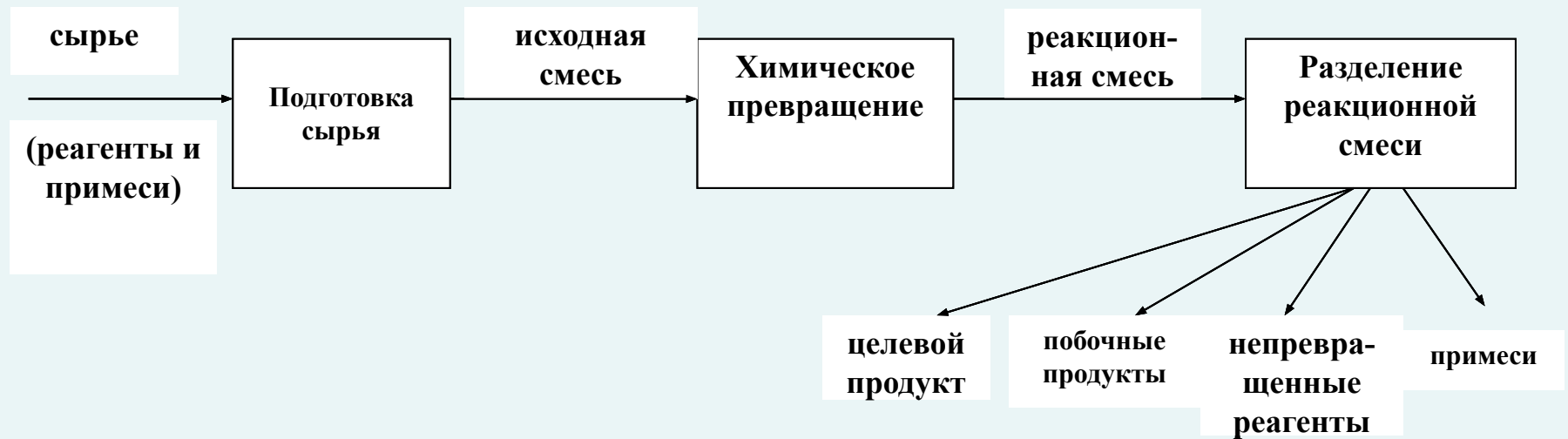


Основной (центральный) аппарат химико-технологического процесса в котором осуществляется химическая реакция и сопутствующие ей физические процессы - это *Химический реактор*. Элементы технологической схемы, расположенные до и после реактора, в основном предназначены для подготовки перерабатываемого сырья и разделения реакционной смеси (выделение целевого продукта, побочных продуктов, непревращенных реагентов).



- ✓ Теория химических реакторов – раздел Общей химической технологии, в котором рассматриваются различные подходы к расчету реактора, позволяющие получить данные, достаточные для проектирования промышленного аппарата.
- ✓ Как и в случае других аппаратов, используемых в химической промышленности (тепло- и массообменных и т.д.) для изучения, расчета и проектирования реакторов используется метод моделирования.
- ✓ Математическая модель – это упрощенное изображение процессов, протекающих в реакторе, которое сохраняет наиболее существенные свойства реального объекта и передает их в математической форме.

Несмотря на то, что реакторы для проведения различных процессов могут существенно отличаться габаритами и конструктивными особенностями, имеются общие признаки, позволяющие классифицировать реакторы:

1. По гидродинамическому режиму.
2. По способу организации процесса (способу подвода сырья и отвода продуктов).
3. По тепловому режиму.
4. По фазовому состоянию реакционной смеси.
5. По конструктивным характеристикам.

1. По гидродинамическому режиму:

реактор смешения

реактор вытеснения

Три механизма переноса вещества, тепла и импульса – квантовый (излучением), молекулярный, и конвективный (перенос движущейся массой вещества).

В реакторах смешения конвективный перенос вещества происходит путем интенсивного перемешивания (например, механической мешалкой, циркуляционным насосом, барботаж газа через жидкость)

В реакторах вытеснения конвективный перенос вещества осуществляется путем направленного движения потока реакционной смеси вдоль оси реактора.

В первом случае интенсивность конвективного переноса определяется скоростью вращения мешалки (и т.д.), во втором – линейной скоростью движения потока.

2. По способу организации процесса (или способу подвода сырья и отвода продуктов):

реактор непрерывного действия

реактор периодического действия

реактор полупериодического (или полунепрерывного) действия

Периодический реактор характеризуется единством места завершения всех стадий процесса.

Сырье загружают в реактор, «устанавливают» рабочие параметры (нагрев до рабочей температуры и т.д.), проводят реакцию, охлаждают реакционную смесь, выгружают реакционную смесь, очищают реактор (например, промывают и высушивают).

Далее следующий цикл работы.

Время одного цикла равно

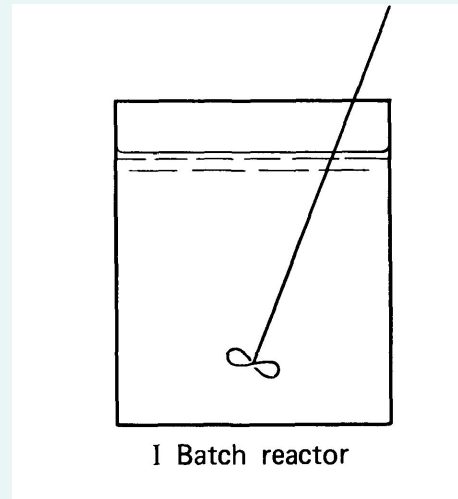
$$\text{Время}_{\text{цикла}} = \text{Время}_{\text{хим.р.}} + \text{Время}_{\text{вспомог. операций}}$$

- низкая производительность (минус)
- цикличность работы (минус)
- большие затраты ручного труда (минус)
- «гибкость» - широкий диапазон рабочих температур и давлений, легко перенастроить с одного режима на другой, нет жесткой привязки к конкретной химической реакции (плюс)

Реакторы такого типа используются:

- при малотоннажном производстве продуктов широкого ассортимента (например, в фармакологии);
- при исследовании кинетических закономерностей химических реакций

Периодический реактор смешения



Время реакции для аппарата этого типа является текущим временем осуществления химической реакции от начального времени - τ_0 до конечного времени - τ_k

Реактор непрерывного действия (проточный) – это реактор, в который непрерывно поступает сырье и также непрерывно выводятся продукты реакции (реакционная смесь); все стадии процесса осуществляются параллельно и одновременно.

В этих реакторах сложно непосредственно изменить время реакции, поэтому часто пользуются понятием условного времени пребывания реагентов в реакторе:

$$\tau = \frac{V_{\text{реактора}}}{V_{\text{сырья}}}$$

Где
 $V_{\text{Реактора}}$ – объем реактора (м³);
 $V_{\text{сырья}}$ – объемная скорость подачи сырья (м³/ч)

Для проточных реакторов с неподвижным слоем гетерогенного катализатора может быть использована аналогичная характеристика.

Расчетная формула в этом случае включает не только объем аппарата, занятый катализатором, но и свободный объем зернистого слоя (порозность слоя) .

$$\tau = \frac{V_{\text{катализатора}} \cdot \varepsilon_{\text{своб}}}{V_{\text{сырья}}}$$

В первом приближении, можно рассчитывать условное время пребывания по объему реакционной смеси при стандартных (нормальных) условиях – для газов это температура 0°C и давление 760 мм рт. ст., для жидкостей - температура 20°C (комнатная температура).

Более правильно использовать при расчете объем исходной смеси, приведенный к давлению и температуре в реакторе для газов, и к температуре в реакторе для жидкостей.

Расчет плотности газовой смеси производится по формуле:

$$\rho = \frac{\bar{M}}{22,4} \cdot \frac{273,15}{273,15 + t} \cdot \frac{P}{P_{норм.}}$$

Средняя молярная масса может быть найдена как отношение массы многокомпонентной смеси к суммарному количеству всех компонентов, выраженному в моль.

$$\bar{M} = \frac{m_{смеси}}{\sum n} = \frac{m_1 + m_2 + \dots + m_n}{\frac{m_1}{M_1} + \frac{m_2}{M_2} + \dots + \frac{m_n}{M_n}}$$

В случае, когда подвижная фаза является жидкостью, изменение давления в области до 1000 атм, на ее плотность и соответственно объем, влияния не оказывает. Температурная зависимость плотности для многих индивидуальных веществ может быть найдена в справочниках, плотность смеси жидкостей в первом приближении находится по уравнению (где w_i – массовая доля компонента, а ρ_i – его плотность)

$$\frac{1}{\rho_{смеси}} = \frac{w_1}{\rho_1} + \frac{w_2}{\rho_2} + \dots + \frac{w_i}{\rho_i}$$

Отдельным случаем является реактор с неподвижным слоем катализатора, в котором реализуется нисходящее движение жидкости по гранулам в пленочном режиме – то есть в условиях, когда только часть свободного объема слоя катализатора занята жидкостью.

Расчет времени пребывания жидкости в таком аппарате могут быть осуществлен по алгоритмам, применяемым при расчете насадочных абсорберов.

Для таких систем фиктивная линейная скорость движения жидкости (объемная скорость, отнесенная к свободному сечению аппарата) пропорциональна корню квадратному от удельного массового расхода жидкости:

$$V_{\text{ж}} = \frac{d}{41,8} \cdot \sqrt{\frac{W_{\text{ж}} \cdot g}{\eta_{\text{ж}}}}, \quad \text{м/с}$$

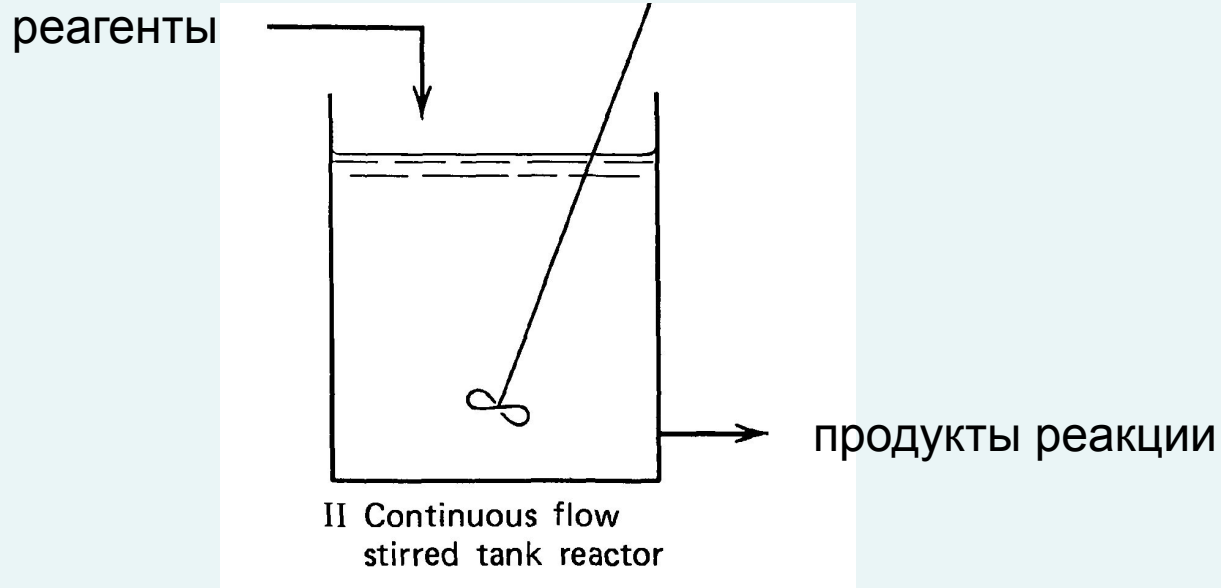
$W_{\text{ж}}$ – удельный массовый расход жидкости, кг/(м²·с);

g – ускорение свободного падения

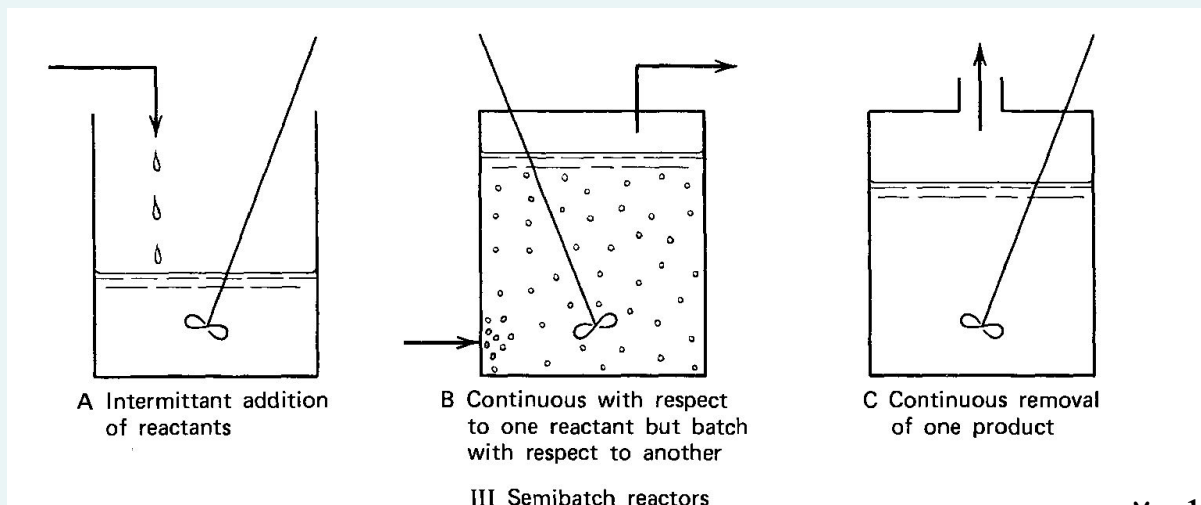
d – номинальный размер гранулы

$\eta_{\text{ж}}$ – динамическая вязкость жидкости

Реактор смешения непрерывного действия



На вход в реактор с постоянной скоростью подаются реагенты, одновременно, из реактора отводятся продукты реакции (в общем случае реакционная масса, содержащая продукты реакции и не превращенные реагенты)



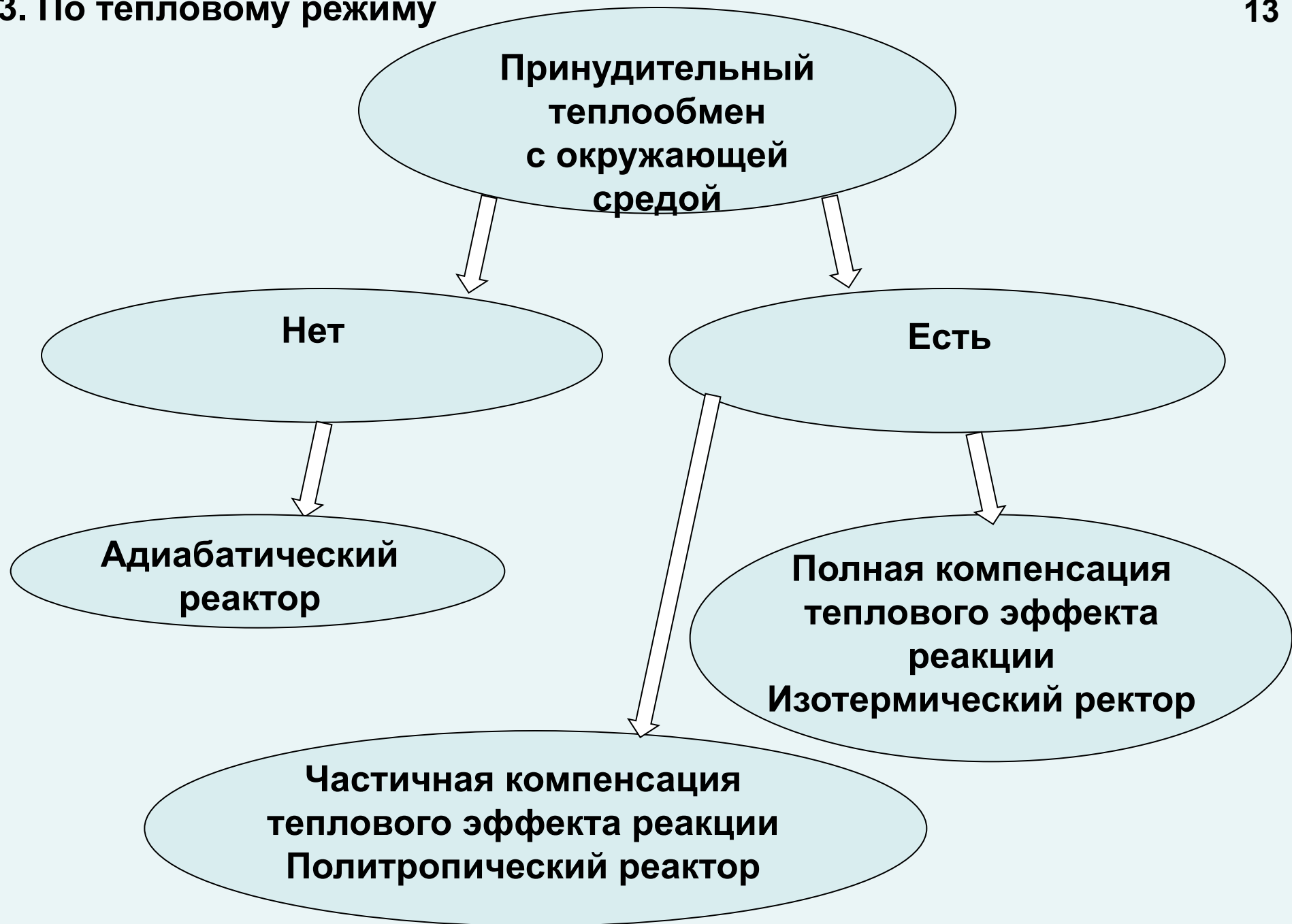
А. Все требуемое количество первого реагента, находящегося в жидкой фазе загружается в реактор, далее во времени непрерывно добавляется второй реагент, также находящийся в жидкой фазе

Б. Второй газообразный реагент непрерывно добавляется к первому, находящемуся в жидкой фазе

В. Один из продуктов реакции непрерывно отводится из реактора (например реакция этерификации - н-бутанола уксусной кислотой продуктами которой являются сложный эфир бутилацетат и вода

Показатель	Реагенты		Продукты	
	н-бутанол	уксусная кислота	бутилацетат	вода
$t_{\text{кипения}}$	118	118	126	100

Непрерывной отвод из системы самого низкокипящего компонента, позволяет сместить равновесие реакции в нужном направлении



В **адиабатическом реакторе** отсутствует теплообмен с окружающей средой и весь тепловой эффект реакции расходуется на изменение температуры реакционной смеси.

В **изотермическом реакторе** обеспечивается такой теплообмен с окружающей средой, который компенсирует полностью тепловой эффект реакции. В результате температура реакционной смеси остается строго постоянной.

Чисто адиабатический и чисто изотермический режимы работы реактора являются идеальными приближениями. На практике, близко к изотермическому режиму работают реакторы, в которых проводят процессы с очень малыми тепловыми эффектами или очень малой скоростью реакции, а также процессы, протекающие в растворе, где концентрация реагентов небольшая и тепло аккумулируется большим объемом растворителя.

Ближе к реальным условиям работы относится модель **политропического реактора**, в котором тепловой эффект химической реакции частично компенсируется за счет теплообмена с окружающей средой.

4. По фазовому составу реакционной смеси:

реакторы для проведения гомогенных процессов
(газофазных и жидкофазных)

реакторы для проведения гетерогенных процессов

реакторы для проведения гетерогенно-каталитических процессов

5. По конструктивным характеристикам:

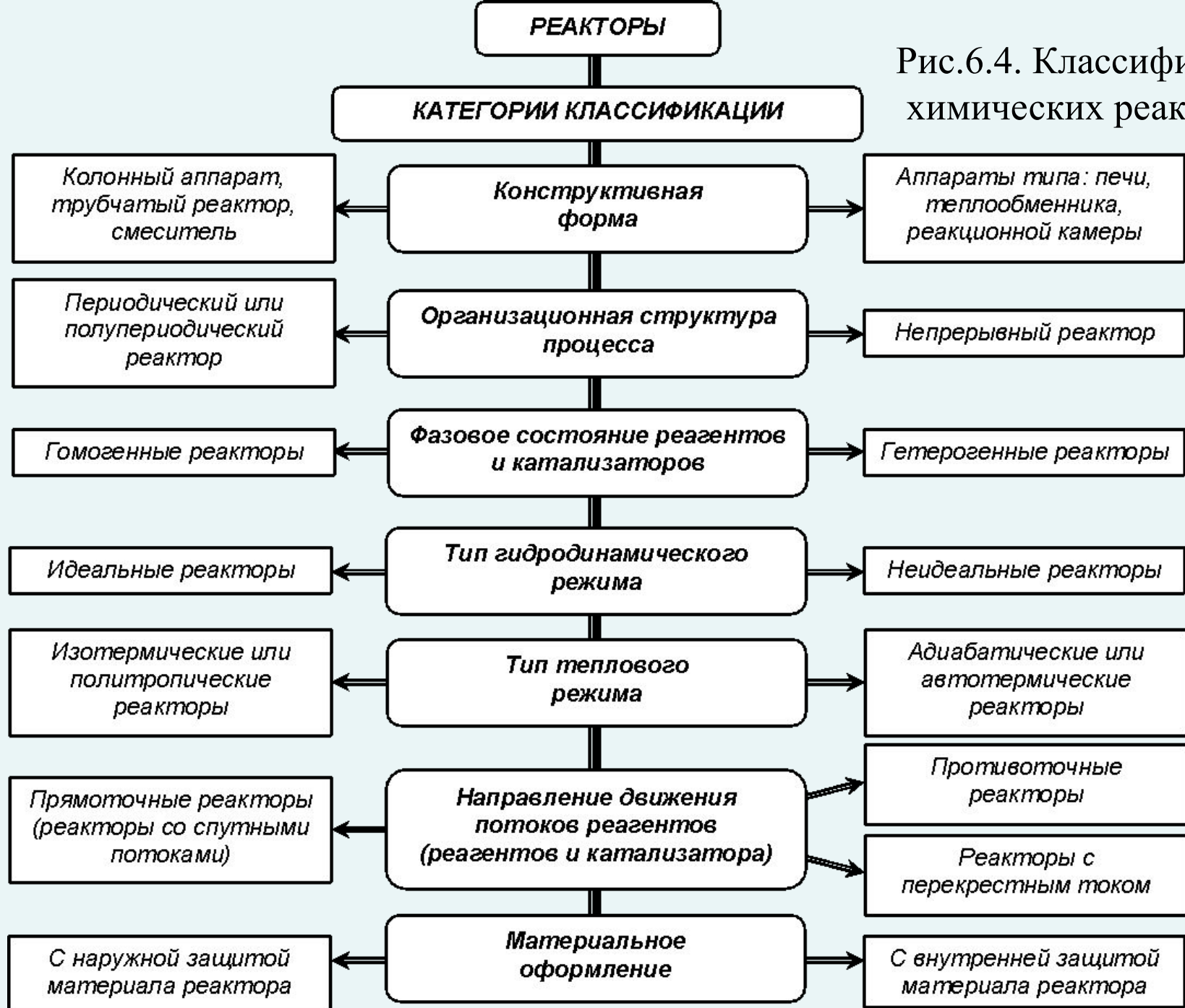
емкостные реакторы

колонны

трубчатые реакторы

печи (реакторы для высокотемпературных процессов)

Рис.6.4. Классификация химических реакторов



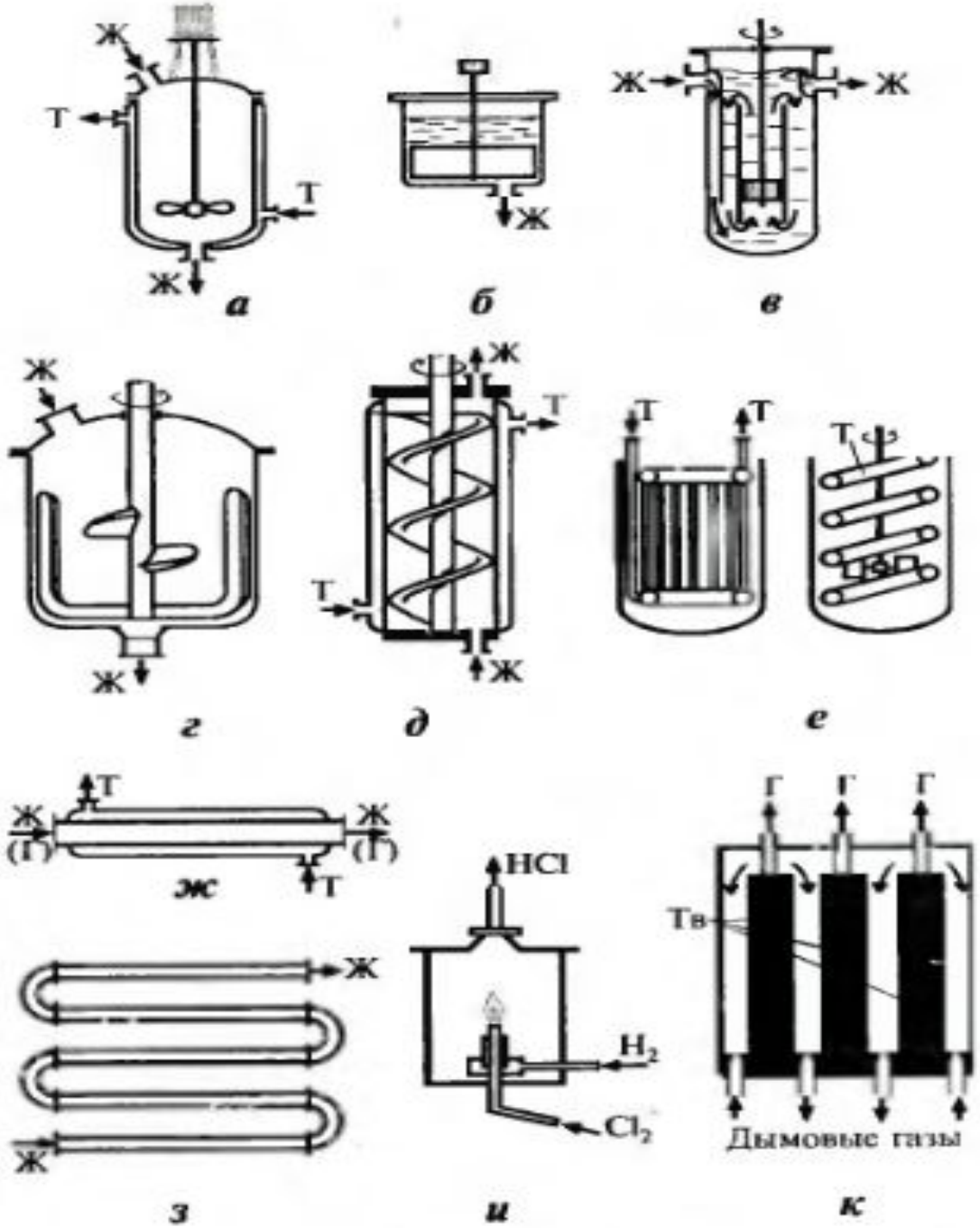


Рис. 2.78. Схемы реакторов для гомогенных процессов. Пояснение в тексте

Учебное издание для вузов

Бесков Владимир Сергеевич
Сафонов Валентин Семенович

ОБЩАЯ ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ
И ОСНОВЫ ПРОМЫШЛЕННОЙ ЭКОЛОГИИ

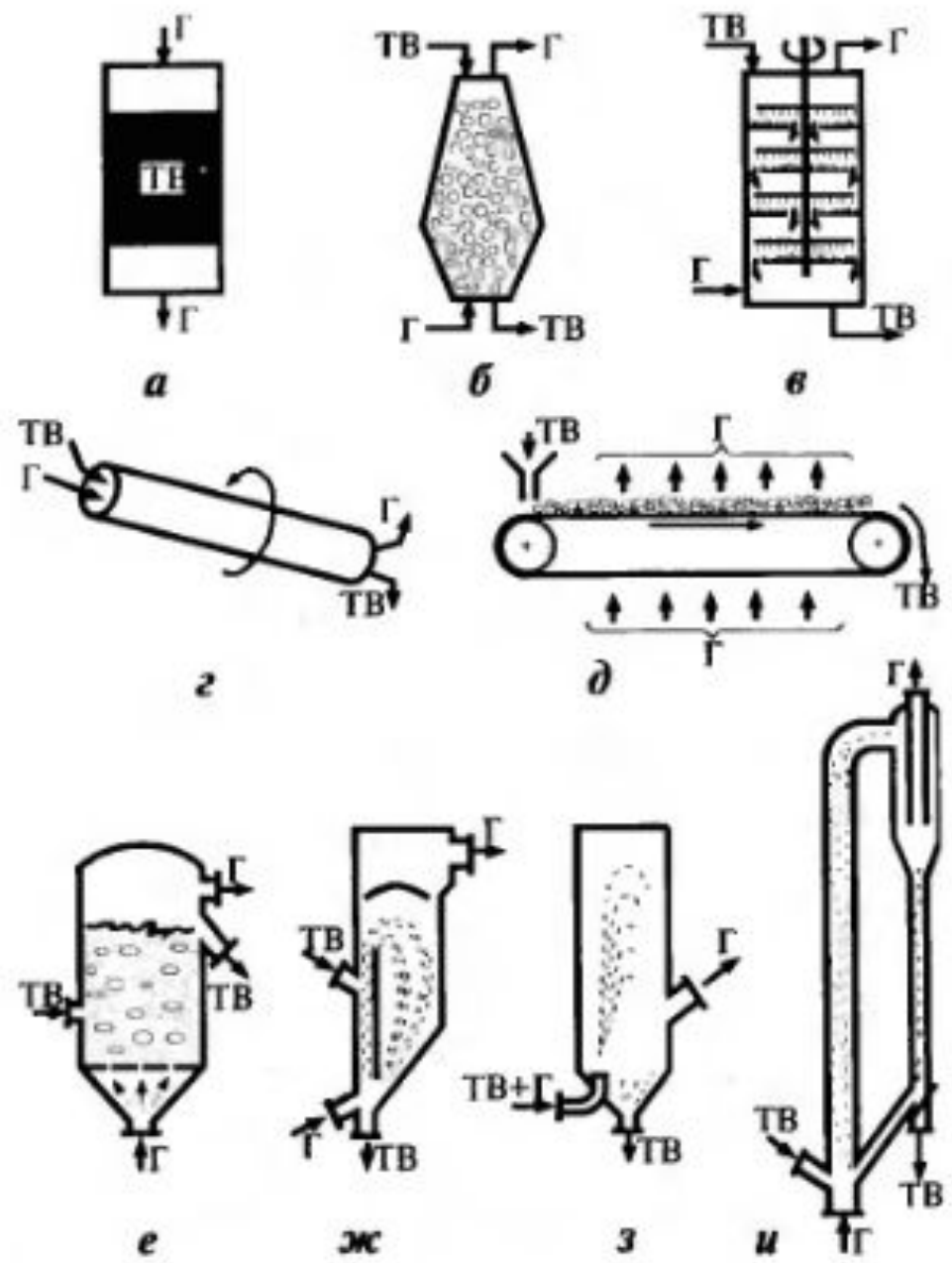


Рис. 2.79. Схемы реакторов для гетерогенных процессов с твердой фазой. Пояснение в тексте

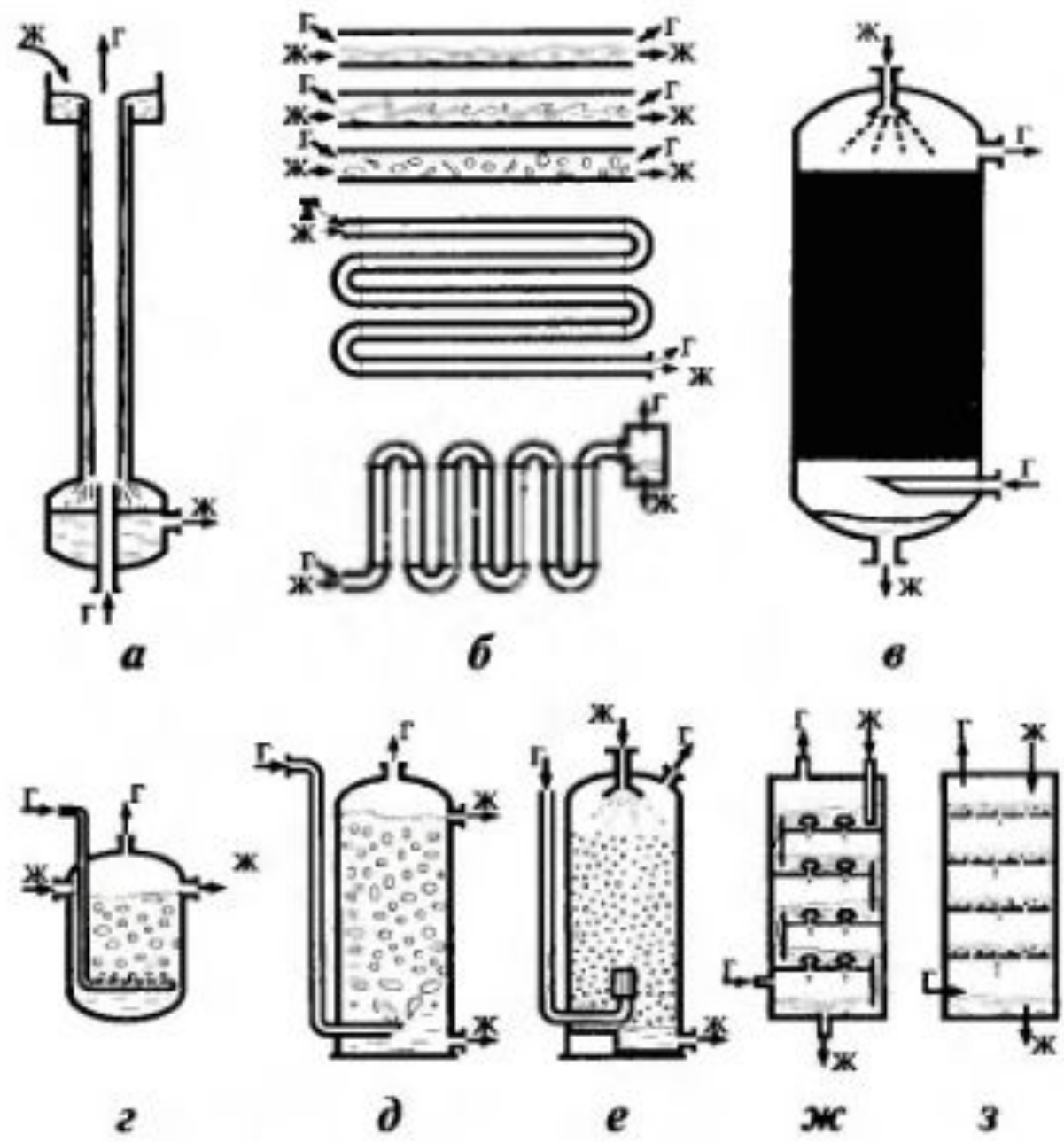


Рис. 281. Схемы реакторов для газожидкостных процессов (г – газ, ж – жидкость). Пояснение в тексте

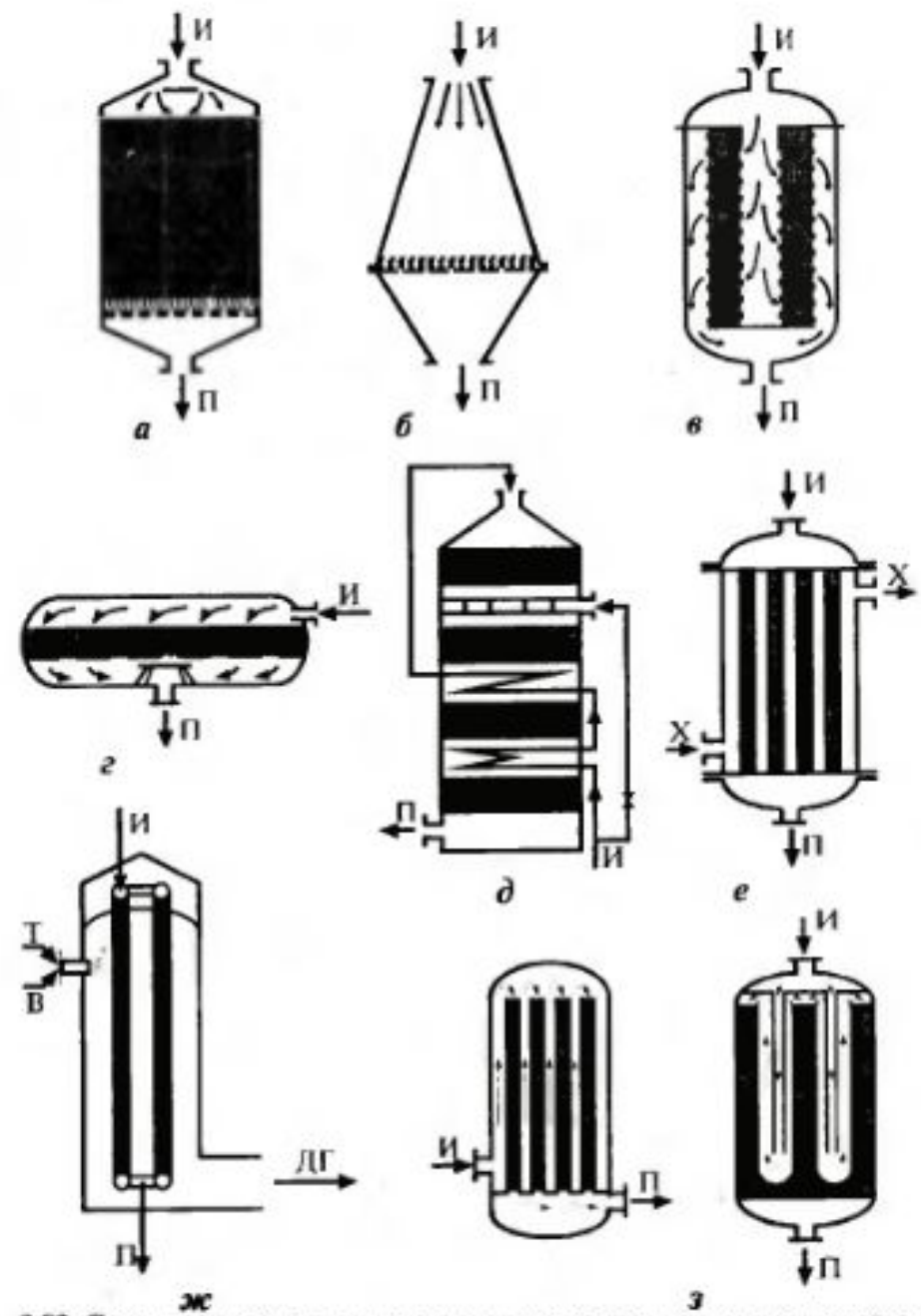


Рис. 2.82. Схемы реакторов для гетерогенно-каталитических процессов с неподвижным слоем катализатора (И - исходные вещества, П - продукты, Х - теплоноситель, Т - топливо, В - воздух, ДГ - дымовые газы). Пояснение в тексте

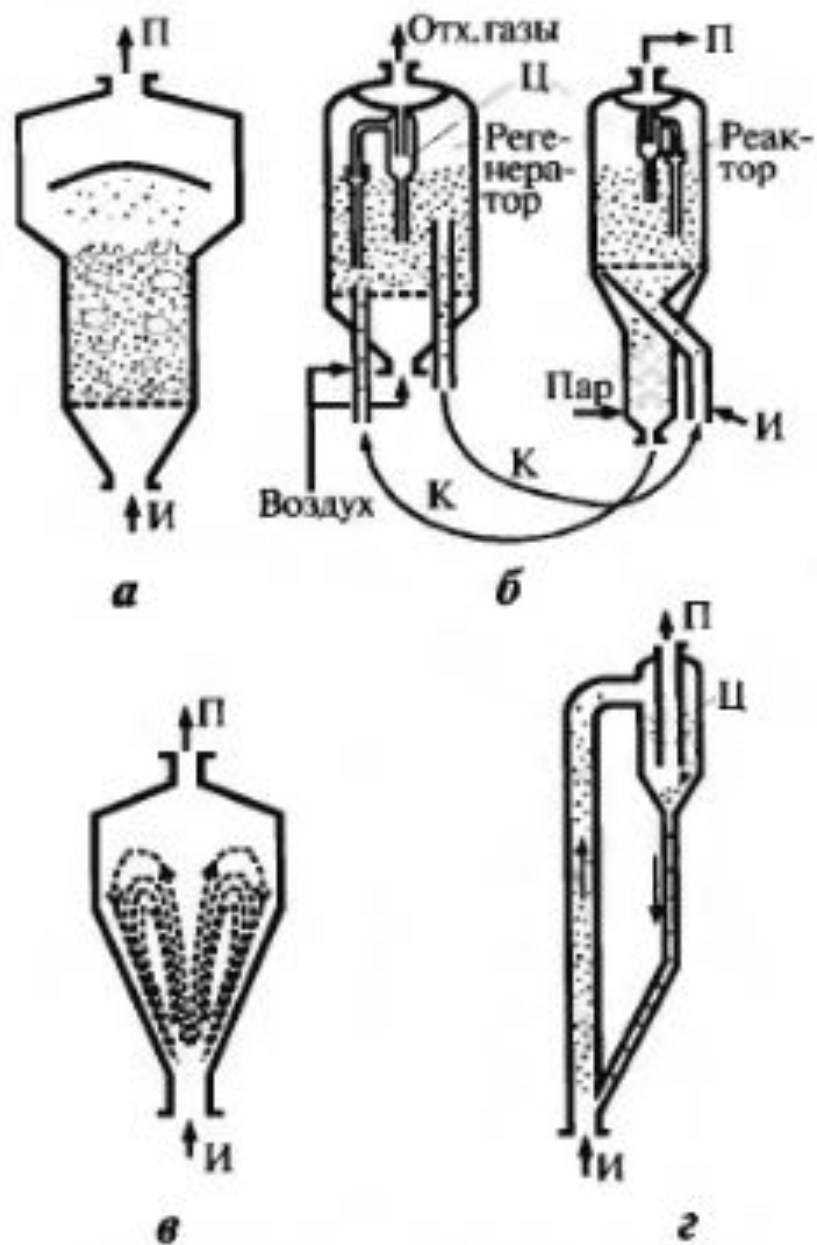
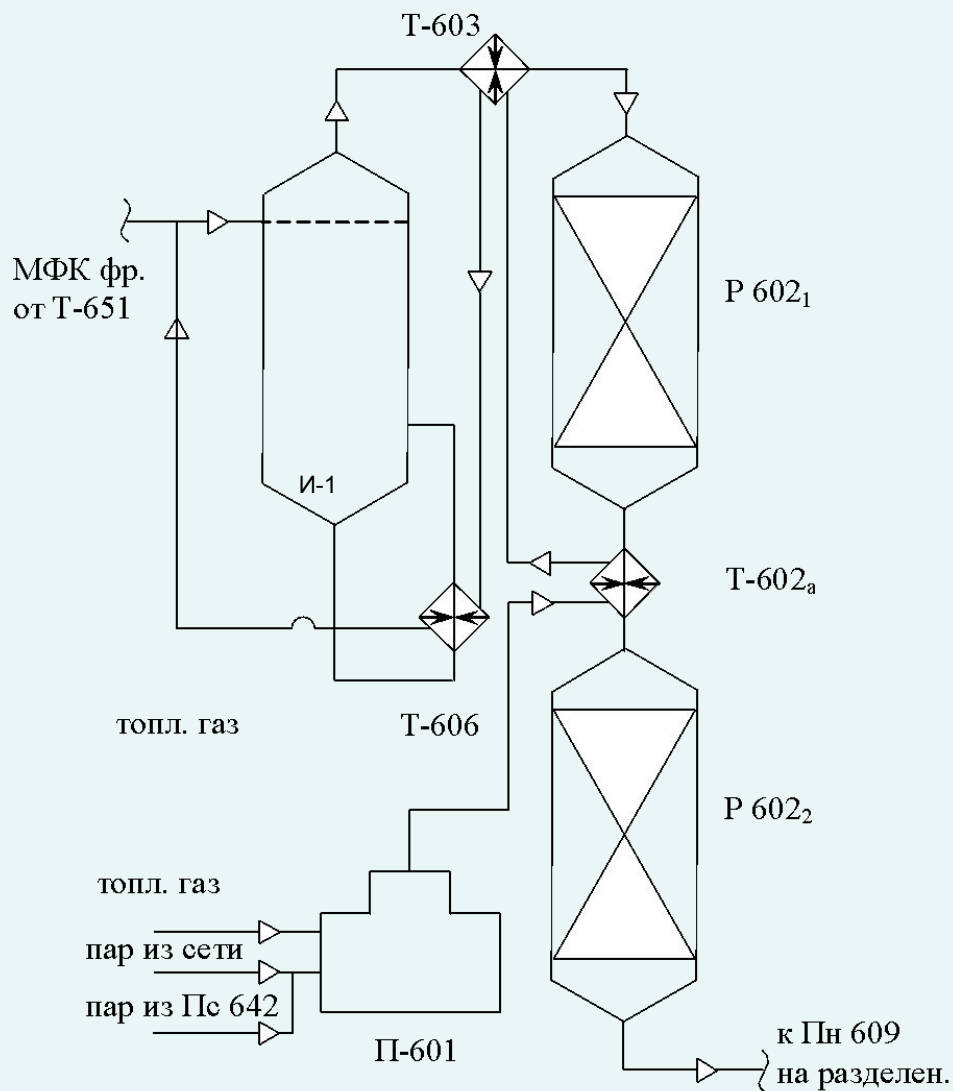


Рис. 2.84. Схемы реакторов для гетерогенно-каталитических процессов со взвешенным слоем катализатора (И – исходные вещества, П – продукты, Ц – циклон)

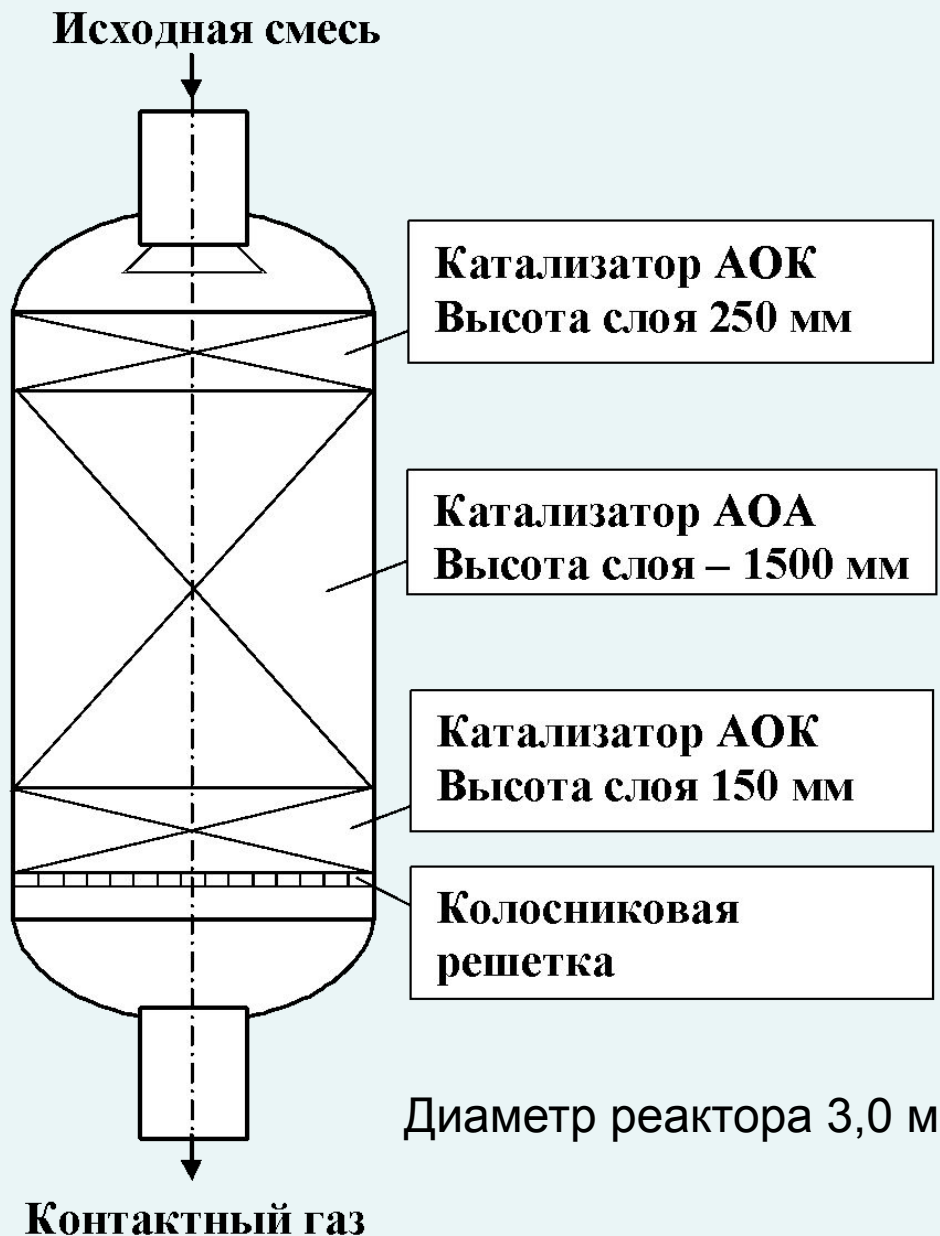
**Действующая схема реакционного узла
газофазной дегидратации 1-ФЭТ
два последовательно расположенных
реактора с промежуточным теплообменником**

**Условия проведения
реакции дегидратации
1-фенилэтанола в
промышленных условиях**



Фазовое состояние реакционного потока	Паро-газовая смесь
Тип реактора	Адиабатический вытеснения с неподвижным слоем катализатора
Катализатор	Активный оксид алюминия
Температура, °С	250 ÷ 320
Рабочее давление, атм	не более 1,6
Разбавление сырья	Водой до 10 моль на 1 моль 1-ФЭТ

Схема загрузки катализаторов в промышленный реактор газофазной дегидратации 1-ФЭТ



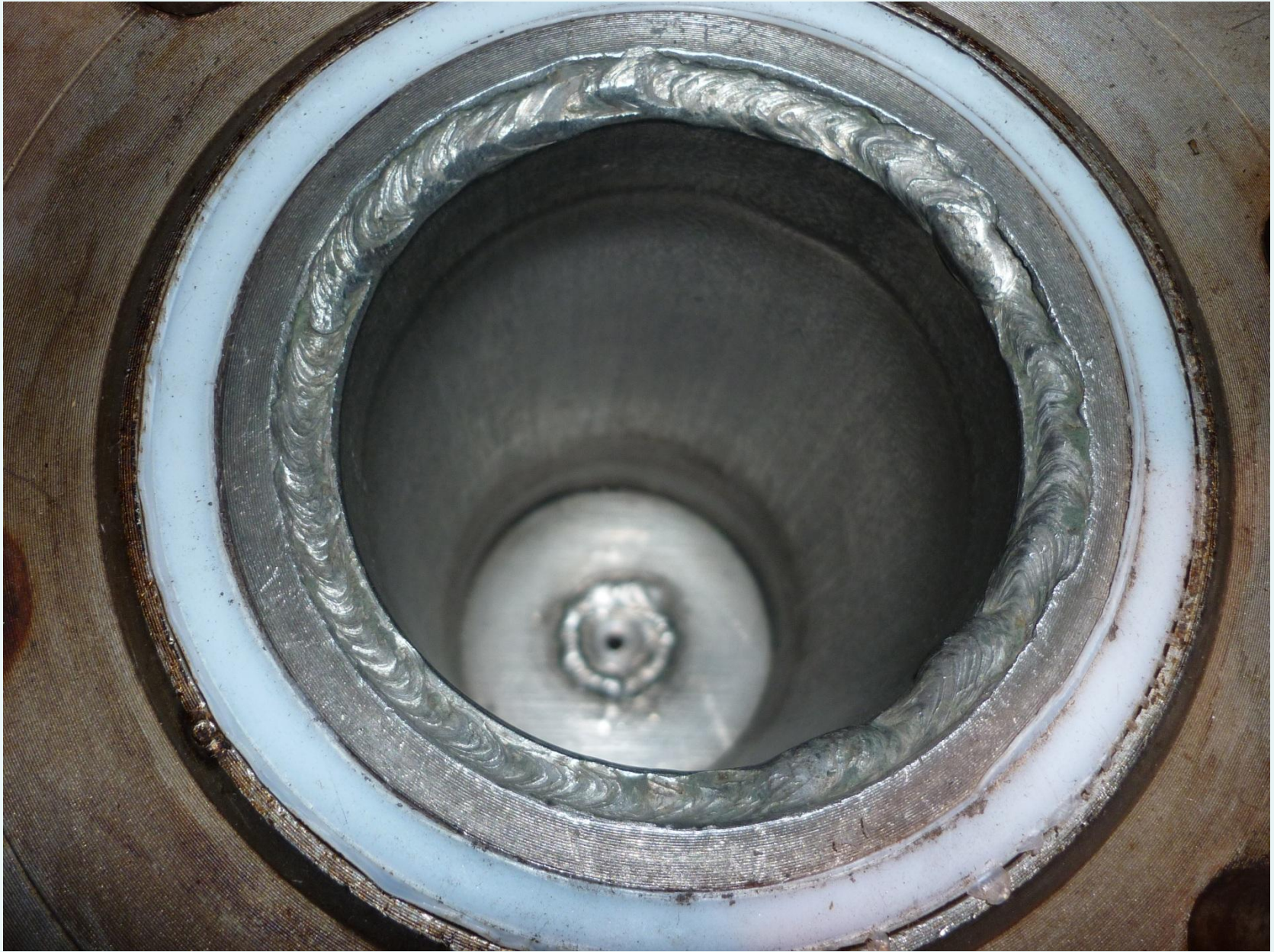
катализатор марки АОА
ГОСТ 8136-85; ОАО «Азот»
г. Днепродзержинск, Украина



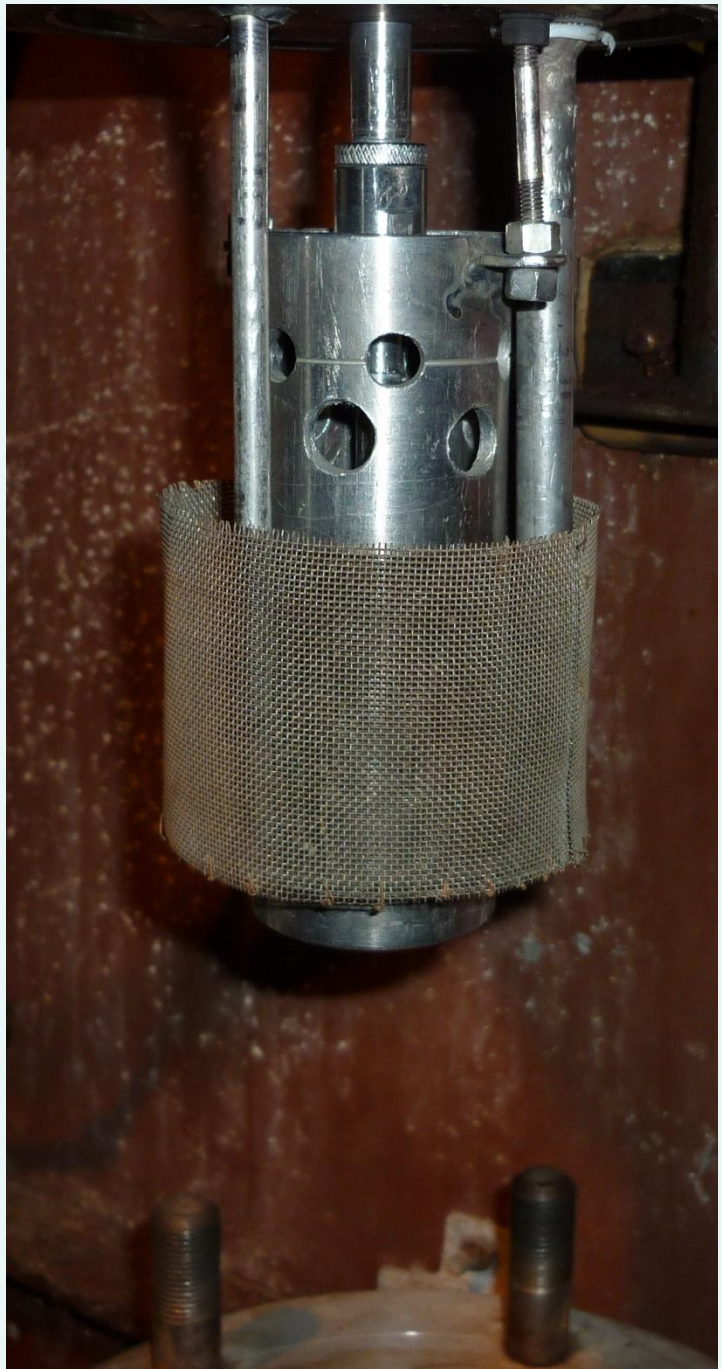
катализатор марки АОК
ТУ 6-68-146-02; АО «Катализатор»,
г. Новосибирск, Россия













Реактор характеризуется набором *габаритных* и *технологических* параметров.

Габаритные параметры – это объем, диаметр, высота реактора, число трубок, тарелок и т.п.

Технологические параметры – это концентрация, температура, скорость потока реагентов (параметры входа) и продуктов (параметры выхода), а также параметры тепло- и хладоагентов.

стационарный (установившийся) и нестационарный

При стационарном режиме в любой точке реактора **во времени** не происходит изменения концентрации и температуры

$$\frac{dC_i}{d\tau} = 0, \quad \frac{dT}{d\tau} = 0$$

При *нестационарном режиме* концентрация и температура в любой точке реактора меняются во времени:

$$\frac{dC_i}{d\tau} \neq 0, \quad \frac{dT}{d\tau} \neq 0$$

Стационарный режим реализуется в реакторах непрерывного действия. Нестационарный в периодических реакторах, и в непрерывных реакторах во время пуска или остановки реактора.

Математическая модель химического реактора включает два уравнения:

- уравнение материального баланса
- уравнение теплового баланса

В общем виде уравнение материального баланса применительно к реагенту можно представить в виде:

количество вещества, поступающего на вход в реактор в единицу времени – расход вещества в единицу времени (на химическую реакцию, а также выходящего из реактора) = накопление (убыль) вещества в реакторе в единицу времени

По аналогии уравнение теплового баланса в общем виде:

приход тепла в реактор в единицу времени – расход тепла в единицу времени = накопление (убыль) тепла в реакторе в единицу времени

Для реактора, работающего в стационарном режиме, когда концентрация и температура во времени не меняются, правая часть обоих уравнений равна 0.