

# Ячеечная модель.

Модель потока с продольным перемешиванием можно представить также в виде ряда проточных реакторов полного (идеального) смешения, соединенных последовательно. Эта модель исходит из того, что реактор с неидеальным потоком может включать  $m$  – указанных аппаратов, имеющих одинаковые объемы.  $C$  – кривая для такого каскада аналогична реакции на возмущение реактора, в котором поток представлен диффузионной моделью.

# Ячеечная модель.

Число реакторов  $m$  аппроксимирующего каскада можно определить, найдя по критериальным уравнениям или на «холодно» модели.

$$m = \frac{1}{\sigma^2} \quad \frac{1}{m} = \frac{2}{Pe_L} - \frac{2}{Pe_L^2} (1 - e^{-Pe_L})$$

$\sigma$  - дисперсия распределения времен пребывания.

При  $m \geq 10$  для практических расчетов можно пользоваться упрощенным выражением:

$$\frac{1}{m} = \frac{2}{Pe_L}$$

# Ячеечная модель.

$Re_L$  критерий Пекле в зависимости от углов на границе аппарата.

Полученное таким образом значение  $m$  округляется до ближайшего целого числа, которое и принимается для дальнейших расчетов. Округление до меньшего числа дает некоторый запас при проектировании, т.к. предусматривает более интенсивное перемешивание потока.

# Ячеечная модель.

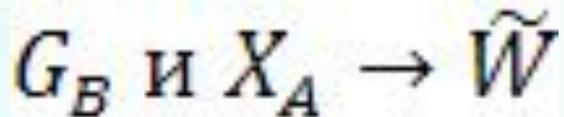
Составляется система линейных уравнений, число которых соответствует округленному значению  $m$ :

$$\frac{V}{\tilde{W}} = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{|r_{A1}|}$$

$$\frac{V}{\tilde{W}} = \frac{C_{A1} - C_{A2}}{|r_{A2}|}$$

# Ячеечная модель.

$$\frac{V}{W} = \frac{C_{Am-1} - C_{Am}}{|m|}$$



$$(WC_{A0} - WC_A) = V|r_A|$$

Неизвестными в этой системе могут быть  $V$  и  $m-1$  концентрации реагента  $A$ , или, если объем единичного реактора каскада известен  $V = \frac{V_{An}}{m}$ , то  $m$  концентрацией реагента  $A$ .

# Ячеечная модель.

Для заданной производительности по целевому продукту и степени превращения ключевого реагента А методика сводится к следующему:

1. Исходя из  $W$  определяют  $W$ . Если реакция сложная, то для этого предварительно рассчитывают интегральную селективность по веществу В, достигаемую в каскаде из  $m$  реакторов полного смешения  $\Phi_{В\text{ кпс}}$

# Ячеечная модель.

2. Затем решают систему записанных выше уравнений и находят объем

3. Очевидно, суммарный объем проектируемого аппарата равен:

$$V_{an} = mV$$

# Ячеечная модель.

Знание  $V_{an}$  позволяет найти основные геометрические размеры трубчатого реактора, который аппроксимировался ячейечной моделью. Выбирают площадь сечения трубки  $S$  и их число  $n$  таким образом, чтобы в аппарате поддерживался тот же гидродинамический режим, что и при определении  $Re_L$ , и следовательно и  $m$ . Теперь длина реактора равна:

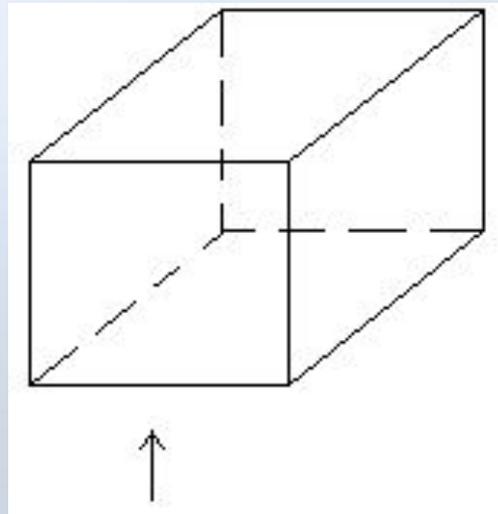
$$L = \frac{V_{an}}{nS}$$

# Ячеечная модель.

Использование ячейечной модели часто более удобно, чем диффузионной для описания работы изотермических трубчатых реакторов с продольным перемешиванием. Это связано с тем, что вместо дифференциального уравнения второго порядка решается система  $m$  алгебраических уравнений. Ячеечная модель описывает потоки в колонных аппаратах, тарельчатых, насадочных, барботажных.

# Ламинарный поток осложненный диффузией.

Очевидно, что в характеристическом уравнении теперь будут слагаемые, содержащие частные производные. Выделим элементарный объем  $dV$ , как это указано на рис 12, и выбираем направление потока, совпадающее со стрелкой.



# Ламинарный поток

осложненный диффузией.

Количество вещества  $A$ , проходящее через нижнюю элементарную поверхность

$$dx \cdot dy$$

с конвективным потоком, равно

$$\omega C_A \cdot dx \cdot dy$$

а через верхнюю:

$$\omega \left( C_A + \frac{\delta C_A}{\delta z} dz \right) dx dy$$

где считаем  $\omega = const$

не меняющейся по координате  $Z$

# Ламинарный поток осложненный диффузией.

С диффузионным потоком через нижнюю поверхность проходит вещества А:

$$-D_A \frac{\delta C_A}{\delta z} dx dy$$

а через верхнюю:

$$-D_A \frac{\delta}{\delta z} \left( C_A + \frac{\delta C_A}{\delta z} dz \right) dx dy$$

где  $D_A$  – коэффициент молекулярной диффузии вещества А в реакционной смеси.

# Ламинарный поток осложненный диффузией.

Если конвективный поток не переносит вещество  $A$  через плоскости  $dx dz$ , и  $dy dz$ , то диффузионный переносит.

Для стационарного процесса разбаланс вещества  $A$ , для приходящих в элемент объема и уходящих из него всех потоков, равен количеству израсходованного.

# Ламинарный поток осложненный диффузией.

Если в реакторе идеального вытеснения существует только один конвективный поток, то теперь добавляется ещё и осевое диффузионный поток. Очевидно, в этом случае характеристическое уравнение будет отличаться от полученного для реактора идеального вытеснения на некоторое слагаемое, учитывающее вклад продольного перемешивания:

$D_L$  - эффективный коэффициент продольного переноса.

$$F_A - (F_A + dF_A) - \tilde{D}_L \cdot S \frac{dC_A}{dl} - \left[ -D_L S \frac{d}{dl} \left( C_A + \frac{dC_A}{dl} dl \right) \right] = |r_A| S dl$$

# Ламинарный поток осложненный диффузией.

Проведем некоторые преобразования этого уравнения, облегчающее его дальнейшее решение:

$$F_A = W C_A = \omega \cdot S \cdot C_A$$

$$-\frac{dF_A}{Sdl} + S \cdot \frac{d^2 C_A}{dl^2} - |r_A| = 0$$

$$-\frac{Sd(\omega C_A)}{Sdl} + \tilde{D}_L \cdot \frac{d^2 C_A}{dl^2} - |r_A| = 0$$

# Ламинарный поток

## осложненный диффузией.

Окончательно имеем:

$$\tilde{D}_L \cdot \frac{d^2 C_A}{dl^2} - \frac{d(\omega C_A)}{dl} - |r_A| = 0$$

В  $\omega$  случае жидкофазных реакций линейная скорость потока практически не меняется по длине реактора и поэтому может быть вынесена из-под знака дифференциала. Для газофазных реакций, протекающих с изменением объема в технологических расчетах часто используют среднее значение  $\omega$ , легко определяемого для известной конечной степени превращения ключевого реагента А. Тогда:

$$\tilde{D}_L \cdot \frac{d^2 C_A}{dl^2} - \tilde{\omega} \frac{dC_A}{dl} - |r_A| = 0$$

# Ламинарный поток

## осложненный диффузией.

Решение уравнения возможно, если известны начальные условия. При  $l=1$ , учитывая непрерывность переноса  $A$ , получим:

$$\tilde{\omega} C_{A0} = \tilde{\omega} C_{A0} - D_L$$

Для конечной величины  $D_L$  это условие влечет за собой прерывистое уменьшение начальной концентрации  $A$  при  $l=1$ . Другим условием является

$$\frac{dC_A}{dl} = 0 \text{ при } l=1$$

Введем следующие обозначения:

$$z = \frac{l}{L}; \quad \tilde{\tau} = \frac{L}{\bar{\omega}}; \quad Pe_L = \frac{\bar{\omega} L}{\tilde{D}_L}$$

# Ламинарный поток осложненный диффузией.

Теперь можно записать:

$$\frac{d^2 C_A}{dz^2} - Pe_L \frac{dC_A}{dz} - Pe_L \tilde{t} |r_A| = 0$$

# Тепловые балансы проточных реакторов для гомофазных процессов.

Расчет проточных реакторов с учетом в них профиля температур осуществляется практически согласно той же методике, что и для периодических. Т.к. рассматриваются стационарные процессы, то все изменения, если они имеются будут происходить только в пространстве.

# РИС – тепловой баланс.

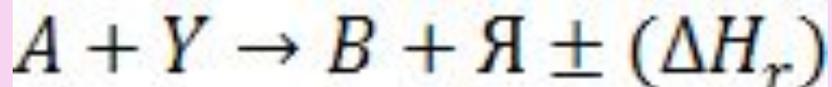
Одним из условий РИС является

$$\frac{dT}{dv} = 0$$

,т.е. отсутствие градиента температуры в объеме реактора. Мы фактически имеем дело с изотермическими условиями и задача теплового баланса сводится к нахождению требуемой поверхности теплообмена для их поддержания в реакторе.

# РИС – тепловой баланс.

Пусть имеется реакция .



Выразим уравнение теплового баланса проточного реактора ИС без учета потерь тепла в окружающую среду, используя молярные теплоемкости:

$$\pm(\Delta H_r)_{T_0} F_{A0} X_A \pm K_q (T - T_T) S_q = [(F_{A0} - F_{A0} X_A) C_{PA} + (F_{Y0} - F_{A0} X_A) C_{PY} + (F_{B0} - F_{A0} X_A) C_{PB} + (F_{Z0} - F_{A0} X_A) C_{PZ} + F_{ин} \cdot C_{рин}] (T - T_0)$$

$$(\Delta H_r)_{T_0} X_A \pm \frac{K_q}{F_{A0}} (T - T_T) S_q = [(1 - X_A) C_{PA} + (\alpha - X_A) C_{PY} + (\beta - X_A) C_{PB} + (\gamma - X_A) C_{PZ} + \theta \cdot C_{рин}] (T - T_0)$$

Здесь неизвестно только  $S_q$

# РИС – тепловой баланс.

Для сложных реакций уравнение теплового баланса, как и в случае периодического реактора в общем случае лучше выражать не через мольные потоки и степень превращения определяющего реагента  $X_A$ , а через скорости реакций и концентрации веществ:

$$\sum_{i=1}^n \pm (\Delta H_r)_{T_0} |r_i^*| V \pm K_q (T - T_0) S_q = \left( \sum_{j=1}^m F_j C_{pj} + F_{\text{ин}} C_{\text{рин}} \right) (T - T_0)$$
$$= \left( \sum_{j=1}^m WC_j C_{pj} + WC_{\text{ин}} C_{\text{рин}} \right) (T - T_0)$$

$n$  – число линейно не зависимых реакций

$m$  – число веществ в реакционной смеси, за исключением инертов.

# РИС – тепловой баланс.

Для жидкофазных реакций, протекающих без изменения объема и осуществляемых в проточных РИС, характеристическое уравнение  $i$ -го ключевого вещества можно записать в виде

$$C_i = C_{i0} \pm \tilde{\tau} |r_i|$$

где знак  $+$  берется для образующегося, а  $-$  для расходующегося. Концентрации остальных ключевых веществ (включительно до  $m$ ) рассчитываются исходя из соответствующих стехиометрических соотношений.

# РИС – тепловой баланс.

Среднее время пребывания может быть определено из характеристического уравнения для определяющего реагента А при известном  $X_A$

$$\bar{\tau} = \frac{C_{A0} - C_A}{|r_A|} = \frac{C_{A0} - X_A}{|r_A|}$$

Переходя от  $k$  к  $W$  с учетом того, что определяют .

Переходя от  $k$  к  $W$  с учетом того,

что определяют

$$\Phi_B = \varphi_B = f(X_A)$$

$$V = W \cdot \bar{\tau}$$

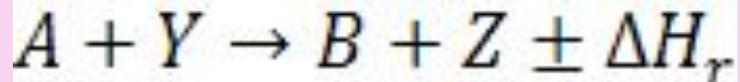
# РИС – тепловой баланс.

Теперь расчет необходимой поверхности сводится к совместному решению уравнения теплового баланса и системы из  $n$  алгебраических характеристических уравнений.

Если температура теплоносителя (хладоагент) изменяется от входа до выхода теплообменника (рубашки, змеевика), то в расчетах используются её среднее значение, как это осуществлялось для периодического реактора.

# Тепловые балансы РИВ.

Рассмотрим на примере простой реакции



В отличие от проточного реактора ИС (РИС) теперь уравнение теплового баланса будет выражено в дифференциальном виде:

$$\pm(\Delta H_r)_{T_0} F_{A0} dX_A \pm K_q (T - T_T) dS_q = [(F_{A0} - F_{A0} X_A) C_{PA} + (F_{Y0} - F_{A0} X_A) C_{PY} + (F_{B0} - F_{A0} X_A) C_{PB} + (F_{Z0} - F_{A0} X_A) C_{PZ} + F_{ин} \cdot C_{рин}] dT$$

Или после преобразований:

$$\pm(\Delta H_r)_{T_0} dX_A \pm K_q (T - T_T) \frac{dS_q}{F_{A0}} = [(1 - X_A) C_{PA} + (\alpha - X_A) C_{PY} + (\beta - X_A) C_{PB} + (\gamma - X_A) C_{PZ} + \theta \cdot C_{рин}] dT$$

# Тепловые балансы РИВ.

Заметим, что для цилиндрической трубки

$$dS_q = \pi d dl \text{ и } dV = \frac{\pi d^2}{4} dl$$

Поэтому

$$dS_q = \frac{\pi d^2}{4} \cdot \frac{4}{d} dl = \frac{4}{d} dV$$

где  $d$  – диаметр трубки.

Учитывая также, что

$$\frac{dV}{F_{A0}} = \frac{dX_A}{|r_A|}$$

запишем теперь уравнение теплового баланса

РИВ следующим образом:

$$\pm(\Delta H_r)_{T0} dX_A \pm K_q (T - T_T) \frac{4}{d} \frac{dX_A}{|r_A|} = [(1 - X_A)C_{PA} + (\alpha - X_A)C_{PY} + (\beta - X_A)C_{PB} + (\gamma - X_A)C_{PZ} + \theta \cdot C_{рин}] dT$$

# Тепловые балансы РИВ.

В таком виде для простой реакции удобно представить связь между  $X_A$ , характеризующей глубину протекания реакции и температурой реакционной смеси, изменяющейся по длине реактора.

Для определения длины реактора нужно решить его характеристическое уравнение:

$$\frac{\pi d^2}{4} dl = F_{A0} \frac{dX_A}{|r_A|}$$

# Тепловые балансы РИВ.

Где:  $|r_A| = f(X_A, T)$

и  $F_{A0}$  - мольная скорость питания ключевым реагентом А одной трубки реактора. Если таких трубок  $n$ , то общая мольная скорость питания реагентом А равна  $n \cdot F_{A0}$ . Эта величина определяется исходя из заданных  $G_B$  и  $X_A$ .

1) В случае адиабатического режима уравнение теплового баланса не будет содержать слагаемое

, которое отвл  $\pm K_q (T - T_T) \frac{4}{d} \frac{dX_A}{|r_A|}$  задачу.

# Тепловые балансы РИВ.

2) Если температура теплоносителя (хладоагента) изменяется по длине реактора, то для него так же составляется самостоятельное уравнение теплового баланса

$$\pm G C_p dT = \pm K_q (T - T_T) \frac{4}{d} F_{A0} \frac{dX_A}{|r_A|}$$

В этом уравнении возможна любая комбинация знаков, что определяется экзотермичностью (эндотермичностью) реакции и организацией потока теплоносителя (хладоагента) – прямоток или противоток.

# Тепловые балансы РИВ.

При прямотоке начальные условия для обоих дифференциальных уравнении теплового баланса заданы на одной и той же границе, а при противотоке – на разных. При противотоке имеем кривую задачу, которую можно решить, используя, например, метод проб и ошибок.

# Тепловые балансы РИВ.

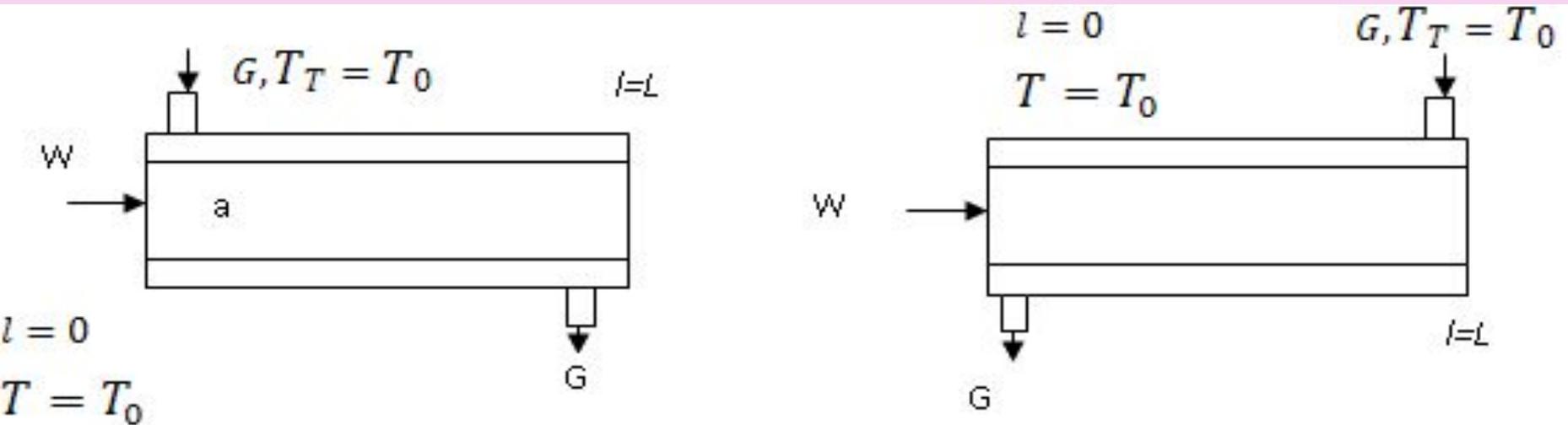


Схема потоков реакционной смеси и хладагента в РИВ а – прямоток, б – противоток.

Выбираем значение на выходе из теплообменника (на входе в реактор). Решаем совместно два уравнения теплового баланса (для реакционной смеси и для теплоносителя). Проверкой служит совпадение с заданной точностью значений рассчитанной и заданной температуры теплоносителя (хладагента) на входе в теплообменник при  $l=L$

# Тепловые балансы РИВ.

3) Чаще всего для составления теплового баланса политропического реактора идеального вытеснения для сложной реакции используют концентрации ключевых реагентов, как параметры, характеризующие глубину протекания реакции.