

Основой для расчета реакторов с учетом теплового режима служит уравнение теплового баланса, составленное обычно на единицу времени. В общем виде это уравнение может быть записано следующим образом:

$$Q_{\text{пр}} = Q_{\text{расх}} \quad (1)$$

Для экзотермической реакции приход и расход тепла:

$$Q_{\text{пр}} = Q_{\text{реаг}} + Q_{\text{х.р}} \quad (2)$$

$$Q_{\text{расх}} = Q_{\text{нак}} + Q_{\text{прод}} + Q_{\text{T}} \quad (3)$$

где $Q_{\text{реаг}}$ - количество тепла, вносимого исходными реагентами; $Q_{\text{х.р}}$ - количество тепла, выделяющегося при химической реакции; $Q_{\text{нак}}$ - количество тепла, накапливающегося в реакторе; $Q_{\text{прод}}$ - количество тепла, уносимого продуктами; Q_{T} - количество тепла, выводимого в результате теплообмена

Подставив значения $Q_{\text{пр}}$ и $Q_{\text{расх}}$ в уравнение (1), находим

$$Q_{\text{нак}} = - (Q_{\text{прод}} - Q_{\text{реаг}}) - Q_{\text{T}} + Q_{\text{x.p}} \quad (4)$$

где $Q_{\text{прод}} - Q_{\text{реаг}} = Q_{\text{конв}}$

Здесь $Q_{\text{конв}}$ - обозначает количество тепла, выносимого конвективным потоком, с учетом которого получим

$$Q_{\text{нак}} = - Q_{\text{конв}} - Q_{\text{T}} + Q_{\text{x.p}} \quad (5)$$

Полученное уравнение теплового баланса (5) может принимать различную форму в зависимости от типа реактора и теплового режима процесса.

В общем случае температура и другие параметры процесса изменяются как в объеме реактора, так и во времени, поэтому уравнения теплового баланса составляют в дифференциальной форме (подобно тому, как это было принято при составлении уравнения материального баланса). Для этой цели используют дифференциальное уравнение конвективного теплообмена

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial \tau} = -\rho C_p \left(w_x \frac{\partial T}{\partial x} + w_y \frac{\partial T}{\partial y} + w_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \quad (6)$$

где ρ, C_p – плотность и удельная теплоемкость реакционной смеси; x, y, z – пространственные координаты; w_x, w_y, w_z – составляющие скорости движения потока в направлении осей; λ – коэффициент теплопроводности реакционной смеси.

Общее решение уравнения (6) затруднительно, поэтому в зависимости от характера реакции, теплового режима и режима движения реакционной среды, т. е. от гидродинамической обстановки в реакторе, в уравнение (6) вводят соответствующие упрощения. Это позволяет найти решение соответствующей задачи с достаточной для практических целей точностью. Введем такие упрощения для различных реакторов при разных режимах их работы: адиабатическом, изотермическом и политропическом.

При изотермическом режиме путем подвода или отвода тепла в реакторе поддерживают постоянную температуру в течение всего процесса.

Адиабатический и изотермический режимы представляют собой предельные идеальные случаи, которые на практике почти не наблюдаются. Однако режим многих реакторов в производственных условиях приближается к этим крайним моделям, поэтому с достаточной для практических целей точностью эти реакторы могут быть рассчитаны по уравнениям, полученным для адиабатического и изотермического режимов

Изотермические реакции проводят на практике только в непрерывных реакторах, так как для поддержания постоянной температуры в реакторе периодического действия отвод тепла должен изменяться во времени, что в промышленных условиях осуществить трудно. В связи с этим изотермические реакторы периодического действия на практике не применяются и здесь не рассматриваются. В изотермических реакторах путем подвода или отвода тепла поддерживается постоянная температура в течение всего процесса.

В тех случаях, когда температура реакционной смеси на входе в реакторы равна температуре на выходе из него (т.е. $T = T_0$), для РИВ и РИС-Н можно записать:

$$C'_p dT = 0 \text{ и } C'_p (T - T_0) = 0$$

С учетом этих значений уравнения тепловых балансов реакторов примут вид:

- для РИВ
$$\Delta H dX_A = \frac{F'K\Delta T dl}{B_{A,0}}$$

- для РИС-Н
$$\Delta H X_A = \frac{FK\Delta T}{B_{A,0}}$$

где $F_{уд}$ - удельная поверхность теплообмена; K - коэффициент теплопередачи; $\Delta T = T - T_{хл}$; T , $T_{хл}$ - температура реакционной смеси и хладогента; ΔH - тепловой эффект реакции