, соотношение потоков с реагентами А и В $\lambda = V_{0A}/V_{0B} = 1$.

Определить влияние соотношения λ потоков растворов А и В на степень превращения исходных реагентов. Принять значения $\lambda = 5:1; 3:1; 1:1; 1:3; 1:5$, Объемный расход реакционной смеси $V_0 = 6$ л/час.

Результаты представить в графическом виде и объяснить полученные зависимости.

Задание I-3

В реакторе протекает необратимая реакция $A + B \rightarrow R + S$. Константа скорости реакции при 298К составляет 4,8 л/(моль·мин). Растворы реагентов А и В подаются в реактор отдельно в соотношении $V_{0A}/V_{0B} = \lambda$. Концентрация исходных веществ в потоках одинакова и равна 0,1 моль/л.

Объем реакционной зоны в реакторе 0,3 л.

В реакторе может быть организован режим идеального вытеснения (РИВ), идеального смешения (РИС) или каскада из n одинаковых РИС ($n = 2, 3, 4, 5$).

Условия процесса:

а) Объемный расход реакционной смеси V_0 [л/ч] = 3, 5, 7; $\lambda = 1:1$.

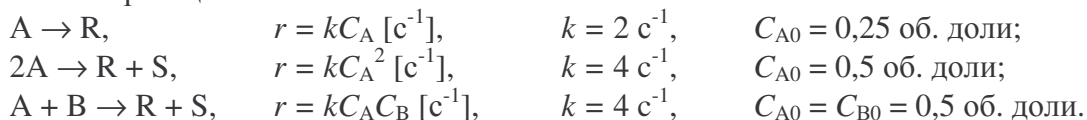
б) Соотношение потоков А и В, $\lambda = 2:1, 1:1, 1:2, 1:5$; $V_0 = 5$ л/ч.

Провести сравнение значений степени превращения исходных реагентов, достигаемых при проведении процесса в реакторах в заданных условиях процесса.

Результаты представить в графическом виде и объяснить полученные зависимости.

Задание I-4

В лабораторном трубчатом реакторе (идеального вытеснения) была проведена серия экспериментов с реакциями:



Здесь же приведены кинетические уравнения и их параметры, начальные концентрации. Диаметр трубчатого реактора 20 мм, длина – 320 мм. Расход реакционной смеси 7,5 л/мин.

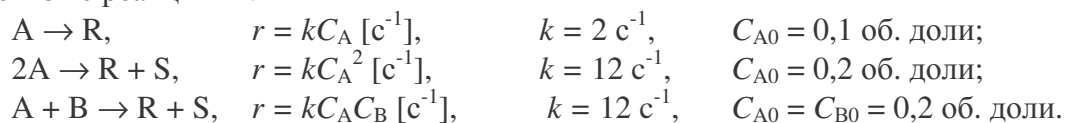
Рассчитайте изменение степени превращения x_A компонента А в реакторе и постройте график зависимости изменения x_A по длине реактора l для всех реакций.

Во второй серии экспериментов все концентрации были уменьшены в два раза.

Как изменится профиль $x_A(l)$ и конечная степень превращения А для каждой из реакций? Объясните полученный результат.

Задание I-5

В лабораторном проточном реакторе с мешалкой (идеального смешения) была проведена серия экспериментов с реакциями:



Здесь же приведены кинетические уравнения и их параметры, начальные концентрации. Объем реактора 200 см³. Расход реакционной смеси 7,5 л/мин.

Определите степень превращения x_A компонента А в реакторе и на выходе из реактора для всех реакций.

Во второй серии экспериментов все концентрации были увеличены в два раза.

Как изменится степень превращения А x_A для каждой из реакций? Объясните полученный результат.

Задание I-6

В лабораторной установке с трубчатым реактором провели испытания двух образцов катализатора. Оба катализатора при времени контакта $\tau = 2$ с и концентрации исходного вещества $C_0 = 10$ об.% показали одинаковую степень превращения исходного компонента А $x_A = 60$ %. Вследствие различия механизмов реакции на разных катализаторах скорость превращения на первом образце описывается уравнением $r = kC$, а на другом - $r = kC^{0.5}$. Определите константы скорости реакции.

На этих же образцах катализатора при том же значении τ провели измерение степени превращения А x_A , увеличив C_0 в два раза. Какова будет степень превращения в реакторе? Объясните полученный результат.

II. Изотермический процесс в реакторе (простая обратимая реакция)

Задание II-1

Обратимая реакция $A + B \rightleftharpoons R$ проводится в реакторе идеального вытеснения. Константы скорости при 473 К прямой реакции $k_1 = 3,2 \text{ м}^3/(\text{моль} \cdot \text{мин})$, обратной – $k_2 = 0,457 \text{ мин}^{-1}$. Энергия активации $E_1 = 80 \text{ кДж}/(\text{моль} \cdot \text{град})$, тепловой эффект реакции $Q_p = 179,5 \text{ кДж/моль}$

Начальные концентрации исходных реагентов равны $C_{A0} = C_{B0} = 5 \text{ об.}\%$, продукт в исходной смеси отсутствует. Объемный расход реакционной смеси $V_0 = 0,2 \text{ л/сек}$.

Определить объемы реакторов для получения степеней превращения $x_A = 50\%$ и $x_A = 75\%$. Постройте графики $x_A(\tau)$ для каждого реактора.

Температуру в каждом реакторе увеличили на 10 град. Как изменятся степени превращения и зависимости $x_A(\tau)$ в рассчитанных реакторах?. Объясните полученный результат.

Задание II-2

В реакторе идеального вытеснения протекает обратимая реакция $A + B \rightleftharpoons R + S + 40 \text{ кДж}$. При температуре 500 К константа равновесия $K_p = 9,5$, константа скорости прямой реакции $k = 10 \text{ с}^{-1}$, энергия активации $E = 60 \text{ кДж/моль}$.

В реактор объемом 700 см^3 подается 6 л/мин реакционной смеси, содержащей по 10 об.% веществ А и В. Режим процесса – изотермический, температура – 500 К.

Рассчитайте и постройте график зависимости степени превращения А x от времени реакции τ .

Как изменится зависимость $x(\tau)$, если температуру увеличить на 30 град? уменьшить на 20 град? Покажите эти изменения графически и объясните.

Задание II-3

В реакторе идеального смешения (РИС) протекает обратимая реакция $A + B \rightleftharpoons R + S + 135 \text{ кДж}$. Константа скорости прямой реакции $k = 25 \text{ с}^{-1}$ при температуре 500 К, энергия активации $E = 90 \text{ кДж/моль}$, константа равновесия $K_p = 10,5$.

В реактор объемом 550 см^3 подается 6 л/мин смеси компонентов А и В, содержащей по 20 об.% веществ А и В. Температура процесса в реакторе 500 К.

Рассчитайте и постройте в координатах « τ – x » распределение степени превращения А x по объему реактора.

Как изменится зависимость $x(\tau)$, если температуру увеличить на 20 град? уменьшить на 20 град? Покажите эти изменения графически и объясните.

III. Изотермический процесс в реакторе (сложная реакция)

Задание III-1

Дана реакция $A \rightarrow R \rightarrow S$, Частные реакции первого порядка. Их константы скорости при температуре 300 К равны $k_1 = 0,03 \text{ с}^{-1}$, $k_2 = 0,02 \text{ с}^{-1}$.

Реакция проводится при температуре 27°C в проточном реакторе идеального смешения и в реакторе идеального вытеснения, имеющих равные объемы $0,65 \text{ м}^3$. Начальная концентрация $C_{A0} = 0,02 \text{ кмоль/м}^3$. Продукты в исходной смеси отсутствуют.

Определить:

- часовую нагрузку V_0 на каждый реактор, чтобы: получить максимальный выход по продукту R;
- максимально возможную концентрацию продукта R;
- соотношение максимальных выходов продукта R в каждом реакторе.

Объяснить полученные результаты.

Задание III-2

Реакция $A \rightarrow R \rightarrow S$, константы скорости которой при температуре 300 К равны $k_1 = 3 \cdot 10^{-2} \text{ с}^{-1}$, $k_2 = 4 \cdot 10^{-2} \text{ с}^{-1}$, проводится в реактора идеального вытеснения при скорости подачи реакционной смеси $V_0 = 1,2 \cdot 10^{-3} \text{ м}^3/\text{с}$, температуре 27°C и начальной концентрации $C_{A0} = 0,0077 \text{ моль/л}$.

Определить максимальный выход продукта R, выходные концентрации всех веществ и необходимый объем реактора.

Провести сравнительный расчет для проточного реактора идеального смешения того же объема. Объяснить полученные результаты.

Задание III-3

В проточном реакторе идеального смешения протекают при температуре 298 К параллельные реакции $A \rightarrow R$, $A \rightarrow S$, где R – целевой продукт. Константа скорости основной реакции первого порядка $k_1 = 8,9 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$. Кинетическое уравнение реакции образования побочных продуктов $r_A = 1,1 \cdot 10^{-3} C_A^{1,2} \text{ кмоль/м}^3 \cdot \text{с}$

Объем реактора $0,9 \text{ м}^3$. Исходная смеси содержит 1 кмоль вещества A в 1 м^3 и подается со скоростью $0,002 \text{ м}^3/\text{с}$.

Определить степень превращения вещества A, выход и селективность по продукту R. Объяснить их изменения по длине реактора.

Сравнить полученные данные с процессом в реакторе идеального вытеснения такого же объема. Объяснить полученные результаты сравнения показателей процесса..

Задание III-5

Дана реакция $A \rightarrow R$, $2A \rightarrow S$, протекающая без изменения объема. Константы скорости по веществу A равны $k_1 = 7,8 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$, $k_2 = 0,01 \text{ м}^3/(\text{кмоль} \cdot \text{с})$. Начальная концентрация исходного вещества $1,2 \text{ кмоль/м}^3$.

Сравнить селективность и выход по продукту R в реакторе идеального вытеснения и в проточном реакторе идеального смешения при степени превращения вещества A равной 0,75. Объяснить полученные результаты (влияние типа реактора на показатели процесса и их изменение по объему реакторов).

IV. Неизотермический процесс в реакторе

Задание IV-1

В реакторе протекает необратимая реакция $A + B \rightarrow R + S$. Константа скорости реакции при температуре 200°C $k = 5 \text{ л}/(\text{моль} \cdot \text{мин})$, энергия активации $E = 15500 \text{ кал}/\text{моль}$

Компоненты А и В подаются в реактор отдельными потоками. с концентрацией, соответственно, $C_{A0} = 0,2 \text{ моль}/\text{л}$, $C_{B0} = 0,2 \text{ моль}/\text{л}$. Соотношение потоков $V_{0A}/V_{0B} = 1:1$.

Степени превращения в реакторе $x_A = 0,5; 0,7; 0,9$.

Реакция проводится в режимах:

- адиабатическом при начальной температуре 200°C (адиабатический разогрев данной реакционной смеси $\Delta T_{\text{ад}} = 150 \text{ град}$),
- изотермическом при температуре, равной температуре на выходе из адиабатического реактора.

Результаты представить на графике " τ – x , T ", сопоставить режимы по интенсивности процессов и объяснить полученные зависимости.

Задание IV-2

В реакторе идеального вытеснения объемом $1,2 \text{ м}^3$ при адиабатических условиях протекает эндотермическая реакция $A + B \rightarrow R$. Константа скорости реакции $k = 5 \cdot 10^{11} \exp(-81438/RT) \text{ м}^3/(\text{кмоль} \cdot \text{с})$. Тепловой эффект реакции $\Delta H = 1,65 \cdot 10^7 \text{ Дж}/\text{кмоль}$ А. Теплоемкость реакционной смеси $c_p = 2,8 \cdot 10^3 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{град})$, плотность $\rho = 1290 \text{ кг}/\text{м}^3$. Начальные концентрации $C_{A0} = 10,2 \text{ кмоль}/\text{м}^3$, $C_{B0} = 12,8 \text{ кмоль}/\text{м}^3$. Температура смеси на входе $T = 55^{\circ}\text{C}$. Скорость подачи исходных веществ $24 \text{ м}^3/\text{с}$.

Определить производительность по продукту.

Задание IV-3

В реакторе идеального вытеснения в адиабатических условиях протекает жидкофазная реакция первого порядка $A \rightarrow 2R$. Константа скорости реакции $k = 5 \cdot 10^{11} \exp(-99720/RT) \text{ с}^{-1}$. Тепловой эффект реакции $Q_p = 2 \cdot 10^7 \text{ Дж}/\text{кмоль}$ А. Начальная концентрация $C_{A0} = 4,2 \text{ кмоль}/\text{м}^3$. Концентрация продукта $C_R = 2,05 \text{ кмоль}/\text{м}^3$. Теплоемкость реакционной смеси $c_p = 2,2 \cdot 10^3 \text{ Дж}/\text{кг} \cdot \text{К}$, плотность $\rho = 850 \text{ кг}/\text{м}^3$. Температура смеси на входе 318 К . Скорость подачи исходных веществ $1 \cdot 10^{-2} \text{ м}^3/\text{с}$.

Определить необходимый объем реактора.

Задание IV-4

В реакторе идеального вытеснения протекает обратимая реакция $A \rightleftharpoons R$. Тепловой эффект реакции $\Delta H_{283}^0 = -58300 \text{ кДж}/(\text{кмоль}$ А), константа скорости прямой реакции $k = 2,72 \cdot 10^6 \exp(-45800/RT) \text{ с}^{-1}$. Для реакции заданы: константа равновесия $K_p = 17,2$; начальная концентрация А $C_{A0} = 1,8 \text{ кмоль}/\text{м}^3$; молярная теплоемкость смеси $c_p = 74 \text{ кДж}/(\text{кмоль} \cdot \text{град})$. Смесь поступает в реактор при температуре 10°C . Объем реактора $0,1 \text{ м}^3$. Время пребывания 10 с . Площадь поверхности теплообмена $0,55 \text{ м}^2$. Теплота отводится за счет воды с температурой 5°C . Коэффициент теплопередачи принять равным $480 \text{ Вт}/\text{м}^2\text{К}$.

Определить степень превращения и профиль температур в реакторе.

Задание IV-5

В реакторе идеального смешения протекает необратимая реакция $A = R$. При температуре 400 К константа скорости реакции $k = 7 \cdot 10^{-2} \text{ с}^{-1}$. Энергия активации $E = 80 \text{ кДж}/\text{моль}$. Величина адиабатического разогрева $\Delta T_{\text{ад}} = 200 \text{ град}$. Условное время реакции в реакторе

Определить степень превращения и температуру в реакторе при температуре реакционной смеси на входе 410 К .

Как изменится степень превращения, если температуру на входе уменьшить на 30 градусов ? увеличить на 30 градусов ?

Объяснить все полученные результаты.

V. Выбор и расчет реактора

Задание V-1

В реакторе протекает необратимая реакция $A + B \rightarrow R + S$. Исходные растворы, содержащие реагент В с концентрацией $0,5 \text{ кмоль/м}^3$ и реагент А с концентрацией $0,3 \text{ кмоль/м}^3$, поступают в реактор отдельными потоками в объемном отношении $V_{0B} : V_{0A} = 2 : 1$. Режим процесса – изотермический с температурой 298 К , объем реактора $0,5 \text{ м}^3$, необходимая степень превращения реагента А составляет 98% .

Определить распределение концентраций, степеней превращения по длине реактора идеального вытеснения, рассчитать производительность реактора по исходным реагентам. Провести те же расчеты для проточного реактора идеального смешения. Сравнить полученные результаты.

Дополнение: Константу скорости реакции следует определить из данных, полученных при проведении реакции в периодическом реакторе идеального смешения: после 10 мин от начала реакции степень превращения реагента А составила 38% .

Задание V-2

Для газофазной реакции $A \rightarrow 3B$ при 700 К с константой скорости равной $4,6 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ найти степень превращения вещества А за время, равное 5000 с , для: 1) реактора идеального вытеснения; 2) проточного реактора идеального смешения; 3) реактора идеального смешения периодического действия.

Определить объемы указанных реакторов и расход сырья $[\text{м}^3/\text{сут}]$ для обеспечения производства $67,5 \text{ моль R}$ в час (в реакторе идеального смешения периодического действия время на подготовку реактора занимает 15% от времени рабочего цикла).

Задание V-3

Скорость превращения аммиака в реакции разложения фосфина $4\text{PH}_3 \rightarrow \text{P}_4 + 6\text{H}_2$ описывается уравнением $w_{\text{PH}_3} = -2,78 \cdot 10^{-3} C_{\text{PH}_3} \text{ кмоль}/(\text{м}^3 \cdot \text{с})$. Реакция протекает при температуре 649 К в реактора идеального вытеснения до степени превращения $x_{\text{PH}_3} = 0,85$. Концентрация исходного вещества $0,04 \text{ кмоль/м}^3$.

Какой объем должен иметь реактор при производительности по фосфину $3,08 \cdot 10^{-4} \text{ кмоль/с}$?

Задание V-4

Окисление оксида азота до диоксида: $\text{NO} + 0,5\text{O}_2 = \text{NO}_2$ – стадия в производстве азотной кислоты, – газофазная реакция, скорость которой описывается кинетическим уравнением $r = k C_{\text{NO}}^2 C_{\text{O}_2}$. Константа скорости реакции $k = 4500 \text{ м}^6/(\text{кмоль}^2 \cdot \text{с})$, энергия активации $E = -4,7 \text{ кДж}/(\text{моль} \cdot \text{град})$ (особенность этой реакции – скорость уменьшается с температурой).

Оксид азота образуется окислением аммиака кислородом воздуха. Аммиачно-воздушная смесь содержит 10% NH_3 . Полагаем, что весь аммиак окисляется до NO и объем реакционной смеси не меняется. После окисления аммиака и охлаждения газ поступает в окислитель NO , где реакция протекает адиабатически.

Определите температурный режим окисления, объем и габариты окислителя для следующих условий: объемный расход газа – $60 \text{ тыс. м}^3/\text{час}$, температура перед окислителем 370 К , диаметр окислителя – 2500 мм . Другие данные: тепловой эффект указанной реакции $Q_p = 56,5 \text{ кДж}$, теплоемкость газа $1,44 \text{ кДж}/(\text{м}^3 \cdot \text{град})$

Как изменится объем окислителя, если в него встроить холодильник, чтобы окисление протекало в изотермическом режиме при $T = 390 \text{ К}$?

Задание V-5

Гомогенное дегидрохлорирование дихлорэтана с получением винилхлорида $\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2 = \text{C}_2\text{H}_3\text{Cl} + \text{HCl}$, осуществляют в реакторе–трубе, помещенной внутрь топки и обогреваемой продуктами горения мазута. Диаметр трубки 150 мм. Температура повышается по ходу протекания процесса, так что можно рассматривать процесс протекающим адиабатически с величиной адиабатического разогрева 250 град. Степень превращения дихлорэтана $x = 45\%$. Скорость реакции описывается уравнением $r = kC_{\text{ДХЭ}}$ (при $x < 0,5$ обратной реакцией можно пренебречь), $k = 0,03 \text{ с}^{-1}$ при 700 К, энергия активации $E = 27,5 \text{ ккал/моль}\cdot\text{град}$.

Определить длину трубки реактора для производства винилхлорида мощностью 10 тыс. т/год, температура потока на входе в реактор 673 К.

Покажите графически изменение x , концентрации винилхлорида и температуры по длине трубки.

Как изменится длина трубки реактора, если процесс провести изотермически при $T = 750 \text{ К}$?