

ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКТОРЫ

Практические занятия

Оглавление

1	Математическая модель процесса в химическом реакторе	2
1.1	Материальный баланс.....	2
1.2	Тепловой баланс:.....	3
2	Математическая модель процесса в периодическом реакторе идеального смешения (РИС)	6
3	Математическая модель процесса в реакторе идеального вытеснения (РИВ).....	7
4	Математическая модель процесса в проточном реакторе идеального смешения (РИС)	8
5	Изотермические процессы в химическом реакторе. Задачи для самостоятельного решения.....	10
	Задача №1	10
	Задача №2	11
	Задача №3	12
	Задача №4	13
	Задача №5	14
	Задача №6	15
6	Неизотермический процесс в реакторе идеального вытеснения.....	16
6.1	Математическая модель химического реактора идеального вытеснения для простой необратимой реакции $A \rightarrow R$	16
6.2	Алгоритм решения системы уравнений математической модели	17
6.3	Задачи для самостоятельного решения.....	18
	Задача №7	18
7	Неизотермические процессы в химическом проточном реакторе идеального смешения.....	20
7.1	Математическая модель химического проточного реактора идеального смешения для простой обратимой экзотермической реакции $A \rightleftharpoons R$	20
7.2	Пример адиабатического процесса в химическом проточном реакторе идеального смешения для простой обратимой экзотермической реакции $A \rightleftharpoons R$	23
7.3	Задачи для самостоятельного решения.....	27
	Задача №8	27
	Задача №9	27
8	Автотермический реактор	29
8.1	Математическая модель автотермического реактора.....	29
8.2	Алгоритм решения системы уравнений математической модели	31
8.3	Решение системы уравнений с использованием EXCEL.....	32
8.4	Пример процесса в автотермическом реакторе где проходит простая химическая реакция $A \xrightarrow{k_1} R$	35
8.5	Задачи для самостоятельного решения.....	37
	Задача №10	37

1 Математическая модель процесса в химическом реакторе

Математическим выражением законов сохранения являются балансовые уравнения, прежде всего уравнения материального и энергетического балансов. В уравнении материального баланса можно учесть все изменения, которые происходят с веществом во времени и пространстве в результате химической реакции и диффузионных явлений (массопереноса) или при движении элементов потока в реакторе (при переносе импульса). Аналогично уравнение энергетического (теплового) баланса может учесть все энергетические изменения в реакторе, имеющие место как в ходе химической реакции, так и в результате процессов переноса.

Таким образом, сочетание только лишь двух уравнений – материального и теплового балансов может обеспечить получение достаточно полной математической модели химического процесса.

Так как химический процесс в реакторе протекает во времени и в пространстве, то для составления балансовых уравнений нужно предварительно выбрать некоторые элементарный объем dV_p и элементарный промежуток времени dt .

Будем считать, что элементарным является такой объем, выделенный внутри реактора, в пределах которого можно пренебречь неравномерностью распределения концентраций и температуры. Элементарный объем неподвижен относительно аппарата и не передвигается вместе с реакционным потоком. В общем случае элементарный объем dV_p бесконечно мал во всех измерениях, но в некоторых частных случаях (например, для аппарата идеального смешения) его можно считать равным всему объему реактора.

Элементарным промежутком времени dt является такой, в течение которого можно пренебречь изменениями концентрации и температуры внутри элементарного объема dV_p . Элементарный промежуток времени бесконечно мал для нестационарных режимов работы реактора и может быть выбран любым для стационарных режимов, например, равным 1 ч или 1 мин.

1.1 Материальный баланс

Материальный баланс для i -ого вещества:

Накопление = Приход-Расход

$$dN_{iH} = dN_{iBX} - dN_{iBЫX} + dN_{iP}, \quad (1.1)$$

где $dN_{iH} = dV_p \cdot d_t C_i$ - количество вещества i накапливаемое в элементарном объеме dV_p реактора за промежуток времени dt , моль;

$d_t C_i$ - изменение концентрации i -ого вещества в элементарном объеме dV_p реактора за промежуток времени dt , моль/м³;

$dN_{iBX} = dV \cdot C_i$ - количество вещества J входящее потоком за промежуток времени dt , моль;

dV - общий объём веществ, входящих потоком за промежуток времени dt , м³;

C_i - концентрация i -ого вещества во входящем потоке, моль/м³;

$dN_{i\text{ВЫХ}} = dV \cdot (C_i + d_\tau C_i)$ - количество вещества i выходящее потоком за промежуток времени dt , моль;

$d_\tau C_i$ - изменение концентрации i -ого вещества в элементарном объеме dV_p реактора за промежуток времени пребывания $d\tau$, моль/м³;

dN_{ip} - количество вещества i которое расходуется или образуется в результате химической реакции за промежуток времени dt , моль.

Тогда уравнение (1.1) перепишем в виде

$$dV_p \cdot d_\tau C_i = dV \cdot C_i - dV \cdot (C_i + d_\tau C_i) + dN_{ip}$$

Поделив на dt получим

$$dV_p \frac{d_\tau C_i}{dt} = \frac{dV}{dt} C_i - \frac{dV}{dt} (C_i + d_\tau C_i) + \frac{dN_{ip}}{dt},$$

где $v = \frac{dV}{dt}$ – объёмная скорость потока, м³/с.

$$dV_p \frac{\partial C_i}{\partial t} = v C_i - v (C_i + d_\tau C_i) + dV_p \frac{dN_{ip}}{dV_p dt};$$

$$\frac{dV_p}{v} \frac{\partial C_i}{\partial t} = -d_\tau C_i + \frac{dV_p}{v} \frac{dN_{ip}}{dV_p dt},$$

где $\tau = \frac{V_p}{v}$ – среднее время пребывания вещества в реакторе, с;

$W_i(C, T) = \frac{dN_{ip}}{dV_p dt}$ – скорость превращения i -ого вещества в реакторе, моль/(м³·с).

$$d\tau \frac{\partial C_i}{\partial t} = -d_\tau C_i + d\tau W_i(C, T).$$

$$d\tau \frac{\partial C_i}{\partial t} = -\frac{d_\tau C_i}{d\tau} + d\tau W_i(C, T).$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -\frac{\partial C_i}{\partial \tau} + W_i(C, T).$$

1.2 Тепловой баланс:

Тепловой баланс:

Накопление = Приход-Расход

$$dQ_H = dQ_{ВХ} - dQ_{ВЫХ} + dQ_p + dQ_T, \quad (1.2)$$

где $dQ_{\text{вх}} = dV \cdot c_p \cdot T$ - тепло, входящий в элементарный объем за промежуток времени dt , Дж;

$dQ_{\text{вых}} = dV \cdot c_p \cdot (T + d_\tau T)$ - выходящий из него за промежуток времени dt , Дж;

c_p - объёмная теплоёмкость, Дж/(м³·К)

$dQ_p = \sum_{j=1}^m [Q_{pj} \cdot dN_j(C, T)]$ – суммарное тепло выделяемое или поглощаемое при реакциях за промежуток времени dt , Дж;

$dN_j(C, T)$ – количество вещества которое расходуется в результате j -ой химической реакции за промежуток времени dt , моль.

Q_{pj} – тепловой эффект j -ой реакции, Дж/моль;

dV - общий объём веществ, входящих потоком, м³;

Тогда уравнение (1.2) перепишем в виде

$$dQ_H = dV \cdot c_p \cdot T - dV \cdot c_p \cdot (T + d_\tau T) + \sum_{j=1}^m [Q_{pj} \cdot dN_j(C, T)] + dQ_T$$

Изменение количества теплоты в реакторе dQ_H связано с изменением температуры в нем: $dQ_H = c_p dV_p d_\tau T$ (принимая теплоемкость c_p неизменной).

Поделив на dt получим

$$\frac{c_p \cdot dV_p \cdot d_\tau T}{dt} = \frac{dV}{dt} \cdot c_p \cdot T - \frac{dV}{dt} \cdot c_p \cdot (T + d_\tau T) + \sum_{j=1}^m \left[Q_{pj} \cdot \frac{dN_j(C, T)}{dt} \right] + \frac{dQ_T}{dt}$$

где $v = \frac{dV}{dt}$ – объёмная скорость потока, м³/с;

$\frac{dQ_T}{dt} = K_T \cdot dF_T \cdot (T_x - T)$ - тепло передаваемое через боковую поверхность dF_m в выделенном объеме.

T_x – температура теплоносителя, К;

K_m – коэффициент теплоотдачи, Вт/(м²К);

Далее:

$$\frac{c_p \cdot dV_p \cdot d_\tau T}{dt} = v \cdot c_p \cdot T - v \cdot c_p \cdot (T + d_\tau T) + \sum_{j=1}^m \left[Q_{pj} \cdot \frac{dN_{jp}}{dV_p} \right] dV_p + K_T \cdot dF_T (T_x - T)$$

где $r_j(C, T) = \frac{dN_{jp}}{dV_p}$ – скорость j -ой реакции, моль/(м³·с).

$$c_p \frac{d_\tau T}{dt} = -\frac{v}{dV_p} \cdot c_p \cdot d_\tau T + \sum_{j=1}^m [Q_{pj} \cdot r_j(C, T)] + K_T \cdot \frac{dF_T}{dV_p} (T_x - T)$$

Обозначив $dF_m/dV_p = F_{уд}$ -удельная поверхность теплообмена (для трубки диаметром $D_{тр}$: $F_{уд} = \pi D_{тр} l / (0,25\pi D_{тр}^2 l) = 4/D_{тр}$);

$\tau = \frac{V_p}{v}$ – среднее время пребывания вещества в реакторе, с.

получим:

$$c_p \frac{d_t T}{dt} = -c_p \cdot \frac{d_\tau T}{d\tau} + \sum_{j=1}^m [Q_{pj} \cdot r_j(C, T)] + K_T \cdot F_{уд} (T_x - T)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\partial T}{\partial \tau} + \sum_{j=1}^m \left[\frac{Q_{pj} \cdot c_{oi}}{c_p} \cdot \frac{r_j(C_i, T)}{C_{oi}} \right] + \frac{K_T \cdot F_{уд}}{c_p} (T_x - T) \quad (1.3)$$

Выражение $\frac{Q_{pj} \cdot c_{oi}}{c_p} = \Delta T_{adj}$ - адиабатический разогрев. Отношение скорости реакции $r_j(C_i, T)$ к исходной концентрации C_{i0} выразим через степень превращения x_i и обозначим: $r_j(C_i, T)/C_{i0} = r_j(x_i, T)$. Соотношение $K_m F_{уд}/c_p = B$ есть параметр теплоотвода.

С этими обозначениями уравнение (1.3) приобретает более стройный вид:

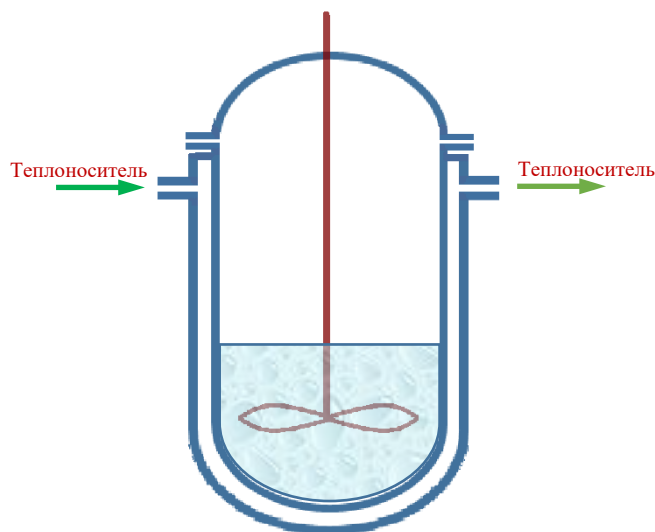
$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\partial T}{\partial \tau} + \sum_{j=1}^m [\Delta T_{adj} \cdot r_j(x_i, T)] + B(T_x - T) \quad (1.4)$$

Окончательно математическая модель представляет собой систему уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial C_i}{\partial t} = -\frac{\partial C_i}{\partial \tau} + W_i(C, T), & i = 1, k - \text{ количество компонентов} \\ \frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\partial T}{\partial \tau} + \sum_{j=1}^m [\Delta T_{adj} \cdot r_j(x_i, T)] + B(T_x - T), & j = 1, m - \text{ количество стадий реакции} \end{cases} \quad (1.5)$$

при $t = 0$ $C = C_{i0}$ и $T = T_0$

2 Математическая модель процесса в периодическом реакторе идеального смешения (РИС)



Материальный баланс

Все компоненты одновременно загружают в него. Реакция протекает при интенсивном перемешивании, так что можно считать концентрации и температуру в каждый момент времени одинаковыми по всему объему. Поэтому элементарным будет весь объем V_p реакционной зоны (далее реактора). Возможен теплообмен с теплоносителем, имеющим температуру T_x . Поверхность теплообмена F_m и коэффициент теплообмена K_m .

Процесс протекает нестационарно:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} \neq 0;$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} \neq 0.$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial \tau} = \frac{\partial C_i}{\partial \left(\frac{V_p}{v}\right)} = v \frac{\partial C_i}{\partial V_p} = 0 \cdot \frac{\partial C_i}{\partial V_p} = 0$$

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\partial T}{\partial \left(\frac{V_p}{v}\right)} = v \frac{\partial T}{\partial V_p} = 0 \cdot \frac{\partial T}{\partial V_p} = 0$$

Тогда система уравнений (1.5) примет вид

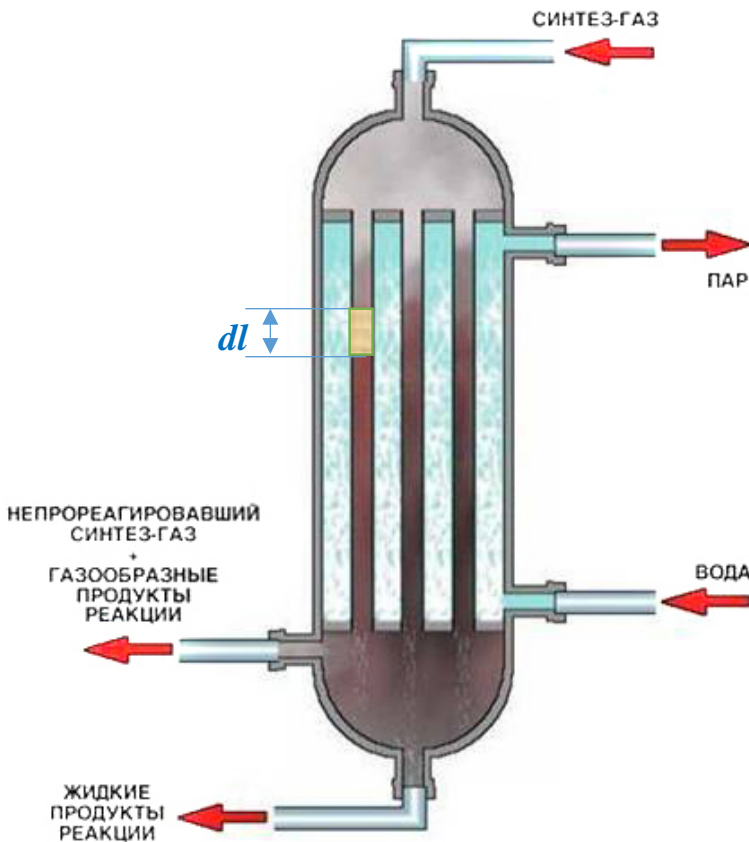
$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C_i}{\partial t} = -0 + W_i(C, T), \quad i = 1, k \\ \frac{\partial T}{\partial t} = -0 + \sum_{j=1}^m [\Delta T_{adj} \cdot r_j(x_i, T)] + B(T_x - T), \quad j = 1, m \end{array} \right. \quad (2.1)$$

при $t = 0 \quad C = C_{i0}$ и $T = T_0$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C_i}{\partial t} = W_i(C, T), \quad i = 1, k \\ \frac{\partial T}{\partial t} = \sum_{j=1}^m [\Delta T_{adj} \cdot r_j(x_i, T)] + B(T_x - T), \quad j = 1, m \end{array} \right. \quad (2.2)$$

при $t = 0 \quad C = C_{i0}$ и $T = T_0$

3 Математическая модель процесса в реакторе идеального вытеснения (РИВ)



Материальный баланс

Режим течения потока через реактор без перемешивания. Профиль скорости по сечению плоский. Это возможно допустить, если масштаб отклонений много меньше масштаба реакционной зоны, что во многих реакторах выполняется. Такой режим потока называют *поршневым*, или *идеального вытеснения*. Реактор представим в виде трубки сечением S , через которое проходит поток величиной v . По мере прохождения потока реакционной смеси вследствие химических превращений изменяются концентрации компонентов C_i и в общем случае температура потока T .

Одновременно может происходить теплообмен с теплоносителем через стенку. Элементарный объем в этом случае участок толщиной dl и объемом $dV_p = Sdl$.

Процесс протекает стационарно:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = 0;$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = 0.$$

Тогда система уравнений (1.5) примет вид

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 = -\frac{\partial C_i}{\partial \tau} + W_i(C, T), \quad i = 1, k \\ 0 = -\frac{\partial C_j}{\partial \tau} + \sum_{j=1}^m [\Delta T_{adj} \cdot r_j(x_i, T)] + B(T_x - T), \quad j = 1, m \\ \text{при } t = 0 \quad C = C_{i0} \text{ и } T = T_0 \end{array} \right. \quad (3.1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C_i}{\partial \tau} = W_i(C, T), \quad i = 1, k \\ \frac{\partial T}{\partial \tau} = \sum_{j=1}^m [\Delta T_{adj} \cdot r_j(x_i, T)] + B(T_x - T), \quad j = 1, m \\ \text{при } \tau = 0 \quad C = C_{i0} \text{ и } T = T_0 \end{array} \right. \quad (3.2)$$

4 Математическая модель процесса в проточном реакторе идеального смешения (РИС)

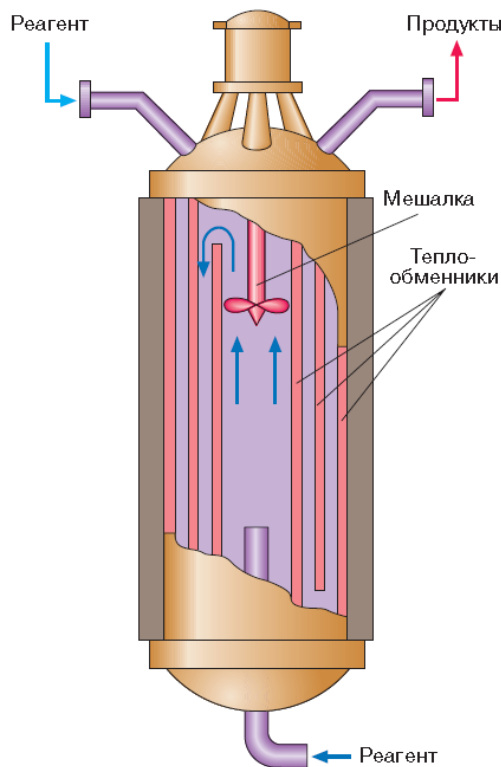


Рис. 1 Проточный реактор идеального смешения

Схема процесса представлена на рис. 1. Рассматриваем одну фазу, интенсивно перемешиваемую. Реактор проточный, и процесс протекает непрерывно. Процесс протекает стационарно:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = 0;$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = 0.$$

Тогда система уравнений (1.5) примет вид

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 = -\frac{\partial C_i}{\partial \tau} + W_i(C, T), \quad i = 1, k \\ 0 = -\frac{\partial T}{\partial \tau} + \sum_{j=1}^m [\Delta T_{adj} \cdot r_j(x_i, T)] + B(T_x - T), \quad j = 1, m \\ \text{при } t = 0 \quad C = C_{i0} \text{ и } T = T_0 \end{array} \right. \quad (4.1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C_i}{\partial \tau} = W_i(C, T), \quad i = 1, k \\ \frac{\partial T}{\partial \tau} = \sum_{j=1}^m [\Delta T_{adj} \cdot r_j(x_i, T)] + B(T_x - T), \quad j = 1, m \\ \text{при } t = 0 \quad C = C_{i0} \text{ и } T = T_0 \end{array} \right. \quad (4.2)$$

Для проточного реактора идеального смешения:

$$\partial C_i = C_i - C_{i0};$$

$$d\tau = \tau;$$

$$dT = T - T_0.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{C_i - C_{i0}}{\tau} = W_i(C, T), \quad i = 1, k \\ \frac{T - T_0}{\tau} = \sum_{j=1}^m [\Delta T_{adj} \cdot r_j(x_i, T)] + B(T_x - T), \quad j = 1, m \\ \text{при } \tau = 0 \quad C = C_{i0} \text{ и } T = T_0 \end{array} \right. \quad (4.3)$$

5 Изотермические процессы в химическом реакторе. Задачи для самостоятельного решения

Задача №1

Определите объем проточного реактора идеального смешения, необходимый для достижения степени превращения исходного реагента x_A (см. табл.1) при проведении реакции $2A \xrightarrow{k} R + S$, если $C_{A,0}$, k и объёмный расход v подачи реагентов в реактор заданы.

Таблица 1

Варианты заданий для задачи №1

Номер варианта	Группа							
	21	22	21	22	21	22	21	22
	x_A		$C_{A,0}$, кмоль/м ³		k , м ³ /(кмоль·ч)		v , м ³ /ч	
1	0,72	0,68	2,3	2,0	24,6	13,0	0,7	1,7
2	0,67	0,75	1,6	3,5	11,3	21,2	1,7	1,8
3	0,91	0,74	1,6	3,4	24,3	11,8	0,9	1,1
4	0,75	0,87	3,7	2,7	11,8	15,3	0,7	1,8
5	0,60	0,70	3,5	1,8	23,1	21,5	1,6	0,7
6	0,85	0,75	4,0	1,8	20,1	13,3	0,8	1,7
7	0,91	0,61	2,5	1,6	19,5	16,2	1,4	1,1
8	0,82	0,89	2,6	2,6	23,2	20,4	1,3	1,3
9	0,91	0,92	2,3	2,9	13,1	21,7	0,7	1,1
10	0,92	0,84	2,9	2,5	21,9	16,2	0,9	0,7
11	0,79	0,86	3,7	3,2	12,6	12,3	1,7	1,4
12	0,67	0,64	3,4	2,3	10,4	11,3	0,9	1,5
13	0,91	0,75	3,4	3,2	20,4	21,8	1,3	1,0
14	0,68	0,86	2,0	2,2	18,0	22,5	0,9	1,7
15	0,60	0,67	3,8	1,5	20,3	17,5	1,6	1,2
16	0,64	0,91	3,1	2,7	23,6	15,1	0,9	1,6
17	0,67	0,92	1,8	3,8	10,7	18,5	0,6	1,3
18	0,94	0,62	2,4	4,0	18,6	18,2	0,5	2,0
19	0,81	0,61	2,4	3,1	16,8	11,3	1,3	1,1
20	0,72	0,71	2,6	3,0	18,4	20,2	1,3	1,5
21	0,91	0,88	2,6	2,0	14,3	10,7	1,9	1,3
22	0,85	0,64	2,7	1,8	10,1	13,3	2,0	0,8
23	0,74	0,62	2,1	3,0	13,5	15,7	0,9	0,8
24	0,66	0,73	3,6	2,7	21,1	18,7	1,6	2,0
25	0,83	0,95	1,7	3,7	11,4	20,2	1,4	0,6
26	0,77	0,72	1,8	2,8	20,9	16,3	0,5	1,1
27	0,64	0,95	3,9	2,6	15,1	20,1	1,5	1,1
28	0,90	0,71	3,1	3,2	14,0	13,2	1,9	0,8
29	0,86	0,80	1,5	2,7	10,4	22,0	1,8	0,9
30	0,95	0,68	3,1	3,3	18,4	15,9	1,5	1,9

Задача №2

Определите степени превращения реагентов A и B на выходе из проточного реактора идеального смешения объёмом V (см. табл.2) при проведении реакции $A + B \xrightarrow{k} R + S$, если $C_{A,0}$, $C_{B,0}$, объёмный расход v , константа скорости k .

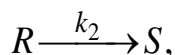
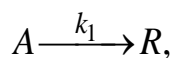
Таблица 2

Варианты заданий для задачи №2

Номер варианта	Группа									
	21	22	21	22	21	22	21	22	21	22
	$V, \text{ м}^3$		$C_{A,0}, \text{ кмоль/м}^3$		$C_{B,0}, \text{ кмоль/м}^3$		$k, \text{ м}^3/(\text{кмоль} \cdot \text{ч})$		$v, \text{ м}^3/\text{ч}$	
1	0,60	0,40	1,1	1,3	1,8	1,5	5,6	5,2	14	14
2	0,57	0,52	1,4	1,0	1,5	1,5	3,1	6,5	10	14
3	0,54	0,68	1,1	1,3	1,7	1,5	3,1	7,0	11	12
4	0,39	0,38	1,3	1,2	1,4	1,5	7,0	6,1	11	13
5	0,37	0,43	1,0	1,3	1,6	1,4	3,4	4,1	13	13
6	0,66	0,54	1,4	1,3	1,7	1,4	6,5	4,2	10	14
7	0,55	0,33	1,4	1,2	1,8	1,6	5,7	4,9	13	11
8	0,35	0,49	1,1	1,3	1,4	1,5	4,4	6,9	10	12
9	0,44	0,48	1,2	1,1	1,8	1,4	4,4	4,5	13	11
10	0,65	0,65	1,0	1,2	1,8	1,6	4,1	6,4	10	13
11	0,43	0,37	1,1	1,2	1,4	1,5	4,3	6,8	10	13
12	0,51	0,57	1,1	1,1	1,8	1,8	5,3	7,0	13	11
13	0,47	0,30	1,4	1,3	1,4	1,5	6,5	5,8	14	12
14	0,64	0,32	1,3	1,4	1,8	1,5	5,7	4,7	14	10
15	0,38	0,67	1,3	1,4	1,8	1,4	5,6	5,9	11	13
16	0,62	0,44	1,2	1,1	1,5	1,5	4,0	4,0	11	11
17	0,55	0,54	1,4	1,1	1,4	1,5	6,1	6,4	10	11
18	0,44	0,61	1,3	1,1	1,4	1,8	3	3,9	11	10
19	0,62	0,36	1,1	1,1	1,7	1,6	4,9	3,6	10	14
20	0,58	0,59	1,2	1,3	1,6	1,7	5,1	6,4	11	13
21	0,54	0,39	1,0	1,4	1,6	1,7	3,0	6,1	12	12
22	0,49	0,45	1,1	1,4	1,7	1,4	5,9	6,8	13	14
23	0,37	0,46	1,0	1,1	1,6	1,5	4,7	5,0	12	12
24	0,44	0,48	1,3	1,1	1,4	1,6	3,8	6,2	13	11
25	0,52	0,57	1,2	1,1	1,8	1,8	3,4	4,8	11	13
26	0,59	0,42	1,4	1,0	1,4	1,8	6,0	3,0	11	12
27	0,58	0,41	1,3	1,3	1,6	1,4	6,9	3,1	10	10
28	0,68	0,49	1,1	1,1	1,8	1,4	6,4	3,8	13	14
29	0,52	0,56	1,0	1,1	1,5	1,4	6,6	3,4	13	12
30	0,60	0,70	1,2	1,0	1,4	1,8	3,7	6,2	13	11

Задача №3

Определите максимально возможную концентрацию промежуточного продукта R при проведении в изотермическом периодическом реакторе идеального смешения последовательных реакций



если k_1 , k_2 и $C_{A,0}$ известны (см. табл.3).

Таблица 3

Варианты заданий для задачи №3

Номер варианта	Группа					
	21	22	21	22	21	22
	$C_{A,0}$, кмоль/м ³		k_1 , ч ⁻¹		k_2 , ч ⁻¹	
1	0,78	0,72	1,31	1,06	0,23	0,18
2	0,78	0,65	1,66	1,25	0,22	0,19
3	0,79	0,67	1,53	1,75	0,25	0,22
4	0,60	0,64	1,58	1,03	0,25	0,18
5	0,61	0,77	1,23	1,64	0,19	0,21
6	0,80	0,60	1,61	1,29	0,25	0,24
7	0,67	0,62	1,33	1,71	0,23	0,25
8	0,76	0,69	1,29	1,32	0,18	0,23
9	0,70	0,63	1,60	1,67	0,22	0,20
10	0,64	0,75	1,40	1,06	0,21	0,22
11	0,78	0,69	1,22	1,24	0,18	0,23
12	0,76	0,73	1,77	1,41	0,18	0,23
13	0,65	0,75	1,50	1,80	0,25	0,15
14	0,66	0,63	1,48	1,66	0,18	0,17
15	0,70	0,79	1,57	1,45	0,20	0,24
16	0,62	0,69	1,05	1,00	0,20	0,17
17	0,72	0,77	1,44	1,49	0,23	0,15
18	0,65	0,80	1,63	1,30	0,23	0,18
19	0,65	0,77	1,21	1,61	0,24	0,22
20	0,67	0,65	1,18	1,42	0,16	0,15
21	0,72	0,69	1,18	1,37	0,20	0,23
22	0,76	0,68	1,25	1,67	0,23	0,24
23	0,69	0,72	1,26	1,30	0,20	0,16
24	0,73	0,60	1,28	1,58	0,25	0,16
25	0,68	0,68	1,42	1,55	0,20	0,15
26	0,69	0,64	1,62	1,04	0,17	0,23
27	0,61	0,70	1,37	1,69	0,20	0,20
28	0,79	0,67	1,67	1,48	0,17	0,15
29	0,69	0,75	1,34	1,02	0,22	0,16
30	0,72	0,60	1,21	1,32	0,17	0,15

Задача №4

Определите степень превращения на выходе из реактора идеального вытеснения объёмом V при проведении реакции, $A \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} R$ если объёмный расход v , константа скорости прямой реакции k_1 , константа равновесия K_c известны (см. табл.4).

Таблица 4

Варианты заданий для задачи №4

Номер варианта	Группа							
	21	22	21	22	21	22	21	22
	$V, \text{ м}^3$		K_c		$k_1, \text{ ч}^{-1}$		$v, \text{ м}^3/\text{ч}$	
1	1,15	1,84	4,8	3,84	1,19	1,89	5,0	4,08
2	0,95	2,35	4,7	3,66	1,08	2,3	4,5	3,46
3	0,81	1,67	4,6	3,68	0,87	1,58	4,3	4,84
4	1,16	2,33	4,5	4,15	1,14	1,76	4,9	4,8
5	1,19	2,47	4,4	3,84	0,92	2,37	4,1	3,98
6	1,17	1,8	4,6	3,52	0,94	2,45	4,6	3,16
7	1,08	2,39	4,2	3,16	1,14	1,61	4,4	4,99
8	0,94	2,06	4,2	4,93	0,92	1,63	4,0	3,19
9	0,89	1,98	4,5	4,71	0,83	1,97	4,9	3,40
10	1,19	2,21	4,5	3,92	0,82	1,69	4,6	3,47
11	1,07	1,59	4,2	4,21	1,05	1,57	4,6	4,69
12	0,94	1,82	4,2	4,34	1,10	2,39	4,0	3,26
13	1,00	2,27	4,9	3,91	1,00	2,42	4,5	4,27
14	1,05	2,02	4,7	3,89	1,08	2,38	4,5	4,23
15	1,13	1,77	4,4	3,88	0,85	1,63	4,2	3,09
16	0,82	1,81	4,7	3,61	0,87	2,48	5,0	3,43
17	0,97	1,78	4,2	3,11	1,08	2,38	4,7	4,7
18	0,97	2,48	4,0	4,94	0,95	2,35	4,1	3,54
19	1,19	1,72	4,3	3,00	0,92	1,77	5,0	4,23
20	1,14	2,4	4,5	4,59	1,17	1,87	4,7	3,96
21	0,81	2,49	4,0	4,58	1,01	2,01	4,8	4,23
22	0,81	2,22	4,7	4,49	0,91	1,62	4,9	3,20
23	0,93	1,60	4,2	4,97	0,89	1,54	4,2	4,45
24	1,08	2,4	5,0	3,64	0,88	2,46	4,9	4,52
25	1,14	1,54	4,5	4,43	0,84	1,89	4,5	4,73
26	0,92	2,35	4,1	4,45	1,19	2,00	4,3	4,91
27	0,87	1,72	4,3	3,39	1,15	1,94	4,0	4,45
28	1,18	2,20	4,5	3,99	1,16	1,80	4,1	3,13
29	1,04	2,03	4,2	3,03	0,86	1,79	4,6	4,13
30	1,08	2,36	4,5	4,23	0,97	1,50	4,0	4,75

Задача №5

1. Определите объем реактора идеального вытеснения для проведения реакции $2A \xrightarrow{k} R + S$, если k , $c_{A,0}$, объёмный расход v , необходимая степень превращения x_A известны (см. табл.5).

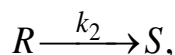
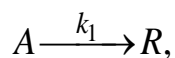
Таблица 5

Варианты заданий для задачи №5

Номер варианта	Группа							
	21	22	21	22	21	22	21	22
	$k, \text{м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{ч}),$		$C_{A,0}, \text{кмоль}/\text{м}^3$		$v, \text{м}^3/\text{ч}$		x_A	
1	5,3	6,0	2,5	2,5	13	12	0,84	0,70
2	4,2	4,9	2,2	2,0	11	12	0,74	0,76
3	5,7	5,7	1,8	1,7	14	13	0,73	0,84
4	5,0	4,3	2,0	2,0	13	12	0,78	0,77
5	4,1	4,1	2,1	2,5	12	13	0,80	0,82
6	5,6	4,4	1,8	2,2	11	14	0,79	0,78
7	5,8	5,7	1,9	2,5	14	13	0,85	0,74
8	4,2	4,4	2,1	2,4	13	10	0,82	0,84
9	4,3	4,9	2,3	1,7	10	14	0,74	0,81
10	4,9	5,1	2,3	2,0	14	14	0,76	0,70
11	5,6	5,1	1,9	1,8	13	11	0,81	0,79
12	5,4	4,2	2,4	1,6	13	14	0,80	0,79
13	5,6	4,2	1,5	2,3	14	14	0,70	0,83
14	4,3	4,3	1,7	2,3	12	11	0,81	0,82
15	5,7	4,4	1,8	1,5	14	10	0,77	0,74
16	4,0	4,7	2,3	2,2	10	10	0,72	0,84
17	6,0	4,5	1,7	1,8	12	12	0,74	0,77
18	5,0	4,9	2,2	2,4	10	10	0,70	0,79
19	4,5	5,7	1,8	1,5	10	11	0,72	0,74
20	5,2	4,8	2,3	1,8	14	10	0,82	0,73
21	4,5	4,8	2,3	1,8	12	11	0,73	0,84
22	4,9	5,7	2,4	1,7	12	12	0,72	0,74
23	5,0	5,2	1,8	2,3	11	12	0,81	0,85
24	5,9	4,4	2,2	1,9	11	10	0,85	0,74
25	4,2	4,6	1,8	1,6	11	10	0,79	0,80
26	5,5	4,9	1,6	2,1	13	12	0,79	0,85
27	4,2	4,1	2,4	2,3	14	12	0,71	0,85
28	4,2	4,4	1,9	1,6	14	13	0,70	0,83
29	4,2	5,6	1,6	2,3	12	11	0,72	0,82
30	5,5	5,6	2,4	1,5	13	11	0,72	0,80

Задача №6

Определите максимально возможную производительность по промежуточному продукту R при проведении в изотермическом реакторе идеального смешения последовательных реакций



если k_1 , k_2 , $C_{A,0}$ и объёмный расход v известны (см. табл.6). Какой объём реактора для этого потребуется? Какая селективность будет достигнута?

Таблица 6

Варианты заданий для задачи №6

Номер варианта	Группа							
	21	22	21	22	21	22	21	22
	$k_1, \text{ч}^{-1}$		$k_2, \text{ч}^{-1}$		$v, \text{м}^3/\text{ч}$		$C_{A,0}, \text{кмоль}/\text{м}^3$	
1	0,36	0,39	0,14	0,14	0,51	0,54	0,61	0,66
2	0,32	0,50	0,12	0,16	0,50	0,57	0,63	0,66
3	0,39	0,34	0,17	0,15	0,53	0,49	0,78	0,63
4	0,37	0,39	0,12	0,12	0,53	0,48	0,72	0,69
5	0,31	0,31	0,15	0,16	0,51	0,41	0,78	0,63
6	0,30	0,30	0,15	0,12	0,43	0,54	0,75	0,66
7	0,47	0,40	0,15	0,12	0,51	0,60	0,67	0,67
8	0,40	0,36	0,16	0,14	0,41	0,50	0,70	0,63
9	0,40	0,38	0,17	0,12	0,49	0,48	0,77	0,60
10	0,37	0,48	0,16	0,14	0,52	0,48	0,76	0,69
11	0,37	0,39	0,16	0,15	0,58	0,42	0,69	0,63
12	0,48	0,39	0,12	0,13	0,45	0,52	0,69	0,61
13	0,36	0,39	0,14	0,14	0,53	0,47	0,78	0,61
14	0,39	0,32	0,12	0,12	0,56	0,52	0,64	0,75
15	0,42	0,43	0,14	0,15	0,57	0,58	0,79	0,64
16	0,31	0,37	0,14	0,17	0,58	0,51	0,75	0,75
17	0,33	0,36	0,16	0,14	0,55	0,57	0,71	0,71
18	0,33	0,32	0,12	0,16	0,58	0,42	0,64	0,79
19	0,42	0,33	0,13	0,16	0,41	0,44	0,65	0,79
20	0,50	0,49	0,16	0,17	0,48	0,42	0,80	0,70
21	0,35	0,44	0,16	0,12	0,46	0,51	0,69	0,71
22	0,36	0,48	0,17	0,17	0,47	0,45	0,76	0,67
23	0,37	0,44	0,13	0,13	0,43	0,49	0,64	0,70
24	0,41	0,36	0,13	0,17	0,50	0,44	0,66	0,62
25	0,40	0,36	0,12	0,13	0,45	0,48	0,77	0,63
26	0,47	0,44	0,16	0,15	0,59	0,46	0,76	0,61
27	0,43	0,47	0,17	0,12	0,49	0,40	0,65	0,69
28	0,33	0,37	0,12	0,13	0,54	0,51	0,79	0,80
29	0,50	0,39	0,17	0,14	0,56	0,49	0,64	0,76
30	0,45	0,36	0,14	0,14	0,51	0,59	0,63	0,74

6 Неизотермический процесс в реакторе идеального вытеснения

6.1 Математическая модель химического реактора идеального вытеснения для простой необратимой реакции $A \rightarrow R$

Политермический режим непрерывного процесса в РИВ описываются математической моделью (3.2):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C_i}{\partial \tau} = W_i(C, T), \quad i = 1, k \\ \frac{\partial T}{\partial \tau} = \sum_{j=1}^m [\Delta T_{adj} \cdot r_j(x_i, T)] + B(T_x - T), \quad j = 1, m \end{array} \right. \quad (6.1)$$

при $\tau = 0$ $C = C_{i0}$ и $T = T_0$

Система уравнений (7.1) для простой необратимой реакции имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_A}{\partial \tau} &= W_A(C, T), \\ \frac{\partial T}{\partial \tau} &= \Delta T_{ад1} \cdot r_1(x_A, T) + B(T_x - T), \end{aligned} \quad (6.2)$$

при $\tau = 0$ $C = C_{A0}$ и $T = T_0$

Для простоты исключим индекс обозначающий принадлежность веществу А и номеру реакции, тогда получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial \tau} &= W(C, T), \\ \frac{\partial T}{\partial \tau} &= \Delta T_{ад} \cdot r(x, T) + B(T_x - T), \end{aligned} \quad (6.3)$$

при $\tau = 0$ $C = C_0$ и $T = T_0$

Скорость превращения вещества А равна

$$W(C, T) = -r(C, T) = -kC = -kC_0(1 - x)$$

Выразив концентрацию через степень превращения получим

$$\frac{dC}{d\tau} = W(C, T); \quad \frac{d[C_0(1 - x)]}{d\tau} = -kC_0(1 - x);$$

$$-C_0 \frac{dx}{d\tau} = -kC_0(1-x); \quad \frac{dx}{d\tau} = k(1-x)$$

С учётом полученных соотношений систему (7.3) перепишем в виде

$$\begin{cases} \frac{dx}{d\tau} = k(1-x) \\ \frac{dT}{d\tau} = \Delta T_{ад} k(1-x) + B(T_x - T) \\ \text{при } \tau = 0 \quad x = 0 \text{ и } T = T_0 \end{cases} \quad (6.4)$$

6.2 Алгоритм решения системы уравнений математической модели

Система уравнений (6.4) аналитическое решение не имеет и для решения можно воспользоваться методом конечных разностей. В его основе лежит аппроксимация производной отношением конечных приращений зависимой (x) и независимой (τ) переменных между узлами равномерной сетки:

$$\begin{cases} \frac{dx}{d\tau} = \frac{\Delta x}{\Delta \tau} = \frac{x_{i+1} - x_i}{\tau_{i+1} - \tau_i} = k_i(1 - x_i) \\ \frac{dT}{d\tau} = \frac{\Delta T}{\Delta \tau} = \frac{T_{i+1} - T_i}{\tau_{i+1} - \tau_i} = \Delta T_{ад} k_i(1 - x_i) + B(T_x - T_i) \\ \text{при } \tau = 0 \quad x = 0 \text{ и } T = T_0 \end{cases} \quad (6.5)$$

Преобразуя систему уравнений (7.5) получим:

$$\begin{cases} \Delta x = x_{i+1} - x_i = k_i(1 - x_i)\Delta \tau \\ \Delta T = T_{i+1} - T_i = \Delta T_{ад} k_i(1 - x_i)\Delta \tau + B(T_x - T_i) \\ \text{при } \tau = 0 \quad x = 0 \text{ и } T = T_0 \end{cases} \quad (6.6)$$

$$\begin{cases} x_{i+1} = x_i + k_i(1 - x_i)\Delta \tau \\ T_{i+1} = T_i + \Delta T_{ад} k_i(1 - x_i)\Delta \tau + B(T_x - T_i) \\ \text{при } \tau = 0 \quad x = 0 \text{ и } T = T_0 \end{cases} \quad (6.7)$$

6.3 Задачи для самостоятельного решения

Варианты выбираются согласно номеру в списке группы 21 или 22.

Задача №7

В химическом реакторе идеального вытеснения проходит для простая необратимая реакция $A \rightarrow R$ в политермическом режиме.

Дано:

1. Предэкспоненциальный множитель для реакции $A_1 = 9,478 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$.
2. Энергия активации прямой реакции $E_1 = 99,6 \text{ кДж/моль}$.
3. Начальная концентрация вещества A $C_{A0} = 4,5 \text{ кмоль/м}^3$.
4. Начальная концентрация вещества B $C_{B0} = 0 \text{ кмоль/м}^3$.
5. Тепловой эффект реакции $Q_p = 2 \cdot 10^7 \text{ Дж/(кмоль)}$.
6. Массовая теплоёмкость $c_p = 2,2 \cdot 10^3 \text{ Дж/(кг}\cdot\text{K)}$.
7. Коэффициент теплоотдачи $K_m = 320 \text{ Вт/(м}^2\text{K)}$.
8. Плотность $\rho = 850 \text{ кг/м}^3$.
9. Температура входного потока T_0 (значения см. в табл.7).
10. Температура хладагента T_x (значения см. в табл.7).
11. Поверхность теплообмена F (значения см. в табл.7).
12. Объём реактора V_p (значения см. в табл.7).

Определить: производительность реактора по продукту при заданном значении степени превращения исходного продукта A (значения см. в табл.7).

Таблица 7

Варианты заданий для задачи №7

Номер варианта	Группа									
	21	22	21	22	21	22	21	22	21	22
	T_0, K		T_x, K		x		F, m^2		V_p, m^3	
1	262	233	325	322	0,90	0,88	15	13	5,0	2,2
2	247	265	320	323	0,84	0,75	12	12	4,0	4,6
3	275	262	317	323	0,91	0,87	11	12	2,0	3,1
4	231	205	325	325	0,75	0,82	14	18	3,5	5,0
5	257	206	324	324	0,79	0,85	18	16	4,5	3,9
6	212	256	316	325	0,83	0,78	12	13	4,3	2,7
7	222	240	325	316	0,86	0,94	15	16	2,8	2,3
8	235	245	316	316	0,80	0,81	12	15	4,6	2,1
9	254	274	320	323	0,91	0,76	14	15	4,9	4,9
10	218	241	324	316	0,85	0,88	10	19	2,4	3,6
11	210	261	325	318	0,85	0,77	13	20	2,6	2,8
12	246	206	323	325	0,80	0,84	14	12	3,6	2,4
13	230	232	315	325	0,90	0,78	17	16	4,4	2,4
14	249	239	315	317	0,77	0,93	16	17	2,5	4,0
15	277	202	323	324	0,94	0,89	11	13	2,1	3,0
16	269	220	324	324	0,85	0,88	10	13	4,6	2,9

Таблица 7

Варианты заданий для задачи №7

Номер варианта	Группа									
	21	22	21	22	21	22	21	22	21	22
	T_0, K		T_x, K		x		F, m^2		V_p, m^3	
17	245	220	325	321	0,91	0,83	12	20	4,5	2,4
18	240	205	325	325	0,90	0,95	14	18	3,9	4,2
19	237	204	323	323	0,84	0,93	11	20	2,7	3,9
20	277	256	324	318	0,89	0,84	15	15	2,9	2,7
21	253	213	316	315	0,92	0,76	17	19	4,1	3,5
22	278	268	325	316	0,82	0,75	10	12	4,9	2,7
23	260	226	319	324	0,86	0,87	19	19	2,6	4,7
24	236	270	320	316	0,87	0,86	20	19	2,0	3,8
25	269	219	322	324	0,8	0,87	10	16	2,9	4,8
26	218	202	320	321	0,93	0,94	15	20	5,0	4,3
27	262	270	323	322	0,75	0,84	12	17	4,8	3,3
28	206	238	315	320	0,87	0,9	16	11	3,1	2,0
29	277	218	320	319	0,83	0,94	18	15	2,7	2,7
30	258	259	316	319	0,8	0,77	11	11	3,4	4,8

7 Неизотермические процессы в химическом проточном реакторе идеального смешения

7.1 Математическая модель химического проточного реактора идеального смешения для простой обратимой экзотермической реакции $A \rightleftharpoons R$

Для обратимой реакции первого порядка $A \xrightleftharpoons[k_1']{k_1} R$ кинетическое уравнение имеет вид

$$-W_A(C, T) = k_1 C_A - k_1' C_R. \quad (7.1)$$

$$r_1(C, T) = k_1 C_A - k_1' C_R. \quad (7.2)$$

Выразив в уравнении (7.1) концентрации C_A и C_R через $C_{A,0}$ и x получим

$$x_A = \frac{(C_{A0} - C_A)}{C_{A0}}; \quad C_A = C_{A0}(1 - x_A); \quad C_R = C_{A0} \cdot x_A \quad (7.3)$$

$$r_1(C, T) = k_1 C_{A0}(1 - x_A) - k_1' C_{A0} x_A = k_1 C_{A0} - (k_1 + k_1') C_{A0} x_A. \quad (7.4)$$

$$-W_A(x_A, T) = -\frac{W_A(C, T)}{C_{A0}} = k_1 - (k_1 + k_1') x_A. \quad (7.5)$$

$$r_1(x_A, T) = \frac{r_1(C, T)}{C_{A0}} = k_1 - (k_1 + k_1') x_A. \quad (7.6)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{C_A - C_{A0}}{\tau} = W_A(C, T), \\ \frac{T - T_0}{\tau} = \Delta T_{ад1} \cdot r_1(x_A, T) + B(T_x - T), \\ \text{при } \tau = 0 \quad C_A = C_{A0} \text{ и } T = T_0 \end{array} \right. \quad (7.7)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{C_{A0} - C_A}{\tau} = \frac{-W_A(C, T)}{C_{A0}}, \\ \frac{T - T_0}{\tau} = \Delta T_{ад1} \cdot r_1(x_A, T) + B(T_x - T), \\ \text{при } \tau = 0 \quad C_A = C_{A0} \text{ и } T = T_0 \end{array} \right. \quad (7.8)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{x_A}{\tau} = k_1 - (k_1 + k'_1)x_A, \\ \frac{T - T_0}{\tau} = \Delta T_{ад1} \cdot [k_1 - (k_1 + k'_1)x_A] + B(T_x - T), \end{array} \right. \quad (7.9)$$

при $\tau = 0$ $x_A = 0$ и $T = T_0$

Первое уравнение системы (7.9) - уравнение *материального* баланса можно представить в виде зависимости x_A от τ и T :

$$\frac{x_A}{\tau} = k_1 - (k_1 + k'_1)x_A. \quad (7.10)$$

$$x_A = \frac{k_1 \tau}{1 + (k_1 + k'_1)\tau}. \quad (7.11)$$

Уравнение теплового баланса входящий в систему (7.9) представим в виде:

$$T - T_0 = \Delta T_{ад1} \tau [k_1 - (k_1 + k'_1)x_A] + \tau B(T_x - T) \quad (7.12)$$

Из уравнения (7.10) следует:

$$x_A = \tau [k_1 - (k_1 + k'_1)x_A] \quad (7.13)$$

$$T - T_0 = \Delta T_{ад1} x_A + \tau B(T_x - T) \quad (7.14)$$

$$x_A = \frac{T - T_0 - \tau B(T_x - T)}{\Delta T_{ад1}} = \frac{T(1 + \tau B) - T_0 - \tau B T_x}{\Delta T_{ад1}}; \quad (7.15)$$

$$x_A = \frac{(1 + \tau B)}{\Delta T_{ад1}} T - \frac{T_0 + \tau B T_x}{\Delta T_{ад1}}$$

$$T = \frac{\Delta T_{ад1}}{(1 + \tau B)} x_A + \frac{T_0 + \tau B T_x}{(1 + \tau B)} \quad (7.16)$$

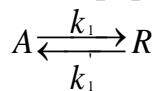
Для решения *итерационным методом* системы уравнений материального и теплового балансов пользуются уравнением

$$T = \frac{\Delta T_{ад1}}{(1 + \tau B)} \frac{k_1 \tau}{1 + (k_1 + k'_1)\tau} + \frac{T_0 + \tau B T_x}{(1 + \tau B)} \quad (7.17)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} x_A = \frac{k_1 \tau}{1 + (k_1 + k'_1) \tau}, \\ T = \frac{\Delta T_{ад1}}{(1 + \tau B)} x_A + \frac{T_0 + \tau B T_x}{(1 + \tau B)}, \\ \text{при } \tau = 0 \quad x_A = 0 \text{ и } T = T_0. \end{array} \right. \quad (7.18)$$

7.2 Пример адиабатического процесса в химическом проточном реакторе идеального смешения для простой обратимой экзотермической реакции $A \rightleftharpoons R$

В непрерывном реакторе идеального смешения проходит реакция



Дано:

1. Предэкспоненциальный множитель для прямой реакции $A_1 = 2,384 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$.
2. Энергия активации прямой реакции $E_1 = 95 \text{ кДж/моль}$.
3. Предэкспоненциальный множитель для обратной реакции $A_2 = 3,881 \cdot 10^{17} \text{ с}^{-1}$.
4. Энергия активации обратной реакции $E_2 = 135 \text{ кДж/моль}$.
5. Начальная концентрация вещества A $C_{A0} = 4,5 \text{ кмоль/м}^3$.
6. Начальная концентрация вещества B $C_{B0} = 0 \text{ кмоль/м}^3$.
7. Тепловой эффект реакции $Q_p = 4 \cdot 10^7 \text{ Дж/(кмоль)}$.
8. Массовая теплоёмкость $c_p = 2,2 \cdot 10^3 \text{ Дж/(кг}\cdot\text{К)}$.
9. Коэффициент теплоотдачи $K_m = 320 \text{ Вт/(м}^2\text{К)}$.
10. Плотность $\rho = 850 \text{ кг/м}^3$.
11. Температура входного потока $T_0 = 300 \text{ К}$.
12. Объём реактора $V_p = 10 \text{ м}^3$.

Определить: удельную производительность реактора по продукту и степень превращения в случае работы реактора в адиабатических условиях.

Для решения задачи воспользуемся табличным процессором EXCEL.

Шаг 1. Исходные данные внесем в ячейки таблицы как показано на рис.2. В ячейке B12 рассчитываем величину адиабатического разогрева по формуле:

$$\Delta T_{\text{ад1}} = \frac{Q_p \cdot C_{A0}}{c_p \rho}$$

	A	B	C
1	A_1	2,384E+12	1/с
2	E_1	95	кДж/моль
3	A_2	3,881E+17	1/с
4	E_2	135	кДж/моль
5	C_{A0}	4,5	кмоль/м ³
6	C_{B0}	0	кмоль/м ³
7	Q_p	4,00E+07	Дж/(кмоль)
8	c_p	2,20E+03	Дж/(кг·К)
9	ρ	850	кг/м ³
10	T_0	300	К
11	V_p	10	м ³
12	ΔT_{ad}	96,26	К

Рис. 2 Исходные данные

Эффективность реактора заданного объёма реактора будем оценивать удельной производительностью по веществу В, которая вычисляется по формуле:

$$ПВ = \frac{v \cdot C_B}{V_p}$$

Шаг 2. В ячейку D17 вводим примерное значение объёмного расхода исходных веществ в м³/ч. В ячейке E17 вычислим среднее время пребывания τ в секундах. В ячейку F17 вводим формулу для вычисления температуры Т (7.17). В ячейку G17 вводим примерное значение температуры в реакторе (введём значение температуры исходного продукта равное 300 К). В ячейку H17 вводим формулу для вычисления степени превращения вещества А - x_A (7.11). В ячейку I17 вводим формулу для вычисления концентрации вещества В - C_B (7.11) и в ячейку J17- формулу для вычисления удельной производительности по веществу В.

	D	E	F	G	H	I	J
16	$v, \text{ м}^3/\text{ч}$	$\tau=V/v$	T_p	T_u	x	$C_B, \text{ кмоль/м}^3$	$ПВ, \text{ кмоль}/(\text{м}^3 \cdot \text{ч})$
17	134,00	268,6567	301,7	300,0	0,0181	0,08	1,09

Рис. 3 Расчётные данные

Шаг 3. Далее методом итерации находим температуру в реакторе. Для этого копируем ячейку F17 и вставляем командой «Специальная вставка» «Вставка значения» рассчитанное значение температуры T_p в ячейку G17. Повторяем эту процедуру до тех пор, пока значения температуры в ячейках F17 и G17 с заданной точностью не сравнятся (см.рис.4).

	D	E	F	G	H	I	J
16	$v, \text{ м}^3/\text{ч}$	$\tau=V/v$	T_p	T_u	x	$C_B, \text{ кмоль}/\text{м}^3$	$ПВ, \text{ кмоль}/(\text{м}^3 \cdot \text{ч})$
17	134,00	268,6567	302,3	302,3	0,0241	0,11	1,45

Рис. 4 Расчётные данные

Шаг 4. Видим, что степень превращения ещё низкая поэтому уменьшаем объемный расход, например, на 10 м³/ч. Копируем строку 17 в строку 18 как показано на рис.5. Методом итерации как и шаге 3 находим температуру в реакторе.

	D	E	F	G	H	I	J
16	$v, \text{ м}^3/\text{ч}$	$\tau=V/v$	T_p	T_u	x	$C_B, \text{ кмоль}/\text{м}^3$	$ПВ, \text{ кмоль}/(\text{м}^3 \cdot \text{ч})$
17	134,00	268,6567	302,3	302,3	0,0241	0,11	1,45
18	124,00	290,3226	302,6	302,6	0,0268	0,12	1,50

Рис. 5 Расчётные данные

Шаг 5. Так продолжаем до тех пор, пока не получим резкий рост температуры и степени превращения (см.рис.6).

	D	E	F	G	H	I	J
16	$v, \text{ м}^3/\text{ч}$	$\tau=V/v$	T_p	T_u	x	$C_B, \text{ кмоль}/\text{м}^3$	$ПВ, \text{ кмоль}/(\text{м}^3 \cdot \text{ч})$
17	134,00	268,6567	302,3	302,3	0,0241	0,11	1,45
18	124,00	290,3226	302,6	302,6	0,0268	0,12	1,50
19	114,00	315,7895	302,9	302,9	0,0303	0,14	1,56
20	104,00	346,1538	303,4	303,4	0,0350	0,16	1,64
21	94,00	382,9787	304,0	304,0	0,0415	0,19	1,76
22	84,00	428,5714	305,0	305,0	0,0521	0,23	1,97
23	74,00	486,4865	307,4	307,4	0,0772	0,35	2,57
24	64,00	562,5	369,6	369,6	0,7235	3,26	20,84

Рис. 6 Расчётные данные

Шаг 6. Далее с точки «зажигания» с большими шагами в нашем случае 50 К движемся в обратном направлении в сторону роста производительности пока не произойдёт «потухание» т.е. резкое снижение температуры. Эти действия показаны на рис.7.

	D	E	F	G	H	I	J
24	64,00	562,5	369,6	369,6	0,7235	3,26	20,84
25	100,00	360	369,3	369,3	0,7196	3,24	32,38
26	150,00	240	368,7	368,7	0,7138	3,21	48,18
27	200,00	180	368,1	368,1	0,7074	3,18	63,67
28	250,00	144	367,4	367,4	0,7002	3,15	78,77
29	300,00	120	366,6	366,6	0,6919	3,11	93,41
30	350,00	102,8571	365,7	365,7	0,6820	3,07	107,42
31	400,00	90	364,5	364,5	0,6697	3,01	120,54
32	450,00	80	362,8	362,8	0,6522	2,93	132,07
33	500,00	72	300,5	300,5	0,0052	0,02	1,18

Рис. 7 Расчётные данные

Шаг 7. Возвращаемся к предыдущей точки и продолжаем движение с меньшим шагом также как в шаге 6 до «потухания». Эти действия показаны на рис.8.

	D	E	F	G	H	I	J
33	500,00	72	300,5	300,5	0,0052	0,02	1,18
34	450,00	80	362,8	362,8	0,6522	2,93	132,07
35	460,00	78,26087	362,3	362,3	0,6475	2,91	134,03
36	470,00	76,59574	361,8	361,8	0,6420	2,89	135,78
37	480,00	75	361,1	361,1	0,6352	2,86	137,20
38	490,00	73,46939	360,2	360,2	0,6259	2,82	138,01

Рис. 8 Расчётные данные

Шаг 8. Возвращаемся к предыдущей точки как в шаге 7 и продолжаем движение с меньшим шагом чем в шаге 7 до «потухания». Эти действия показаны на рис.9.

	D	E	F	G	H	I	J
38	490,00	73,46939	360,2	360,2	0,6259	2,82	138,01
39	492,00	73,17073	360,0	360,0	0,6234	2,81	138,02
40	494,00	72,87449	359,7	359,7	0,6205	2,79	137,93
41	496,00	72,58065	359,4	359,4	0,6169	2,78	137,69
42	498,00	72,28916	358,9	358,9	0,6117	2,75	137,09
43	499,00	72,14429	358,4	358,4	0,6070	2,73	136,31
44	500,00	72	300,5	300,5	0,0052	0,02	1,18

Рис. 9 Расчётные данные

Шаг 9. Для нашего случая последние вычисления позволяют определить условия при которых достигается максимальное значение удельной производительности и степени превращения реагента А. Они равны:

Объёмная скорость – 492 м³/ч;

Температура в реакторе – 360 К;

Время пребывания – 73 с;

Степень превращения вещества А - $x_A = 0,623$;

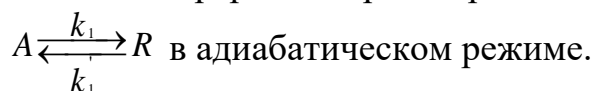
Удельная производительность – 138 кмоль/(м³/ч).

7.3 Задачи для самостоятельного решения

Варианты выбираются согласно номеру в списке группы 21 или 22.

Задача №8

В непрерывном реакторе идеального смешения проходит реакция



Дано:

1. Предэкспоненциальный множитель для прямой реакции A_1 (значения см. в табл. Ошибка! Источник ссылки не найден.).
2. Энергия активации прямой реакции E_1 (значения см. в табл. 8).
3. Предэкспоненциальный множитель для обратной реакции A_2 (значения см. в табл. 8).
4. Энергия активации обратной реакции E_2 (значения см. в табл. 8).
5. Начальная концентрация вещества A $C_{A0}=4,5$ кмоль/м³.
6. Начальная концентрация вещества B $C_{B0}=0$ кмоль/м³.
7. Тепловой эффект реакции Q_p , (значения см. в табл. 8).
8. Массовая теплоёмкость $c_p = 2,2 \cdot 10^3$ Дж/(кг·К).
9. Коэффициент теплоотдачи $K_m=320$ Вт/(м²К).
10. Плотность $\rho=850$ кг/м³.
11. Температура входного потока $T_0=300$ К.
12. Объём реактора $V_p=10$ м³.

Определить: удельную производительность реактора по продукту и степень превращения в случае работы реактора в адиабатических условиях.

Задача №9

В непрерывном реакторе идеального смешения проходит реакция



Дано:

1. Предэкспоненциальный множитель для прямой реакции A_1 (значения см. в табл.8).
2. Энергия активации прямой реакции E_1 (значения см. в табл.8).
3. Предэкспоненциальный множитель для обратной реакции A_2 (значения см. в табл.8).
4. Энергия активации обратной реакции E_2 (значения см. в табл.8).
5. Начальная концентрация вещества A $C_{A0}=4,5$ кмоль/м³.
6. Начальная концентрация вещества B $C_{B0}=0$ кмоль/м³.
7. Тепловой эффект реакции Q_p , (значения см. в табл.8).
8. Массовая теплоёмкость $c_p = 2,2 \cdot 10^3$ Дж/(кг·К).
9. Коэффициент теплоотдачи $K_m=320$ Вт/(м²К).
10. Плотность $\rho=850$ кг/м³.
11. Температура входного потока $T_0=300$ К.
12. Объёмная скорость потока $\nu=60$ м³/ч.

Определить: оптимальное значение объёма реактора при заданной производительности реактора по продукту и степень превращения в случае работы реактора в адиабатических условиях.

Таблица 8

Варианты заданий для задач №8 и №9

Номер варианта	Группа									
	21	22	21	22	21	22	21	22	21	22
	$A_1, 10^{12} \cdot \text{с}^{-1}$		$E_1, \text{кДж/моль}$		$A_2, 10^{16} \cdot \text{с}^{-1}$		$E_2, \text{кДж/моль}$		$Q_p, \text{кДж/моль}$	
31	3,22	4,35	96	97	38,81	8,66	135	130	39	33
32	26,28	47,89	103	105	15,78	8,66	132	130	29	25
33	2,38	19,47	95	102	2,61	8,66	126	130	31	28
34	14,43	2,38	101	95	6,42	4,75	129	128	28	33
35	2,38	47,89	95	105	2,61	2,61	126	126	31	21
36	35,48	2,38	104	95	1,93	3,52	125	127	21	32
37	35,48	19,47	104	102	8,66	8,66	130	130	26	28
38	7,92	10,69	99	100	4,75	2,61	128	126	29	26
39	2,38	19,47	95	102	8,66	6,42	130	129	35	27
40	4,35	4,35	97	97	3,52	1,93	127	125	30	28
41	47,89	4,35	105	97	4,75	4,75	128	128	23	31
42	5,87	14,43	98	101	1,93	4,75	125	128	27	27
43	26,28	14,43	103	101	8,66	4,75	130	128	27	27
44	2,38	3,22	95	96	11,69	11,69	131	131	36	35
45	19,47	47,89	102	105	28,75	4,75	134	128	32	23
46	2,38	5,87	95	98	8,66	3,52	130	127	35	29
47	7,92	26,28	99	103	15,78	15,78	132	132	33	29
48	2,38	35,48	95	104	38,81	6,42	135	129	40	25
49	35,48	5,87	104	98	6,42	4,75	129	128	25	30
50	14,43	47,89	101	105	15,78	1,93	132	125	31	20
51	10,69	7,92	100	99	28,75	2,61	134	126	34	27
52	7,92	2,38	99	95	1,93	38,81	125	135	26	40
53	35,48	10,69	104	100	28,75	6,42	134	129	30	29
54	26,28	5,87	103	98	6,42	11,69	129	131	26	33
55	2,38	4,35	95	97	8,66	15,78	130	132	35	35
56	2,628	47,89	103	105	15,78	8,66	132	130	29	25
57	4,789	7,92	105	99	3,52	15,78	127	132	22	33
58	5,87	5,87	98	98	15,78	1,93	132	125	34	27
59	3,548	3,55	104	104	6,42	2,61	129	126	25	22
60	3,22	2,63	96	103	1,93	1,93	125	125	29	22

8 Автотермический реактор

8.1 Математическая модель автотермического реактора

Вариант трубчатого реактора с отводом тепла из реакционной зоны показан на рис. 10. Теплоносителем является исходная реакционная смесь. Она подается в трубки реактора, в которых нагревается теплом экзотермической реакции. Пройдя трубки, поток направляется в межтрубное пространство, где и протекает реакция (на катализаторе). Выделяющееся тепло отводится через стенку к "холодильнику", т. е. свежей реакционной смеси. Такая схема реактора используется, например, в синтезе аммиака. Размещение катализатора не в трубках, а в межтрубном пространстве - не принципиально для режима и определено из конструктивных соображений.

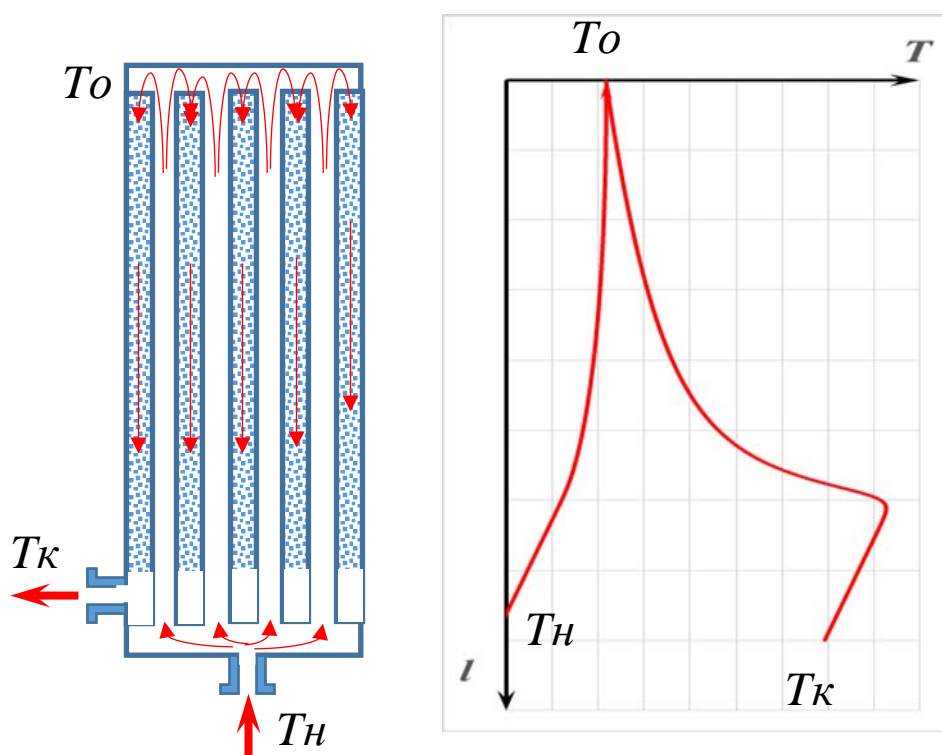


Рисунок 10 Схема автотермического реактора и профиль температур в нём

Математически процесс описывается системой уравнений (3.2), дополненной уравнением нагрева реакционной смеси:



Рисунок 11 Схема теплообмена

$$\frac{\partial T_x}{\partial \tau} = B(T_x - T)$$

$$\text{при } \tau = 0 \quad x = 0 \text{ и } T = T_x = T_0 \quad (8.1)$$

$$\text{при } \tau = \tau_k \quad x = 0 \text{ и } T_x = T_H$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C_i}{\partial \tau} = W_i(C, T), i = 1, k \\ \frac{\partial T}{\partial \tau} = \sum_{j=1}^m [\Delta T_{adj} \cdot r_j(x_i, T)] + B(T_x - T), j = 1, m \\ \frac{\partial T_x}{\partial \tau} = B(T_x - T) \\ \text{при } \tau = 0 \quad C = C_{i0} \quad x_i = 0 \text{ и } T = T_x = T_0 \\ \text{при } \tau = \tau_k \quad x_i = 0 \text{ и } T_x = T_H \end{array} \right. \quad (8.2)$$

Для простой необратимой реакции $A \rightarrow R$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C_A}{\partial \tau} = W_A(C, T), \\ \frac{\partial T}{\partial \tau} = \Delta T_{ад1} \cdot r_1(x_A, T) + B(T_x - T), \\ \frac{\partial T_x}{\partial \tau} = B(T_x - T) \\ \text{при } \tau = 0 \quad C = C_{A0} \quad x_A = 0 \text{ и } T = T_x = T_0 \\ \text{при } \tau = \tau_k \quad x_A = 0 \text{ и } T_x = T_H \end{array} \right. \quad (8.3)$$

Скорость превращения вещества А для простой необратимой экзотермической реакции $A \rightarrow R$:

$$\frac{\partial C_A}{\partial \tau} = \frac{\partial C_{A0}(1 - x_A)}{\partial \tau} = -C_{A0} \frac{\partial x_A}{\partial \tau} = W(C_A, T) = -r_1(C_A, T) = -kC_A = -kC_{A0}(1 - x_A) \quad (8.4)$$

$$-C_{A0} \frac{\partial x_A}{\partial \tau} = -kC_{A0}(1 - x_A) \rightarrow \frac{\partial x_A}{\partial \tau} = k(1 - x_A)$$

$$-r_1(C, T) = -kC_{A0}(1 - x_A) \rightarrow r_1(x_A, T) = \frac{r_1(C_A, T)}{C_{A0}} = k(1 - x_A)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial x_A}{\partial \tau} = k(1 - x_A) \\ \frac{\partial T}{\partial \tau} = \Delta T_{ад1} \cdot k(1 - x_A) + B(T_x - T), \\ \frac{\partial T_x}{\partial \tau} = B(T_x - T) \end{array} \right. \quad (8.5)$$

при $\tau = 0$ $C = C_{A0}$ $x_A = 0$ и $T = T_x = T_0$

при $\tau = \tau_k$ $x_A = 0$ и $T_x = T_H$

8.2 Алгоритм решения системы уравнений математической модели

Данную систему уравнений решим, используя метод конечных разностей:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\Delta x}{\Delta \tau} = k(1 - x) \\ \frac{\Delta T}{\Delta \tau} = \Delta T_{ад} k(1 - x) + B(T_x - T) \\ \frac{\Delta T_x}{\Delta \tau} = B(T_x - T) \end{array} \right. \quad (8.6)$$

при $\tau = 0$ $x = 0$ и $T = T_x = T_0$

при $\tau = \tau_k$ $x = 0$ и $T_x = T_H$

Умножая правую и левую части уравнений в системе (8.6)(8.7) на $\Delta \tau$ получим

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta x = k(1 - x) \Delta \tau \\ \Delta T = \Delta T_{ад} k(1 - x) \Delta \tau + B(T_x - T) \Delta \tau \\ \Delta T_x = B(T_x - T) \Delta \tau \end{array} \right. \quad (8.7)$$

при $\tau = 0$ $x = 0$ и $T = T_x = T_0$

при $\tau = \tau_k$ $x = 0$ и $T_x = T_H$

или

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta x = x_{i+1} - x_i = k(1 - x_i)\Delta\tau \\ \Delta T = T_{i+1} - T_i = \Delta T_{\text{ад}}k(1 - x_i)\Delta t + B(T_{x,i} - T_i)\Delta\tau \\ \Delta T_x = T_{x,i+1} - T_{x,i} = B(T_{x,i} - T_i)\Delta\tau \\ \text{при } \tau = 0 \quad x = 0 \text{ и } T = T_x = T_0 \\ \text{при } \tau = \tau_k \quad x = 0 \text{ и } T_x = T_H \end{array} \right. \quad (8.8)$$

Окончательно получим систему разностных уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_{i+1} = x_i + k(1 - x_i)\Delta\tau \\ T_{i+1} = T_i + \Delta T_{\text{ад}}k(1 - x_i)\Delta t + B(T_{x,i} - T_i)\Delta\tau \\ T_{x,i+1} = T_{x,i} + B(T_{x,i} - T_i)\Delta\tau \\ \text{при } \tau = 0 \quad x = 0 \text{ и } T = T_x = T_0 \\ \text{при } \tau = \tau_k \quad x = 0 \text{ и } T_x = T_H \end{array} \right. \quad (8.9)$$

Граничные условия в системе (8.9) заданы на разных границах слоя. Для решения этой системы уравнений подбирают значение температуры T_0 при $\tau = 0$, т. е. используют граничное условие: при $\tau = 0$ и $T = T_x = T_0$; $x = 0$ так, чтобы в конце реактора, при $\tau = \tau_k$, выполнить условие $T_x = T_H$.

8.3 Решение системы уравнений с использованием EXCEL

Такой подбор можно осуществить в EXCEL, фрагмент рабочего листа которого показан на рис.12. В ячейки F15:F396 вводим формулу для вычисления степени превращения x (первое уравнение системы (8.9)). В ячейки G15:G396 вводим формулу для вычисления температуры в слое катализатора T (второе уравнение системы (8.9)). В ячейки H15:H396 вводим формулу для вычисления температуры в холодильнике T_x (третье уравнение системы (8.9)).

	D	E	F	G	H
14	<i>i</i>	τ	x	$T=T_x=T_0$	$T_x=T_0$
15	0	0	0	321,00	321,0
16	1	0,20	0,00012	321,01	321,0
17	2	0,40	0,00023	321,01	321,0
18	3	0,60	0,00035	321,02	321,0
19	4	0,80	0,00047	321,03	321,0
392	377	393,15	1,00000	373,21	301,0
393	378	394,86	1,00000	372,95	300,8
394	379	396,57	1,00000	372,70	300,5
395	380	398,29	1,00000	372,45	300,3
396	381	400,00	1,00000	372,19	300,0
397		τ_k	x	T	T_H

Рисунок 12 Фрагмент рабочего листа EXCEL

Выбираем команду «Подбор параметра». На экране появится диалоговое окно «Подбор параметра» (см. рис.13). В поле *Установить в ячейке* вводим абсолютную ссылку на ячейку \$H\$396. В этой ячейке вычисляется значение температуры реакционной смеси на входе в реактор $T_x = T_n$. В поле *Значение* записываем заданное значение температуры T_n , в данном случае 300. В поле *Изменяя значение в ячейке* вводим абсолютный адрес ячейки \$G\$15, где вычисляется значение температуры реакционной смеси на входе в слой катализатора T_0 .

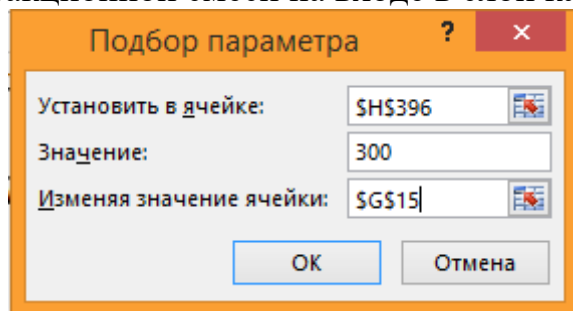


Рисунок 13 Окно подбора параметра

Нажимаем ОК.

На экране отображается окно Результат подбора параметра, в котором указывается, что решение найдено (см.рис.14).

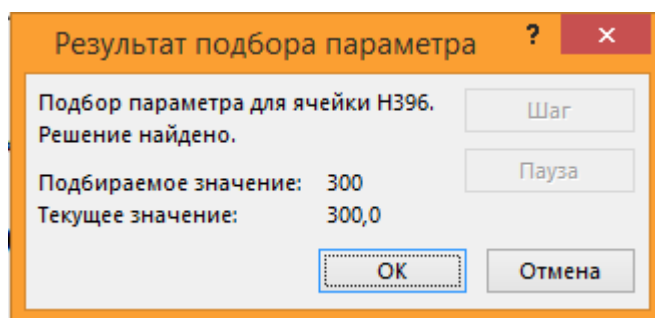


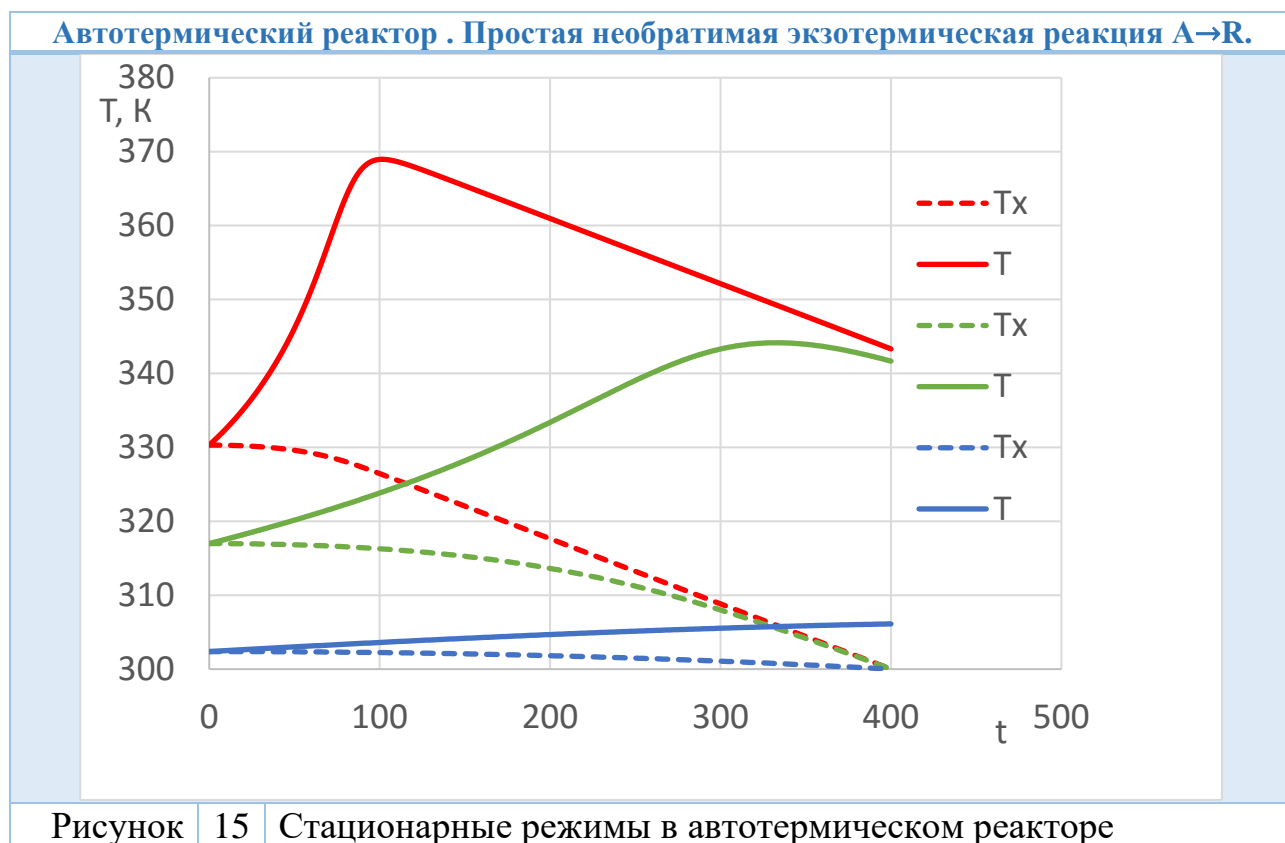
Рисунок 14 Окно результата подбора параметра

Профиль температур в реакционной зоне имеет типичный для реакторов с теплоотводом вид экстремальной зависимости. Температура хладагента - свежей реакционной смеси - будет возрастать по мере продвижения вдоль трубок. Температурные профили показаны справа на рис.10. Процесс в реакционной зоне протекает с теплоотводом, а в реакторе в целом адиабатически, поскольку посторонний теплоноситель отсутствует. Поэтому разность температур между входным и выходным потоками равна адиабатическому разогреву ΔT_{ad} . Такой режим и реактор называют *автотермическими*.

В этом реакторе можно проследить обратную связь по теплу между выходящим и входящим потоками через стенки трубок. Допустим, что по каким-либо причинам температура в слое увеличится, например, вследствие временного увеличения концентрации, т. е. тепловыделения. Исходная реакционная смесь будет подогреться сильнее. Это в свою очередь приведет к увеличению скорости реакции и дополнительному тепловыделению. Подогрев исходной смеси станет

еще больше. Скорость реакции опять возрастет, и так далее - возмущение будет нарастать со временем. Прежний стационарный режим может не восстановиться, когда будет убран источник возмущения режима увеличенная концентрация. Такое поведение процесса при возмущении режима встречалось в проточном реакторе идеального смешения: неустойчивый стационарный режим. Это же указывает на возможность существования множественности стационарных режимов в рассматриваемом реакторе.

Решая систему (8.9) описанным выше методом, можно получить три решения с различными значениями T_k при одинаковых начальных условиях T_n . Это показано на рис.15. Один стационарный режим будет низкотемпературный, с небольшим превращением; другой - с полным превращением и с очень большим перегревом внутри реактора. Перегрев может быть в несколько раз больше адиабатического разогрева. Третий режим - средний между ними.



8.4 Пример процесса в автотермическом реакторе где проходит простая химическая реакция $A \xrightarrow{k_1} R$.

Дано:

13. Предэкспоненциальный множитель для реакции $A_1 = 9,478 \cdot 10^{12} \text{ c}^{-1}$.
14. Энергия активации прямой реакции $E_1 = 99,6 \text{ кДж/моль}$.
15. Начальная концентрация вещества A $C_{A0} = 1 \text{ кмоль/м}^3$.
16. Начальная концентрация вещества B $C_{B0} = 0 \text{ кмоль/м}^3$.
17. Тепловой эффект реакции $Q_p = 3 \cdot 10^7 \text{ Дж/(кмоль)}$.
18. Массовая теплоёмкость $c_p = 2,2 \cdot 10^3 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{K)}$.
19. Коэффициент теплоотдачи $K_m = 50 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{K)}$.
20. Плотность $\rho = 850 \text{ кг/м}^3$.
21. Температура входного потока $T_n = 300 \text{ K}$.
22. Объём реактора $V_p = 2,5 \text{ м}^3$.

Определить: производительность реактора по сырью.

Для решения задачи воспользуемся табличным процессором EXCEL.

Шаг 1. Исходные данные внесём в ячейки таблицы как показано на рис. 16. В ячейке B16 рассчитываем величину адиабатического разогрева по формуле:

$$\Delta T_{ад1} = \frac{Q_p \cdot C_{A0}}{c_p \rho}$$

	A	B	C
4	A_1	9,47805E+12	1/с
5	E_1	99,6	кДж/моль
6	C_{A0}	1	кмоль/м ³
7	C_{B0}	0	кмоль/м ³
8	Q_p	3,00E+07	Дж/(кмоль)
9	c_p	2,20E+03	Дж/(кг · K)
10	ρ	850	кг/м ³
11	T_n	300	С
12	T_0	342,52	С
13	F	110,2166667	м ²
14	K	50	Вт/(м ² K)
15	B	0,00295	1/с
16	$\Delta T_{ад}$	16,04	С
17	V_p	2,50	м ³

Рис. 16 Исходные данные

В ячейке B13 рассчитываем поверхность теплообмена по формуле:

$$F = \pi D \frac{V_p}{\frac{\pi D^2}{4}} = \frac{4V_p}{D}$$

Эффективность реактора заданного объёма реактора будем оценивать производительностью по веществу А, которая вычисляется по формуле:

$$v = \frac{V_p \cdot C_A}{\tau}$$

где τ – время пребывания вещества в реакторе, с

Шаг 2. Готовим рабочий лист, показанный на рис. 12. В этом листе значения τ_i вычисляются по формуле $\tau_i = \tau_{i-1} + \Delta\tau$, где $\Delta\tau = \tau_{np}/381$. Значения времени пребывания вещества в реакторе τ_{np} вводится в ячейку В18 и интервал времени $\Delta\tau$ вычисляется в ячейки В19.

	А	В	С
18	τ_{np}	600,00 с	
19	$\Delta\tau$	1,575 с	

Рис. 17 Исходные данные

Шаг 3. Для того, чтобы автотермическая реакция протекала необходимо определённая температура и время пребывания вещества в реакторе. Вначале надо подобрать необходимое время пребывания. В ячейку В18 вводим примерное значение времени пребывания, например, 700 с. Методом описанном в п.8.3 подбираем в G15 такое значение T_0 при котором значение температуры T_n будет равным заданному 300 К. Следим за степенью превращения на выходе продукта

	D	E	F	G	H
393	378	694,5	0,03153476	300,5	300,0
394	379	696,3	0,03161695	300,5	300,0
395	380	698,2	0,03169912	300,5	300,0
396	381	700,0	0,03178128	300,5	300,0

Рис. 18 Расчётные данные

из реактора в ячейки F396 (см. рис.18), которая должна быть не менее 0,99. В нашем случае $x=0,0318$. В ячейку В18 вводим значение времени пребывания 800 с. Снова подбираем значение T_0 описанным выше методом. Получается $x=0,037$. Так продолжаем до скачка степени превращения: 900 с $\rightarrow x=0,043$; 1000 с $\rightarrow x=0,999$. Находим более точное значение времени, при котором произойдёт скачок: 950 с $\rightarrow x=0,046$; 975 с $\rightarrow x=0,048$; 985 с $\rightarrow x=0,996$ (см. рис.19).

	D	E	F	G	H
393	378	977,2	0,9958845	316,3	300,4
394	379	979,8	0,99588811	316,2	300,2
395	380	982,4	0,99589166	316,1	300,1
396	381	985,0	0,99589517	316,0	300,0

Рис. 19 Расчётные данные

Шаг 4. Для нашего случая последние вычисления позволяют определить условия при которых достигается максимальное значение удельной производительности и степени превращения реагента А. Они равны:

Объёмная скорость – $v = \frac{V_p}{\tau} = \frac{2,5}{985} \cdot 3600 = 9,14 \text{ м}^3/\text{ч}$;

Производительность по веществу А – $v_A = \frac{V_p \cdot C_A}{\tau} = \frac{2,5 \cdot 1}{985} \cdot 3600 = 9,14 \text{ кмоль}/\text{ч}$;

Температура входного потока $T_n=300$ К;

Время пребывания – 985 с;

Степень превращения вещества А - $x_A=0,996$;

Удельная производительность – $v_{уд} = \frac{v_A}{V_p} = \frac{9,14}{2,5} = 3,65$ кмоль/(м³ч);.

8.5 Задачи для самостоятельного решения

Варианты выбираются согласно номеру в списке группы 21 или 22.

Задача №10

В непрерывном реакторе идеального смешения проходит реакция



Дано:

1. Предэкспоненциальный множитель для прямой реакции $A_1=9,478 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$.
2. Энергия активации прямой реакции $E_1=99,6$ кДж/моль.
3. Начальная концентрация вещества А C_{A0} , кмоль/м³ (значения см. в табл.9).
4. Начальная концентрация вещества В $C_{B0}=0$ кмоль/м³.
5. Тепловой эффект реакции $Q_p, =3 \cdot 10^7$ Дж/(кмоль).
6. Массовая теплоёмкость $c_p, =2,2 \cdot 10^3$ Дж/(кг·К).
7. Коэффициент теплоотдачи $K_m, \text{ Вт}/(\text{м}^2\text{К})$ (значения см. в табл.9).
8. Плотность $\rho=850$ кг/м³.
9. Температура входного потока $T_n, \text{ К}$ (значения см. в табл.9).
10. Объём реактора $V_p=2,5$ м³.

Определить: производительность реактора по сырью.

Варианты заданий для задачи №10

Номер варианта	Группа					
	21	22	21	22	21	22
	$C_{A0}, \text{кмоль/м}^3$		$K, \text{Вт/(м}^2\text{К)}$		$T_n, \text{К}$	
1	0,6	2,8	53	43	294	305
2	2,6	2,1	49	44	301	303
3	0,8	2,1	43	53	301	291
4	2,1	2,8	56	48	290	291
5	2,5	1,8	60	44	303	291
6	0,7	1,3	51	55	322	303
7	2,7	1,5	41	52	296	314
8	2,3	1,0	59	48	297	295
9	2,3	2,8	47	41	323	294
10	2,4	2,7	45	58	292	317
11	2,8	1,5	42	45	300	316
12	2,4	1,4	46	41	323	308
13	0,6	1,2	40	41	304	326
14	0,9	2,5	46	49	327	306
15	1,5	2,8	53	59	292	330
16	2,1	2,2	57	53	301	302
17	1,9	0,8	50	43	325	326
18	2,1	0,7	52	48	306	315
19	2,1	1,6	49	51	292	329
20	2,4	0,8	59	42	307	322
21	1,2	0,8	51	42	297	326
22	1,5	0,9	51	60	296	305
23	1,3	3,0	47	54	316	306
24	0,9	1,6	60	43	316	319
25	0,9	2,3	56	48	299	312
26	1,8	2,6	56	42	320	293
27	1,9	2,0	59	52	303	328
28	0,6	2,7	56	57	329	318
29	0,5	2,4	54	51	317	306
30	2,4	1,9	57	60	309	298