

**МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА В
ХИМИЧЕСКОМ
РЕАКТОРЕ**

Математическая модель процесса в химическом реакторе

Математическая модель, в общем виде

$$\frac{dN}{dt} = \sum N_{\text{ВХ}} + \sum N_{\text{ИСТ}} \qquad \frac{dq}{dt} = \sum Q_{\text{ВХ}} + \sum Q_{\text{ИСТ}}$$

Здесь

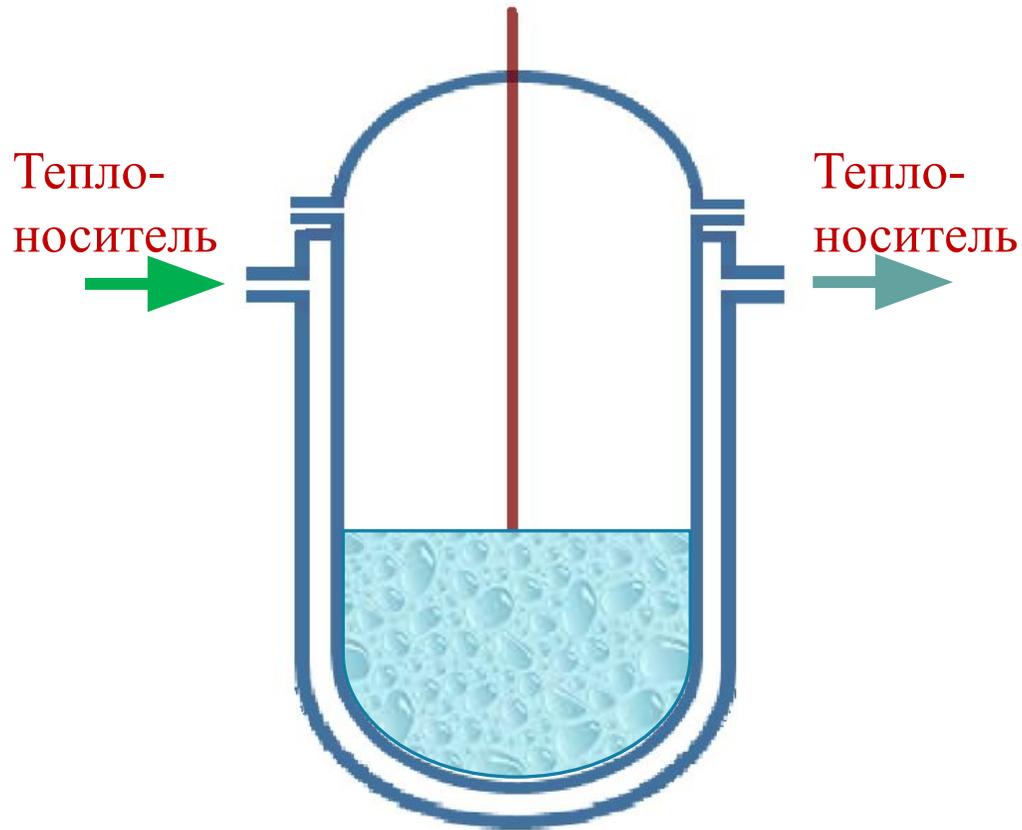
dN/dt и dq/dt - накопление вещества и теплоты в выделенном элементарном объеме.

$N_{\text{вх}}$ и $Q_{\text{вх}}$ - материальные и тепловые потоки материальные потоки, входящие в выделенный объем (покидающие объем потоки имеют отрицательное значение); входящие потоки могут быть как конвективными (течение реагентов), так и диффузионного характера (вследствие возникновения градиентов концентраций и температуры).

$N_{\text{ист}}$ и $Q_{\text{ист}}$ - источники вещества и тепла внутри выделенного объема. Источником вещества является химическая реакция.

- Уравнения составляются для всех участвующих в процессе веществ
- Для многофазных процессов уравнения составляют для каждой фазы и учитывают тепло- и массообмен между ними

Математическая модель процесса в периодическом реакторе идеального смешения (РИС)



- Все компоненты *одновременно* загружают в реактор.
- Реакция протекает при интенсивном *перемешивании* (концентрация и температура одинаковые в любой момент времени по всему объему).
- Поэтому элементарным будет весь объем V_r реакционной зоны (реактора).
- Возможен теплообмен с теплоносителем, имеющим температуру T_x .
- Поверхность теплообмена F_m и коэффициент теплообмена K_m .

Материальный баланс

- ❑ Процесс – нестационарный $dN/dt \neq 0$.
- ❑ В реакторе нет входящих и выходящих потоков $\sum N_{вх} = 0$.
- ❑ Источником i -го вещества является химическое превращение: $\sum N_{ист i} = W_i(C, T) \cdot V_p$.

❑ Уравнение

$$\frac{dN}{dt} = \sum N_{ВХ} + \sum N_{ИСТ}$$

будет выглядеть следующим образом (для i -го вещества):

$$\frac{dN_i}{dt} = W_i(C, T) \cdot V_p$$

Количество вещества в реакторе $N_i = V_p \cdot C_i$:

$$\frac{dC_i}{dt} = W_i(C, T)$$

Источники тепла –

- изменение энтальпии в химическом превращении $\Sigma Q_{уст}$ = $\Sigma Q_{pi} \cdot r_i(C, T) \cdot V_p$ [для единственной реакции $\Sigma Q_{уст} = Q_p \cdot r(C, T) \cdot V_p$]
- теплообмен с теплоносителем $K_T F_T (T_x - T)$.

- Уравнение

$$\frac{dq}{dt} = \sum Q_{вх} + \sum Q_{ист}$$

примет вид

$$\frac{dq}{dt} = \sum_{j=1}^m [Q_{pj} \cdot r_j(C, T)] \cdot V_p + K_T F_T (T_x - T)$$

- Изменение количества теплоты в реакторе dq связано с изменением температуры в нем:
- $dq = c_p V_p dT$ (принимаем теплоемкость c_p неизменной)
- Удельная поверхность теплообмена $F_{уд} = F_T / V_p$

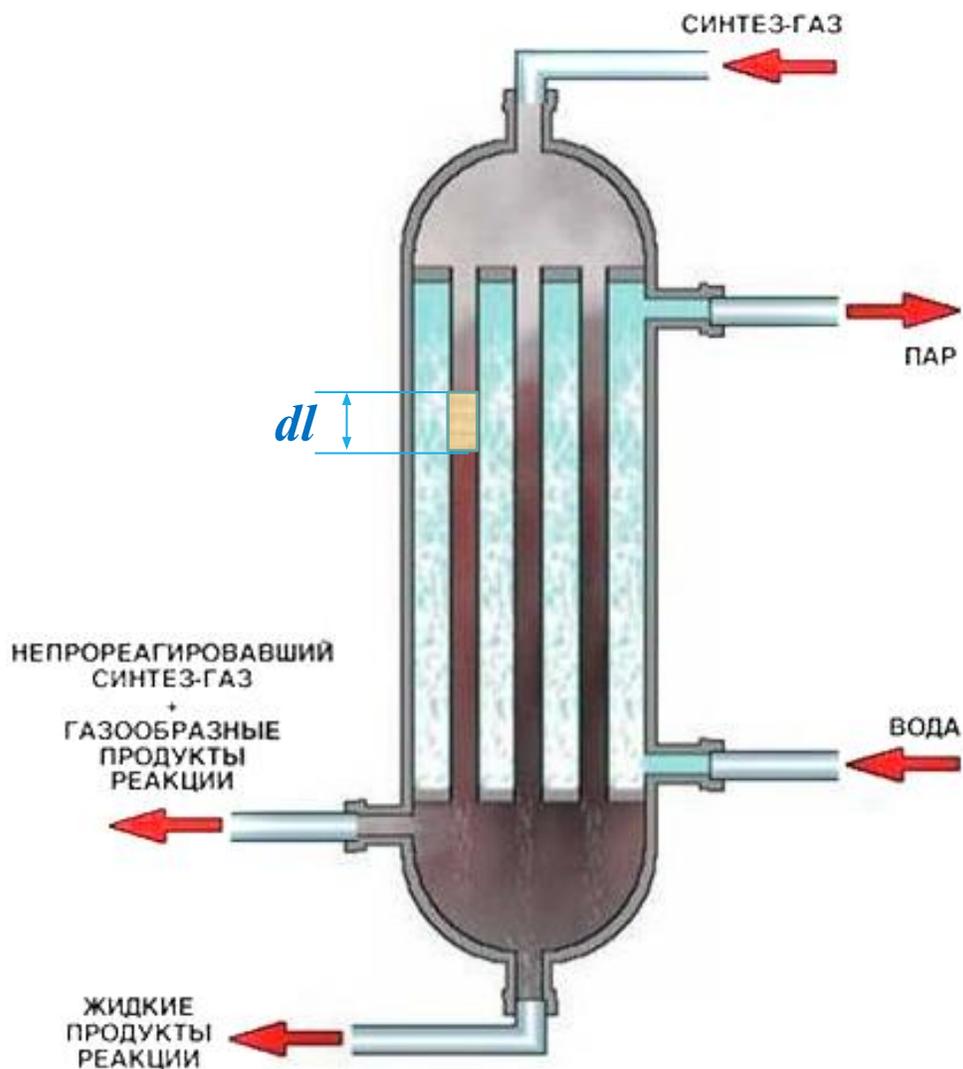
тогда получим

$$\frac{dq}{dt} = Q_p \cdot r(C, T) \cdot V_p + K_T F_T (T_x - T)$$

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

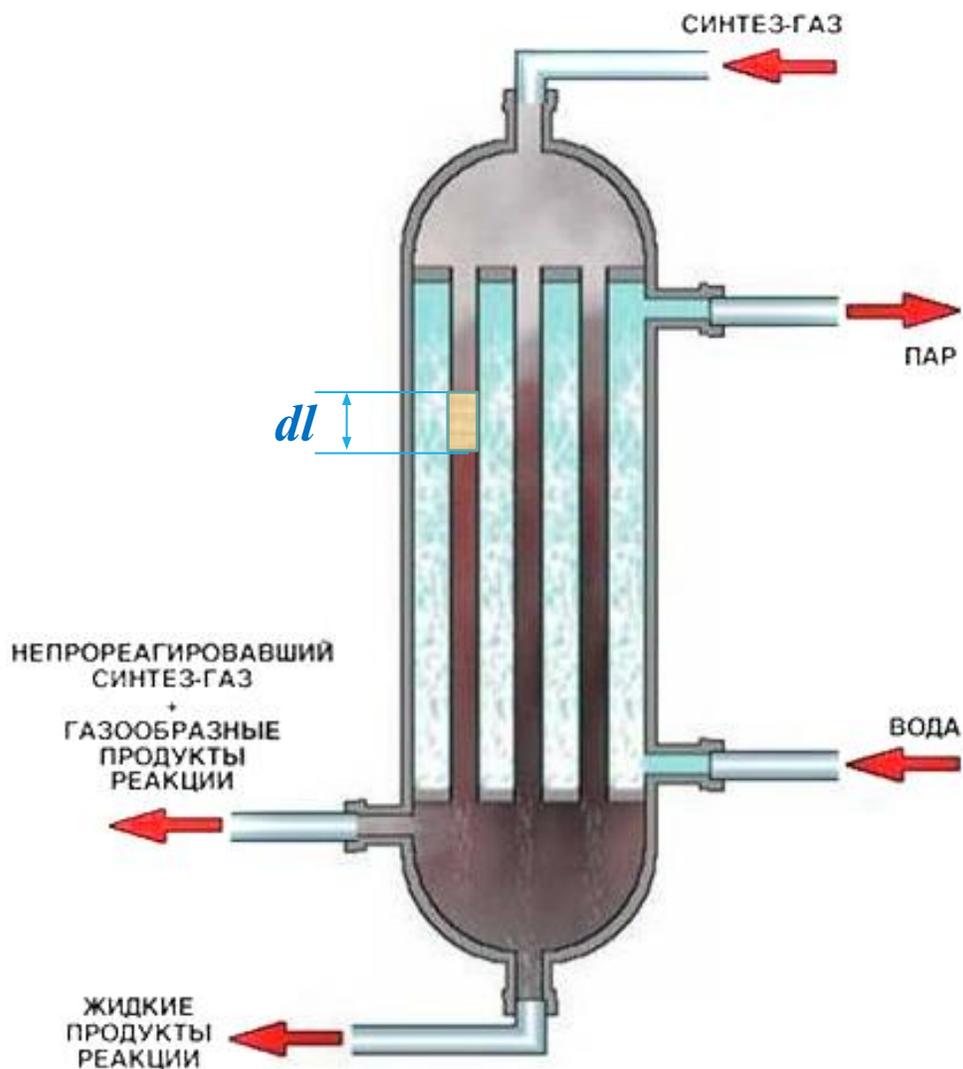
- Процесс начинается при концентрациях C_{i0} и температуре T_0 .
- Начальные условия для процесса:
при $t = 0$ $C = C_{i0}$ $T = T_0$.

Математическая модель процесса в реакторе идеального вытеснения (РИВ)



- ❑ Режим течения потока через реактор без перемешивания. Профиль скорости по сечению плоский. Такой режим потока называют *поршневым*, или *идеального вытеснения*.
- ❑ Реактор представим в виде трубки сечением S , через которое проходит поток величиной V_0 .
- ❑ По мере прохождения потока реакционной смеси вследствие химических превращений изменяются концентрации компонентов C_i .
- ❑ Элементарный объем в этом случае участок толщиной dl и объемом $dv_p = Sdl$.

Материальный баланс



□ В элементарный объём входит с потоком компонент i в количестве $V_0 \cdot C_i$ и выходит $V_0 \cdot (C_i + dC_i)$.

- Источник вещества в выделенном объеме химическое превращение $\sum N_{ист i} = W_i(C, T) \cdot dV_p$.
- Процесс протекает стационарно ($dN_i/dt = 0$), объем реакционной смеси не меняется и уравнение

$$\frac{dN}{dt} = \sum N_{ВХ} + \sum N_{ИСТ}$$

принимает вид

$$0 = V_0 \cdot C_i - V_0 \cdot (C_i + dC_i) + W_i(C, T) \cdot dV_p$$

После упрощения получим

$$\frac{dC_i}{d\tau} = W_i(C, T),$$

где $\tau = \frac{V_p}{V_0}$ - условное время реакции.

- Для теплового уравнения

$$\frac{dq}{dt} = \sum Q_{\text{ВХ}} + \sum Q_{\text{ИСТ}}$$

$dq/dt = 0$ - процесс стационарен;

$V_0 \cdot c_p T$ - тепловой поток, входящий в элементарный объем,

и $V_0 \cdot c_p (T + dT)$ - выходящий из него;

- $\sum Q_{pi} \cdot r_i(C, T) \cdot dV_p + K_T \cdot dF_T (T_x - T)$ - источники теплоты (реакция и теплообмен через боковую поверхность dF_T в выделенном объеме).

- Далее:

$$0 = V_0 \cdot c_p T - V_0 \cdot c_p (T + dT) + \sum Q_{pi} \cdot r_i(C, T) \cdot dV_p + K_T \cdot dF_T (T_x - T);$$

- Далее:

$$0 = \cancel{V_0 \cdot c_p T} - \cancel{V_0 \cdot c_p T} - V_0 \cdot c_p dT + \sum Q_{pi} \cdot r_i(C, T) \cdot dV_p + K_T \cdot dF_T (T_x - T);$$

- $V_0 \cdot c_p dT = \sum Q_{pi} \cdot r_i(C, T) \cdot dV_p + K_T \cdot dF_T (T_x - T);$

- $\frac{V_0 c_p dT}{dV_p} = \sum Q_{pi} \cdot r_i(C, T) + K_T \frac{dF_T}{dV_p} \cdot (T_x - T)$

$dF_T / dV_p = F_{уд}$ - удельная поверхность теплообмена

$\tau = \frac{V_p}{V_0}$ - условное время пребывания

После преобразований

получим:

- $c_p \frac{dT}{d\tau} = \sum Q_{pi} \cdot r_i(C, T) + K_T F_{уд} (T_x - T)$

при $\tau = 0$ $C = C_0$ и $T = T_0$.

Неизотермический периодический процесс в химическом реакторе *идеального смешения* и неизотермический непрерывный процесс в химическом реакторе *идеального вытеснения* описываются *идентичными математическими моделями*

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_i}{dt} = W_i(C, T), i = 1, k - \text{количество компонентов} \\ c_p \frac{dT}{dt} = \sum_{j=1}^m [Q_{pj} \cdot r_j(C, T)] + K_T F_{уд} (T_x - T) \\ j = 1, m - \text{количество стадий реакции} \\ \text{при } t = 0 \quad C = C_0 \text{ и } T = T_0 \end{array} \right.$$

□ А в случае протекания простой реакции $W(C, T) = -r(C, T)$

□ Перейдя к степени превращения

$$x = (C_0 - C) / C_0 \rightarrow C = C_0(1-x) \rightarrow dC = -C_0 dx$$

приведем систему к виду

$$\begin{cases} \frac{dC}{dt} = W(C, T), \\ c_p \frac{dT}{dt} = Q_p \cdot r(C, T) + K_T F_{уд} (T_x - T) \\ \text{при } t = 0 \quad C = C_0 \text{ и } T = T_0 \end{cases}$$



$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \frac{r(C, T)}{C_0}, \\ \frac{dT}{dt} = \frac{Q_p C_0 r(C, T)}{c_p C_0} + \frac{K_T F_{уд}}{c_p} (T_x - T) \\ \text{при } t = 0 \quad x = 0 \text{ и } T = T_0 \end{cases}$$

$\Delta T_{ад}$

B

□ Выражение

$$\frac{Q_p C_0}{c_p} = \Delta T_{\text{ад}}$$

- *адиабатический разогрев.*

□ Отношение скорости реакции $r(C, T)$ к исходной концентрации C_0 выразим через степень превращения x и обозначим:

$$r(C, T)/C_0 = r(x, T)$$

□ Соотношение

$$K_T F_{\text{уд}} / c_p = B$$

есть параметр теплоотвода

С этими обозначениями система приобретает более стройный вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dx}{dt} = r(x, T) \\ \frac{dT}{dt} = \Delta T_{\text{ад}} r(x, T) + B(T_x - T) \\ \text{при } t = 0 \quad x = 0 \text{ и } T = T_0 \end{array} \right.$$

В этой системе только три параметра для характеристики тепловых явлений в реакторе: $\Delta T_{\text{ад}}$, B и T_x