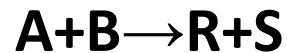


## Практическая работа №2

Решение задач на примере идеальных моделей химических реакторов различного типа для гомогенных процессов

## Задание 1.

Гомогенная жидкофазная реакция



протекает в двух отдельно стоящих и автономно работающих реакторах РИВ и РИС-Н.

Известны равные начальные концентрации реагирующих веществ  $C_{A0} = C_{B0}$ , концентрация вещества А на выходе из реакторов  $C_A$ , а также константа скорости реакции  $k$ .

При равных объемах реакторов  $V_p$  определить и сравнить время пребывания реагентов в реакторах и их производительности.

## Алгоритм решения задачи

Степень превращения реагента А:  $X_A = (C_{A0} - C_A)/C_{A0}$ .

Кинетическое выражение для данной реакции второго порядка по закону действующих масс:  $r_A = k \cdot C_A \cdot C_B$ .

Исходя из стехиометрического уравнения процесса и заданного соотношения начальных концентраций реагентов

Тогда 
$$C_A = C_B = C_{A0} (1 - X_A)$$
$$r_A = k \cdot C_A \cdot C_B = k \cdot [C_{A0} (1 - X_A)]^2$$

Характеристическое уравнение времени пребывания реагентов:

а) если процесс реализуется в РИВ,

$$\tau = C_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{k C_{A0}^2 (1 - x_A)^2} = \frac{1}{k C_{A0}} \cdot \frac{x_A}{1 - x_A}$$

б) если процесс реализуется в РИС-Н

$$\tau = C_{A0} \cdot X_A / r_A = C_{A0} \cdot X_A / k \cdot [C_{A0} (1 - X_A)]^2$$

Производительность по целевому продукту R как для РИВ, так и для РИС-Н:

$$П = v C_R, \text{ где}$$

## Исходные данные для расчета:

**Дано:**

$$k = 5 \cdot 10^{-2} \text{ м}^3/\text{кмоль} \cdot \text{сек}$$

$$C_{A0} = C_{B0} = 8 \cdot 10^{-2} \text{ кмоль/м}^3,$$

$$C_A = 2 \cdot 10^{-2} \text{ кмоль/м}^3,$$

$$V_p = 0,5 \text{ м}^3$$

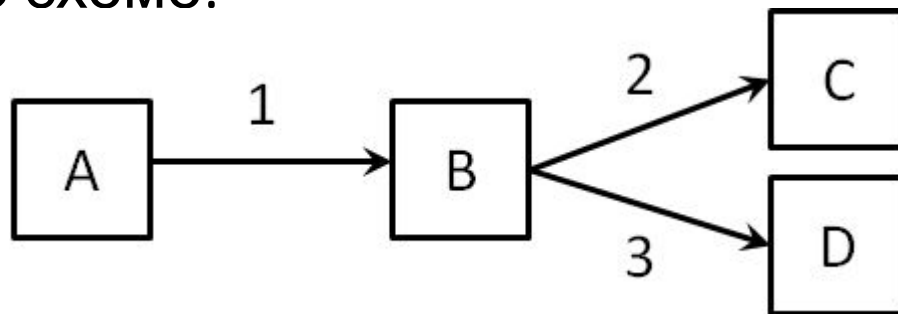
**Определить:**

$t$  (час) и  $\Pi$  (моль/час) для РИВ и РИС-Н

## Задание

2.

В реакторе идеального смешения непрерывного принципа действия, протекает химическая реакция без изменения объема реакционной смеси и при постоянной температуре по схеме:



Известна степень превращения компонента А, его начальная концентрация  $C_{A0}$ , а начальные концентрации других реагентов  $C_{B0}$ ,  $C_{C0}$ ,  $C_{D0}$  равны 0. Рассчитаны предэкспоненциальные множители  $k_{i0}$  и энергии активации  $E_i$  для применения формулы Аррениуса по 1,2,3 стадиям реакции.

Применить соответствующую математическую модель реактора, и определить состав реакционной смеси на выходе из него.

## Основные выражения и ход выполнения задания

Для РИС-Н в стационарном режиме:  $[(C_{i0} - C_i)/\tau] + r_i = 0$

Скорость реакции по 1,2,3 стадиям:  $r_1 = k_1 \cdot C_A$ ;  $r_2 = k_2 \cdot C_B$ ;  $r_3 = k_3 \cdot C_B$

Скорость реакции по компонентам:  $r_A = -r_1$ ;  $r_B = r_1 - r_2 - r_3$ ;  $r_C = r_2$ ;  $r_D = r_3$

Математическая модель реактора состоит из уравнений материального баланса для каждого из компонентов:

$$\begin{aligned} [(C_{A0} - C_A)/\tau] - k_1 \cdot C_A &= 0; \\ [(C_{B0} - C_B)/\tau] + k_1 \cdot C_A - (k_2 + k_3) C_B &= 0; \\ [(C_{C0} - C_C)/\tau] + k_2 \cdot C_B &= 0; \\ [(C_{D0} - C_D)/\tau] + k_3 \cdot C_B &= 0; \end{aligned}$$

или представив их через концентраций компонентов на выходе из реактора, что и является целью задания (проверка:  $\sum C_i = C_{A0}$ )

$$\begin{aligned} C_A &= C_{A0} / (1 + k_1 \cdot \tau); \\ C_B &= (C_{B0} + k_1 \cdot \tau \cdot C_A) / [1 + (k_2 + k_3) \tau]; \\ C_C &= C_{C0} + k_2 \cdot C_B \cdot \tau; \\ C_D &= C_{D0} + k_3 \cdot C_B \cdot \tau; \end{aligned}$$

где  $k_1, k_2, k_3$  – константы скоростей реакции по стадиям определяют по формуле Аррениуса

$$k_i = k_{0i} \exp(-E_i/RT);$$

$\tau$  – время, необходимое для достижения заданной степени превращения можно определить из выражения записанного через степень превращения исходного компонента  $X_A$ :

## Исходные данные для расчета:

**Дано:**

$$T=293^0K$$

$$X_A=0,8$$

$$C_{A0}=2 \text{ кмоль/м}^3, C_{B0}=C_{C0}=C_{D0}=0$$

$$k_{01}=5,0 \cdot 10^5 \text{ м}^3/\text{кмоль} \cdot \text{с}, k_{02}=5,5 \cdot 10^5 \text{ м}^3/\text{кмоль} \cdot \text{с},$$
$$k_{03}=5,2 \cdot 10^5 \text{ м}^3/\text{кмоль} \cdot \text{с}$$

$$E_1=4,0 \cdot 10^4 \text{ кДж/кмоль}, E_2=4,2 \cdot 10^4 \text{ кДж/кмоль},$$
$$E_1=4,14 \cdot 10^4 \text{ кДж/кмоль}$$

$$R=8,314 \text{ кДж/кмоль} \cdot ^0K$$

**Определить:**

$$C_A, C_B, C_C, C_D, \text{ в кмоль/м}^3$$

### Задание 3.

Жидкофазная реакция второго порядка  $A+B \rightarrow R+S$  протекает при постоянной плотности реакционной смеси в каскаде, состоящем из трех одинаковых по объему ( $V_1, V_2, V_3$ ) реакторов идеального смешения.

Известны:

- начальная концентрация реагента А на входе и выходе из каскада ( $C_{A0}, C_{AK}$ ),
  - начальная концентрация реагента В ( $C_{B0}$ ),
  - объемный расход реакционной смеси ( $v$ ),
  - константы скоростей реакции по секциям каскада ( $k_1, k_2, k_3$ ).
- Определить объем каскада реакторов ( $V_K$ ) графическим методом



## Последовательность выполнения задания

Характеристическое уравнение в соответствии с условиями задачи:

$$\tau = V/v = (C_{A0} - C_A)/(-r_A) = (C_{A0} - C_A)/k \cdot C_A \cdot C_B,$$

где  $C_B = C_{B0} - (C_{A0} - C_A), \quad -r_A = k \cdot C_A \cdot C_B$

Так как объемы секций 1,2,3 одинаковы то:

$$(C_{A0} - C_{A1})/(-r_{A1}) = (C_{A1} - C_{A2})/(-r_{A2}) = (C_{A2} - C_{A3})/(-r_{A3}) = V/v = \text{const.}$$

Проводят расчёт концентраций реагентов и скоростей реакции по 1,2,3 секциям каскада и строят графики зависимостей:

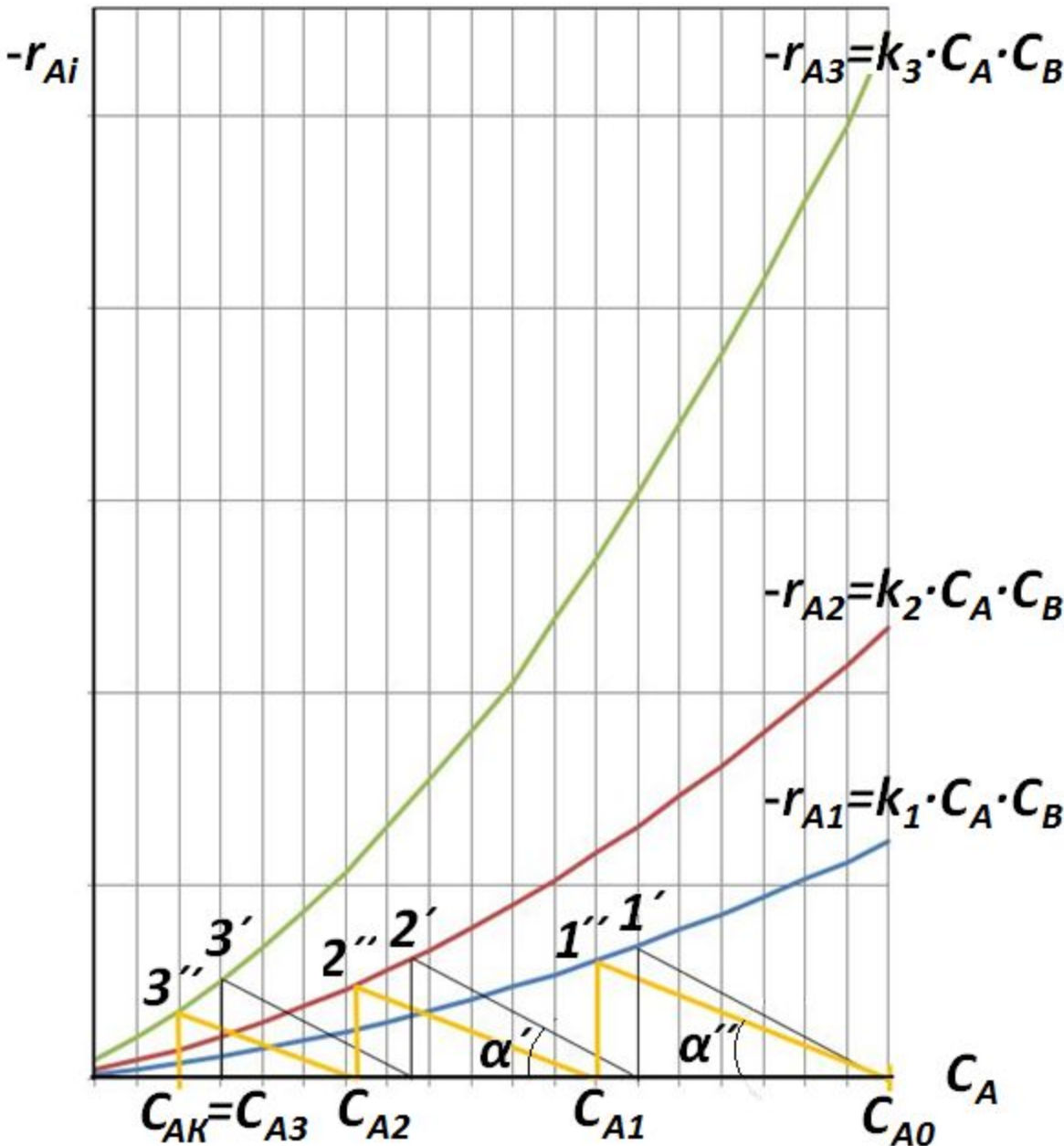
$$-r_{A1} = k_1 \cdot C_A \cdot C_B, \quad -r_{A2} = k_2 \cdot C_A \cdot C_B, \quad -r_{A3} = k_3 \cdot C_A \cdot C_B$$

Концентрацию реагента **A** варьируют от начального  $C_{A0}$  до конечного  $C_{AK}$  значения с дробным шагом для получения достаточного количества точек и построения графических зависимостей.

Параллельно рассчитывают концентрацию реагента **B** по значениям тех же шагов варьирования:  $C_B = C_{B0} - (C_{A0} - C_A)$ . Полученные результаты заносят в таблицу и по ним строят графики.

$C_{Ai}$ (от $C_{A0}$ до $C_{AK}$ )	$C_{Bi} = C_{B0} - (C_{A0} - C_{Ai})$	$-r_{A1} = k_1 \cdot C_{Ai} \cdot C_{Bi}$	$-r_{A2} = k_2 \cdot C_{Ai} \cdot C_{Bi}$	$-r_{A3} = k_3 \cdot C_{Ai} \cdot C_{Bi}$
Значение на входе				
Промежуточные значения				
<i>i</i>				
.....				

Графическое определение концентрации реагента А на выходе из каждой трех секций каскада



Из  $C_{A0}$  проводят линию под любым углом  $\alpha'$  до пересечения с кривой  $-r_{A1} = k_1 \cdot C_A \cdot C_B$  в точке  $1'$  и восстанавливают в к абсцисс. Из полученной точки пересечения проводят линию под тем же углом  $\alpha'$  до пересечения с кривой  $r_{A2} = k_2 \cdot C_A \cdot C_B$  в точке  $2'$  и восстанавливают в к абсцисс. Те же действия предпринимают для определения точки  $3'$ .

Если в к абсцисс от точки  $3'$  не соответствует значению  $C_{AK}$  то методом подбора меняют угол наклона прямых линий, например, на  $\alpha''$ , что показывает совпадение

По результатам графических построений находят координаты точек  $C_{A1'}$ ,  $C_{A2'}$ ,  $C_{A3'}$ , концентрацию реагента **A** на выходе, соответственно, из 1,2,3 секций каскада. Поскольку угол наклона рабочих линий одинаков, то секции имеют одинаковый объем (согласно условию задачи).

Таким образом, объем каждой секции:

$$V_1 = V_2 = V_3 = v(C_{A0} - C_{A1})/k_1 C_{A1}[C_{B0} - (C_{A0} - C_{A1})], \quad V_K = 3V_1$$

**Исходные данные для расчета:**

**Дано:**

$$C_{A0} = 2 \text{ кмоль/м}^3,$$

$$C_{B0} = 3 \text{ кмоль/м}^3,$$

$$C_{AK} = 0,5 \text{ кмоль/м}^3,$$

$$k_1 = 0,04 \text{ м}^3/\text{кмоль} \cdot \text{сек}, k_2 = 0,08 \text{ м}^3/\text{кмоль} \cdot \text{сек}, k_3 = 0,2 \text{ м}^3/\text{кмоль} \cdot \text{сек},$$

$$v = 1,5 \cdot 10^{-2} \text{ м}^3/\text{сек}$$

**Определить:**

$$V_K (\text{м}^3)$$

**Примечания:**

1) Шаг варьирования концентраций реагента **A** от начального  $C_{A0}$  до конечного  $C_{AK}$  значения взять  $0,1 \text{ кмоль/м}^3$

2) Графики выполнить в масштабе для  $C_{Ai} \rightarrow 0,1 \text{ кмоль/м}^3 : 10 \text{ мм}$