

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 обратимой 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 B . 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_o , 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:

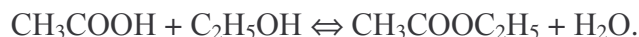
τ [с], $r(x,T)$ [с⁻¹], $\Delta T_{ад}$ [град], B [с⁻¹].

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.

РЕАКТОР

I. Процесс и реактор

1. Движения потока

- ☐ Идеальное вытеснение
- ☒ Идеальное смешение

2. Тепловой режим

- ☒ Изотермический
- ☐ Адиабатический
- ☐ Политропический

3. Расчет

- ☐ X(tau)
- ☒ tau(X)

4. Реакция

- ☐ Простая необратимая
- ☒ Простая обратимая
- ☐ Сложная

Схема реактора

Математическая модель

$$\frac{X - X_H}{\tau} = r(X)$$

Кинетическое уравнение

$$A + \nu_B B = \nu_R R + \nu_S S$$

$$r = K \frac{(1-x)^{n_1} (1-a \cdot x)^{n_2}}{(1+b \cdot x)^{n_3}} \left[1 - \frac{\varphi(C)}{K_p} \right]$$

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

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

x - степень превращения A

II. Параметры процесса

5. Условия процесса

T [K]: 373 E, Qp [кДж/моль]

XH 0 XK 0.35

7. Параметры кинетической модели

T* 373

K 0.000439 E 0 a 1.4 n1 1

b 0 n2 1 n3 0

Для обратной реакции

Kp 2.93 Стех. коэфф. V Нач. конц. Co [доли]

Qp 0 B 1 A 0.263

R 1 B 0.186

S 1

РАСЧЕТ

Выход

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:

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

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

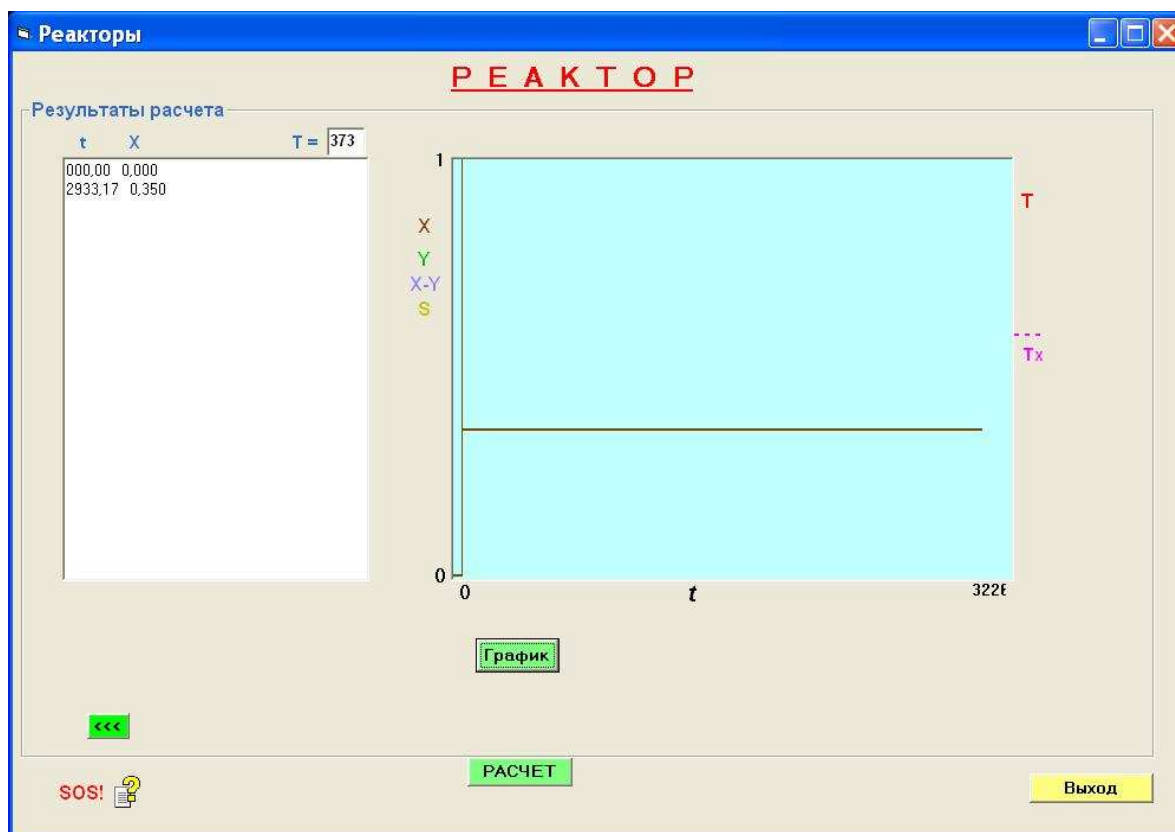
$$C_{A0} = 0,263, \quad C_{B0} = 0,186$$

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»).

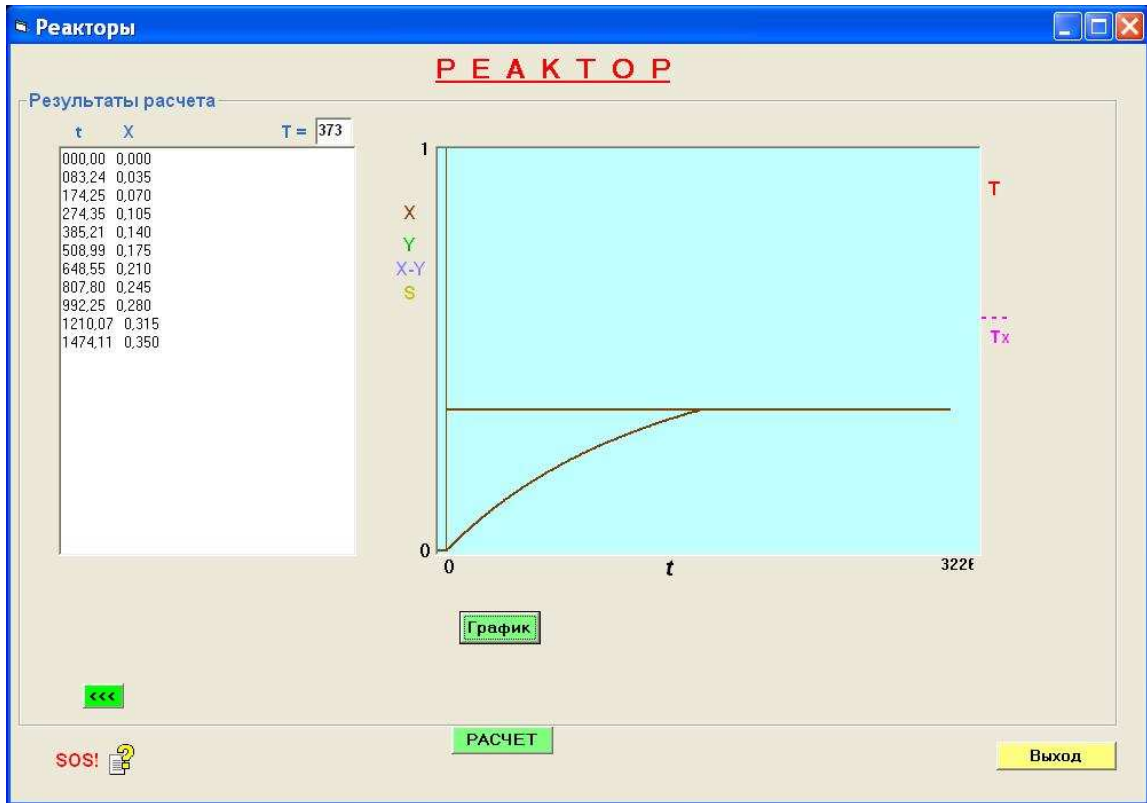
3. Расчет реактора идеального вытеснения

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 [$\text{м}^3/\text{с}$], 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, 10^3 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.