

Проектирование реакционного узла

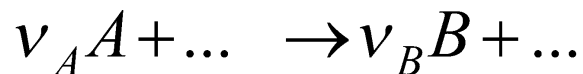
Требования, предъявляемые к реакционному узлу

- Высокая степень превращения компонентов исходного сырья:

$$x_A = \frac{n_A^{\square} - n_A}{n_A^{\square}}$$

n_A^{\square} n_A - количество компонента A до и после химического превращения.

- Высокая селективность реакционного процесса:



v'_A *побочные продукты*

$$\phi_B^A = \frac{v_A (n_B - n_B^o)}{v_B n_A^o x_A}$$

Селективность зависит от условий проведения процесса (температура, давление, соотношение реагентов), от степени превращения компонента сырья, от типа реактора (соответственно модели реактора), от режима движения жидкости в реакторе и т.п.

Реакционный узел должен обеспечивать высокую удельную производительность – количество целевого продукта, получаемого в единице объёма в единицу времени;

- минимальное энергопотребление;
- легкость автоматизированного управления.

Исходные данные для проектирования реакционного узла.

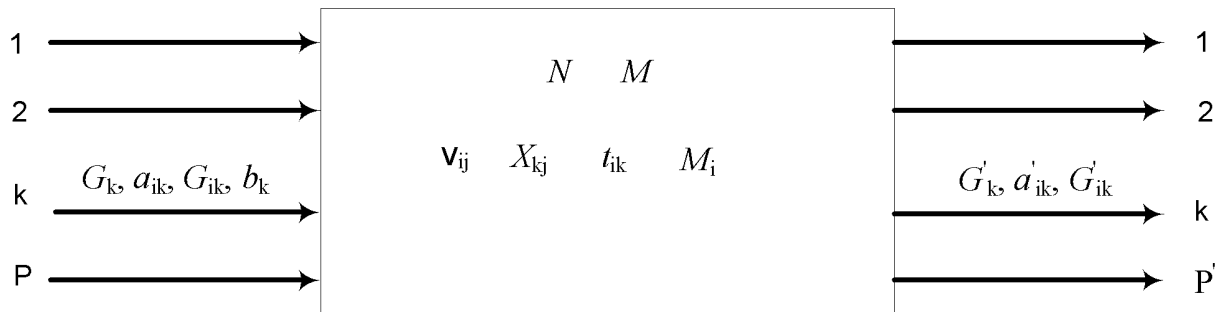
- - Расход и состав потоков исходного сырья;
- - Кинетическая модель химических реакций и параметры этой модели (или другие данные, необходимые для расчёта размеров реактора и состава на выходе);
- - Данные для расчёта термодинамических и транспортных свойств компонентов;
- - Для систем с двумя или тремя фазами необходимы данные по фазовым равновесиям и кинетике массопередачи;
- - Для гетерогенно-каталитических процессов – сведения о времени работы катализатора и методах регенерации;
- - Требования по степени превращения ключевых компонентов.

Цель технологического проектирования реакционного узла

- - Выбрать тип (конструкцию) реакционного аппарата и структуру реакционного узла.
- - Рассчитать материальный и энергетический балансы, а также тепловую нагрузку на каждый аппарат реакционного узла;
- - Рассчитать технологические размеры и число реакторов;
- - Рассчитать площадь поверхности теплообменных устройств аппаратов реакционного узла;
- - Рассчитать массообменные устройства;
- - Выбрать материалы для изготовления реакционной аппаратуры;
- - Выполнить гидравлический расчёт реакционного узла;
- - Разработать эскизы реакционной аппаратуры.
-

Расчёт материального баланса реакционного узла

Схема реакционного узла.



Обозначения:

N - число компонентов;

M - число независимых химических реакций;

P – число потоков на входе в реактор;

P' – число потоков на выходе из реактора;

b_k – массовое соотношение между потоками исходного сырья;

a_{ik} – массовая доля компонента i в потоке k исходного сырья;

a'_{ik} – массовая доля компонента i в потоке k на выходе из реактора;

G_k – массовый поток компонента k на входе в реактор;

G'_k – массовый поток компонента k на выходе в реактора;

g_i – масса компонента i на входе в реактор;

g'_i – масса компонента i на выходе из реактора;

x_{kj} – степень превращения ключевого компонента k в реакции;

M_i – молекулярная масса компонента i ;

v_{ij} – стехиометрический коэффициент при компоненте i в реакции j ;

t_{ik} – коэффициент разделения компонента i для потока k на выходе из реактора;

Q – производительность установки по целевому продукту, т/год ;

$Ч$ – число рабочих часов в году.

Исходные данные для расчёта материального баланса:

- - Число и состав потоков исходного сырья;
- - Массовое соотношение между потоками сырья;
- - Химические реакции, протекающие в реакторе;
- - Степень превращения ключевых компонентов в каждой из реакций;
- - Коэффициенты разделения компонентов между потоками на выходе из реактора;
- - Производительность установки по целевому продукту;
- - Число рабочих часов в году;
- - Данные о потерях целевого продукта на последующих стадиях.

Расчёт ведём на 1000 кг (1т) исходного сырья:

1. Рассчитываем массу каждого потока исходного сырья:

$$G_k = \frac{1000 \cdot b_k}{\sum_{k=1}^P b_k}, \quad k = 1, 2, \dots, P$$

2. Рассчитываем массу каждого компонента в каждом из потоков исходного сырья:

$$G_{ik} = G_k \cdot a_{ik}$$

3. Рассчитываем массу каждого компонента на входе в реактор:

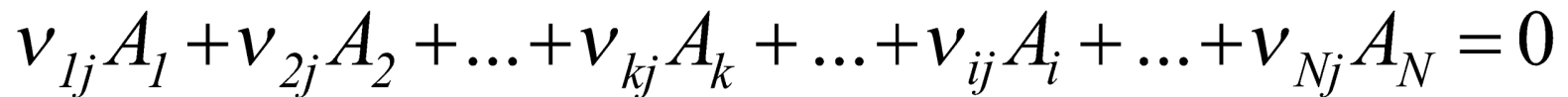
$$g_i = \sum_{k=1}^P G_{ik}, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

4. Рассчитываем массу каждого компонента на выходе из реактора:

$$g_i' = g_i + \sum_{j=1}^M m_{ij}, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

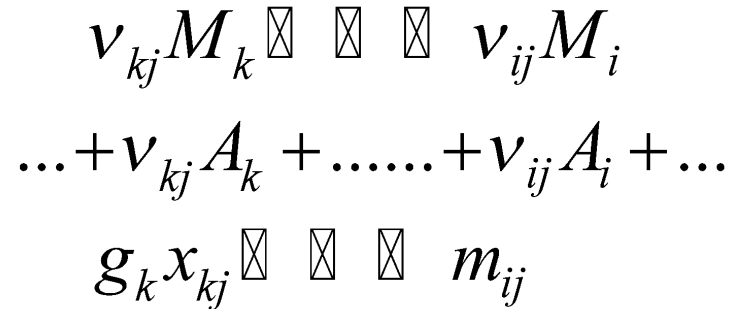
m_{ij} - масса компонента i , образующегося или расходуемого в реакции j ;
 g_i - масса компонента i на входе в реактор.

Запишем уравнение реакции под номером j в следующем виде:



Если компонент образуется, то его стехиометрический коэффициент >0 , если компонент расходуется, то его стехиометрический коэффициент <0 , а если компонент не участвует в реакции, то стехиометрический коэффициент равен 0.

Запишем фрагмент реакции под номером j :



Масса m_{ij} компонента i , образующегося (со знаком $+$) или расходуемого (со знаком $-$) в реакции j , будет равна:

$$m_{ij} = - \frac{g_k x_{kj} \nu_{ij} M_i}{\nu_{kj} M_k} \quad i = 1, 2, \dots, N; \quad j = 1, 2, \dots, M$$

где g_k — масса ключевого компонента k на входе в реактор.

5. Рассчитываем массу компонента i в потоке k на выходе из реактора и массу потока G'_{ik} :

$$G'_{ik} = g'_i t_{ik}, \quad k = 1, 2, \dots, P', \quad i = 1, 2, \dots, N$$

$$G'_k = \sum_{i=1}^N G'_{ik}$$

6. Рассчитываем массовую долю компонентов в потоках на выходе из реактора:

$$a'_{ik} = \frac{G'_{ik}}{G'_k}$$

7. Рассчитываем коэффициент пересчёта K_1 материального баланса из размерности кг/т исходного сырья в размерность кг/т товарного целевого продукта:

$$K_1 = \frac{G}{g'_k}$$

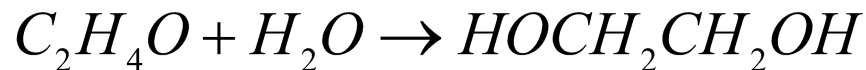
где G – масса целевого продукта на выходе из реактора, эквивалентная 1 тонне товарного целевого продукта, т.е. с учетом потерь на последующих стадиях и содержания целевого вещества в товарном продукте;
 g'_k – масса целевого продукта k на выходе из реакционного узла.

8. Рассчитываем коэффициент пересчёта K_2 материального баланса из размерности кг/т товарного продукта в размерность кг/ч:

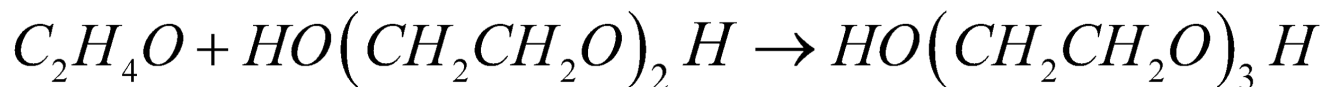
$$K_2 = \frac{Q}{\mathcal{U}}$$

Пример 1.

Рассчитать материальный баланс процесса гидратации оксида этилена в жидкой фазе. Целевым продуктом является этиленгликоль:



Гидратация сопровождается побочными реакциями образования ди- и три- этиленгликолей:



Состав исходного потока оксида этилена, % масс.: оксид этилена – 99,9; ацетальдегид – 0,05; прочие – 0,05. Молярное отношение вода:оксид этилена – 18:1.

Степень превращения оксида этилена в этиленгликоль – 85%, в диэтиленгликоль – 12%, в триэтиленгликоль – 2,5 %.

После реактора смесь дросселируют и подают в сепаратор, где она разделяется на 2 потока. Газовый поток содержит 90% ОЭ, 20% воды и 100% ацетальдегида и примесей, выходящих из реактора. Остальные компоненты находятся в жидкой фазе.

Потери этиленгликоля на стадии очистки составляют – 0,3%. Товарный продукт содержит 99% этиленгликоля. Производительность установки 30000 тонн в год. Число рабочих часов в году – 8400.

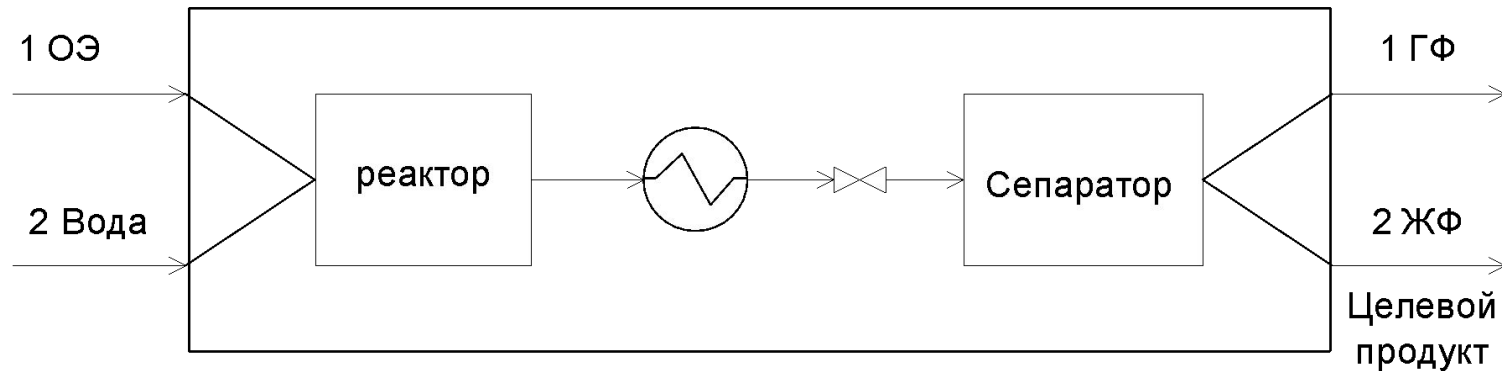


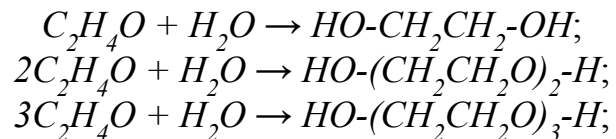
Схема реакционного узла

Расчёт проводим в следующей последовательности:

1. Пронумеруем все компоненты (всего $N=7$ компонентов):

$ОЭ$ – 1; H_2O – 2; $ЭГ$ -3; $ДЭГ$ -4; $ТЭГ$ -5; ацетальдегид-6; примеси -7.

2. Пронумеруем все реакции (всего $M=3$ реакций), преобразовав их таким образом, чтобы в левой части стояли только компоненты исходного сырья, а в правой – только продукты реакции:



3. Найдём массовое соотношение между потоками b_k : Мольное соотношение $m_{O_2} : m_{H_2O} = 1:18$. Массовое соотношение: $44/18 \cdot 18$ или $44/324$. В потоке O_2 содержится 99,9% масс. оксида этилена. Массовое соотношение между потоками сырья составит $44/0,999 \cdot 324$, т.е. $44,04 : 324$.

$$b_1 = 44,04; b_2 = 324.$$

4. Задаём молярные доли компонентов в потоках питания.

	1	2	3	4	5	6	7
a_{i1}	0,999	0	0	0	0	0,0005	0,0005
a_{i2}	0	1	0	0	0	0	0

5. Создадим матрицу стехиометрических коэффициентов.

	1	2	3	4	5	6	7
v_{i1}	-1	-1	1	0	0	0	0
v_{i2}	-2	-1	0	1	0	0	0
v_{i3}	-3	-1	0	0	1	0	0

6. Для каждой реакции выбираем ключевой компонент и задаёмся степенью превращения компонента.

	1	2
$J=1$	$k=1$	$x_1=0,85$
$J=2$	$k=1$	$x_2=0,12$
$J=3$	$k=1$	$x_3=0,02$
		5

7. Молекулярные массы компонентов: 1-44; 2-18; 3-62; 4-106; 5-150; молекулярные массы компонентов 6-7 не нужны, так как эти компоненты не участвуют в химических реакциях.

8. Задаём коэффициенты разделения для каждого потока.

	1	2	3	4	5	6	7
t_{i1}	0,9	0,2	0	0	0	1	1
t_{i2}	0,1	0,8	1	1	1	0	0

9. Находим массу этиленгликоля на выходе, эквивалентную 1 тонне товарного целевого продукта.

$$G - 0,003G = 990; \quad G=992,98.$$

Расчёт материального баланса (на 1000 кг исходного сырья) проводим в следующей последовательности (размерность кг/кг):

Рассчитываем массовые потоки оксида этилена и воды на входе в реактор:

Поток 1 ОЭ:

$$G_1 = (1000b_1)/(b_1+b_2) = (1000*44,04)/(44,04+324) = 119,7$$

Поток 2 (H₂O):

$$G_2 = (1000b_2)/(b_1+b_2) = (1000*324)/(44,04+324) = 880,3$$

Рассчитываем массовые расходы каждого компонента в каждом из потоков исходного сырья:

Поток 1 (k=1) ОЭ:

$$\text{ОЭ } G_{11} = G_1 a_{11} = 119,7 * 0,999 = 119,6$$

$$\text{АЦ } G_{61} = G_1 a_{61} = 119,7 * 0,0005 = 0,0598$$

$$\text{Прим. } G_{71} = G_1 a_{71} = 119,7 * 0,0005 = 0,0598$$

Поток 2 (k=2) H₂O:

$$G_{22} = G_2 a_{22} = 880,3 * 1 = 880,3$$

Всего компонентов на входе:

$$g_1 = G_{11} + G_{12} = 119,6 + 0 = 119,6$$

$$g_2 = G_{21} + G_{22} = 0 + 880,3 = 880,3.$$

$$g_6 = 0,0598$$

$$g_7 = 0,0598$$

Рассчитываем количество каждого компонента образовавшегося или израсходованного в каждой из реакций.

Расчёт для первой реакции, $j=1$:

Для реакции 1 ключевой компонент 1 (ОЭ).

$$\text{ОЭ } m_{11} = -(119,6*0,85*(-1)*44)/((-1)*44) = - 101,66 \text{ кг/кг}$$

$$\text{H}_2\text{O } m_{21} = -(119,6*0,85*(-1)*18)/((-1)*44) = - 41,588$$

$$\text{ЭГ } m_{31} = - (119,6*0,85*(1)*62)/((-1)*44) = 143,25$$

$$m_{41} = \dots = m_{71} = 0.$$

Расчёт для второй реакции, $j=2$:

Для реакции 2 ключевой компонент 1 (ОЭ).

$$\text{ОЭ } m_{12} = - (119,6*0,12*(-2)*44)/((-2)*44) = - 14,352 \text{ кг/кг}$$

$$\text{H}_2\text{O } m_{22} = - (119,6*0,12*(-1)*18)/((-2)*44) = - 2,935$$

$$\text{ЭГ } m_{32} = 0$$

$$\text{ДЭГ } m_{42} = - (119,6*0,12*(1)*106)/((-2)*44) = 17,288$$

$$m_{51} = \dots = m_{71} = 0.$$

Расчёт для третьей реакции, $j=3$:

Для реакции 3 ключевой компонент 1 (ОЭ).

$$\text{ОЭ } m_{13} = - (119,6 * 0,025 * (-3) * 44) / ((-3) * 44) = - 2,99 \text{ кг/кг}$$

$$\text{H}_2\text{O } m_{23} = - (119,6 * 0,025 * (-1) * 18) / ((-3) * 44) = - 0,408$$

$$\text{ЭГ } m_{33} = 0$$

$$\text{ДЭГ } m_{43} = 0$$

$$\text{ТЭГ } m_{52} = - (119,6 * 0,025 * (1) * 150) / ((-3) * 44) = 3,398$$

$$m_{61} = m_{71} = 0.$$

• Рассчитываем количество каждого компонента на выходе из реактора g_i^{\wedge} :

$$\text{ОЭ } g_1^{\wedge} = 119,6 - 101,66 - 14,352 - 2,99 = 0,598$$

$$\text{H}_2\text{O } g_2^{\wedge} = 880,3 - 41,588 - 2,935 - 0,4077 = 835,36$$

$$\text{ЭГ } g_3^{\wedge} = 0 + 143,25 = 143,25$$

$$\text{ДЭГ } g_4^{\wedge} = 0 + 17,288 = 17,288$$

$$\text{ТЭГ } g_5^{\wedge} = 0 + 3,398 = 3,398$$

$$g_6^{\wedge} = 0,0598$$

$$g_7^{\wedge} = 0,0598$$

5. Рассчитываем количество каждого компонента в каждом из потоков на выходе из реактора G_{ik}^{\wedge} :

5.1 Поток1 (газовая фаза) k=1

$$\text{O}_2 \quad G_{11}^{\wedge} = g_1^{\wedge} * t_{11} = 0,598 * 0,9 = 0,5382$$

$$\text{H}_2\text{O} \quad G_{21}^{\wedge} = g_2^{\wedge} * t_{21} = 835,36 * 0,2 = 167,07$$

$$G_{31}^{\wedge} = \dots G_{51}^{\wedge} = 0$$

$$G_{61}^{\wedge} = 0,0598$$

$$G_{71}^{\wedge} = 0,0598$$

5.2 Поток2 (жидкая фаза) k=2

$$\text{O}_2 \quad G_{12}^{\wedge} = g_1^{\wedge} * t_{12} = 0,598 * 0,1 = 0,0598$$

$$\text{H}_2\text{O} \quad G_{22}^{\wedge} = g_2^{\wedge} * t_{22} = 835,36 * 0,8 = 668,29$$

$$\text{ЭГ} \quad G_{32}^{\wedge} = g_3^{\wedge} * t_{32} = 143,25$$

$$\text{ДЭГ} \quad G_{42}^{\wedge} = 17,288$$

$$\text{ДЭГ} \quad G_{52}^{\wedge} = 3,398$$

$$G_{61}^{\wedge} = 0$$

$$G_{71}^{\wedge} = 0$$