

ВЛИЯНИЕ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО РЕЖИМА РЕАКТОРА НА ВЕЛИЧИНУ РЕЦИРКУЛИРУЮЩЕГО ПОТОКА

С.Л. Назанский*, доцент, А.В. Солохин, профессор, А.В. Кийко, аспирант

кафедра Химии и технологии основного органического синтеза

МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва 119571 Россия

*Автор для переписки, e-mail: nazanski@yandex.ru

В работе на примере реакции $A \rightleftharpoons B$ рассмотрено влияние гидродинамического режима в реакторе на величину потока рецикла, необходимую для достижения заданной конверсии. Рассмотрены режимы идеального смешения и идеального вытеснения.

Ключевые слова: рециркуляционные системы, математическое моделирование.

Известно, что для интенсификации реакционных процессов (увеличения конверсии и селективности) может быть использована рециркуляция реагентов, не успевших прореагировать за один проход через реактор [1, 2]. Очевидно, что величина конверсии, достигаемая в рециркуляционной системе, напрямую связана с производительностью реактора, представляющую собой произведение скорости химической реакции на его объем. Следовательно, производительность (при фиксированных значениях объема реактора и температуры в нем) будет зависеть только от состава реакционной массы, который, в свою очередь, определяется временем пребывания смеси в зоне реакции и гидродинамической структурой потока в реакторе. В связи с этим целью данной работы является исследование влияния гидродинамического режима в реакторе (идеальное смешение или идеальное вытеснение) на величину рецикла, необходимую для достижения в системе заданной конверсии.

Рассмотрим возможные стационарные состояния рециркуляционной системы (рис. 1) для случая протекания в изотермическом реакторе реакции типа $A \rightleftharpoons B$.

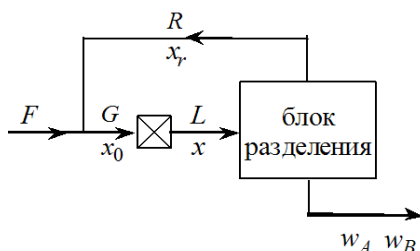


Рис. 1. Рециркуляционная система.

В соответствии с обозначениями на рис. 1, уравнение материального баланса по реагенту А для системы в целом имеет вид:

$$F - w_A - P = 0, \quad (1)$$

где F , w_A – мольный поток реагента А на входе и выходе из системы соответственно, кмоль/ч; P – производительность реактора по расходованию реагента А, кмоль/ч.

При этом конверсия реагента А в системе будет равна

$$\gamma = \frac{F - w_A}{F}, \quad (2)$$

откуда с учетом (1) получим:

$$\gamma = \frac{P}{F}. \quad (3)$$

Из (3) следует, что при заданной конверсии и заданном потоке питания производительность должна иметь определенное значение.

Получим выражения, позволяющие определять величину рецикла, необходимую для достижения заданной конверсии в рециркуляционной системе при использовании реакторов идеального смешения и идеального вытеснения при следующих условиях: заданы значения потока питания системы, конверсии, констант скорости реакции, объема реактора; скорость реакции подчиняется закону действующих масс.

Реактор идеального смешения

Материальный баланс реактора по реагенту А имеет вид:

$$F + Rx_r - Lx - \gamma F = 0, \quad (4)$$

где R , L – поток рецикла и поток на выходе из реактора соответственно, кмоль/ч; x , x_r – концентрация реагента А в реакторе и рецикле соответственно, мол. доля.

В соответствии с определением понятия производительности и с учетом (3) для данного случая величина производительности реактора определяется как:

$$P = W_A V = V k^+ x - V k^- (1 - x) = \gamma F, \quad (5)$$

где V – объем реактора, м³; W_A – скорость реакции по реагенту А, кмоль/(м³ ч); k^+ , k^- – константы скорости прямой и обратной реакций соответственно, кмоль/(м³ ч).

Тогда из (5) можно выразить концентрацию реагента на выходе из реактора:

$$x = \frac{\gamma F + V k^-}{V(k^+ + k^-)}, \quad (6)$$

подстановка которой в уравнение баланса (4) дает:

$$F + R x_r - L \frac{(\gamma F + V k^-)}{V(k^+ + k^-)} - \gamma F = 0. \quad (7)$$

Из стехиометрии реакции следует, что:

$$L = G, \quad (8)$$

где G – поток на входе в реактор равен:

$$G = F + R. \quad (9)$$

Тогда после подстановки (8) и (9) в (7) и соответствующих преобразований получим:

$$R = \frac{\gamma F^2 + \gamma F V k^- - F V k^+ (1 - \gamma)}{V(k^+ + k^-) x_r - \gamma F - V k^-}. \quad (10)$$

Выражение (10) позволяет вычислить величину рецикла состава x_r , необходимую для достижения заданной конверсии в рециркуляционной системе при использовании реактора идеального смешения [3].

Реактор идеального вытеснения

В данном случае состав, а, следовательно, и скорость реакции изменяются по длине реактора, поэтому производительность реактора будет равна:

$$P = S \int_0^{L_R} W(l) dl, \quad (11)$$

где S – площадь поперечного сечения реактора, м^2 ; W – скорость реакции, $\text{кмоль}/(\text{м}^3 \text{ч})$; l – текущая длина реактора, м ; L_R – общая длина реактора, м .

Для вычисления интеграла (11) необходимо получить выражение для зависимости скорости реакции от длины реактора, которая может быть найдена из материального баланса по реагенту А для элемента длины реактора (с учетом постоянства мольного потока G по длине реактора):

$$-G dx - W S dl = 0, \quad (12)$$

где скорость реакции в соответствии с законом действующих масс имеет вид:

$$W = (k^+ + k^-) x - k^-. \quad (13)$$

Из (13) может быть получено выражение для концентрации реагента в реакторе:

$$x = \frac{W + k^-}{k^+ + k^-}, \quad (14)$$

дифференцирование левой и правой частей которого дает:

$$dx = \frac{1}{k^+ + k^-} dW. \quad (15)$$

Подставляя (15) в (12), получим уравнение вида:

$$-\frac{G}{k^+ + k^-} dW - W S dl = 0, \quad (16)$$

разделение переменных в котором приводит к следующему результату:

$$\frac{dW}{W} = -\frac{(k^+ + k^-) S}{G} dl. \quad (17)$$

Интегрируя обе части (17), получим:

$$\int_{W_0}^{W_m} \frac{dW}{W} = -\frac{(k^+ + k^-) S}{G} \int_0^{l_m} dl, \quad (18)$$

где W_0 , W_m – скорость реакции в начальном и текущем сечении реактора; l_m – текущее значение длины реактора.

Тогда из (18) может быть получено выражение для скорости:

$$W_m = W_0 \exp\left(-\frac{(k^+ + k^-) S l_m}{G}\right), \quad (19)$$

в котором:

$$W_0 = (k^+ + k^-) x_0 - k^-. \quad (20)$$

При этом концентрация реагента А на входе в реактор в соответствии с материальным балансом смешения рецикла с питанием имеет вид:

$$x_0 = \frac{F + R x_r}{G} = \frac{F + R x_r}{F + R}. \quad (21)$$

Подставляя (19) в (11), получим:

$$P = S W_0 \int_0^{L_R} \exp\left(-\frac{(k^+ + k^-) S l_m}{G}\right) dl_m. \quad (22)$$

Тогда, вычисляя интеграл в (22) и учитывая (3), получим выражение для производительности:

$$P = \frac{W_0 G}{k^+ + k^-} \left[1 - \exp\left(-\frac{(k^+ + k^-) S L_R}{G}\right) \right] = \gamma F. \quad (23)$$

Произведение $S L_R$ в (23) является объемом реактора V . Подставляя (20) в (23), с учетом (21) получим:

$$\left[F + R x_r - \frac{k^- (F + R)}{k^+ + k^-} \right] \times \left[1 - \exp\left(-\frac{(k^+ + k^-) V}{(F + R)}\right) \right] - \gamma F = 0. \quad (24)$$

Из (24) видно, что данное уравнение является трансцендентным относительно величины рецикла, поэтому решать его следует численно.

На рис. 2 представлены результаты расчета по выражениям (10) и (24) величины рецикла, необходимого для достижения заданной конверсии в системе при различных значениях объема реактора.

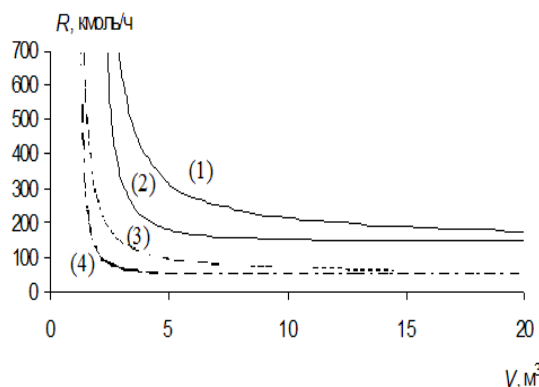


Рис. 2. Зависимость величины рецикла от объема для реакторов идеального вытеснения и идеального смешения.

(1) – реактор ИС, конверсия 100%; (2) – реактор ИВ, конверсия 100%; (3) – реактор ИС, конверсия 60%; (4) – реактор ИВ, конверсия 60%.

Расчет проводился при следующих условиях: поток питания реагента $F=100$ кмоль/ч; константы скорости $k^+=50$, $k^-=75$ кмоль/(м³ ч); состав рецикла (мол. доля А) $X_r=1$.

Из рис. 2 видно, что при закрепленном значении объема реактора величина рецикла, необходимая для достижения заданной конверсии в системе с реактором идеального вытеснения (ИВ) меньше, чем в системе с реактором идеального смешения (ИС). Кроме того из полученных результатов следует, что при снижении заданной величины конверсии разность между потоками рециклов для систем с реактором ИС и ИВ уменьшается.

Поскольку величина рецикла в рециркуляционной системе напрямую связана с энергетическими затратами [4], то полученный результат позволяет сделать вывод, что для достижения заданной конверсии в случае использования в системе реактора идеального вытеснения потребуются меньшие затраты энергии, чем при использовании реактора идеального смешения. Данный вывод является предварительным и не исключает необходимость в оптимизации рециркуляционной системы по экономическим показателям, например, критерию приведенных затрат.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Нагиев М.Ф. Теоретические основы рециркуляционных процессов в химии. М.: АН СССР, 1962. 325 с.
2. Солохин А.В., Назанский С.Л., Истомина О.Ю. Использование рециркуляции для интенсификации реакционных процессов при наличии конкурирующих химических реакций // Хим. технология. 2012. № 4. С. 241–246.
3. Назанский С.Л., Солохин А.В., Кийко А.В. Поверочный и проектный варианты расчета рециркуляционной системы // Вестник МИТХТ. 2013. Т. 8. № 3. С. 70–75.
4. Назанский С.Л., Солохин А.В., Истомина О.Ю. Влияние организации потока рецикла на величину энергетических затрат // Вестник МИТХТ. 2011. Т. 6. № 6. С. 49–53.

INFLUENCE OF THE REACTOR HYDRODYNAMIC CONDITION ON VALUE OF RECYCLE FLOW RATE

S.L. Nazanskiy[@], A.V. Solokhin, A.V. Kiyko

M.V. Lomonosov Moscow State University of Fine Chemical Technologies, Moscow, 119571 Russia

[@]Corresponding author e-mail: nazanski@yandex.ru

On example of $A \rightleftharpoons B$ reaction the influence of hydrodynamic condition in the reactor on recycle flow rate need for determined conversion value is investigated. The continuous stirred tank and plug flow reactors considered.

Keywords: recycled systems, mathematical simulation.