



УДК 66.015.4:541.121.001

АНАЛИЗ СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ РЕЦИРКУЛЯЦИОННОЙ СИСТЕМЫ «РЕАКТОР-СЕПАРАТОР» НА ПРИМЕРЕ РЕАКЦИИ ДИМЕРИЗАЦИИ

ANALYSIS OF STEADY STATES OF THE REACTOR-SEPARATOR RECIRCULATION SYSTEM BY THE EXAMPLE OF THE DIMERIZATION REACTION

Королькова Н.А.

Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова МИРЭА, Российский технологический университет

Назанский С.Л.

Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова МИРЭА, Российский технологический университет
nazanski@yandex.ru

Korolkova N.A.

M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies MIREA, Russian technological university

Nazanskii S.L.

M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies MIREA, Russian technological university
nazanski@yandex.ru

Аннотация. Проведено математическое моделирование стационарных режимов работы рециркуляционной системы «реактор идеального смешения-парожидкостной сепаратор» с рециклом для реакции $2A=B$. Расчеты проводились при изменении потока рецикла. Показано, что в системе может реализовываться до трех стационарных состояний, отличающихся температурой в реакторе и производительностью. Полученные результаты позволяют выявить стационарные состояния с максимальной конверсией и соответствующие данным состояниям конструктивные и режимные параметры.

Annotation. A mathematical modelling of recycled continuous stirred reactor-vapor liquid separator system carried out. System liquid phase reaction is $2A=B$, reactive mixture has no azeotropes and A is the more volatile component. Calculations of the system steady states was made with varying of reactor and separator heat duties. Proved up to three steady states can exist for system is considered. The results allow to receive construction and operation parameters of recycled system, corresponding of maximal conversion.

Ключевые слова: математическое моделирование, реактор, сепаратор, рециркуляционная система, стационарные состояния.

Keywords: mathematical simulation, reactor, separator, recycled system, steady states.

Химико-технологические системы с обратными связями во многих случаях характеризуются наличием множественных стационарных состояний (полистационарностью) [1, 2]. Проявляется это таким образом, что при закрепленных значениях конструктивных и режимных параметров может реализовываться несколько стационарных режимов, отличающихся технологическими показателями процесса. В связи с этим является актуальной задача выявления всех возможных стационарных состояний системы и выбора режима с наилучшими технологическими показателями. Решение указанной задачи с помощью содержательных математических моделей во многих случаях затруднено. Поэтому на начальном этапе целесообразно использовать качественный анализ с применением упрощенных математических моделей. Полученные на данном этапе результаты могут быть использованы в ходе с последующего численного моделирования на более сложных, содержательных моделях [3].

Объектом исследования в данной работе является рециркуляционная система «реактор идеального смешения-парожидкостной сепаратор» представленная на рисунке 1. Рассматривалась экзотермическая реакция димеризации ацетона (A) в диацетоновый спирт (B). Зависимости мольных объемов и теплоемкостей компонентов от температуры были взяты из базы данных программного пакета Aspen Plus [4]. Принималось, что потоки жидкости и пара, выходящие из сепаратора, находятся в состоянии фазового равновесия. Мольный объем реакционной смеси подчиняется правилу аддитивности.

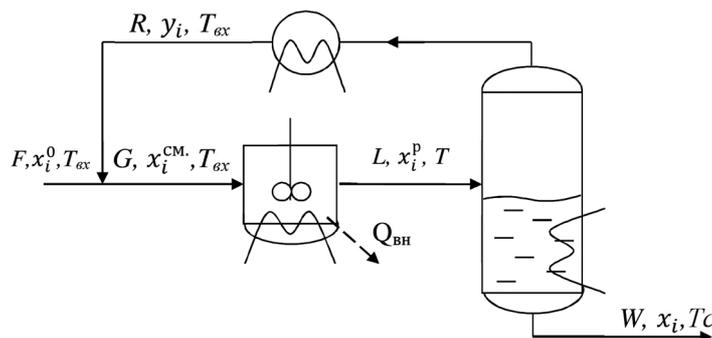


Рисунок 1 – Рециркуляционная система «реактор-сепаратор»



Математическая модель рециркуляционной системы состоит из уравнений материального баланса реактора и сепаратора с учетом кинетического уравнения, а также теплового баланса:

Материальный баланс реактора:

$$F x_A^0 + R y_A - L x_A^p - 2V \left[\frac{k^+ (x_A^p)^2}{v^2} - \frac{k^- (1 - x_A^p)}{v} \right] = 0, \quad (1)$$

где v – мольный объем смеси:

$$v = v_A x_A^p + v_B (1 - x_A^p). \quad (2)$$

Материальный баланс сепаратора:

$$L x_A^p - R y_A - W x_A = 0, \quad (3)$$

где состав пара:

$$y_A = \frac{\alpha x_A}{\alpha x_A + 1 - x_A}, \quad (4)$$

$$\alpha = A x_A^5 + B x_A^4 + C x_A^3 + D x_A^2 + E x_A + F. \quad (5)$$

Невязка теплового баланса реактора:

$$\Delta Q = T_{ex} C_{pA}^{ex} (F x_A^0 + R y_A) + T_{ex} C_{pB}^{ex} [F (1 - x_A^0) + R (1 - y_A)] - TLC_{pA} x_A^p - TLC_{pB} (1 - x_A^p) - \Delta H V w + Q_{внеш} = 0, \quad (6)$$

где w – скорость реакции:

$$w = \frac{k^+ (x_A^p)^2}{v^2} - \frac{k^- (1 - x_A^p)}{v}, \quad (7)$$

ΔH – изменение энтальпии при протекании реакции; C_{pA}^{ex}, C_{pB}^{ex} теплоемкости жидких компонентов А и В соответственно, при входной температуре, кДж/(кмоль·К); T_{ex} – температура на входе в реактор, К; C_{pA}, C_{pB} теплоемкости жидких компонентов А и В соответственно, при температуре в реакторе, кДж/(кмоль·К); T – температура в реакторе, К; $Q_{внеш}$ – поток тепла, подаваемый в реактор извне, кДж/ч.

Коэффициенты полинома (5) были оценены по Y-X-диаграмме смеси ацетон-диацетоновый спирт, полученной с помощью модели NRTL в среде программного пакета Aspen Plus. Значения коэффициентов приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Коэффициенты зависимости относительной летучести от состава

A	B	C	D	E	F
6643	-12944	9122	-2605	293,9	4,228

При расчете материального баланса рециркуляционной системы в качестве входных параметров закреплялись: значения потока питания, его состав и температура, а также температура и величина потока рецикла; объем реактора, а также количество отведенного тепла. Далее при различных значениях температуры в реакторе решалась система уравнений (1), (3), (4) с учетом выражений (2), (5) и вычислялась невязка теплового баланса (6). Стационарные состояния системы выявлялись по точкам пересечения графика невязки с осью OX (невязка равна нулю, рис. 2).

Расчеты стационарных состояний рециркуляционной системы проводились при следующих исходных данных: Температура входного потока реагентов: $T_{вх} = 263,15$ К; объем реактора: $V = 1,4$ м³; подача исходного сырья: 100 кмоль/ч чистого А; отвод тепла: $Q_{вн} = 0$ кДж/ч. Из приведенных на рисунке 2 зависимостей невязки теплового баланса от температуры видно, что точки пересечения с осью Oх соответствующие стационарному состоянию, с увеличением потока рецикла смещаются вдоль оси Oх (температура стационарного состояния уменьшается при увеличении потока рецикла). Из рисунка 2 видно, что существует диапазон значений рецикла R, при которых в рециркуляционной системе ре-



ализуются три стационарных состояния, отличающиеся производительностью и температурой в реакторе. Множественные стационарные состояния реализуются при значениях потока рецикла свыше 200 кмоль/ч. Итоговые результаты работы представлены на рисунке 3.

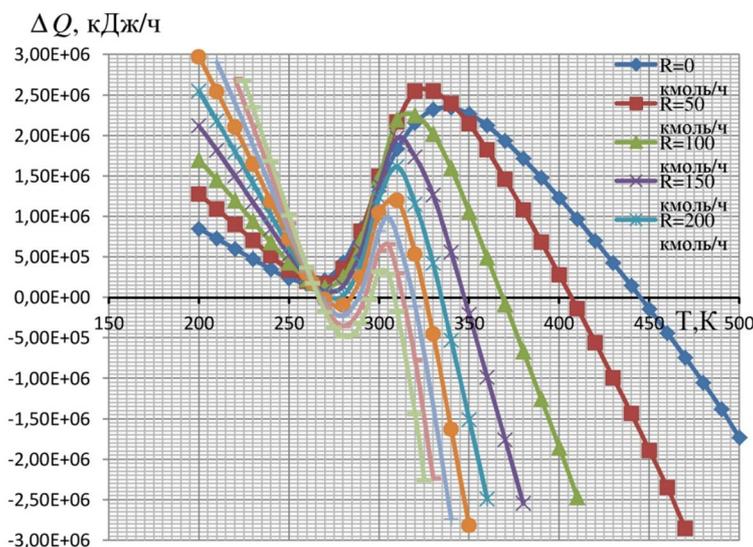


Рисунок 2 – Невязка теплового баланса реактора в зависимости от температуры при различных величинах рецикла

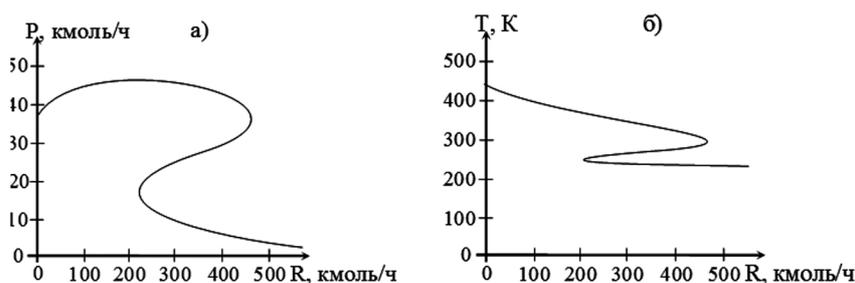


Рисунок 3 – Зависимость производительности системы: а) и температуры в реакторе; б) от потока рецикла

Из рисунка 3 видно, что при рециклах в диапазоне от 200 до 460 кмоль/ч реализуются три стационарных состояния с различной производительностью и температурой в реакторе. Следует отметить, что наиболее высокой производительностью, а, следовательно, и конверсией характеризуются состояния с более высокими температурами в реакторе.

Таким образом для системы «реактор-сепаратор» на примере реакции $2A \rightleftharpoons B$ показана возможность существования до трех стационарных состояний с различной конверсией реагента с рециклом выявлены области существования множественных стационарных состояний, отличающихся конверсией в системе и температурой в реакторе.

Список литературы:

1. Нагиев М.Ф. Химическая рециркуляция. – М. : Наука, 1978. – 87 с.
2. Кафаров В.В., Дорохов И.Н. Системный анализ процессов химической технологии. Основы стратегии. – М. : Наука, 1976. – 498 с.
3. Благов С.А. Разработка метода анализа стационарных состояний рециркуляционных реакционно-ректификационных процессов : дис. ... канд. техн. наук. – М. : МИТХТ, 1999. – 190 с.
4. База данных NIST TDE программного пакета Aspen Plus v. 10.

List of references:

1. Nagiev M.F. Chemical recirculation. – M. : Nauka, 1978. – 87 p.
2. Kafarov V.V., Dorokhov I.N. System Analysis of Chemical Technology Processes. A Strategy Fundamentals. – A System Analysis of the Processes of Chemical Technology. – M. : Nauka, 1976. – 498 p.
3. Blagov S.A. Development of a method for the analysis of the stationary states of the recirculation reactive-rectification processes: Ph. ... candidate of technical sciences. – M. : MITHT, 1999. – 190 p.
4. The NIST TDE database of the software package Aspen Plus v. 10.