

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
**«Санкт-Петербургский государственный университет
промышленных технологий и дизайна»**
Высшая школа технологии и энергетики
Кафедра органической химии

МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ

Выполнение практических заданий

Методические указания для студентов очной формы обучения
по направлению подготовки
18.04.01 — Химическая технология

Составители:
А. В. Курзин
А. Н. Евдокимов

Санкт-Петербург
2022

Утверждено
на заседании кафедры ОХ
17.03.2022 г., протокол № 5

Рецензент А. А. Таразанов

Методические указания соответствуют программе и учебному плану дисциплины «Методы оптимизации» для студентов, обучающихся по направлению подготовки 18.04.01 «Химическая технология».

Указания предназначены для магистров очной формы обучения при выполнении практических заданий и для подготовки к зачету.

Утверждено Редакционно-издательским советом ВШТЭ СПбГУПТД в качестве методических указаний

Режим доступа: http://publish.sutd.ru/tp_get_file.php?id=202016, по паролю.
- Загл. с экрана.

Дата подписания к использованию 27.09.2022 г. Изд. № 5013/22

Высшая школа технологии и энергетики СПб ГУПТД
198095, СПб., ул. Ивана Черных, 4.

© ВШТЭ СПбГУПТД, 2022

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
1. ИЗОТЕРМИЧЕСКИЕ РЕАКТОРЫ	6
1.1. Примеры решений.....	6
1.2. Задания для самостоятельного решения.....	8
2. НЕИЗОТЕРМИЧЕСКИЕ РЕАКТОРЫ	15
2.1. Примеры решений.....	15
2.2. Задания для самостоятельного решения.....	17
3. РАСЧЕТ ОПТИМАЛЬНОГО РЕЖИМА ДЛЯ ИДЕАЛЬНЫХ ИЗОТЕРМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ.....	27
3.1. Примеры решений.....	27
3.2. Задания для самостоятельного решения.....	29
4. ОПТИМИЗАЦИЯ РЕАКТОРНОГО УЗЛА ПО ЭКОНОМИЧЕСКИМ КРИТЕРИЯМ	36
4.1. Примеры решений.....	36
4.2. Задания для самостоятельного решения.....	49
5. ОПТИМИЗАЦИЯ РАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ.....	69
5.1. Примеры решений.....	69
5.2. Задания для самостоятельного решения.....	72
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК	77

Введение

Данные методические указания являются практическим пособием к курсу «Методы оптимизации», составленным на базе опыта преподавания этой дисциплины на кафедре органической химии ВШТЭ СПбГУПТД.

Современное химическое производство представляет собой сложную хи-мико-технологическую систему (ХТС), состоящую из большого количества аппаратов и технологических связей между ними. Следовательно, разработка и эксплуатация производства требуют знания как общего подхода к проблеме, так и большого количества вопросов, непосредственно связанных с ХТС.

При разработке новой ХТС или модернизации существующей, основная задача заключается в создании высокоэффективного химического производства, т. е. такого объекта химической промышленности, который позволит получать продукцию заданного качества в требуемом объеме наиболее экономически целесообразным путем. При эксплуатации существующей ХТС необходимо таким образом управлять производством, чтобы при высокой производительности и низких капитальных и текущих затратах обеспечить получение продукта требуемого качества. Кроме того, при эксплуатации ХТС необходимо не только понимать принципы организации и функционирования производства, заложенные в технологическую схему при ее проектировании, но и учитывать колебания на рынке сырья и продукции, изменение параметров сырья, требований к конечной продукции, а также непрерывное изменение параметров работы оборудования вследствие непрерывного расходования его ресурсов, возможных аварий, пусков, остановок и т. д. Это приводит к тому, что работодатели начинают предъявлять повышенные требования к качеству инженерной подготовки технологических кадров, которые в будущем будут управлять производством и проводить его реконструкцию.

Одной из характерных черт начала третьего тысячелетия являются интеграционные процессы в мировой экономике и одновременно устойчивые тенденции роста цен на энергетические, материальные и другие природные ресурсы, необходимые для различных производственных процессов. Для химической, нефтеперерабатывающей, нефтехимической, газоперерабатывающей и многих других смежных отраслей промышленности задача снижения затрат на получение требуемых продуктов является первостепенной. Важнейшим условием успеха при этом является выбор, эксплуатация и при необходимости создание высокоэффективных энерго- и ресурсосберегающих технологий химических процессов.

В связи этим возрастает значение подготовки квалифицированных специалистов, способных применять теоретические знания при разработке, проектировании новых химико-технологических процессов органического синтеза и управлении ими. Основой управления и оптимизации химико-технологических процессов органического синтеза является знание термодинамических и кинетических закономерностей, механизмов химических реакций при использовании различных инициаторов и катализаторов, теории химических реакторов.

Методические указания предназначены для углубленного изучения вопросов управления химико-технологическими процессами синтеза веществ. Их цель — дать студентам представления об основных принципах и методах анализа, моделирования и оптимизации технологических схем производства органических веществ, с учетом взаимодействия между аппаратами при существующих технологических и аппаратурных ограничениях, требованиях по производительности и качеству продукции и т. п.; научить студентов использовать теоретические знания о технологическом процессе для его управления и оптимизации. Основное внимание уделено рассмотрению влияния управляющих параметров, таких как концентрация исходных веществ, давление, температура, тип реакционного аппарата на наиболее важные показатели химико-технологического процесса: удельную производительность, степень конверсии, выход, селективность.

Все задачи разбиты на пять разделов — расчет идеальных изотермических реакторов; расчет неизотермических реакторов; расчет оптимального с точки зрения селективности или иного критерия режима работы реактора; определение оптимального, с точки зрения выбранного экономического критерия, условия проведения процесса; оптимизация равновесных процессов. В начале каждого раздела приведены решения нескольких примеров, затем следуют задачи для самостоятельной работы.

При составлении методических указаний учитывалось, что студенты знакомы с основными математическими методами оптимизации ХТС, теоретическими основами технологических процессов органического синтеза и основами расчета и проектирования химических реакторов, изложенными в общедоступных учебниках и пособиях.

Методические указания рекомендуется использовать в процессе занятий, для подготовки к контрольным работам, зачетам и экзаменам.

1. Изотермические реакторы

1.1. Примеры решений

Задача 1.1. Газофазная реакция $A \longrightarrow B + Z$ протекает в периодическом реакторе в изотермическом режиме (300 К) и при постоянном давлении (5 атм). Начальный объем реакционной смеси $0,5 \text{ м}^3$, константа скорости $k = 1 \cdot 10^{14} e^{(-10000/T)} \text{ ч}^{-1}$. Начальные концентрации В и Z равны нулю. Теплота реакции $Q_A - 6280 \text{ кДж/кмоль}$.

Рассчитать зависимость степени конверсии от времени и определить зависимость количества подводимого тепла от времени, необходимого для поддержания условия изотермичности.

Решение. Обозначим текущее количество молей вещества A через N_A и запишем характеристическое уравнение для периодического реактора, учитывая, что $[A] = N_A/V$ (где V — объем реактора):

$$-\frac{dN_A}{V \cdot dt} = r_A = k[A] = \frac{kN_A}{V}.$$

При проведении реакции в изотермическом режиме константа скорости реакции постоянна и равна по условию задачи для 300 К $0,334 \text{ ч}^{-1}$. Интегрирование полученного дифференциального уравнения по времени дает следующее выражение:

$$N_A = N_{A,0} e^{(-0,334\tau)},$$

откуда, учитывая, что $N_A = N_{A0}(1 - X_A)$, получаем зависимость степени конверсии от времени:

$$X_A = 1 - e^{(-0,334\tau)}.$$

Количество тепла, поглощаемое в результате реакции, равно:

$$Q = Q_A N_{A0} X_A = Q_A N_{A0} (1 - e^{(-0,334\tau)}).$$

Следовательно, ровно столько же тепла необходимо подводить для поддержания постоянной температуры в реакторе. Количество молей вещества A в начале реакции находим по уравнению идеального газа:

$$N_{A0} = \frac{PV_{A0}}{RT} = \frac{5 \cdot 1,013 \cdot 10^5 \cdot 5}{8,31 \cdot 300} = 1015,8 \text{ моль}.$$

Следовательно, искомая зависимость количества подводимого тепла от времени выглядит так:

$$Q = 6280 \cdot 1015,8 (1 - e^{(-0,334\tau)}) = 6379,2 (1 - e^{(-0,334\tau)}) \text{ кДж}.$$

Задача 1.2. В проточном реакторе идеального вытеснения проводят газофазную реакцию $A \longrightarrow B$ при постоянной температуре 60°C и давлении $4,75$ атм.

На вход в реактор подается смесь компонента А и инертного компонента в мольном соотношении 1:1 со скоростью 4000 кг/ч. Молекулярные массы А и инертного компонента равны соответственно $M_A = 40$ и $F_{In} = 20$. Константа скорости 2000 ч^{-1} .

Определить размер реактора для достижения степени конверсии вещества А $0,35$.

Решение. Запишем характеристическое уравнение для проточного реактора идеального вытеснения:

$$-dF_A = r_A dV,$$

где F_A — мольный поток вещества А; r_A — скорость расхода вещества А.

В соответствии с размерностью константы скорости реакция подчиняется кинетическому уравнению первого порядка:

$$r_A = kC_A = kC_{A,0}(1 - X_A).$$

Подставив выражение для скорости реакции в характеристическое уравнение и учитывая, что $F_A = F_{A,0} \cdot (1 - X_A)$, после разделения переменных получим:

$$\frac{V}{F_{A,0}} = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{kC_{A,0}(1 - X_A)}.$$

Интегрирование правой части данного уравнения приводит к следующему выражению для объема реактора:

$$V = \frac{F_{A,0}}{(kC_{A,0})(-\ln(1 - X_A))},$$

откуда с учетом равенства $F_{A,0} = W_0 \cdot c_{A,0}$ (где W_0 — объемная скорость подачи реагентов на входе в реактор) получаем уравнение для расчета объема реактора:

$$V = \frac{W_0}{k \cdot (-\ln(1 - X_A))}. \quad (1)$$

Используя уравнение идеального газа, объемную скорость на входе в реактор можно выразить через мольные потоки компонентов на входе в реактор:

$$W_0 = \frac{(F_{A,0} + F_{In,0})RT}{P},$$

где $F_{In,0}$ — мольный поток инертного компонента.

Для вычисления значений $F_{A,0}$ и $F_{In,0}$ запишем выражение для массовой скорости подачи реагентов G :

$$G = F_{A,0}M_A + F_{In,0}M_{In} = 4000 \text{ кг/ч.}$$

Так как по условию задачи $F_{A,0} = F_{In,0}$, то из полученного уравнения вычисляем:

$$F_{A,0} = F_{In,0} = 66,7 \text{ кмоль/ч.}$$

Следовательно, объемная скорость составит:

$$W_0 = \frac{(F_{A,0} + F_{In,0})8,31 \cdot 333}{4,75 \cdot 1,013 \cdot 10^5} = 767,2 \text{ м}^3/\text{ч.}$$

Подставляя полученное значение W_0 в уравнение (1), рассчитаем искомый объем реактора:

$$V = \frac{767,2}{2000}(-\ln 0,65) = 0,072 \text{ м}^3/\text{ч.}$$

1.2. Задания для самостоятельного решения

Задача 1.3. Обратимую реакцию $A \rightleftharpoons R$ проводят в периодическом реакторе при постоянной температуре. Константы прямой и обратной реакции составляют, 1/с: $k_1 = 7 \cdot e^{(-5036/T)}$ и $k_{-1} = 5000 \cdot e^{(-10072/T)}$.

Плотность жидкой реакционной массы составляет 1000 кг/м^3 . Теплоемкость $4,187 \text{ кДж/(кг} \cdot \text{К)}$; Начальная мольная доля вещества А в смеси 0,5. Молекулярные массы А и инертного растворителя соответственно 100 и 20. Начальная концентрация продукта равна нулю. Максимально допустимая температура реакции 800 К.

Для степени конверсии 0,8 определить оптимальную температуру. Критерий оптимальности — минимальное время реакции.

Задача 1.4. В проточном реакторе идеального вытеснения (сечение трубки $2 \cdot 10^{-3} \text{ м}^2$) проводят последовательную реакцию: $A \longrightarrow B \longrightarrow C$.

На вход в реактор подают чистый реагент А с начальной концентрацией $C_{A,0} = 0,05 \text{ кмоль/м}^3$; объемная скорость подачи $0,15 \text{ м}^3/\text{ч}$, константа скорости первой стадии $k_1 = 172,5 \text{ ч}^{-1}$; соотношение констант второй и первой стадии $k_2/k_1 = 0,5$.

Рассчитать длину трубки реактора, обеспечивающую максимальный выход вещества В. Вычислить концентрации на выходе из реактора А, В и С.

Задача 1.5. В проточном реакторе полного смешения проводят последовательную реакцию $A \longrightarrow B \longrightarrow C$.

На вход в реактор подают чистый реагент А с начальной концентрацией $C_{A,0} = 0,05$ кмоль/м³; объемная скорость подачи 0,15 м³/ч, константа скорости первой стадии $k_1 = 172,5$ ч⁻¹; соотношение констант скорости второй и первой стадии $k_2/k_1 = 0,5$.

Рассчитать объем реактора, необходимый для получения максимального выхода вещества В. Вычислить концентрации на выходе из реактора веществ А, В и С.

Задача 1.6. В проточном реакторе полного смешения объемом 490 мл протекает жидкофазная реакция $4\text{NH}_3 + 6\text{HCHO} \longrightarrow (\text{CH}_2)_6\text{N}_4 + 6\text{H}_2\text{O}$.

Скорость реакции описывается следующим уравнением:

$$r = 1,42 \cdot 10^3 e^{(-3090/T)} [\text{NH}_3][\text{HCHO}]^2 \quad \text{моль/(л} \cdot \text{с)}.$$

Реагенты подаются отдельно со скоростями 1,5 мл/с; концентрация аммиака в питании — 4,06 моль/л, а формальдегида — 6,32 моль/л. Температура в реакторе 36 °С.

Рассчитать концентрации веществ в реакторе.

Задача 1.7. В проточном реакторе полного смешения объемом 10 м³ при постоянной температуре проводят гидрирование олефинов. Скорость подачи реакционной массы 0,2 м³/с. Начальная концентрация двойных связей $C_{A,0} 13$ кмоль/м³. Скорость процесса подчиняется уравнению:

$$r_A = \frac{[A]}{(1 + [A]^2)} \quad \text{кмоль/(м}^3 \cdot \text{с)}.$$

Возможно ли при данных условиях существование нескольких стационарных состояний? Если да, то как необходимо изменить начальную концентрацию двойных связей, чтобы избежать этого?

Задача 1.8. Обратимую реакцию: $A \rightleftharpoons R + S$ проводят в проточном трубчатом реакторе диаметром 0,05 м при 275 °С и давлении $P = 3$ атм. Кинетическое уравнение реакции выглядит так:

$$r = \frac{k \cdot K_A \left(P_A - \frac{P_R \cdot P_S}{K} \right)}{(1 + K_A \cdot P_A + K_R \cdot P_R + K_S \cdot P_S)^2}.$$

Значения констант: $k = 4,3593$ кмоль/(кг_{КАТ}·ч), $K = 0,589$ атм, $K_A = 0,43039$ 1/атм, $K_R + K_S = 2,8951$ 1/атм.

В исходной смеси содержится вода (инертный компонент) в мольном соотношении к реагенту А 0,155:1. Общий начальный поток 4,2 кмоль/ч, насыпной вес катализатора 1500 кг/м³. Рассчитать длину трубки реактора для достижения степени конверсии 0,4.

Задача 1.9. Обратимую реакцию: $A \rightleftharpoons R + S$ проводят в проточном трубчатом реакторе диаметром 0,05 м при 275 °С и давлении $P = 3$ атм. Кинетическое уравнение реакции выглядит так:

$$r = \frac{k \cdot K_A (P_A - (P_R \cdot P_S / K))}{(1 + K_A \cdot P_A + K_R \cdot P_R + K_S \cdot P_S)^2}.$$

Значения констант: $k = 4,3593$ кмоль/(кг_{КАТ}·ч), $K = 0,589$ атм, $K_A = 0,43039$ 1/атм, $K_R + K_S = 2,8951$ 1/атм.

В исходной смеси содержится вода (инертный компонент) в мольном соотношении к реагенту А 0,165:1. Общий начальный поток 4,4 кмоль/ч, насыпной вес катализатора 1500 кг/м³. Рассчитать длину трубки реактора для достижения степени конверсии 0,7.

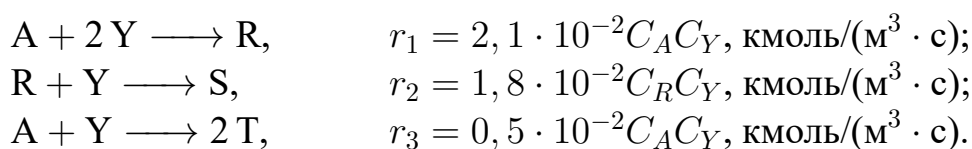
Задача 1.10. В кожухотрубчатом реакторе (диаметр трубок 0,05 м, длина одной трубки 3 м) при 275 °С и давлении $P = 3$ атм проводят обратимую реакцию: $A \rightleftharpoons R + S$. Кинетическое уравнение реакции выглядит так:

$$r = k \cdot \frac{K_A (P_A - (P_R \cdot P_S / K))}{(1 + K_A \cdot P_A + K_R \cdot P_R + K_S \cdot P_S)^2}.$$

Значения констант: $k = 4,3593$ кмоль/(кг_{КАТ}·ч), $K = 0,589$ атм, $K_A = 0,43039$ 1/атм, $K_R + K_S = 2,8951$ 1/атм.

В исходной смеси содержится вода (инертный компонент) в мольном соотношении к реагенту А 0,155:1. Общий начальный поток 4,2 кмоль/ч, насыпной вес катализатора 1500 кг/м³. Рассчитать количество труб, необходимое для получения 20000 тонн/год продукта R, если установка работает 8000 ч/год, а молекулярная масса R 44 кг/кмоль.

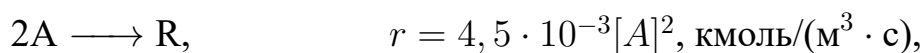
Задача 1.11. В проточном реакторе полного смешения идут реакции:



Концентрации веществ на входе в реактор: $C_{A,0}$ 2 кмоль/м³; $C_{Y,0}$ 2,3 кмоль/м³. Скорость подачи веществ на входе в реактор 0,05 м³/с.

Вычислить производительность реактора по продукту R (F_R/V_p , где V_p — объем реактора) и концентрацию вещества Y на выходе из реактора, если концентрация T на выходе из реактора составляет 0,2 кмоль/м³.

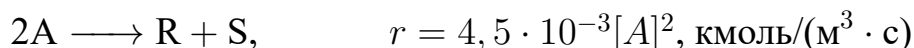
Задача 1.12. Реакцию



проводят в каскаде из трех проточных реакторов полного смешения. Объемы реакторов составляют 1,0, 1,5 и 1,8 м³. Скорость подачи исходного вещества $8 \cdot 10^{-3}$ м³/с. Начальная концентрация A 2,2 кмоль/м³.

Составить оптимальную с точки зрения производительности по продукту R последовательную схему из этих реакторов.

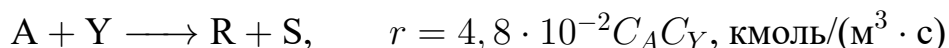
Задача 1.13. Реакцию



проводят в каскаде из трех проточных реакторов полного смешения. Объемы реакторов составляют 1, 1,5 и 2 м³. Скорость подачи исходного вещества $8 \cdot 10^{-3}$ м³/с. Начальная концентрация A 2,5 кмоль/м³.

Составить оптимальную с точки зрения производительности по продукту S последовательную схему из этих реакторов.

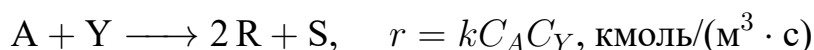
Задача 1.14. Реакцию



проводят в каскаде из двух реакторов. Один из них — проточный реактор полного смешения, имеющий объем $V_{p1} = 0,8$ м³; а второй — проточный реактор идеального вытеснения с объемом $V_{p2} = 0,2$ м³. Начальные концентрации веществ A и Y равны между собой и составляют 0,07 кмоль/м³. Концентрация вещества A на выходе из системы реакторов равна 0,005 кмоль/м³.

Определить производительность системы по сырью ($F_A + F_Y$) для разных вариантов последовательного соединения реакторов.

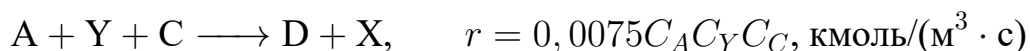
Задача 1.15. При проведении реакции:



в периодическом реакторе за 240 с достигается степень конверсии $X_A = 0,2$. При этом начальные концентрации составляют $C_{A,0} = C_{Y,0} = 1,2$ кмоль/м³.

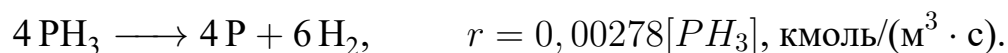
Вычислить объемы проточного реактора полного смешения и проточного реактора идеального вытеснения, необходимые для обеспечения производительности по продукту R 0,004 кмоль/с при степени превращения $X_A = 0,4$ и начальных концентрациях реагентов, кмоль/м³, $C_{A,0} = 0,8$ и $C_{Y,0} = 0,53$.

Задача 1.16. Для реакции:



определить необходимые объемы проточного реактора полного смешения и проточного реактора идеального вытеснения для достижения степени конверсии $X_A = 0,75$, если скорость подачи реагентов равна 0,002 м³/с, а начальные концентрации — $C_{A,0} = 1,5$ кмоль/м³, $C_{Y,0} = C_{C,0} = 3$ кмоль/м³.

Задача 1.17. В проточном реакторе идеального вытеснения проводят разложение фосфина:



Условия в реакторе: температура 648,9 °С, давление 0,36 МПа, инертные примеси в реакционной смеси — 12 об. %. Степень конверсии фосфина 0,85.

Какой объем должен иметь реактор при производительности по фосфину 0,00308 кмоль/с?

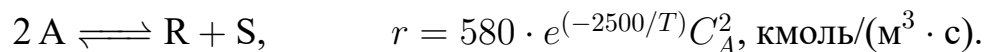
Задача 1.18. В периодическом реакторе при постоянном объеме протекает газофазная реакция:



Исходная смесь содержит 5 об. % В, 12 об. % инертной примеси, остальное А. Температура смеси 21 °С. Начальное давление 3,2 атм, через 5 мин — 3,62 атм.

Вычислить степень превращения и производительность по продукту при проведении процесса в проточном реакторе идеального вытеснения объемом $V_p = 1,8 \text{ м}^3$, при скорости подачи А 0,01 м³/с и тех же начальных условиях, что и в периодическом реакторе.

Задача 1.19. В проточном реакторе идеального вытеснения объемом 1 м³ проходит обратимая реакция:



Тепловой эффект реакции –38500 кДж/кмоль, изменение энергии Гиббса $\Delta G_{298} - 5620 \text{ кДж/кмоль}$, $[A]_0 = 0,202 \text{ кмоль/м}^3$, начальный мольный поток вещества А $F_{A,0} = 0,00672 \text{ кмоль/с}$.

Вычислить степень превращения при температуре в реакторе 15 °С, определить температуру, при которой достигается максимальная степень превращения.

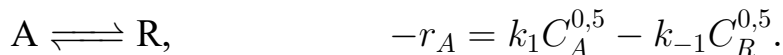
Задача 1.20. При проведении газофазной реакции:



в периодическом реакторе при 150 °С и времени реакции 278 с степень конверсии достигает $X_A = 0,27$, а при 200 °С и времени реакции 91 с степень конверсии $X_A = 0,445$.

Вычислить степень конверсии А в проточном реакторе идеального вытеснения при условных временах пребывания 1200, 900 и 600 с и температуре 170 °С.

Задача 1.21. В проточном реакторе полного смешения проводят обратимую эндотермическую реакцию:



Тепловой эффект реакции -30200 кДж/кмоль, а изменение энергии Гиббса ΔG_{298} 1080 кДж/кмоль. Теплоемкости веществ можно считать постоянными и независимыми от температуры. $k_1 = 4,15 \cdot 10^{12} e^{(-10000/T)}$, начальная концентрация $C_{A,0} = 0,0625$ кмоль/м³, время пребывания 100 с.

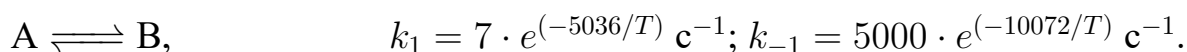
Определить температуру в реакторе, которую необходимо поддерживать, чтобы получить степень конверсии $0,2$, $0,4$ и $0,6$.

Задача 1.22. В периодическом реакторе при температуре 300 К и давлении 5 атм проводят эндотермическую газофазную реакцию $A \longrightarrow 2R$.

Начальный объем реакционной смеси $0,5$ м³. Константа скорости $k = 10^{14} e^{(-8000/T)}$ ч⁻¹, тепловой эффект реакции -6280 кДж/кмоль.

Рассчитать зависимость степени конверсии от времени и определить количество тепла, необходимое для поддержания заданной температуры.

Задача 1.23. В периодическом реакторе при постоянной температуре проводят обратимую реакцию:



Плотность реакционной массы 1000 кг/м³, теплоемкость реакционной массы $4,187$ кДж/(кг·К), начальная мольная доля вещества A в смеси с растворителем составляет $0,4$, молекулярные массы A и растворителя соответственно 100 и 20 . Максимально допустимая температура 800 К.

Для степени конверсии $0,8$ определить оптимальную температуру и время реакции. Вычислить также необходимую скорость теплообмена.

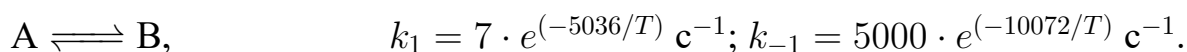
Задача 1.24. В периодическом реакторе при постоянной температуре 300 К и давлении 5 атм проводят эндотермическую газофазную реакцию



Начальный объем реакционной смеси $0,3$ м³, тепловой эффект реакции -6280 кДж/кмоль.

Определить зависимость степени конверсии от времени и количество тепла, необходимое при этом для поддержания заданной температуры.

Задача 1.25. В периодическом реакторе при постоянной температуре проводят обратимую реакцию:



Плотность реакционной массы 1000 кг/м³, теплоемкость реакционной массы $4,187$ кДж/(кг·К), начальная мольная доля вещества A в смеси с растворителем составляет $0,7$, молекулярные массы A и растворителя соответственно 100 и 20 . Максимально допустимая температура 800 К.

Для степени конверсии 0,8 определить оптимальную температуру и время реакции. Вычислить также необходимую скорость теплообмена.

Задача 1.26. В периодическом реакторе (27 °С, 3 атм) протекает газо-фазная эндотермическая реакция $A \longrightarrow R + S$. Начальный объем реакционной смеси 0,5 м³. Тепловой эффект реакции –6280 кДж/кмоль. Константа скорости подчиняется уравнению:

$$k = 10^{14} \cdot e^{(-10000/T)} \quad 1/\text{ч}.$$

Рассчитать зависимость степени конверсии от времени и определить количество тепла, необходимое для поддержания заданной температуры.

2. Неизотермические реакторы

2.1. Примеры решений

Задача 2.1. В периодическом реакторе объемом 5 м^3 , имеющем змеевик площадью $3,3 \text{ м}^2$, проводят жидкофазную экзотермическую реакцию:



Температура: начальная 20°C , максимально допустимая 95°C . Теплоноситель: пар (120°C , коэффициент теплопередачи $K_q = 1360 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{K})$), или холодная вода (15°C , $K_q = 1180 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{K})$). Время заполнения и опорожнения реактора 10 и 15 мин соответственно. Энтальпия реакции $\Delta H = 1670 \text{ кДж/кг}$, теплоемкость реакционной массы $C_P = 4,2 \cdot 10^6 \text{ Дж}/(\text{м}^3 \cdot \text{K})$, молекулярная масса А 100; начальная концентрация $C_{A,0} 1 \text{ кмоль}/\text{м}^3$.

Рассчитать время самой реакции и полное время цикла при следующем режиме работы установки: предварительный подогрев до 55°C , затем адиабатический процесс до момента достижения либо температуры 95°C , либо конверсии выше 0,9, а затем охлаждение до 45°C .

Решение. Вначале рассчитаем время нагрева до 55°C , предполагая, что реакция при этом не происходит. Количество тепла, необходимое для подогрева от 20 до 55°C , находим следующим образом:

$$Q_{\text{нагр}} = V_P C_P (55 - 20) = 5,5 \cdot 4200000 \cdot 35 = 808,5 \text{ МДж}.$$

Вычислим среднюю разность температур для процесса нагрева:

$$\Delta t_{\text{ср}} = \frac{\Delta t_{\text{Б}} - \Delta t_{\text{М}}}{\ln \frac{\Delta t_{\text{Б}}}{\Delta t_{\text{М}}}} = \frac{100 - 65}{\ln \frac{100}{65}} = 81,25^\circ\text{C}.$$

Время, требуемое для подвода рассчитанного количества тепла при помощи пара, находим по уравнению теплопередачи:

$$\tau_{\text{нагр}} = Q_{\text{нагр}} / (K_q F \Delta t_{\text{ср}}) = \frac{808500000}{1360 \cdot 3,3 \cdot 81,25} = 2217 \text{ с} \approx 36 \text{ мин}.$$

Оценим допустимость предположения о непротекании реакции в процессе нагрева. Средняя температура реакционной массы при нагреве составляет: $(20+55)/2 = 37,5^\circ\text{C}$. При этой температуре константа скорости составит $k = 1,53 \cdot 10^{-5} \text{ с}^{-1}$.

Для данного значения константы скорости рассчитаем степень конверсии, достигаемую за время нагрева:

$$X_A = 1 - e^{(-k \cdot \tau_{\text{нагр}})} = 1 - e^{(-1,53 \cdot 10^{-5} \cdot 2217)} = 0,032.$$

Полученное значение составляет 3,6 % от требуемой конечной степени конверсии, поэтому считаем сделанное допущение верным.

Вычислим адиабатический разогрев смеси при полной конверсии исходного реагента:

$$\Delta t_{\text{ад}} = \frac{\Delta H \cdot M_A \cdot c_{A,0}}{C_P} = \frac{1670 \cdot 100 \cdot 1}{4200} = 39,8 \text{ }^{\circ}\text{C}.$$

Следовательно при полной конверсии вещества А температура в реакторе достигнет значения $55 + 39,8 = 94,8 \text{ }^{\circ}\text{C}$.

Таким образом, в адиабатическом реакторе невозможно достичь требуемой по условию температуры $95 \text{ }^{\circ}\text{C}$ даже при полной конверсии исходного реагента.

Рассчитаем конечную температуру для заданной конечной степени конверсии 0,9:

$$t_{\text{кон}} = t_{\text{н}} + \Delta t_{\text{ад}} \cdot 0,9 = 90,78 \text{ }^{\circ}\text{C}.$$

Время реакции рассчитываем, интегрируя кинетическое уравнение первого порядка:

$$\begin{aligned} \tau_p &= \int_{c_{A,0}}^{c_A} \frac{dc_A}{-r_A} = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{k(1 - X_A)} = \\ &= \int_0^{0,9} \frac{dX_A}{4 \cdot 10^6 \cdot e^{(-\frac{7900}{273+90,78})} \cdot (1 - X_A)} = 17000 \text{ с} = 283,3 \text{ мин.} \end{aligned}$$

Вычислим количество тепла, необходимое для охлаждения до $45 \text{ }^{\circ}\text{C}$:

$$Q_o = V_P \cdot C_P \cdot (90,78 - 45) = 961,5 \text{ МДж}.$$

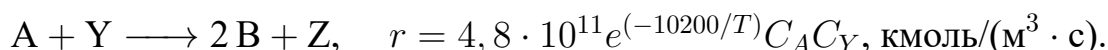
Средняя разность температур для стадии охлаждения составляет: $\Delta t_{\text{ср}} = 49,4 \text{ }^{\circ}\text{C}$, тогда время охлаждения рассчитывается так:

$$\tau_o = \frac{961500000}{1180 \cdot 3,3 \cdot 49,4} = 4998 \text{ с} = 83,3 \text{ мин}.$$

Общее время цикла составит:

$$\tau_{\text{ц}} = \tau_{\text{н}} + \tau_p + \tau_o = 36 + 283,3 + 83,3 = 402,6 \text{ мин} = 6,7 \text{ ч}.$$

Задача 2.2. В проточном адиабатическом реакторе полного смешения объемом $2,6 \text{ м}^3$ протекает реакция:



Эндотермический тепловой эффект $Q_{XP} = -1,8 \cdot 10^7$ Дж/кмоль (здесь и далее тепловой эффект указан на вещество А), теплоемкость реакционной смеси $C_P = 3050$ Дж/(кг · К), плотность $\rho = 1190$ кг/м³. Начальные концентрации А и Y равны 6,5 и 10,5 кмоль/м³, соответственно. Температура на входе в реактор $t_0 = 38$ °С.

Определить производительность по продукту В, если температура в реакторе составляет $t = 15$ °С.

Решение. Используя уравнение теплового баланса адиабатического реактора:

$$\rho \cdot C_P \cdot (t - t_0) = Q_{XP} C_{A,0} X_A,$$

рассчитаем степень конверсии вещества А, соответствующую температуре, достигаемой в реакторе:

$$X_A = \frac{\rho \cdot C_P \cdot (t - t_0)}{Q_{XP} C_{A,0}} = \frac{1190 \cdot 3050 \cdot (15 - 38)}{-1,8 \cdot 10^7 \cdot 6,5} = 0,71.$$

Концентрацию вещества В в реакторе выразим с помощью мольного баланса через известные величины:

$$C_Y = C_{Y,0} - (C_A - C_{A,0}) = C_{Y,0} - C_{A,0} \cdot X_A = C_{A,0} \cdot (\beta_Y - X_A),$$

где β_Y — начальный мольный избыток Y относительно А.

Скорость реакции в реакторе при этом составляет:

$$\begin{aligned} r &= 4,8 \cdot 10^{11} \cdot e^{(-10200/T)} C_{A,0}^2 \cdot (1 - X_A) \cdot (\beta_Y - X_A) = \\ &= 4,8 \cdot 10^{11} \cdot e^{(-10200/(273+15))} \cdot 6,5^2 \cdot (1 - 0,71) \cdot (10,5/6,5 - 0,71) = \\ &= 0,00221, \text{ кмоль/(м}^3 \cdot \text{с)}. \end{aligned}$$

Используя характеристическое уравнение для проточного реактора полного смешения, рассчитаем производительность (мольный поток) по исходному веществу А:

$$F_{A,0} = \frac{r V_P}{X_A} = 0,00221 \cdot \frac{2,6}{0,71} = 0,0081 \text{ кмоль/с.}$$

Следовательно, производительность по продукту В составляет:

$$F_B = 2 F_{A,0} \cdot X_A = 0,0115 \text{ кмоль/с.}$$

2.2. Задания для самостоятельного решения

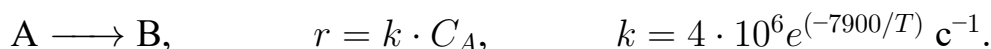
Задача 2.3. В периодическом реакторе при постоянном давлении и в адиабатических условиях проводят газофазную реакцию



Энтальпия реакции $\Delta H = -6280$ кДж/кмоль, теплоемкости веществ A , B , Z составляют соответственно 125,6, 104,7 и 83,7 кДж/(кмоль $\cdot$ К). Начальные условия: температура 300 К, давление 5 атм, объем реакционной смеси 0,5 м³.

Рассчитать профиль температуры по времени.

Задача 2.4. В периодическом реакторе объемом 5 м³, имеющем змеевик с площадью поверхности $F = 3,3$ м², проводят жидкофазную экзотермическую реакцию:



Начальная температура 20 °С, максимально допустимая температура 95 °С. В качестве теплоносителя можно подавать пар (120 °С, коэффициент теплопередачи $K_q = 1360$ Вт/(м² $\cdot$ К)) и холодную воду (15 °С, коэффициент теплопередачи $K_q = 1180$ Вт/(м² $\cdot$ К)). Время заполнения и опорожнения реактора 10 и 15 мин соответственно. Энтальпия реакции $\Delta H = -1670$ кДж/кг, теплоемкость смеси $4,2 \cdot 10^6$ Дж/(м³ $\cdot$ К), молекулярная масса A 100 кг/кмоль, его начальная концентрация 1 кмоль/м³.

Рассчитать время самой реакции и полное время цикла при следующем режиме работы установки: нагрев до 95 °С, затем проведение реакции изотермически до достижения конверсии 0,9, а затем охлаждение до 45 °С.

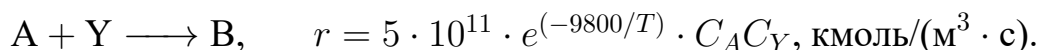
Задача 2.5. Эндотермическую газофазную реакцию:



проводят в периодическом реакторе следующим образом: вначале реакционную смесь нагревают до 400 °С, а затем процесс проводят адиабатически. За время нагрева 10 % вещества A вступает в реакцию. Тепловой эффект составляет -104670 кДж/кмоль, объем реактора равен 1 м³. Теплоемкость реакции

Определить время достижения степени конверсии 0,7 с момента достижения реакционной массы температуры 400 °С.

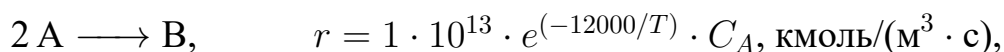
Задача 2.6. В адиабатическом проточном реакторе полного смешения объемом 1,2 м³ проводят эндотермическую реакцию:



Плотность 1290 кг/м³, тепловой эффект $1,65 \cdot 10^7$ Дж/кмоль, теплоемкость реакционной смеси 2800 Дж/(кг $\cdot$ К), начальные концентрации веществ A и Y составляют 10,2 и 12,8 кмоль/м³ соответственно. Температура на входе в реактор 55 °С.

Определить производительность реактора по продукту при объемной скорости подачи исходных веществ 0,004 м³/с.

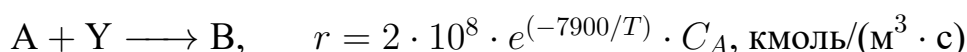
Задача 2.7. В адиабатическом проточном реакторе идеального вытеснения объемом $1,26 \text{ м}^3$ проводят реакцию:



Экзотермический тепловой эффект $2 \cdot 10^7 \text{ Дж/кмоль}$, теплоемкость реакционной смеси $2200 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$, плотность 850 кг/м^3 , начальная концентрация вещества A $3,2 \text{ кмоль/м}^3$, температура на входе в реактор 325 К .

Рассчитать производительность реактора по продукту, если температура на выходе из реактора равна 357 К .

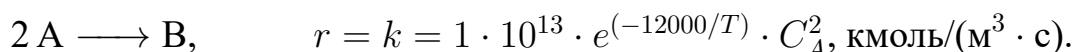
Задача 2.8. Реакцию:



проводят в каскаде из трех проточных реакторов полного смешения равного объема. Вещество B взято в большом избытке. Реакция идет с выделением тепла, тепловой эффект $6,5 \cdot 10^7 \text{ Дж/кмоль}$, теплоемкость реакционной массы $2400 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$, температура на входе в каскад $5 \text{ }^\circ\text{C}$, начальная концентрация вещества A $0,5 \text{ кмоль/м}^3$, плотность 850 кг/м^3 , объемная скорость подачи реагентов на вход в каскад $0,002 \text{ м}^3/\text{с}$. Температура в реакторах каскада составляет соответственно $15, 25$ и $35 \text{ }^\circ\text{C}$.

Определить количество тепла, которое необходимо отводить в каждом реакторе каскада, если на выходе из каскада концентрация вещества A равна $0,02 \text{ кмоль/м}^3$.

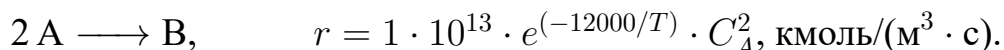
Задача 2.9. В проточном адиабатическом реакторе идеального вытеснения проводят реакцию:



Тепловой эффект экзотермической реакции составляет $2 \cdot 10^7 \text{ Дж/кмоль}$, теплоемкость реакционной массы $2200 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$, плотность 850 кг/м^3 . Начальная концентрация вещества A $4,2 \text{ кмоль/м}^3$, объемная скорость подачи реакционной массы $0,01 \text{ м}^3/\text{с}$, начальная температура 318 К .

Вычислить объем реактора, если концентрация вещества B на выходе из него равна $2,05 \text{ кмоль/м}^3$.

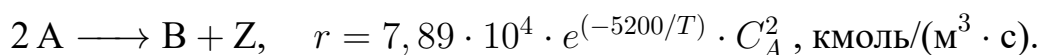
Задача 2.10. В проточном адиабатическом реакторе полного смешения объемом 10 м^3 проводят экзотермическую реакцию:



Тепловой эффект реакции составляет $2 \cdot 10^7 \text{ Дж/кмоль}$, теплоемкость реакционной массы $2200 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$, плотность 850 кг/м^3 . Объемная скорость подачи реакционной массы $0,01 \text{ м}^3/\text{с}$, начальная температура 310 К .

Определить производительность реактора по исходному веществу и по продукту, если температура на выходе из реактора 362 К .

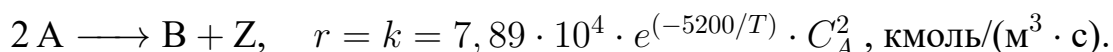
Задача 2.11. Дана реакция:



Тепловой эффект экзотермической реакции 10100 кДж/кмоль, теплоемкость всех веществ 62 кДж/(кмоль·К). Температура на входе в реактор 40 °С.

Вычислить отношение объемов адиабатических проточных реакторов полного смешения и идеального вытеснения при степени конверсии A 0,2.

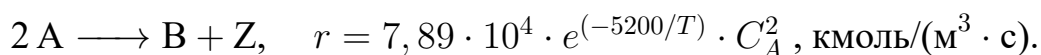
Задача 2.12. Дана экзотермическая реакция:



Температура на входе в реактор 40 °С, тепловой эффект 10100 кДж/кмоль, теплоемкость всех веществ 62 кДж/(кмоль·К).

Вычислить отношение объемов адиабатических проточных реакторов полного смешения и идеального вытеснения при степени конверсии A 0,4.

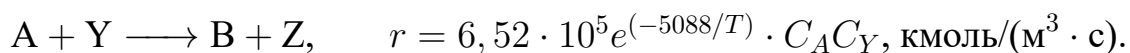
Задача 2.13. Дана экзотермическая реакция:



Температура на входе в реактор 40 °С. Тепловой эффект 10200 кДж/кмоль. Теплоемкости всех веществ 62 кДж/(кмоль·К).

Вычислить отношение объемов адиабатических проточных реакторов полного смешения и идеального вытеснения при степени конверсии A 0,5.

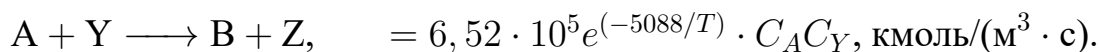
Задача 2.14. В адиабатическом проточном реакторе полного смешения объемом 0,15 м³ проводят реакцию:



Экзотермический тепловой эффект реакции 42600 кДж/кмоль, плотность исходной смеси 840 кг/м³, теплоемкость смеси 2800 Дж/(кг·К), начальные концентрации реагентов $C_{A,0} = C_{Y,0} = 1,2$ кмоль/м³, температура на входе в реактор 16 °С, объемная скорость подачи реакционной массы 0,0005 м³/с.

Определить степень превращения X_A .

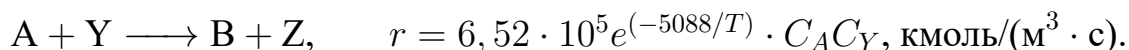
Задача 2.15. В адиабатическом проточном реакторе полного смешения объемом 0,15 м³ проводят экзотермическую реакцию:



Тепловой эффект реакции 42600 кДж/кмоль, теплоемкость реакционной смеси 2800 Дж/(кг·К), плотность исходной смеси 840 кг/м³, начальные концентрации реагентов $C_{A,0} = C_{Y,0} = 1,2$ кмоль/м³, температура на входе в реактор 16 °С, объемная скорость подачи реакционной массы 0,0005 м³/с.

Определить степень превращения X_A , если теплотери в реакторе зависят от температуры t , °С, в реакторе: $Q_{\text{пот}} = 0,11 \cdot (t - 5)$ кВт.

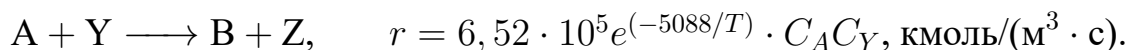
Задача 2.16. В проточном реакторе идеального вытеснения проводят экзотермическую реакцию:



Реактор — кожухотрубный теплообменник объемом $0,12 \text{ м}^3$, поверхностью теплообмена $14,7 \text{ м}^2$ и длиной $3,5 \text{ м}$. Тепловой эффект 42600 кДж/кмоль , плотность исходной смеси 840 кг/м^3 , теплоемкость смеси $2800 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$, начальные концентрации реагентов $C_{A,0} = C_{Y,0} = 1,1 \text{ кмоль/м}^3$, температура на входе в реактор $12 \text{ }^\circ\text{C}$, скорость подачи реакционной массы $0,0004 \text{ м}^3/\text{с}$.

Рассчитать степень превращения и профиль температуры по длине реактора, если теплотери зависят от температуры t в реакторе, $^\circ\text{C}$, следующим образом: $Q_{\text{пот}} = 155 \cdot (t - 4) \text{ Вт}$.

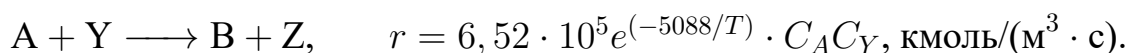
Задача 2.17. В адиабатическом проточном реакторе полного смешения объемом $0,15 \text{ м}^3$ проводят экзотермическую реакцию:



Тепловой эффект реакции 42600 кДж/кмоль , теплоемкость исходной смеси $2800 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$, ее плотность 840 кг/м^3 , начальные концентрации реагентов $C_{A,0} = C_{Y,0} = 1,2 \text{ кмоль/м}^3$, температура на входе в реактор $16 \text{ }^\circ\text{C}$, объемная скорость подачи реакционной массы $0,0005 \text{ м}^3/\text{с}$.

Определить степень превращения X_A , если теплотери в реакторе зависят от температуры t , $^\circ\text{C}$: $Q_{\text{пот}} = 0,11 \cdot (t - 5) \text{ кВт}$.

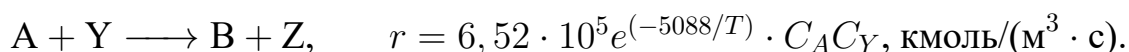
Задача 2.18. В проточном реакторе идеального вытеснения проводят экзотермическую реакцию:



Реактор — кожухотрубный теплообменник (объем $0,12 \text{ м}^3$, поверхность теплообмена $14,7 \text{ м}^2$, длина $3,5 \text{ м}$). Тепловой эффект 42600 кДж/кмоль , плотность исходной смеси 840 кг/м^3 , теплоемкость смеси $2800 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$, начальные концентрации реагентов $C_{A,0} = C_{Y,0} = 1,1 \text{ кмоль/м}^3$, температура на входе в реактор $12 \text{ }^\circ\text{C}$, скорость подачи реакционной массы $0,0004 \text{ м}^3/\text{с}$.

Рассчитать степень превращения и профиль температуры по длине реактора, если теплотери зависят от площади поверхности теплообмена и температуры, $^\circ\text{C}$, в реакторе следующим образом: $Q_{\text{пот}} = 155 \cdot (t - 4) \text{ кВт}$.

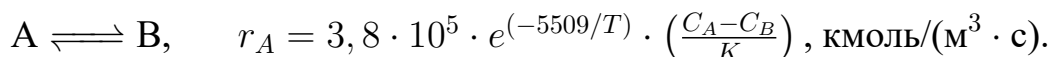
Задача 2.19. В проточном адиабатическом реакторе идеального вытеснения объемом $0,12 \text{ м}^3$ и длиной $3,5 \text{ м}$ проводят экзотермическую реакцию:



Тепловой эффект 42600 кДж/кмоль, плотность исходной смеси 840 кг/м³, теплоемкость смеси 2800 Дж/(кг·К), начальные концентрации реагентов равны между собой $C_{A,0} = C_{Y,0} = 1,1$ кмоль/м³, температура на входе в реактор 12 °С, скорость подачи реакционной массы 0,0004 м³/с.

Рассчитать степень превращения и профиль температуры по длине реактора, если теплопотери в реакторе отсутствуют.

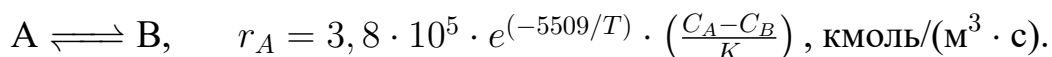
Задача 2.20. В проточном реакторе полного смешения объемом 0,8 м³ и поверхностью теплообмена 2,1 м² проводят обратимую реакцию:



Константа равновесия при 298 К составляет $K = 7,395$. Энтальпия реакции $\Delta H = -58300$ кДж/кмоль. Теплоемкости веществ A , B и инертного растворителя R равны, соответственно, 74, 68 и 61 кДж/(кмоль·К). Начальные концентрации, кмоль/м³, составляют: $C_{A,0} = 1$, $C_{R,0} = 17,5$ кмоль/м³; начальная температура 20 °С, время пребывания 200 с. Тепло реакции отводится за счет охлаждающей воды с начальной температурой 5 °С, расход воды 1,2 кг/с, коэффициент теплопередачи 360 Вт/(м²·К).

Вычислить производительность реактора по продукту и достигаемую степень превращения.

Задача 2.21. В проточном адиабатическом реакторе полного смешения объемом 0,8 м³ проводят обратимую реакцию:



Константа равновесия при 298 К составляет $K = 7,395$. Энтальпия реакции $\Delta H = -58300$ кДж/кмоль. Теплоемкости веществ A , B и инертного растворителя R равны, соответственно, 74, 68 и 61 кДж/(кмоль·К). Начальные концентрации составляют: $C_{A,0} = 1$, $C_{R,0} = 17,5$ кмоль/м³; начальная температура 20 °С, время пребывания 200 с.

Вычислить производительность реактора по продукту и достигаемую степень превращения.

Задача 2.22. В проточном реакторе полного смешения проводят обратимую эндотермическую реакцию



Изменение энергии Гиббса $\Delta G_{298} = 1970$ кДж/кмоль. Тепловой эффект реакции -28500 кДж/кмоль. Теплоемкости веществ A , B и инертного растворителя R , соответственно, 89, 89 и 75 кДж/(кмоль·К). Начальные условия: концентрации $C_{A,0} = 2,2$ кмоль/м³; $C_{R,0} = 9,02$ кмоль/м³, температура 75 °С. Тепловые потери: $Q_{\text{пот}} = 0,03 \cdot t$ кВт (t — температура в реакторе, °С).

Определить объем реактора, необходимый для достижения производительности по продукту 0,00028 кмоль/с при степени превращения $X_A = 0,452$.

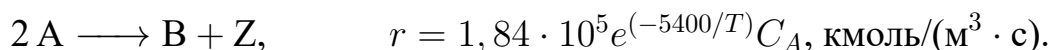
Задача 2.23. В проточном реакторе полного смешения объемом $0,2 \text{ м}^3$ проводят обратимую эндотермическую реакцию



Изменение энергии Гиббса $\Delta G_{298} = 1970 \text{ кДж/кмоль}$. Тепловой эффект реакции -28500 кДж/кмоль . Теплоемкости веществ A , B и инертного растворителя R равны, соответственно, $89, 89$ и $75 \text{ кДж/(кмоль}\cdot\text{К)}$. Начальные условия: концентрации $C_{A,0} = 2,4 \text{ кмоль/м}^3$; $C_{R,0} = 9,02 \text{ кмоль/м}^3$; температура $73 \text{ }^\circ\text{C}$. Тепловые потери $Q_{\text{пот}} = 0,02 \cdot (t - 10) \text{ кВт}$ (t — температура в реакторе, $^\circ\text{C}$).

Определить максимальную степень превращения и температуру, при которой её можно достигнуть.

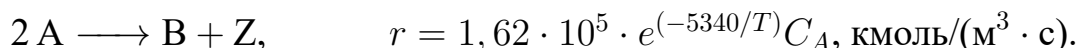
Задача 2.24. в проточном реакторе идеального вытеснения идет экзотермическая реакция:



Длина реактора $2,5 \text{ м}$, объем $0,132 \text{ м}^3$, площадью поверхности теплообмена $10,74 \text{ м}^2$. Тепловой эффект 44800 кДж/кмоль . Теплоемкости вещества A и инертного растворителя R , $\text{кДж/(кмоль}\cdot\text{К)}$, составляют, соответственно, 62 и 53 ; теплоемкости продуктов равны теплоемкости A . Начальные концентрации: $C_{A,0} = 1,4 \text{ кмоль/м}^3$; $C_{R,0} = 10,8 \text{ кмоль/м}^3$. Объемная скорость подачи реагентов $0,0007 \text{ м}^3/\text{с}$. Начальная температура смеси $22 \text{ }^\circ\text{C}$. Теплотери в реакторе составляют: $Q_{\text{пот}} = 0,025S(t - 10) \text{ кВт}$ (S — площадь поверхности теплообмена, м^2 ; t — температура в реакторе, $^\circ\text{C}$).

Найти профиль температуры и степени превращения по длине реактора.

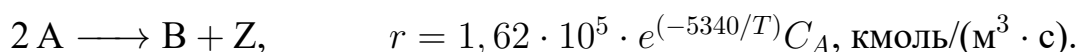
Задача 2.25. В проточном реакторе идеального вытеснения (длина $2,9 \text{ м}$, объем $0,147 \text{ м}^3$, поверхность теплообмена $12,8 \text{ м}^2$) проводят реакцию:



Экзотермический тепловой эффект реакции 35600 кДж/кмоль . Начальные условия: температура $27 \text{ }^\circ\text{C}$; концентрации, кмоль/м^3 , $C_{A,0} = 3,1$, $C_{R,0} = 10,4$. Скорость подачи реагентов $0,001 \text{ м}^3/\text{с}$. Теплоемкости A , B , Z и инертного растворителя R составляют, соответственно, $66, 58, 54$ и $52 \text{ кДж/(кмоль}\cdot\text{К)}$. Охлаждение осуществляют водой при подаче противотоком к реакционной массе. Температура воды изменяется линейно по длине реактора от $12 \text{ }^\circ\text{C}$ до $22 \text{ }^\circ\text{C}$. Коэффициент теплопередачи $290 \text{ Вт/(\text{м}^2\cdot\text{К})}$.

Определить конверсию по длине реактора, температурный профиль, чувствительность профиля к изменению температуры охлаждающей воды.

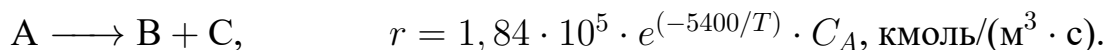
Задача 2.26. В проточном реакторе идеального вытеснения (площадь поверхности теплообмена $12,8 \text{ м}^2$, длина $2,9 \text{ м}$, объем $0,147 \text{ м}^3$,) проводят экзотермическую реакцию:



Тепловой эффект реакции 35,6 МДж/кмоль. Начальная температура смеси 27 °С. Начальные концентрации, кмоль/м³: $C_{A,0} = 3,8$, $C_{R,0} = 10,1$. Теплоемкости, кДж/(кмоль·К), A , B , Z и инертного растворителя R составляют, соответственно, 66, 58, 54 и 52. Скорость подачи реагентов 0,001 м³/с. Охлаждение осуществляют водой при подаче прямооток к реакционной массе. Температура воды изменяется линейно по длине реактора, ее начальная температура 12 °С, расход 2 кг/с. Коэффициент теплопередачи 290 Вт/(м³·К).

Определить конверсию по длине реактора, температурный профиль, чувствительность профиля к изменению температуры охлаждающей воды.

Задача 2.27. Экзотермическую реакцию проводят в проточном реакторе идеального вытеснения диаметром 0,08 м:



Тепловой эффект 44800 кДж/кмоль. Теплоемкости вещества A , продуктов и инертного растворителя R , кДж/кмоль, равны, соответственно, 62, 62, 53. Исходная смесь подается в реактор с расходом 0,00107 м³/с. Начальные условия: концентрации компонентов, кмоль/м³: $C_{A,0} = 1,2$; $C_{R,0} = 10,8$, температура смеси на входе в реактор 29 °С, температура воды, подаваемой на охлаждение противотоком, 14 °С. Конечная температура воды 20 °С. Расход охлаждающей воды 1,2 кг/с. Коэффициент теплопередачи 320 Вт/(м²·К).

Определить длину реактора и достигаемую степень превращения A .

Задача 2.28. В периодическом адиабатическом реакторе при постоянном объеме 0,5 м³ проводят газофазную эндотермическую реакцию:



Теплота реакции –6280 кДж/кмоль. Теплоемкости веществ A , B и Z составляют, соответственно, 125,6, 104,7 и 83,7 кДж/(кмоль·К). Начальная температура смеси 300 К, начальное давление 5 атм.

Рассчитать профиль температуры и давления по времени.

Задача 2.29. В периодическом реакторе в адиабатическом режиме при постоянном объеме 0,5 м³ проводят жидкофазную реакцию:



Теплота эндотермической реакции –6280 кДж/кмоль. Теплоемкости веществ A , B и Z — соответственно, 125,6, 104,7 и 83,7 кДж/(кмоль·К). Начальная температура 300 К.

Рассчитать профиль температуры и степени конверсии по времени.

Задача 2.30. В периодическом реакторе в адиабатическом режиме при постоянном давлении 5 атм проводят газофазную эндотермическую реакцию:



Начальные условия: температура смеси 300 К, объем реакционной смеси 0,5 м³. Теплота реакции –6280 кДж/кмоль. Теплоемкости веществ *A*, *B* и *Z* составляют, соответственно, 125,6, 104,7 и 83,7 кДж/(кмоль·К).

Рассчитать профиль температуры и объема по времени.

Задача 2.31. В периодическом реакторе идет эндотермическая реакция



Вначале реакционную смесь нагревают до 400 °С, а затем процесс проводят адиабатически. За время нагрева 8 % вещества *A* вступает в реакцию. Тепловой эффект составляет –104670 кДж/кмоль. Теплоемкость реакционной массы 2,47 кДж/(кг·К). Общая загрузка в реактор составляет 950 кг, плотность реакционной массы 950 кг/м³ (не меняется в течение процесса), начальное количество загруженного вещества *A* 10,2 кмоль.

Определить время достижения степени конверсии 0,7 с момента достижения реакционной массы температуры 400 °С.

Задача 2.32. В периодическом адиабатическом реакторе при постоянном объеме 0,5 м³ проводят газофазную эндотермическую реакцию:



Теплота реакции –6280 кДж/кмоль. Теплоемкости веществ *A*, *B* и *Z* равны, соответственно, 125,6, 104,7 и 83,7 кДж/(кмоль·К). Начальная температура смеси 300 К, начальное давление 3 атм.

Рассчитать профиль температуры и давления по времени.

Задача 2.33. В периодическом реакторе при постоянном объеме 0,5 м³ в адиабатическом режиме проводят жидкофазную эндотермическую реакцию:



Теплота реакции –6280 кДж/кмоль. Теплоемкости веществ *A*, *B* и *Z* — соответственно, 120, 100 и 80 кДж/(кмоль·К). Начальная температура 320 К.

Рассчитать профиль температуры и степени конверсии по времени.

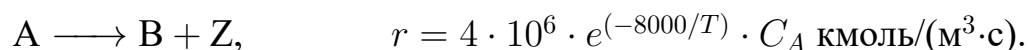
Задача 2.34. В периодическом реакторе при постоянном объеме 0,5 м³ в адиабатическом режиме проводят газофазную реакцию:



Теплота реакции -6280 кДж/кмоль; Теплоемкости веществ А, В и Z — соответственно, 125,6, 104,7 и 83,7 кДж/(кмоль·К). Начальная температура 300 К, начальное давление 7 атм.

Рассчитать профиль температуры и давления по времени.

Задача 2.35. Проточный адиабатический реактор полного смешения используют для проведения реакции:



Начальная концентрация исходного реагента $C_{A,0} = 1$ кмоль/м³. Молекулярная масса А 100 кг/кмоль. Теплоемкость смеси 4187 кДж/(м³·К). Энтальпия реакции равна $\Delta H = -16480$ кДж/кмоль.

Определить температуру на входе и объем реактора, необходимый для достижения степени конверсии 0,7 и температуры в реакторе 100 °С, если объем производства равен 10 кмоль/ч продукта В.

3. Расчет оптимального режима для идеальных изотермических реакторов

3.1. Примеры решений

Задача 3.1. Выберите условия (начальные концентрации реагентов, степени конверсии исходных реагентов A и Y) для проведения следующей сложной реакции:



в периодическом реакторе таким образом, чтобы селективность образования продукта C была максимальная. Условия: $k_2/k_1 = 10$; диапазон изменений концентраций, моль/л, исходных реагентов: $C_{A,0} = 1 - 4$, $C_{Y,0} = 1 - 4$; диапазон изменения степени конверсии реагента A : $X_A = 0,5 - 0,9$.

Решение. Для решения задачи необходимо найти зависимость селективности образования вещества C (Φ_C^A) от варьируемых условий (начальных концентраций реагентов A и Y и степени конверсии реагента A):

$$\Phi_C^A = \frac{C_{Y,0} - C_Y}{C_{A,0} - C_A} = \frac{C_{Y,0} X_Y}{C_{A,0} X_A}. \quad (2)$$

Чтобы выразить X_Y через X_A , запишем уравнение отношения скоростей расходования A и Y :

$$\frac{dC_A}{dC_Y} = 1 + \frac{k_1 C_A}{k_2 C_Y}.$$

Интегрирование последнего уравнения от начальных до конечных условий приводит к степенному уравнению, которое невозможно записать в общем виде относительно X_Y , поэтому запишем его относительно X_A :

$$X_A = 1 + \frac{[1 - (1 + b(\gamma - 1)(1 - X_Y)^{(\gamma-1)})](1 - X_Y)}{b(\gamma - 1)}, \quad (3)$$

где $b = C_{A,0}/C_{Y,0}$, $\gamma = k_1/k_2 = 0,1$.

Учитывая полученное выражение, запишем функцию зависимости Φ_C^A от варьируемых параметров:

$$\Phi_C^A = \frac{X_Y}{b + \frac{[1 - (1 + b(\gamma - 1)(1 - X_Y)^{(\gamma-1)})](1 - X_Y)}{b(\gamma - 1)}}. \quad (4)$$

Анализ уравнения (2) показывает, что селективность Φ_c^A меняется монотонно с изменением b и степени конверсии и не имеет экстремумов, поэтому достаточно рассчитать значения Φ_c^A по уравнению (4) при различных комбинациях заданных граничных условий и выбрать условия, обеспечивающие максимальную селективность.

Проведем расчеты, подбирая значения X_Y так, чтобы значения X_A (уравнение (3)) были близки граничным значениям (0,5 и 0,9) (табл. 1).

Таблица 1 – Расчет селективности

$C_{A,0}$	$C_{Y,0}$	b	X_Y	X_A	Φ_c^A
1	1	1	0,455	0,499012	0,911802
1	1	1	0,825	0,898894	0,917794
1	4	0,25	0,122	0,497697	0,980516
1	4	0,25	0,221	0,897265	0,985217
4	1	4	0,980	0,506046	0,484145
4	1	4	0,999	0,637754	0,391609

Максимальная селективность образования продукта C ($\Phi_c^A = 0,985$) достигается при $C_{A,0} = 1$ моль/л, $C_{Y,0} = 4$ моль/л и при $X_A = 0,897$ (при этом $X_Y = 0,221$).

Задача 3.2. Реакция:



проводится в непрерывном реакторе полного смешения объемом V с конверсией $X_A = 0,9$. Какого объема должен быть последовательно присоединенный второй реактор смешения для того, чтобы при тех же условиях увеличить производительность установки в четыре раза при той же конверсии?

Решение. Запишем выражение для производительности установки:

$$F_B = F_{A,0}X_A = WC_{A,0}X_A = 0,9WC_{A,0}.$$

Из данного выражения следует, что для увеличения производительности новой установки в 4 раза по сравнению с исходной необходимо в 4 раза увеличить объемный поток (W), т.е.: $W' = 4W$.

Используя характеристическое уравнение реактора смешения для исходной установки, найдем значение W :

$$V = \frac{F_{A,0} \cdot X_A}{r} = \frac{0,9 \cdot W \cdot C_{A,0}}{(k \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A))} = \frac{9 \cdot W}{k};$$

$$W = \frac{k \cdot V}{9}.$$

Запишем характеристическое уравнение для первого реактора каскада в новой установке для расчета степени конверсии, достигаемой в нем $X_{A,1}$:

$$V = \frac{W' \cdot C_{A,0} \cdot X_{A,1}}{k \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_{A,1})} = \frac{4 \cdot W \cdot X_{A,1}}{k \cdot (1 - X_A)},$$

$$X_{A,1} = \left(1 + \frac{4 \cdot W}{V \cdot k}\right)^{-1} = 0,69.$$

С учетом этого выражения найдем искомое значение объема второго реактора каскада V_2 , используя соответствующее характеристическое уравнение:

$$V_2 = W' \cdot C_{A,0} \cdot \frac{X_A - X_{A,1}}{k \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A)} = \frac{4 \cdot W \cdot (0,9 - X_{A,1})}{0,1 \cdot k} = 0,923V.$$

3.2. Задания для самостоятельного решения

Задача 3.3. Выберите оптимальные условия (тип реактора, начальные концентрации исходных веществ, степень конверсии вещества A) для проведения сложной реакции:



с максимальной селективностью по продукту C , если $k_2/k_1 = 10$. Интервалы изменения концентраций, моль/л, и степени конверсии: $C_{A,0} = 1 - 4$ моль/л, $C_{Y,0} = 1 - 6$ моль/л, $X_A = 0,5 - 0,9$. Вычислить Φ_{Cmax} и X_Y при найденных оптимальных условиях.

Задача 3.4. В проточном реакторе идеального смешения протекает сложная реакция:



При $C_{A,0} = 4$ моль/л, $C_{Y,0} = 6$ моль/л и $X_A = 0,9$ получено $X_Y = 0,695$. Выберите оптимальные условия (тип реактора, начальные концентрации исходных веществ, степень конверсии вещества A) для проведения реакции с максимальной селективностью по продукту C , если интервалы изменения концентраций, моль/л, и степени конверсии — $C_{A,0} = 1 - 8$ моль/л, $C_{Y,0} = 1 - 8$ моль/л, $X_A = 0,5 - 0,9$. Вычислить Φ_{Cmax} и X_Y при найденных оптимальных условиях.

Задача 3.5. Для реакции, идущей в проточном реакторе идеального смешения:



при $C_{A,0} = 3$ моль/л, $C_{Y,0} = 4$ моль/л и $X_A = 0,817$ получено $\Phi_C = 0,714$.

Выберите оптимальные условия (тип реактора, начальные концентрации исходных веществ, степень конверсии вещества A) для проведения реакции с максимальной селективностью по продукту C , если $C_{A,0} = 3$ моль/л, диапазон изменения концентраций реагента Y составляет: $C_{Y,0} = 3 - 6$ моль/л, а $X_A \geq 0,9$. Вычислить Φ_{Cmax} и X_Y при найденных оптимальных условиях.

Задача 3.6. Выберите оптимальные условия (тип реактора, начальные концентрации исходных веществ, степень конверсии вещества A) для проведения сложной реакции с максимальной селективностью по продукту C :



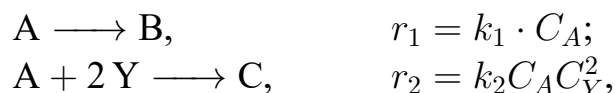
если $k_2/k_1 = 10$, $C_{A,0} = 3$ моль/л, диапазон изменения концентраций реагента Y составляет: $C_{Y,0} = 3 - 6$ моль/л, а $X_A \geq 0,9$. Вычислить Φ_{Cmax} и X_Y при найденных условиях.

Задача 3.7. Для сложной реакции в периодическом реакторе :



при $C_{A,0} = 3$ моль/л, $C_{Y,0} = 4$ моль/л, получено $X_A = 0,675$ и $X_Y = 0,9$. Выберите оптимальные условия (тип реактора, начальные концентрации исходных веществ, степень конверсии вещества A) проведения реакции с максимальной селективностью по продукту C , если $X_A \geq 0,9$, $C_{Y,0} = 3 - 6$ моль/л, $C_{A,0} = 3$ моль/л. Вычислить Φ_{Cmax} и X_Y при найденных условиях.

Задача 3.8. Для идущей в проточном реакторе идеального смешения сложной реакции:



при $C_{A,0} = 3$ моль/л, $C_{Y,0} = 4$ моль/л, получено $X_Y = 0,9$ и $\Phi_C = 0,615$. Найти значения Φ_C и X_A для тех же условий в периодическом реакторе.

Задача 3.9. В периодическом реакторе проводится реакция:



до полного превращения реагента Y , при $C_{A,0} = C_{Y,0} = C_{C,0} = 1$ моль/л. При этом получено $\Phi_B = 0,9$. Вычислить Φ_B в проточном реакторе полного смешения при $C_{A,0} = C_{Y,0} = C_{C,0} = 1$ моль/л и $X_Y = 0,9$.

Задача 3.10. При проведении в периодическом реакторе последовательной реакции первого порядка:



при $C_{A,0} = 1$ моль/л через 10 мин после ее начала обнаружили 0,246 моль/л продукта B и 0,114 моль/л продукта C . Рассчитайте константы скорости последовательных стадий и определите время, необходимое для получения максимальной концентрации продукта B . Каковы будут константы скорости реакций, если эти же продукты образуются параллельно.

Задача 3.11. При проведении последовательно-параллельной реакции:



в периодическом реакторе при некотором значении соотношения $C_{Y,0}/C_{A,0}$ и $X_Y = 1$ осталось 0,7 моль/л вещества A , получено 0,24 моль/л вещества B и 0,06 моль/л вещества C . При каком соотношении реагентов $C_{Y,0}/C_{A,0}$ и $X_Y = 1$ концентрация продукта B в реакционной смеси достигнет максимума? Каково значение C_{Bmax} ? Найти C_{Bmax} и $C_{Y,0}/C_{A,0}$ для этих же условий в проточном реакторе идеального смешения.

Задача 3.12. В непрерывном реакторе полного смешения объемом V проводится реакция:



с конверсией $X_A = 0,9$. Какого объема должен быть последовательно присоединенный второй реактор смешения для того, чтобы увеличить производительность установки в четыре раза?

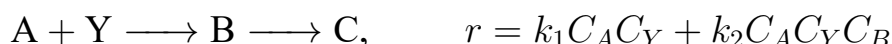
Задача 3.13. В непрерывном реакторе идеального вытеснения объемом V проводится реакция:



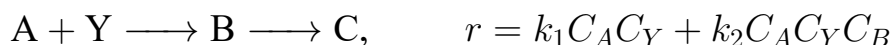
с конверсией $X_A = 0,9$. Какого объема должен быть последовательно присоединенный второй реактор смешения для того, чтобы увеличить производительность установки в четыре раза?

Задача 3.14. Реакция

проводится в непрерывном реакторе идеального смешения объемом V с конверсией $X_A = 0,9$. Какого объема должен быть последовательно присоединенный второй реактор идеального вытеснения для того, чтобы увеличить производительность установки в четыре раза?

Задача 3.15. Для реакции

соотношение констант: $k_2 = 8k_1$. Реакция проводится в каскаде реакторов смешения объемом V_1 и вытеснения объемом V_2 при $C_{A,0} = C_{Y,0} = 1$ моль/л. Найти соотношение объемов V_1/V_2 , обеспечивающее максимальную удельную производительность при $X_A = 0,9$.

Задача 3.16. Для реакции

соотношение констант: $k_2 = 10k_1$. Реакция проводится в каскаде реакторов смешения объемом V_1 и вытеснения объемом V_2 при $C_{A,0} = 1$ моль/л. Найти соотношение объемов V_1/V_2 , обеспечивающее максимальную удельную производительность при $X_A = 0,9$.

Задача 3.17. В каскаде из последовательно соединенных реакторов смешения (объем $2V$) и вытеснения (объем V) проводится реакция:



с конверсией $X_A = 0,9$. Как изменится производительность установки, если подавать реакционную смесь в противоположном направлении?

Задача 3.18. В проточном реакторе полного смешения объемом V проводится реакция:



с конверсией $X_A = 0,8$ при $C_{A,0} = 1$ моль/л. На сколько можно увеличить мольный поток $F_{A,0}$, если заменить данный реактор двумя последовательно соединенными реакторами с объемом $0,5V$.

Задача 3.19. В проточном реакторе смешения объемом V проводится реакция:



с конверсией $X_A = 0,9$. Как подключить реактор идеального вытеснения объемом $0,25V$ (последовательно до, последовательно после или параллельно), чтобы производительность установки была максимальной?

Задача 3.20. В проточном реакторе смешения объемом V проводится реакция:



с конверсией $X_A = 0,9$. Как подключить реактор идеального вытеснения объемом $0,5V$ (последовательно до, последовательно после или параллельно), чтобы производительность установки была максимальной?

Задача 3.21. В реакторе идеального вытеснения объемом V проводится реакция:



с конверсией $X_A = 0,9$. Как подключить реактор полного смешения объемом $2V$ (последовательно до, последовательно после или параллельно), чтобы производительность установки была максимальной?

Задача 3.22. В проточном реакторе полного смешения объемом V проводится реакция:



с конверсией $X_A = 0,8$ при $C_{A,0} = 1$ моль/л. Как подключить реактор идеального вытеснения объемом $0,25V$ (последовательно до, последовательно после или параллельно), чтобы производительность установки была максимальной?

Задача 3.23. В реакторе идеального вытеснения объемом V проводится реакция:



с конверсией $X_A = 0,8$ при $C_{A,0} = 1$ моль/л. Как подключить реактор полного смешения объемом $4V$ (последовательно до, последовательно после или параллельно), чтобы производительность установки была максимальной?

Задача 3.24. Выберите оптимальные условия (начальные концентрации исходных веществ, степень конверсии вещества A) для проведения реакции:



в периодическом реакторе с максимальной селективностью по продукту C , если $k_2/k_1 = 5$, $C_{A,0} = 3 - 5$ моль/л, $C_{Y,0} = 1 - 3$ моль/л, $X_A = 0,75 - 0,95$. Вычислить $\Phi_{C_{max}}$ и X_Y при найденных оптимальных условиях.

Задача 3.25. Выберите оптимальные условия (тип реактора, начальные концентрации исходных веществ, степень конверсии вещества A) для проведения реакции:



с максимальной селективностью по продукту C , если $C_{A,0} = 3 - 5$ моль/л, $C_{Y,0} = 1 - 3$ моль/л, $k_2/k_1 = 5$, $X_A = 0,75 - 0,95$. Вычислить $\Phi_{C_{max}}$ и X_Y в найденных условиях.

Задача 3.26. Для реакции в проточном реакторе идеального смешения:



при $C_{A,0} = 5$ моль/л, $C_{Y,0} = 6$ моль/л, и $X_A = 0,8$ получено $\Phi_C = 70\%$. Найдите значение Φ_C и X_Y для тех же условий в периодическом реакторе.

Задача 3.27. Для реакции в проточном реакторе идеального смешения:



при $C_{A,0} = 5$ моль/л, $C_{Y,0} = 6$ моль/л получено $X_A = 0,9$ и $X_Y = 0,65$. Выберите условия (тип реактора, начальные концентрации исходных веществ, степень конверсии вещества A) для проведения реакции с максимальной селективностью по продукту C , если $C_{A,0} = 1 - 8$ моль/л, $C_{Y,0} = 1 - 8$ моль/л, $X_A = 0,5 - 0,9$. Вычислить $\Phi_{C_{max}}$ и X_Y при найденных условиях.

Задача 3.28. Выберите оптимальные условия (тип реактора, начальные концентрации исходных веществ, степень конверсии вещества A) для проведения реакции:



с максимальной селективностью по продукту C , если $X_A \geq 0,9$, $k_2/k_1 = 15$, $C_{A,0} = 3$ моль/л, $C_{Y,0} = 3 - 8$ моль/л. Найдите значение Φ_C и X_Y для тех же условий в периодическом реакторе.

Задача 3.29. Для реакции:



в периодическом реакторе при $C_{A,0} = 3$ моль/л, $C_{Y,0} = 4$ моль/л получено $X_A = 0,7$ и $X_Y = 0,9$. Выберите оптимальные условия (тип реактора, начальные концентрации исходных веществ, степень конверсии вещества А) для проведения реакции с максимальной селективностью по продукту С, если $C_{A,0} = 3$ моль/л, $C_{Y,0} = 3 - 6$ моль/л, $X_A \geq 0,9$. Найдите значение Φ_C и X_Y для тех же условий в периодическом реакторе.

4. Оптимизация реакторного узла по экономическим критериям

4.1. Примеры решений

Задача 4.1. В проточном реакторе идеального вытеснения проводят реакцию:



Цена вещества А — Π_A (у.е./кмоль); стоимость рецикла непрореагировавшего вещества А — $S_{\text{РЦ}}$ (у.е./кмоль); стоимость амортизации реактора: $a_1 + a_2 V$, где V — объем реактора, м^3 . Цена продукта В — Π_B (у.е./кмоль). Критерий оптимизации — доход, полученный от производства вещества В при постоянном начальном потоке реагента А ($F_{A,0} = \text{const}$).

Найти оптимальную степень конверсии X_A .

Решение. Доход (Д) от производства вещества В равен разнице между выручкой от продажи вещества В и затратами на его производство (З). Обозначив мольную производительность по продукту В как F_B , запишем уравнение для вычисления Д:

$$\text{Д} = F_B \cdot \Pi_B - \text{З}.$$

Затраты на производство продукта В складываются из затрат на сырье, на рецикл вещества А и на амортизацию оборудования. Составим материальный баланс реакторного узла:

Начальный поток реагента А на входе в реактор: $F_{A,0}$.

Поток реагента А на выходе из реактора (возвращаемый на рецикл):

$$F_A = F_{A,0} \cdot (1 - X_A)$$

Поток продукта В на выходе из реактора: $F_B = F_{A,0} \cdot X_A$.

С учетом материального баланса запишем функцию дохода:

$$\begin{aligned} \text{Д} &= F_B \cdot \Pi_B - (F_B \cdot \Pi_A + F_{A,0} \cdot (1 - X_A) \cdot S_{\text{РЦ}} + a_1 + a_2 V) = \\ &= F_{A,0} \cdot X_A \cdot \Pi_B - (F_{A,0} \cdot X_A \cdot \Pi_A + F_{A,0} \cdot (1 - X_A) \cdot S_{\text{РЦ}} + a_1 + a_2 V). \end{aligned}$$

Из характеристического уравнения реактора идеального вытеснения

$$dV = \frac{F_{A,0} \cdot dX_A}{r}$$

и кинетического уравнения реакции, определим объем реактора:

$$V = F_{A,0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-k_1 \cdot C_A} = -F_{A,0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{k_1 \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A)} = \frac{-F_{A,0} \cdot \ln(1 - X_A)}{k_1 \cdot C_{A,0}}.$$

Подставим полученное выражение в уравнение функции дохода:

$$\text{Д} = F_{A,0} \cdot \Pi_B - \left(F_{A,0} \cdot \Pi_A + F_{A,0} \cdot (1 - X_A) \cdot S_{\text{РЦ}} + a_1 + a_2 \cdot \frac{F_{A,0} \cdot \ln(1 - X_A)}{k_1 \cdot C_{A,0}} \right).$$

Для определения оптимальной степени конверсии продифференцируем полученную функцию дохода по X_A и приравняем к нулю:

$$\frac{d\Pi}{dX_A} = F_{A,0} \cdot \left(\Pi_B - \Pi_A + S_{\text{PC}} \right) - a_2 \cdot \frac{F_{A,0}}{k_1 \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A)} = 0,$$

откуда находим выражение для оптимальной степени конверсии:

$$X_{A,\text{опт}} = 1 - \frac{a_2}{k_1 \cdot C_{A,0} \cdot (\Pi_B - \Pi_A + S_{\text{PC}})}.$$

Задача 4.2. Продукт В получают по реакции:



в реакторе идеального вытеснения ($V = 3 \text{ м}^3$). Известно, что $k_1 = 0,1 \text{ ч}^{-1}$ и $k_2/k_1 = 2$. Цены на вещества составляют: $\Pi_A = 20 \text{ /кмоль}$, $\Pi_C = 7 \text{ у.е./кмоль}$. Стоимость рецикла вещества А: $S_{\text{PC}} = 3 \text{ у.е./кмоль}$. Начальная концентрация вещества А: $C_{A,0} = 2 \text{ моль/л}$.

Найти оптимальную степень конверсии А и производительность установки по В.

Решение. Оптимальными условиями считаем такие, которые обеспечивают наименьшую себестоимость продукта В (S_B). Для получения функции себестоимости составим баланс затрат (З) на производство В.

С одной стороны: $Z = F_B \cdot S_B$, с другой — затраты складываются из затрат на сырье (вещество А) и затрат на рецикл непрореагировавшего вещества А за вычетом средств, получаемых от продажи продукта С:

$$Z = F_{A,0} \cdot X_A \cdot \Pi_A + F_{A,0} \cdot (1 - X_A) \cdot S_{\text{PC}} - F_C \cdot \Pi_C.$$

Приравняв правые части двух выражений для затрат и выразив S_B , получим:

$$S_B = (F_{A,0} \cdot X_A \cdot \Pi_A + \frac{F_{A,0} \cdot (1 - X_A) \cdot S_{\text{PC}} - F_C \cdot \Pi_C}{F_B}).$$

Учтем соотношения материального баланса для данной реакции:

$$F_B = F_{A,0} \cdot X_A \cdot \Phi_B$$

$$F_C = F_{A,0} \cdot X_A \cdot (1 - \Phi_B)$$

Выражение себестоимости принимает следующий вид:

$$S_B = \frac{\Pi_A}{\Phi_B} + \frac{(1 - X_A) \cdot S_{\text{PC}}}{(X_A \cdot \Phi_B)} - \frac{(1 - \Phi_B) \cdot \Pi_C}{\Phi_B}.$$

Запишем выражение для Φ_B для заданной реакции в реакторе идеального вытеснения:

$$\Phi_B = \frac{1 - X_A - (1 - X_A)^{\frac{k_2}{k_1}}}{X_A \left(\frac{k_2}{k_1} - 1 \right)},$$

которое при подстановке значения отношения констант скоростей дает:

$$\Phi_B = 1 - X_A.$$

Для определения оптимальной степени конверсии рассчитаем значения себестоимости для интервала значений X_A (табл. 2):

Таблица 2 – Расчет себестоимости

X_A	Φ_B	$\frac{C_A}{\Phi_B}$	$\frac{(1 - X_A) \cdot S_{\text{пр}}}{X_A \cdot \Phi_B}$	$\frac{(1 - \Phi_B) \cdot C_C}{\Phi_B}$	S_B
0,10	0,9	22,22	30,00	0,78	51,44
0,15	0,85	23,53	20,00	1,23	42,29
0,20	0,80	25,00	15,00	1,75	38,25
0,25	0,75	26,67	12,00	2,33	36,33
0,28	0,72	27,78	10,71	2,72	35,77
0,30	0,70	28,57	10,00	3,00	35,57
0,32	0,68	29,41	9,38	3,29	35,49
0,34	0,66	30,30	8,82	3,61	35,52
0,36	0,64	31,25	8,33	3,93	35,64

Оптимальная степень конверсии равна 0,32. При этом:

$F_{A,0} = -V \cdot k \cdot C_{A,0} / \ln(1 - X_A) = 1,56$ кмоль/ч, а производительность по продукту $F_B = F_{A,0} \cdot X_A \cdot \Phi_B = 0,34$ кмоль/ч.

Задача 4.3. Реакция:



проводится в проточном реакторе идеального смешения при $X_A = 0,9$.

Производительность установки 40 моль/ч по продукту В, стоимость веществ: $C_A = 1000$ у.е./моль, $C_B = 1320$ у.е./моль; эксплуатационные расходы составляют 20000 у.е./ч. В этом режиме установка убыточна.

Как изменить условия процесса, $F_{A,0}$ и X_A , чтобы обеспечить максимально возможный доход?

Решение. Доход (Д) от производства вещества В равен разнице между выручкой от продажи вещества В и затратами на его производство (З). Обозначив мольную производительность по продукту В как F_B , запишем уравнение для вычисления Д:

$$Д = F_B \cdot C_B - З.$$

Затраты на производство продукта В складываются из затрат на сырье и эксплуатационных расходов. Следовательно:

$$Д = F_B \cdot Ц_B - З = F_B \cdot Ц_B - F_{A,0} \cdot Ц_A - 20000$$

или с учетом мольного баланса:

$$Д = F_{A,0} \cdot X_A \cdot Ц_B - F_{A,0} \cdot Ц_A - 20000.$$

Реакция протекает в проточном реакторе полного смешения, поэтому варьируемые параметры ($F_{A,0}$ и X_A) процесса связаны между собой соответствующим характеристическим уравнением:

$$V = \frac{F_{A,0} \cdot X_A}{r} = \frac{F_{A,0} \cdot X_A}{k \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A)}.$$

Выразим из последнего уравнения $F_{A,0}$:

$$F_{A,0} = \frac{V \cdot k \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A)}{X_A}.$$

Подставим выражение для $F_{A,0}$ в функцию дохода:

$$Д = V \cdot k \cdot C_{A,0} \cdot \left((1 - X_A) \cdot Ц_B - \frac{Ц_A \cdot (1 - X_A)}{X_A} \right) - 20000.$$

Согласно условиям задачи варьируемыми параметрами являются $F_{A,0}$ и X_A , следовательно остальные должны оставаться неизменными, то есть произведение $V \cdot k \cdot C_{A,0}$ является величиной постоянной.

Для нахождения максимума дохода продифференцируем полученную функцию по X_A и приравняем производную к нулю:

$$\frac{dД}{dX_A} / = -V \cdot k \cdot C_{A,0} \cdot \left(Ц_B + \frac{Ц_A}{(X_A)^2} \right) = 0.$$

Вычислим значение X_A :

$$X_A = \left(\frac{Ц_A}{Ц_B} \right)^{0,5} = \left(\frac{1000}{1320} \right)^{0,5} = 0,87.$$

Найдем значение $F_{A,0}$, соответствующее оптимальному значению X_A :

$$F_{A,0} = \frac{V \cdot k \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A)}{X_A} = \frac{V \cdot k \cdot C_{A,0} \cdot (1 - 0,87)}{0,87} = 0,149 \cdot V \cdot k \cdot C_{A,0}.$$

Используя характеристическое уравнение и учитывая, что

$$F_B = F_{A,0} \cdot X_A = 40,$$

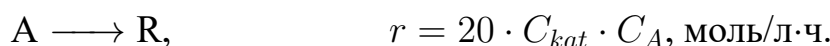
вычислим значение $V \cdot k \cdot C_{A,0}$ при заданных в условии значениях F_B и X_A :

$$V \cdot k \cdot C_{A,0} = \frac{F_{A,0} \cdot X_A}{1 - X_A} = \frac{40}{1 - 0,98} = 2000.$$

Следовательно: $F_{A,0} = 0,149 \cdot 2000 = 298$ моль/ч.

Таким образом, максимальный доход составит 24223,2 у.е./ч при $F_{A,0} = 298$ моль/ч и $X_A = 0,87$.

Задача 4.4. В аппарате полного смешения проводится реакция



Найти оптимальную концентрацию гомогенного катализатора, если $X_A = 0,95$, $\Pi_{kat} = 4$ у.е./кмоль, а отчисления на амортизацию, у.е./ч, выражаются уравнением:

$$З_{ам} = \frac{a}{8000} \cdot (\Pi_{об,0} + V \cdot \Pi_{об,V}),$$

где $a = 0,15$ и $\Pi_{об,V} = 400$ у.е./м³.

Затраты на катализатор, у.е./ч, составляют:

$$З_{kat} = F_{kat} \cdot \Pi_{kat} = F_{A,0} \cdot \frac{C_{kat}}{C_{A,0}} \cdot \Pi_{kat}.$$

Решение. Объем реактора находим по кинетическому уравнению для аппарата полного смешения:

$$V = \frac{F_{A,0} \cdot X_A}{k \cdot C_{kat} \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A)} [\text{м}^3].$$

Следовательно, минимизации подлежит сумма, у.е./моль:

$$\sum C_{R,пер} = \frac{1}{F} \left[F_{A,0} \cdot \frac{C_{kat}}{C_{A,0}} \cdot \Pi_K + \frac{a}{8000} (\Pi_{об,0} + \frac{F_{A,0} \cdot X_A \cdot \Pi_{об,V}}{k \cdot C_{kat} \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A)}) \right].$$

При заданном R_F и X_A для нахождения минимума берем производную и приравниваем ее к нулю:

$$\frac{d \sum C_{R,пер}}{d C_{kat}} = \frac{\Pi_{kat}}{C_{A,0} \cdot X_A} - \frac{a \cdot \Pi_{об,V}}{8000 \cdot k \cdot C_{kat}^2 \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A)} = 0.$$

Оптимальная концентрация катализатора, кмоль/м³, будет равна:

$$C_{K,опт} = \sqrt{\frac{a \cdot \Pi_{об,V} \cdot X_A}{8000 \cdot k \cdot (1 - X_A) \cdot \Pi_{kat}}} = \sqrt{\frac{0,15 \cdot 400 \cdot 0,95}{8000 \cdot 20 \cdot 0,05 \cdot 4}} = 0,042.$$

Задача 4.5. Найти для предыдущего примера по критерию себестоимости оптимальную концентрацию катализатора, если все условия остаются прежними, но F_R и $F_{A,0}$ могут изменяться, а $\Pi_{об,0} = 1500$ у.е. и $V = 4$ м³.

Решение. В данном случае минимизации подлежит сумма:

$$\sum C_{R,\text{пер}} = \frac{1}{F_{A,0} \cdot X_A \cdot \Phi_R} \left[F_{A,0} \cdot \frac{C_{kat}}{C_{A,0}} \cdot \Pi_{kat} + \frac{a}{8000} \cdot (\Pi_{об,0} + V \cdot \Pi_{об,V}) \right].$$

При известном объеме реактора $F_{A,0} \cdot X_A = V \cdot k \cdot C_{kat} \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A)$, что дает:

$$\sum C_{R,\text{пер}} = \frac{1}{\Phi_R} \cdot \left[\frac{C_{kat} \cdot \Pi_{kat}}{C_{A,0} \cdot X_A} + \frac{a}{8000} \cdot \frac{\Pi_{об,0} + V \cdot \Pi_{об,V}}{V \cdot k \cdot C_{kat} \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A)} \right].$$

При постоянных Φ_R , $C_{A,0}$, X_A находим производную и приравниваем ее к нулю:

$$\frac{d \sum C_{R,\text{пер}}}{d C_{kat}} = \frac{\Pi_{kat}}{C_{A,0} \cdot X_A} - \frac{a}{8000} \cdot \frac{\Pi_{об,0} + V \cdot \Pi_{об,V}}{V \cdot k \cdot C_{kat}^2 \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A)}.$$

В результате чего получаем решение:

$$C_{kat,\text{опт}} = \sqrt{\frac{a \cdot \Pi_{об,0} + V \cdot \Pi_{об,V} \cdot X_A}{8000 \cdot k \cdot (1 - X_A) \cdot \Pi_{kat}}} = \sqrt{\frac{0,15 \cdot (1500 + 4 \cdot 400) \cdot 0,95}{8000 \cdot 20 \cdot 0,05 \cdot 4}} = 0,059 \text{ кмоль/м}^3.$$

Задача 4.6. Реакцию $A + Y \longrightarrow R$ проводят в жидкой фазе в реакторе полного смешения в присутствии инициатора. Реагент А является растворителем, а Y — газом, барботирующим через жидкость, вследствие чего их концентрации постоянны. Реакция имеет псевдонулевые порядки по реагентам, ее скорость описывается уравнением $r = k_{эф} \cdot C_{и}^{0,5}$. При 350 К константы скорости распада инициатора равны $k_0 = 2,00 \text{ ч}^{-1}$ и $k_{эф} = 10,0 \text{ л}^{0,5} \cdot \text{моль}^{-0,5} \cdot \text{ч}^{-1}$, энергии активации $E_0 = 110 \text{ кДж/моль}$ и $E_{эф} = 75 \text{ кДж/моль}$. Определить оптимальные концентрации инициатора и температуру реакции, если оптимальная цена инициатора $\Pi_{и} = 200 \text{ у.е./кмоль}$, амортизационные отчисления по реакционному узлу описываются уравнением:

$$\sum A_{\text{пер}} = \frac{0,15}{8000} (\Pi_{об,0} + V \cdot \Pi_{об,V}) [\text{у.е./ч}],$$

где $\Pi_{об,V} = 3000 \text{ у.е./м}^3$, степень конверсии инициатора $X_{и} = 0,090$ и степень конверсии реагента $X_A = 0,25$ при $C_{A,0} = 10 \text{ моль/л}$.

Решение. Из дифференциального уравнения для удельного расхода инициатора получим для реактора полного смешения и заданной кинетики процесса:

$$\frac{C_{и,0}}{C_{A,0} \cdot X_A} = \frac{k_0}{k_{эф}} \cdot \frac{[C_{и,0} \cdot (1 - X_{и})]^{0,5}}{X_{и}}.$$

Отсюда начальная концентрация инициатора, обеспечивающая заданную степень конверсии X_A , будет равна:

$$C_{и,0} = \left(\frac{k_0}{k_{эф}} \cdot C_{A,0} \cdot X_A \right)^2 \frac{(1 - X_{и})}{X_{и}^2}.$$

Для ее расчета находим k_0 , $k_{эф}$ и $k_0/k_{эф}$ для ряда температур через пятиградусные интервалы по уравнению

$$\ln \frac{k_T}{K_{350}} = -\frac{E_i}{R} \cdot \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{350} \right):$$

T, K	330	335	340	345	350	355
$k_0, ч^{-1}$	0,20	0,37	0,66	1,16	2,00	3,41
$k_{эф} л^{0,5} \cdot молль^{-0,5} \cdot ч^{-1}$	2,1	3,2	4,7	6,9	10	14,4
$k_0/k_{эф}$	0,096	0,117	0,140	0,168	0,200	0,237
$C_{и,0}$	0,0072	0,0105	0,0152	0,0218	0,0309	0,0433

Из часового экономического баланса находим уравнение для суммы переменных затрат:

$$\begin{aligned} \sum C_{R,пер} &= \frac{1}{F_{A,0} \cdot X_A \cdot \Phi_R} \left[F_{A,0} \cdot \Pi_{и} + \frac{0,15}{8000} (\Pi_{A,0} + V \cdot \Pi_{об,V}) \right] = \\ &= \frac{C_{и,0} \cdot \Pi_{и}}{C_{A,0} \cdot X_A \cdot \Phi_R} + \frac{0,15 \cdot \Pi_{об,0}}{8000 \cdot F_{A,0} \cdot X_A \cdot \Phi_R} + \frac{0,15 \cdot V \cdot \Pi_{об,V}}{8000 \cdot F_{A,0} \cdot X_A \cdot \Phi_R}. \end{aligned}$$

При заданной мощности по целевому продукту и селективности второе слагаемое уравнения постоянно, и минимизации подлежит сумма двух других. Объем реактора находим по известному выражению:

$$V = \frac{F_{A,0} \cdot X_A}{|r_A|} = \frac{F_{A,0} \cdot X_A}{k_{эф} \cdot [C_{и,0} \cdot (1 - X_{и})]^{0,5}},$$

что окончательно дает:

$$\sum C_{R,пер} = \frac{C_{и,0} \cdot \Pi_{и}}{C_{A,0} \cdot X_A \cdot \Phi_R} + \frac{0,15 \cdot \Pi_{об,0}}{8000 \cdot k_{эф} \cdot [C_{и,0} \cdot (1 - X_{и})]^{0,5} \cdot \Phi_R}.$$

Оптимум при постоянной селективности не зависит от Φ_R , поэтому рассчитываем $\sum C_{R,пер}$ при $\Phi_R = 1$ и найденным значениям $k_{эф}$ и $C_{и,0}$, при разных температурах:

T, K	330	335	340	345	350	355
$\sum C_{R,пер}$	2,67	2,58	2,66	2,95	3,48	4,32

Таким образом, минимум себестоимости достигается при температуре реакции 335 К и начальной концентрации инициатора 0,0105 моль/л.

Задача 4.7. Целевой продукт R получают при последовательных реакциях первого порядка $A \xrightarrow{k_1} R \xrightarrow{k_2} S$ в изотермических условиях в реакторе идеального вытеснения объемом $2,5 \text{ м}^3$. Из экспериментальных данных известно, что $k_1 = 0,10 \text{ ч}^{-1}$ и $k_2/k_1 = 0,5$.

Оптовая цена реагента равна $\Pi_A = 20 \text{ у.е./кмоль}$, энергетические затраты на выделение и рециркуляцию непревращенного вещества A составляют 3 у.е./кмоль , амортизационные отчисления по реакционному узлу, стадии отделения непревращенного вещества A и его рециркуляции описываются уравнением:

$$\sum A_{\text{пер}} = \frac{0,20 \cdot \Pi_{\text{об}}}{8000} [\text{у.е./ч}],$$

где $\Pi_{\text{об}} = 50000 \text{ у.е.}$ и $C_{A,0} = 2 \text{ моль/л}$. Найти оптимальную степень конверсии в условиях рециркуляции непревращенного реагента A, если:

- 1) побочный продукт является бесполезным отходом;
- 2) побочный продукт утилизируется по цене 7 у.е./кмоль .

Решение. Из рис. 1 находим, что без учета потерь

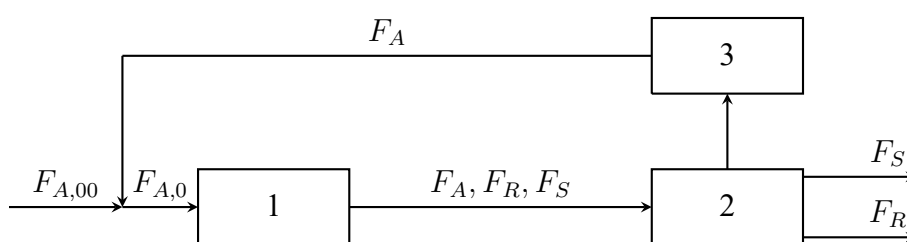


Рис. 1. Схема потоков при рециркуляции непревращенного реагента: 1 — реакционный узел; 2 — блок отделения непревращенного реагента; 3 — блок рециркуляции

$$F_A = F_{A,0} \cdot (1 - X_A),$$

откуда

$$F_{A,0} = F_A + F_{A,00} = F_{A,0} + F_{A,0} \cdot (1 - X_A);$$

$$F_{A,00} = F_{A,0} \cdot X_A;$$

$$F_R = F_{A,0} \cdot X_A \cdot \Phi_R = F_{A,00} \cdot \Phi_R;$$

$$F_S = F_{A,0} \cdot X_A \cdot (1 - \Phi_R) = F_{A,00} \cdot (1 - \Phi_R).$$

В соответствии с кинетикой процесса получим для реактора идеального вытеснения:

$$\frac{V}{F_{A,0}} = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{|r_A|} = \frac{1}{k_1 \cdot C_{A,0}} \cdot \ln \frac{1}{1 - X_A},$$

или

$$F_{A,0} = \frac{k_1 \cdot C_{A,0} \cdot V}{-\ln(1 - X_A)}.$$

Интегральная селективность для сложной последовательной реакции

$$\Phi_{R, \text{РИБ}}^A = \frac{1}{X_A \cdot \left(\frac{k_2}{k_1} - 1\right)} [1 - X_A - (1 - X_A)^{(k_2/k_1)}].$$

Часовой экономический баланс по переменным затратам в общем виде будет равен:

$$F_R \sum C_{R, \text{пер}} = F_{A,00} \cdot \Pi_A - F_S \cdot \Pi_S + \sum A_{\text{пер}} + F_A \cdot \mathcal{E}_{\text{рец}},$$

откуда сумма переменных слагаемых себестоимости составит:

$$\begin{aligned} \sum C_{R, \text{пер}} &= \frac{F_{A,00} \cdot \Pi_A}{F_{A,00} \cdot \Phi_R} - \frac{F_{A,0} \cdot X_A \cdot (1 - \Phi_R)}{F_{A,0} \cdot X_A \cdot \Phi_R} \cdot \Pi_S + \frac{0,20 + 50000}{8000 \cdot F_{A,0} \cdot X_A \cdot \Phi_R} + \\ &+ \frac{F_A}{F_R} \cdot \mathcal{E}_{\text{рец}} = \frac{\Pi_A}{\Phi_R} - \frac{(1 - \Phi_R)}{\Phi_R} \cdot \Pi_S + \frac{1,25}{F_{A,0} \cdot X_A \cdot \Phi_R} + \frac{1 - X_A}{X_A \cdot \Phi_R} \cdot \mathcal{E}_{\text{рец}}. \end{aligned}$$

Подставляя выражение $F_{A,0} = k_1 \cdot C_{A,0} \cdot V / [-\ln(1 - X_A)]$, получаем уравнение, связанное со всеми параметрами процесса. По нему при разной степени конверсии X_A находим каждое из слагаемых рис. 2).

X_A	0,1	0,2	0,3	0,4	0,45	0,5	0,6	0,7
Φ_R	0,974	0,944	0,911	0,873	0,872	0,828	0,775	0,708
$\frac{\Pi_A}{\Phi_R}$	20,54	21,18	21,95	22,91	23,48	24,14	25,81	28,26
$\frac{(1 - \Phi_R) \cdot \Pi_A}{\Phi_R}$	0,19	0,41	0,68	1,02	1,22	1,45	2,03	2,89
$F_{A,0}$	4,748	2,241	1,402	0,979	0,836	0,721	0,546	0,415
$\frac{1,25}{(F_{A,0} \cdot X_A \cdot \Phi_R)}$	2,71	2,95	3,26	3,66	3,90	4,18	4,93	6,08
$\frac{1 - X_A}{X_A - \Phi_R} \cdot \mathcal{E}_{\text{рец}}$	27,73	12,71	7,68	5,15	4,31	3,62	2,58	1,82
без утилизации	50,98	36,84	32,10	31,72	31,69	31,95	33,32	36,15
с утилизацией	50,79	36,43	32,21	30,70	30,47	30,50	31,29	33,26

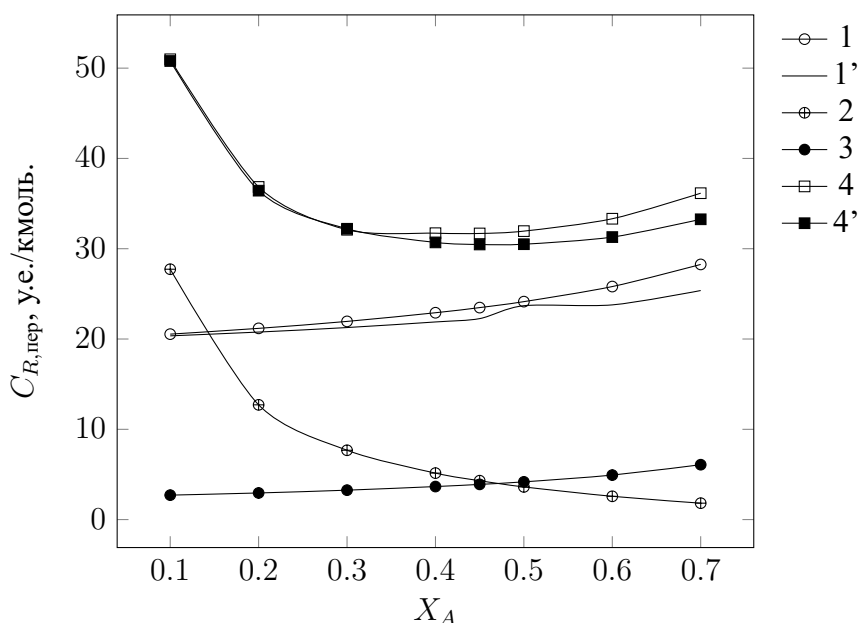
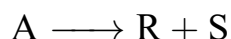


Рис. 2. Зависимость переменных слагаемых себестоимости от степени конверсии: 1 — материальные затраты без утилизации побочного продукта; 1' — то же с утилизацией последнего; 2 — энергетические расходы, связанные с отделением и рециркуляцией непревращенных реагентов; 3 — амортизационные отчисления; 4 — сумма переменных затрат в себестоимости продукта без утилизации побочных продуктов; 4' — то же, с утилизацией последних

Материальные затраты (1) растут с повышением степени конверсии в связи со снижением селективности, уменьшаясь при утилизации побочных веществ (1'). Амортизационные отчисления также растут с повышением степени конверсии, но в результате уменьшения удельной производительности установки. Энергетические же затраты увеличиваются при снижении степени конверсии из-за роста рециркулирующего потока. Таким образом, сумма переменных слагаемых себестоимости имеет минимум при определенных степенях конверсии (в рассмотренном примере при $X_A = 0,45$ без утилизации побочного продукта и при $X_A = 0,50$ с утилизацией). Оптимальная степень конверсии увеличивается, если рецикл непревращенного реагента отсутствует (в этом случае слагаемое себестоимости Π_A/Φ_R превращается в $\Pi_A/(X_A \cdot \Phi_R)$ и минимум себестоимости находится вблизи степени конверсии, соответствующей максимальному выходу целевого продукта $X_R = X_A \cdot \Phi_R$, в данном примере при $X_A = 0,70$).

Задача 4.8. Необратимая реакция



протекает в каскаде из двух реакторов идеального смешения. Исходные данные: $k = 6,57 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$; $C_{A,0} = 0,085 \text{ кмоль/м}^3$. Производственные затраты на обслуживание двух реакторов идеального смешения, соединенных последовательно, составляют $0,07 \text{ у.е./м}^{-3}$. Цена вещества А равна 3500 у.е./кмоль .

Определить время пребывания в каскаде при минимальной себестоимости продукта R, если известно, что объем второго реактора в 1,68 раза больше первого.

Решение. Себестоимость продукта R складывается из затрат на обслуживание реакторов каскада и стоимости израсходованного вещества А, отнесенных к 1 кмоль вещества R:

$$\begin{aligned} S_R &= S_A + S_{\text{обс}}; \\ S_A &= \frac{W_0 \cdot C_{A,0} \cdot \Pi_A}{F_R} = \frac{W_0 \cdot C_{A,0} \cdot \Pi_A}{W_0 \cdot C_{A,0} \cdot X_A} = \frac{\Pi_A}{X_A} [\text{у.е./кмоль}]; \\ S_{\text{обс}} &= \frac{V_P \cdot \Pi_{\text{обс}}}{F_R} = \frac{V_P \cdot \Pi_{\text{обс}}}{W_0 \cdot C_{A,0} \cdot X_A} = \frac{\tau \cdot \Pi_{\text{обс}}}{C_{A,0} \cdot X_A} [\text{у.е./кмоль}]; \\ S_R &= \frac{\Pi_A}{X_A} + \frac{\tau \cdot \Pi_{\text{обс}}}{C_{A,0} \cdot X_A} [\text{у.е./кмоль}], \end{aligned}$$

где: W_0 — объемный расход реакционной массы, $\text{м}^3/\text{с}$; $C_{A,0}$ — начальная концентрация вещества А, кмоль/м^3 ; F_R — мольный расход вещества R, кмоль/с ; V_P — реакционный объем двух реакторов, м^3 ; Π_A — цена А, у.е./кмоль ; $\Pi_{\text{обс}}$ — затраты на обслуживание реакторов, $\text{руб} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{м}^{-3}$; τ — суммарное время пребывания в двух реакторах, с ; X_A — суммарная степень конверсии вещества А в двух реакторах.

Суммарное время пребывания τ в двух реакторах равно сумме времен пребывания в каждом реакторе $\tau = \tau_1 + \tau_2$, где:

$$\begin{aligned} \tau_1 &= C_{A,0} \cdot \frac{X_1}{k \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A)} = \frac{X_1}{k \cdot (1 - X_1)} = \frac{V_{P1}}{W_0}, \\ \tau_2 &= \frac{X_A - X_1}{k \cdot (1 - X_1)} = \frac{1,68 \cdot V_{P1}}{W_0}. \end{aligned}$$

Разделив τ_2 на τ_1 , получим:

$$1,68 = \frac{(1 - X_A) \cdot (X_A - X_1)}{X_1 \cdot (1 - X_A)},$$

$$\text{или } X_1^2 - (2,68 - 0,68 \cdot X_A) \cdot X_1 + X_A = 0.$$

Из корней полученного квадратного уравнения имеет смысл следующий:

$$X_1 = \frac{2,68 - 0,68 \cdot X_A}{2} - \sqrt{\frac{(2,68 - 0,68 \cdot X_A)^2}{4}} - X_A.$$

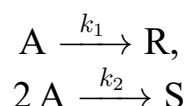
Задавая конечную степень конверсии реагента А, последовательно рассчитываем X_1 , $\tau = 2,68 \cdot X_1/[k \cdot (1 - X_1)]$ и S_R . Результаты сведены в табл. 3.

Таблица 3 – Зависимость себестоимости продукта R от степени конверсии исходного реагента

X_A	X_1	τ , с	S_R , у.е./кмоль
0,2	0,081	361	18984,6
0,3	0,128	597	13306,8
0,4	0,179	892	10587,2
0,5	0,238	1273	9096,7
0,6	0,305	1790	8290,8
0,705	0,389	2599	8000,8
0,8	0,484	3812	8319,6
0,9	0,623	6733	10049,5

Минимальная себестоимость продукта R $S_R = 8000,8$ у.е./кмоль достигнута при $X_A = 0,705$. При этом степень превращения в первом реакторе $X_1 = 0,389$. Полное время пребывания в каскаде $\tau = 2599$ с.

Задача 4.9. Жидкофазную параллельную реакцию



можно проводить в реакторах идеального смешения и идеального вытеснения объемом $0,8 \text{ м}^3$. Производственные затраты на обслуживание обоих типов реакторов одинаковы и составляют $0,0038 \text{ у.е.}/(\text{с} \cdot \text{м}^3)$. Константы скорости: $k_1 = 0,001 \text{ с}^{-1}$; $k_2 = 0,002 \text{ м}^3/(\text{кмоль} \cdot \text{с})$. Концентрация вещества А на входе в реактор $1,2 \text{ кмоль}/\text{м}^3$, его цена $14 \text{ у.е.}/\text{кмоль}$. Непрореагировавшее вещество А можно отделить от продуктов и вернуть снова в производство. При отделении теряется 2 % вещества А.

Определить: тип реактора, обеспечивающий производство продукта R по минимальной себестоимости; минимальную себестоимость продукта R; оптимальные условия проведения процесса: степень конверсии и мольную скорость подачи исходного вещества А, производительность реакционного узла по продукту R.

Решение. Себестоимость продукта R складывается из затрат на обслуживание реактора ($S_{\text{обс}}$) и стоимости израсходованного вещества А (S_A), отнесенных к 1 кмоль вещества R: $S_R = S_A + S_{\text{обс}}$.

$$S_A = \frac{(F_{A,0} - 0,98F_A) \cdot \Pi_A}{F_R} [\text{у.е./кмоль}]; \quad S_{\text{обс}} = \frac{V_P \cdot \Pi_{\text{обс}}}{F_R} [\text{у.е./кмоль}],$$

где: F_R — мольный расход вещества R, кмоль/с; V_P — реакционный объем реактора, м³; Π_A — цена вещества А, у.е./кмоль; $\Pi_{\text{обс}}$ — затраты на обслуживание реактора, у.е./с·м³.

Блок-схема производства приведена на рис. 3.

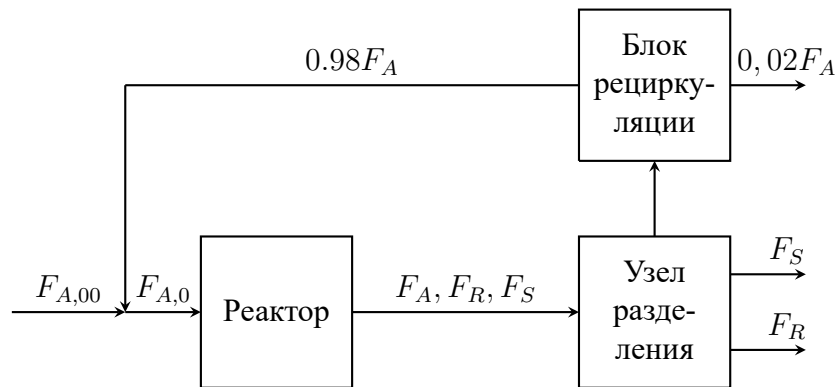


Рис. 3. Схема потоков

Задаваясь степенью конверсии исходного реагента А, последовательно вычисляем:

селективность для РИС

$$\Phi_{R,\text{РИС}} = \varphi_R = \frac{r_R}{|r_A|} = \frac{k_1 \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A)}{k_1 \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A) + 2 \cdot k_2 \cdot C_{A,0}^2 \cdot (1 - X_A)^2},$$

селективность для РИВ $\Phi_{R,\text{РИВ}} = \frac{1}{X_A} \int_0^{X_A} \varphi_R dX_A$,

$F_{A,0}$ для РИС

$$F_{A,0,\text{РИС}} = \frac{V_P \cdot |r_A|}{X_A} = \frac{V_P \cdot [k_1 \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A) + 2 \cdot k_2 \cdot C_{A,0}^2 \cdot (1 - X_A)^2]}{X_A},$$

$F_{A,0}$ для РИВ

$$F_{A,0,\text{РИВ}} = \frac{V_P}{\int_0^{X_A} \frac{dX_A}{|r_A|}} = \frac{V_P}{\int_0^{X_A} \frac{dX_A}{V_P [k_1 C_{A,0} (1 - X_A) + 2 k_2 C_{A,0}^2 (1 - X_A)^2]}}.$$

Находим $F_{R,\text{РИС}} = F_{A,0,\text{РИС}} \cdot X_A \cdot \Phi_{R,\text{РИС}}$, $F_{R,\text{РИВ}} = F_{A,0,\text{РИВ}} \cdot X_A \cdot \Phi_{R,\text{РИВ}}$, и для обоих реакторов рассчитываем S_A , $S_{\text{общ}}$, и S (табл. 4).

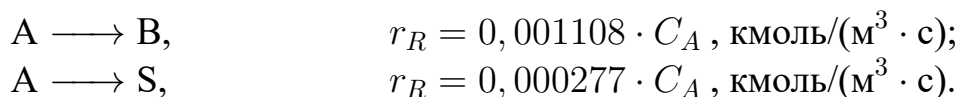
Минимальная себестоимость продукта R 23,78 у.е./кмоль достигается при проведении процесса в РИВ, при этом мольная скорость подачи реагента А в реактор $F_{A,0}$ 0,001566 кмоль/с, степень конверсии 0,556; производительность по R 0,000649 кмоль/с.

Таблица 4 – Зависимость себестоимости продукта R от степени конверсии исходного реагента

X_A	Селективность		Мольная скорость подачи реагента А, $\times 10^4$ кмоль/с		Производительность по R, $\times 10^3$ кмоль/с		Себестоимость R, у.е./кмоль	
	РИС	РИВ	РИС	РИВ	РИС	РИВ	РИС	РИВ
0,1	0,698	0,687	12,372	13,261	8,64	9,11	27,18	27,39
0,2	0,723	0,699	5,315	6,151	7,68	8,59	24,88	25,18
0,3	0,749	0,711	2,993	3,775	6,72	8,05	24,10	24,39
0,4	0,776	0,724	1,855	2,582	5,76	7,47	23,85	23,99
0,409	0,779	0,725	1,781	2,502	5,67	7,42	23,85	23,97
0,5	0,806	0,737	1,190	1,860	4,80	6,86	24,04	23,81
0,556	0,824	0,745	0,930	1,566	4,26	6,49	24,39	23,78
0,6	0,839	0,751	0,763	1,372	3,84	6,18	24,83	23,80
0,7	0,874	0,766	0,471	1,014	2,88	5,44	26,71	24,01
0,8	0,912	0,782	0,263	0,733	1,92	4,59	31,25	24,61
0,9	0,954	0,799	0,112	0,490	0,96	3,53	46,37	26,18
0,95	0,977	0,808	0,052	0,365	0,48	2,80	77,68	28,19

4.2. Задания для самостоятельного решения

Задача 4.10. В проточном реакторе полного смешения ($V_p = 0,567 \text{ м}^3$) проводят реакцию:



Цена вещества А 2 у.е./кмоль; цена продукта R 5 у.е./кмоль; начальная концентрация вещества А $C_{A,0} = 16,03 \text{ кмоль}/\text{м}^3$; сумма затрат на энергетику и амортизацию $(\text{Э} + \text{А}) = 0,007 + 1,25 \cdot F_{A,0} \cdot X_A$. Критерий оптимизации — доход от реализации продукта R.

Определить оптимальную степень конверсии А и количество целевого продукта R, если регенерация А отсутствует, а продукт S не реализуют.

Задача 4.11. Реакции:



проводят в проточном реакторе полного смешения объемом V . Соотношение цен на продукт R и исходный реагент A составляет $\Pi_R/\Pi_A = M$; $k_1/k_2 = N(C_{A,0})$; сумма затрат на энергетику и амортизацию: $b(F_{A,0})$. Критерий оптимизации — доход от реализации продукта R .

Определить оптимальную степень конверсии A и количество получаемого продукта R , если регенерация A отсутствует, а S выбрасывают.

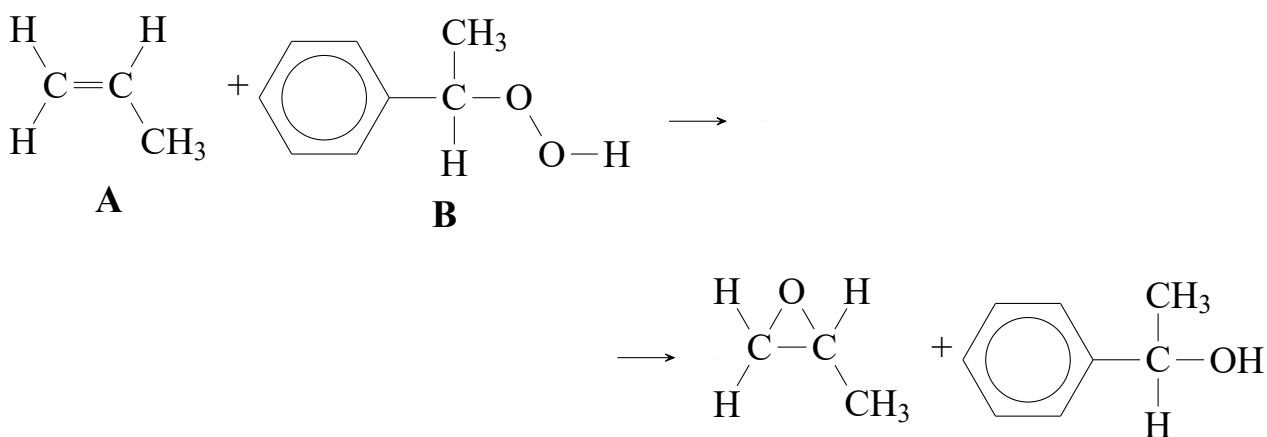
Задача 4.12. Реакции:



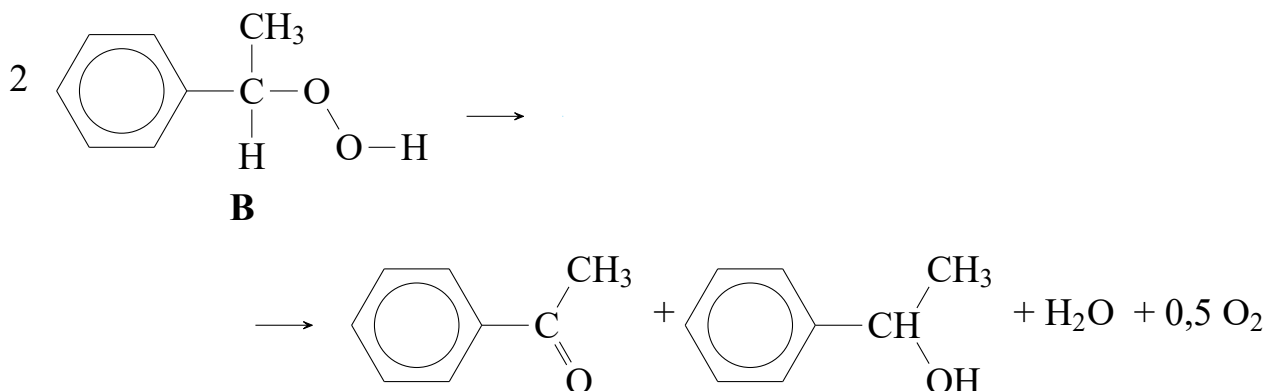
проводят в проточном реакторе полного смешения объемом V . Соотношение цен на продукт R и исходный реагент A $\Pi_R/\Pi_A = M$; $k_1/k_2 = NC_{A,0}$; Критерий оптимизации — доход от реализации продукта R .

Определить оптимальную степень конверсии A и количество целевого продукта R , если регенерация A отсутствует, а S выбрасывают.

Задача 4.13. Реакции:



$$r_1 = 10C_A \cdot C_B, \text{ моль/(\text{л} \cdot \text{ч})},$$



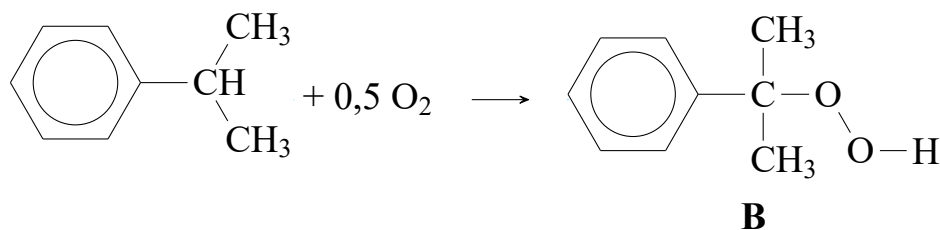
$$r_2 = 10C_B, \text{ моль/(\text{л} \cdot \text{ч})},$$

(где A — пропилен; B — гидропероксид этилбензола) проводят в каскаде из трех проточных реакторов полного смешения равного объема. Вещество B

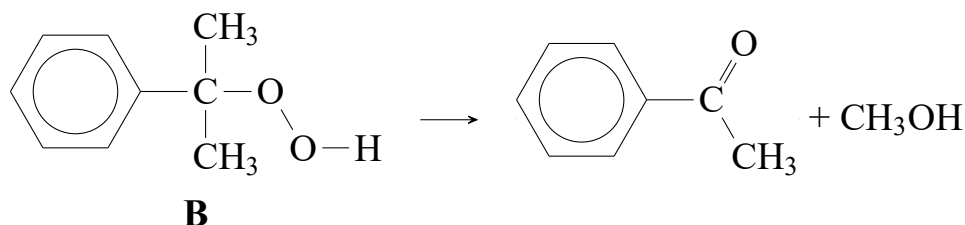
находится в растворе этилбензола (20 мас.%), плотность раствора 900 кг/м³, конверсия В составляет 0,99. Цена: пропилена 50 у.е./т, гидропероксида этилбензола 350 у.е./т. Стоимость рецикла пропилена 4 у.е./т. Критерий оптимизации — минимум себестоимости производства оксида пропилена.

Определить оптимальное соотношение пропилена и гидропероксида этилбензола, считая концентрацию пропилена мало меняющейся.

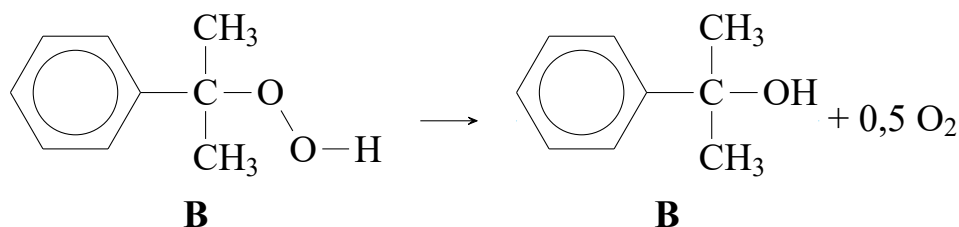
Задача 4.14. Реакции:



$$r_1 = 5 \text{ моль/л}\cdot\text{ч},$$



$$r_2 = 0,5C_B, \text{ моль/}(\text{л}\cdot\text{ч}),$$



$$r_3 = 0,5C_B, \text{ моль/}(\text{л}\cdot\text{ч})$$

проводят в проточном реакторе идеального вытеснения. Плотность реакционной массы равна 900 кг/м^3 . Содержание гидропероксида кумола в растворе не выше 25 мас.%. Цена кумола 250 у.е./т, стоимость рецикла кумола 16 у.е./т. Критерий оптимизации — минимум себестоимости гидропероксида кумола.

Определить оптимальную степень конверсии кумола.

Задача 4.15. Реакции:

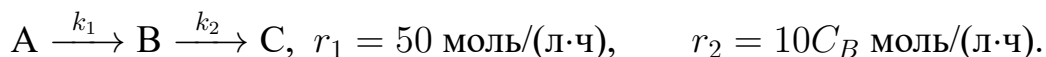


проводят в проточном реакторе полного смешения. При этом: $k_2/k_1 = 0,5$; $k_1 = 2 \text{ ч}^{-1}$; $C_{A,0} = 2 \text{ моль/л}$, цена реагента А 10 у.е./кмоль; стоимость рецикла

$A = 3$ у.е./кмоль; стоимость обслуживания реактора 2 у.е./($\text{м}^3/\text{ч}$). Критерий оптимальности — минимум себестоимости целевого продукта С.

Найти оптимальную степень конверсии, селективность и объем реактора, если поток целевого продукта равен 10 кмоль/ч на выходе из реактора.

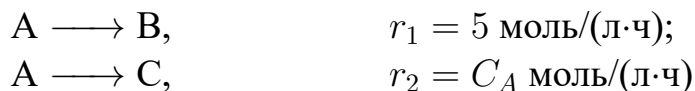
Задача 4.16. В проточном реакторе полного смешения проводят реакцию:



Начальная концентрация $C_{A,0} = 5$ моль/л; цена вещества $A = 20$ у.е./кмоль; стоимость рецикла вещества $A = 3$ у.е./кмоль. Критерий оптимальности — минимум себестоимости продукта В.

Определить оптимальную степень конверсии, селективность и объем аппарата, если поток целевого вещества составляет 100 кмоль/ч.

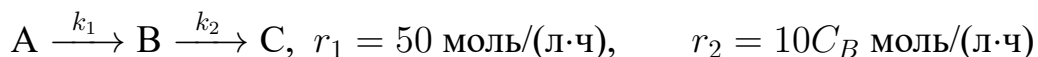
Задача 4.17. Реакции:



проводят в проточном реакторе идеального вытеснения. Начальная концентрация $C_{A,0} = 5$ моль/л; цена вещества $A = 20$ у.е./кмоль; стоимость рецикла вещества $A = 3$ у.е./кмоль. Критерий оптимальности — минимум себестоимости продукта С.

Определить оптимальную степень конверсии, селективность и объем аппарата, если поток целевого вещества составляет 100 кмоль/ч.

Задача 4.18. Реакцию:



проводят в проточном реакторе идеального вытеснения. Начальная концентрация $C_{A,0} = 5$ моль/л; цена вещества $A = 20$ у.е./кмоль; стоимость рецикла вещества $A = 3$ у.е./кмоль. Критерий оптимальности — минимум себестоимости продукта В.

Определить оптимальную степень конверсии, селективность и объем аппарата, если поток целевого вещества составляет 100 кмоль/ч.

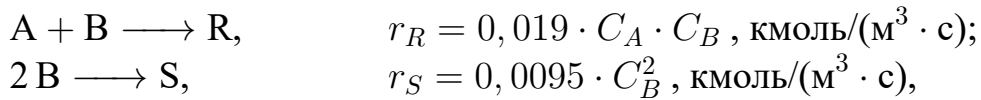
Задача 4.19. Реакции:



проводят в проточном реакторе полного смешения. Начальная концентрация $C_{A,0} = 5$ моль/л; цена вещества $A = 20$ у.е./кмоль; стоимость рецикла вещества $A = 3$ у.е./кмоль. Критерий оптимальности — минимум себестоимости продукта С.

Определить оптимальную степень конверсии, селективность и объем аппарата, если поток целевого вещества составляет 100 кмоль/ч.

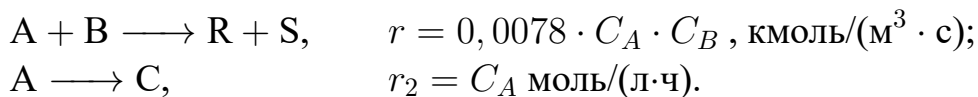
Задача 4.20. Реакции:



проводят в проточном реакторе полного смешения. Цены на вещества А и В равны и составляют 500 у.е./кмоль. Начальные концентрации $C_{A,0} = C_{B,0} = 0,1$ кмоль/м³. Расходы на обслуживание реактора пропорциональны его объему (V) и составляют $0,0028 \cdot V$ у.е./с. Критерий оптимальности — минимум себестоимости продукта R.

Вычислить оптимальные степени конверсии А и В, а также объем реактора и мольные потоки $F_{A,0}$ и $F_{B,0}$, если поток целевого вещества на выходе из реактора $28 \cdot 10^{-6}$ кмоль/с, а регенерация веществ А и В отсутствует.

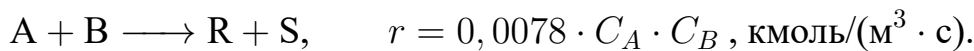
Задача 4.21. В проточном реакторе полного смешения идут реакции:



Поток $F_{A,0} = 25,4 \cdot 10^{-6}$ кмоль/с. Начальная концентрация $C_{A,0} = 0,12$ кмоль/м³. Цена вещества А = 14 у.е./кмоль, вещества В = 68 у.е./кмоль. Затраты на обслуживание реактора пропорциональны его объему (V) и составляют $0,0038 \cdot V$ у.е./с. Критерий оптимальности — минимум себестоимости продукта R.

Определить оптимальный объем реактора и начальную концентрацию вещества В, если поток продукта составляет $F_R = 12,9 \cdot 10^{-6}$ кмоль/с.

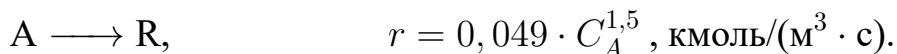
Задача 4.22. В проточном реакторе полного смешения идет реакция:



Поток $F_{A,0} = 25,4 \cdot 10^{-6}$ кмоль/с. Начальная концентрация $C_{A,0} = 0,12$ кмоль/м³. Цена вещества А = 14 у.е./кмоль, вещества В = 68 у.е./кмоль. Затраты на обслуживание реактора пропорциональны его объему (V) и составляют $0,0038 \cdot V$ у.е./с. Критерий оптимальности — минимум себестоимости продукта R.

Определить оптимальный объем реактора и начальную концентрацию вещества В, если поток продукта составляет $F_R = 12,9 \cdot 10^{-6}$ кмоль/с.

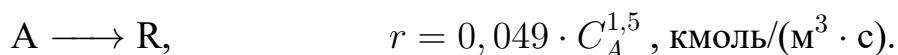
Задача 4.23. В периодическом реакторе проводят реакцию:



Начальная концентрация $C_{A,0} = 0,05$ кмоль/м³. Цена А = 5,6 у.е./кмоль. Затраты на обслуживание реактора пропорциональны его объему V и составляют $0,00185 \cdot V$ у.е./с (с учетом времени загрузки и выгрузки, равного 70 % времени протекания реакции). Затраты на разделение — 1,1 у.е./кмоль А. При отделении теряется 10 % продукта, а отлеленное вещество А не используется. Критерий оптимальности — минимум себестоимости продукта R.

Вычислить оптимальную степень конверсии и себестоимость R.

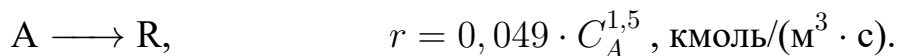
Задача 4.24. В проточном реакторе полного смешения проводят реакцию:



Начальная концентрация $C_{A,0} = 0,05$ кмоль/м³. Цена А = 5,6 у.е./кмоль. Затраты на обслуживание реактора пропорциональны его объему (V) и составляют $0,00185V$ у.е./с. Затраты на отделение продукта 1,1 у.е./кмоль А. При отделении теряется 10 % продукта, а непрореагировавшее вещество А не используется. Критерий оптимальности — минимум себестоимости R.

Вычислить оптимальную степень конверсии и себестоимость R.

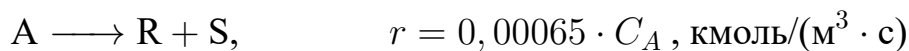
Задача 4.25. В проточном реакторе идеального вытеснения проводят реакцию:



Начальная концентрация $C_{A,0} = 0,05$ кмоль/м³. Цена А = 5,6 у.е./кмоль. Затраты на обслуживание реактора пропорциональны его объему V и составляют $0,00185 \cdot V$ у.е./с. Затраты на разделение — 1,1 у.е./кмоль А. При отделении теряется 10 % продукта, а непрореагировавшее вещество А не используется. Критерий оптимальности — минимум себестоимости R.

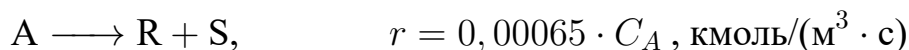
Вычислить оптимальную степень конверсии и себестоимость R.

Задача 4.26. В проточном реакторе идеального вытеснения проводят реакцию:



в каскаде из нескольких проточных реакторов полного смешения равного объема $V = 0,72$ м³. Начальная концентрация $C_{A,0} = 0,085$ кмоль/м³, цена вещества А = 3,5 у.е./кмоль. Затраты на обслуживание одного реактора пропорциональны его объему и составляют $0,00052V$ у.е./с, затраты на обслуживание двух реакторов составляют $0,000424 \cdot V$ у.е./с, затраты на обслуживание трех реакторов $0,00037 \cdot V$ у.е./с, затраты на обслуживание четырех реакторов $0,00035 \cdot V$ у.е./с.

Критерий оптимальности — минимум себестоимости продукта R. Определить оптимальные скорости подачи реагента, степени конверсии и себестоимость R для случаев одного, двух, трех и четырех реакторов в каскаде.

Задача 4.27. Реакцию:

проводят в каскаде из двух проточных реакторов полного смешения (соотношение объемов реакторов каскада: $V_2 = 1,68 \cdot V_1$). Начальная концентрация $C_{A,0} = 0,085$ кмоль/м³. Затраты на обслуживание каскада пропорциональны суммарному объему реакторов и составляют $0,00058(V_1 + V_2)$ у.е./с, цена вещества $A = 3,5$ у.е./кмоль. Критерий оптимальности — минимум себестоимости продукта R .

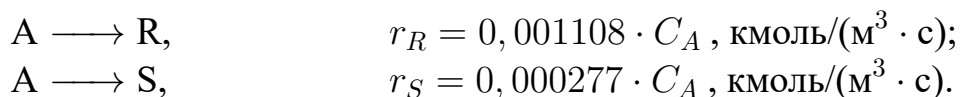
Определить оптимальное время пребывания и соответствующую степень конверсии.

Задача 4.28. В реакторе идеального вытеснения идет реакция:

Цена вещества A Π_A , у.е./кмоль; стоимость рецикла A : $C_{\text{рц}}$, у.е./кмоль; стоимость амортизации оборудования: $a_1 + a_2 \cdot V$, где V — объем реактора, м³; цена продукта B Π_B , у.е./кмоль. Критерий оптимизации — доход, полученный от производства вещества B при постоянном начальном потоке A ($F_{A,0} = \text{const}$).

Найти оптимальную степень конверсии вещества A .

Задача 4.29. Реакции проводят в проточном реакторе полного смешения объемом $0,567$ м³ ::



Цена вещества A 2 у.е./кмоль; цена продукта R 5 у.е./кмоль, начальная концентрация $C_{A,0} = 16,03$ кмоль/м³, сумма затрат на энергетику и амортизацию: $0,007 + 2,5 \cdot F_{A,0} \cdot X_A$. Критерий оптимизации — доход от реализации продукта R .

Определить оптимальную степень конверсии A и количество получаемого целевого продукта R , если регенерация A отсутствует, а продукт S выбрасывается.

Задача 4.30. Реакции:

проводят в проточном реакторе полного смешения объемом V . Соотношение цен продукта R и исходного вещества A составляет $\Pi_R/\Pi_A = M$; соотношение констант скоростей k_1/k_2 пропорционально начальной концентрации

вещества А $C_{A,0}$; сумма затрат на энергетику и амортизацию пропорциональна начальному потоку вещества А $F_{A,0}$. Критерий оптимизации — доход от реализации продукта R.

Определить оптимальную степень конверсии А и количество получаемого продукта R, если регенерация А отсутствует, а S выбрасывается.

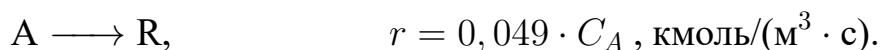
Задача 4.31. В проточном реакторе полного смешения идет реакция:



Цена вещества А Π_A у.е./кмоль, стоимость его рецикла C_{PC} у.е./кмоль; стоимость амортизации оборудования: $a_1 + a_2 \cdot V$, где V — объем реактора, m^3 ; цена продукта В Π_B , у.е./кмоль. Критерий оптимизации — доход, полученный от производства вещества В при постоянном начальном потоке А.

Найти оптимальную степень конверсии вещества А.

Задача 4.32. В реакторе идеального вытеснения идет реакция:



Начальная концентрация вещества А $C_{A,0}$ 0,05 кмоль/ m^3 , цена А 5,6 у.е./кмоль, затраты на обслуживание реактора пропорциональны его объему V : $0,00185 \cdot V$ у.е./с, затраты на разделение 1,1 у.е./кмоль А. При отделении теряется 10 % продукта, вещество А повторно не используется. Критерий оптимальности — минимум себестоимости продукта.

Вычислить оптимальную степень конверсии и себестоимость R.

Задача 4.33. Реакцию:



проводят в проточном реакторе идеального вытеснения. Начальная концентрация $C_{A,0} = 5$ моль/л; цена вещества А = 20 у.е./кмоль, стоимость рецикла вещества А = 3 у.е./кмоль. Критерий оптимальности — минимум себестоимости продукта В.

Определить оптимальную степень конверсии, селективность и объем аппарата, если поток целевого вещества составляет 100 кмоль/ч.

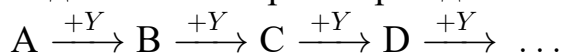
Задача 4.34. Реакцию:



проводят в проточном реакторе полного смешения. Начальная концентрация $C_{A,0} = 5$ моль/л; цена вещества А = 20 у.е./кмоль; стоимость рецикла вещества А = 3 у.е./кмоль. Критерий оптимальности — минимум себестоимости продукта В.

Определить оптимальную степень конверсии, селективность и объем аппарата, если поток целевого вещества составляет 100 кмоль/ч.

Задача 4.35. В реакторе идеального вытеснения проводится реакция:



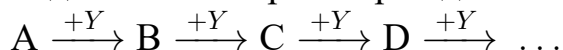
до полной конверсии Y с рециклом непревращенного A. Стоимость, у.е./моль: A = 1, B = 2, Y = 0,1, продуктов C, D, и т.д. = 0,2, рецикла A = 0,1.

Скорость реакции:

$$-r_Y = k_1 C_A C_Y + k_2 C_B C_Y + k_2 C_C C_Y + k_2 C_D C_Y + \dots, \\ k_1 = k_2 = 1 \text{ л/моль}\cdot\text{ч}.$$

Найти оптимальное отношение $F_{Y,0}/F_{A,0}$ и необходимый объем реактора, если концентрация A на входе в реактор 1 моль/л, $X_Y = 0,99$ и заданная производительность $F_B = 100$ моль/ч.

Задача 4.36. В реакторе идеального смешения проводится реакция:



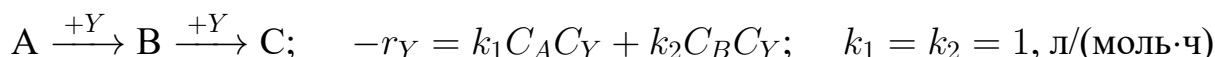
до полной конверсии Y с рециклом непревращенного A. Стоимость, у.е./моль: A = 1, B = 2, Y = 0,1, продуктов C, D, и т.д. = 0,2, рецикла A = 0,1.

Скорость реакции:

$$-r_Y = k_1 C_A C_Y + k_2 C_B C_Y + k_2 C_C C_Y + k_2 C_D C_Y + \dots, \\ k_1 = k_2 = 1 \text{ л/моль}\cdot\text{ч}.$$

Найти оптимальное отношение $F_{Y,0}/F_{A,0}$ и необходимый объем реактора, если концентрация A на входе в реактор 1 моль/л, $X_Y = 0,99$ и заданная производительность $F_B = 100$ моль/ч.

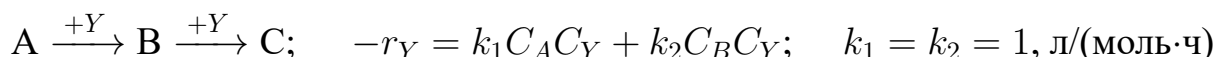
Задача 4.37. Реакция:



проводится в проточном реакторе идеального смешения до полной конверсии Y с рециклом непревращенного A. Стоимость: A = 1 у.е./моль, B = 2 у.е./моль, Y = 0,1 у.е./моль, C = 0,2 у.е./моль. Стоимость рецикла A = 0,1 у.е./моль.

Найти оптимальное отношение $F_{Y,0}/F_{A,0}$ и необходимый объем реактора, если концентрация A на входе в реактор 1 моль/л, $X_Y = 0,99$ и заданная производительность $F_B = 100$ моль/ч.

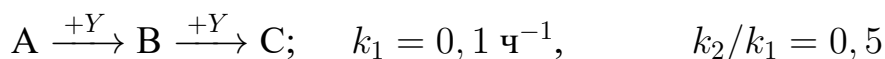
Задача 4.38. В реакторе идеального вытеснения проводится реакция:



до полной конверсии Y с рециклом непревращенного A. Стоимость, у.е./моль: A = 1, B = 2, Y = 0,1, C = 0,2, рецикла A = 0,1.

Найти оптимальное отношение $F_{Y,0}/F_{A,0}$ и необходимый объем реактора, если концентрация A на входе в реактор 1 моль/л, $X_Y = 0,99$ и заданная производительность $F_B = 100$ моль/ч.

Задача 4.39. Продукт В получают по реакции:

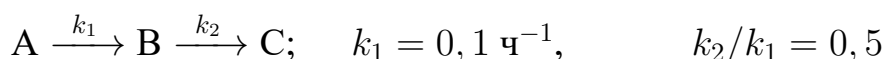


в реакторе идеального вытеснения объемом 3 м^3 .

Стоимость: $A = 20 \text{ у.е./кмоль}$, $C = 7 \text{ у.е./кмоль}$, рецикла $A = 3 \text{ у.е./кмоль}$; начальная концентрация $C_{A,0} = 2 \text{ моль/л}$.

Найти оптимальную степень конверсии А и производительность установки по В.

Задача 4.40. Продукт В получают по реакции:

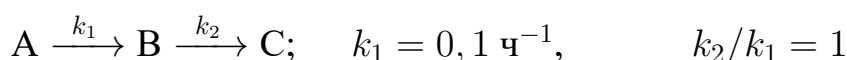


в проточном реакторе идеального смешения объемом 3 м^3 .

Стоимость: $A = 20 \text{ у.е./кмоль}$, $C = 7 \text{ у.е./кмоль}$, рецикла $A = 3 \text{ у.е./кмоль}$; начальная концентрация $C_{A,0} = 2 \text{ моль/л}$.

Найти оптимальную степень конверсии А и производительность установки по В.

Задача 4.41. Продукт В получают по реакции:

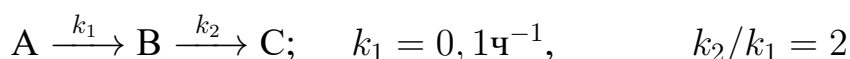


в проточном реакторе идеального смешения объемом 3 м^3 .

Стоимость: $A = 20 \text{ у.е./кмоль}$, $C = 7 \text{ у.е./кмоль}$, рецикла $A = 3 \text{ у.е./кмоль}$; начальная концентрация $C_{A,0} = 2 \text{ моль/л}$.

Найти оптимальную степень конверсии А и производительность установки по В.

Задача 4.42. Продукт В получают по реакции:

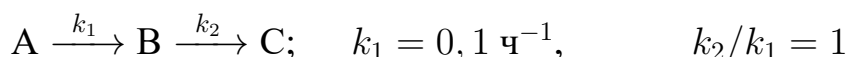


в реакторе идеального смешения объемом 3 м^3 .

Стоимость: $A = 20 \text{ у.е./кмоль}$, $C = 7 \text{ у.е./кмоль}$, рецикла $A = 3 \text{ у.е./кмоль}$; начальная концентрация $C_{A,0} = 2 \text{ моль/л}$.

Найти оптимальную степень конверсии А и производительность установки по В.

Задача 4.43. Продукт В получают по реакции:



в реакторе идеального вытеснения объемом 3 м^3 .

Стоимость: $A = 20 \text{ у.е./кмоль}$, $C = 7 \text{ у.е./кмоль}$, рецикла $A = 3 \text{ у.е./кмоль}$; начальная концентрация $C_{A,0} = 2 \text{ моль/л}$.

Найти оптимальную степень конверсии А и производительность установки по В.

Задача 4.44. В реакторе идеального смешения проводится реакция:



с рециклом непревращенного А. Производительность $F_B = 100$ моль/ч. $C_{A,0} = 1$ моль/л. Стоимость: А = 1 у.е./моль, В = 3 у.е./моль. Эксплуатационные расходы 20 у.е./ч. Стоимость рецикла А = 0,2 у.е./моль. Расходы на реактор пропорциональны его объему: $S_V = 0,5 \cdot V$ у.е./л·ч.

Найти объем реактора, обеспечивающий минимум затрат.

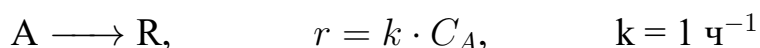
Задача 4.45. В реакторе идеального вытеснения проводится реакция:



с рециклом непревращенного А. $C_{A,0} = 1$ моль/л, заданная производительность $F_B = 100$ моль/ч. Стоимость, у.е./моль: А = 1, В = 3, рецикла 0,2. Эксплуатационные расходы 20 у.е./ч. Расходы на реактор пропорциональны его объему: $S_V = 0,5 \cdot V$ у.е./л·ч.

Найти объем реактора, обеспечивающий минимум затрат.

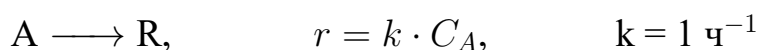
Задача 4.46. В реакторе идеального вытеснения проводится реакция:



с заданной производительностью F_B 100 моль/ч и рециклом непревращенного А. $C_{A,0} = 1$ моль/л. Стоимость: А = 1 у.е./моль, В = 3 у.е./моль. Эксплуатационные расходы 20 у.е./ч. Стоимость рецикла А = 0,2 у.е./моль. Расходы на реактор пропорциональны его объему: $S_V = 0,5 \cdot V$ у.е./л·ч.

Найти объем реактора, обеспечивающий минимум затрат.

Задача 4.47. Реакция:



проводится в проточном реакторе идеального смешения с рециклом непревращенного А. Заданная производительность $F_B = 100$ моль/ч. Стоимость: А = 1 у.е./моль, В = 3 у.е./моль. Эксплуатационные расходы 20 у.е./ч. Стоимость рецикла А = 0,2 у.е./моль. Расходы на реактор пропорциональны его объему: $S_V = 0,5 \cdot V$ у.е./л·ч. $C_{A,0} = 1$ моль/л.

Найти объем реактора, обеспечивающий минимум затрат.

Задача 4.48. Реакции:



проводятся в проточном реакторе идеального смешения с рециклом непревращенного А. Заданная производительность $F_B = 100$ моль/ч. Стоимость, у.е./моль: А — 1, В — 2, С — 0,2, рецикла А — 0,1.

Найти оптимальную конверсию А и необходимый объем реактора, если $C_{A,0} = 1$ моль/л, $k_1 = 2$ л/(моль·ч), $k_2 = 1$ ч⁻¹.

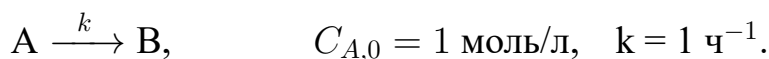
Задача 4.49. Реакции:



проводятся в реакторе идеального вытеснения с рециклом непревращенного А. Заданная производительность $F_B = 100$ моль/ч. Стоимость, у.е./моль: А — 1, В — 2, С — 0,2, рецикла А — 0,1.

Найти оптимальную конверсию А и необходимый объем реактора, если $C_{A,0} = 1$ моль/л, $k_1 = 2$ л/(моль·ч), $k_2 = 1$ ч⁻¹.

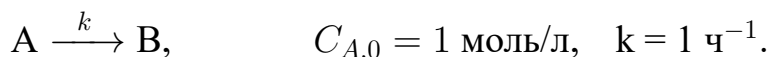
Задача 4.50. В периодическом реакторе проводят реакцию:



Время непроизводительных операций 1 ч, объем реактора 100 л. Цена вещества А = 1000 у.е./моль; цена продукта В = 2000 у.е./моль, затраты на эксплуатацию установки 20000 у.е./ч.

Найти условия работы реактора для достижения наибольшей прибыли.

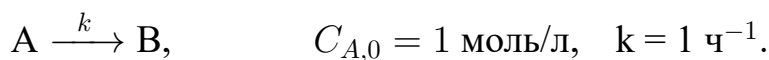
Задача 4.51. В проточном реакторе идеального смешения (объем 100 л) идет реакция:



Время непроизводительных операций 1 ч. Цена А = 1000 у.е./моль; цена продукта В = 2000 у.е./моль, затраты на эксплуатацию установки 20000 у.е./ч.

Найти условия работы реактора для достижения наибольшей прибыли.

Задача 4.52. В проточном реакторе идеального вытеснения объемом 100 л идет реакция:



Время непроизводительных операций 1 ч. Цена А = 1000 у.е./моль; цена продукта В = 2000 у.е./моль, затраты на эксплуатацию установки 20000 у.е./ч.

Найти условия работы реактора для обеспечения наибольшей прибыли.

Задача 4.53. Реакция:



идет в проточном реакторе идеального смешения при $X_A = 0,95$. Производительность установки 50 моль/ч по продукту В, стоимость А = 1000 у.е./моль, стоимость В = 1500 у.е./моль, эксплуатационные расходы 20000 у.е./ч.

Есть ли возможность повышения дохода путем изменения $F_{A,0}$ и X_A ? Как обеспечить максимальный доход?

Задача 4.54. Реакция:

проводится в реакторе идеального вытеснения при $X_A = 0,95$. Производительность установки 50 моль/ч по продукту В, стоимость А = 1000 у.е./моль, стоимость В = 1500 у.е./моль, эксплуатационные расходы 20000 у.е./ч.

Есть ли возможность повышения дохода путем изменения $F_{A,0}$ и X_A ? Как обеспечить максимальный доход?

Задача 4.55. Реакции:

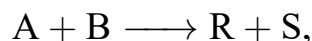
проводят в проточном реакторе идеального смешения с рециклом непревращенного А. Заданная производительность $F_B = 100$ моль/ч. Стоимость: А — 1 у.е./моль, В — 2 у.е./моль, С — 0,2 у.е./моль, рецикла А — 0,1 у.е./моль.

Найти оптимальную конверсию А и необходимый объем реактора, если $C_{A,0} = 1$ моль/л, $k_1 = 2,5$ л/(моль·ч), $k_2 = 0,5$ ч⁻¹.

Задача 4.56. Реакции:

проводят в реакторе идеального вытеснения с рециклом непревращенного А. Заданная производительность $F_B = 100$ моль/ч. Стоимость: А — 1 у.е./моль, В — 2 у.е./моль, С — 0,2 у.е./моль, рецикла А — 0,1 у.е./моль.

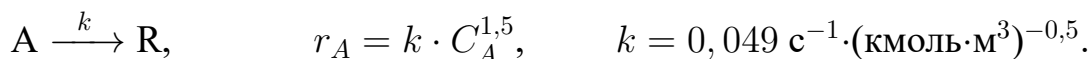
Найти оптимальную конверсию А и необходимый объем реактора, если $C_{A,0} = 1$ моль/л, $k_1 = 2,5$ л/(моль·ч), $k_2 = 0,5$ ч⁻¹.

Задача 4.57. Реакция

где R — продукт реакции. Константа скорости $k = 0,0078$ м³/(с·кмоль).

Концентрация вещества А на входе в реактор $C_{A,0} 0,12$ кмоль/м³; скорость подачи $F_{A,0} 2,54 \cdot 10^{-5}$ кмоль/с; производительность по целевому продукту R $F_R 1,29 \cdot 10^{-5}$ кмоль/с. Цена вещества А — 14 у.е./кмоль; вещества В — 68 у.е./кмоль. Затраты на обслуживание, у.е./(с·м³), проточного РИС — 0,0038; проточного РИВ — 0,0182.

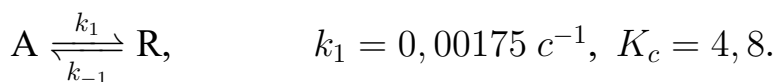
Для обоих реакторов рассчитать объемы и определить оптимальный состав исходной смеси с тем, чтобы полные затраты на производство продукта были минимальными. Определить себестоимость и полные затраты на производство продукта.

Задача 4.58. Жидкофазная реакция

Концентрация вещества А на входе в реактор $C_{A,0} 0,05 \text{ кмоль/м}^3$. Цена вещества А — 5,6 у.е./кмоль.

Затраты на обслуживание реактора составляют 0,00185 у.е./($\text{с} \cdot \text{м}^3$). Затраты на выделение продукта равны 1,1 у.е./(кмоль непрореагировавшего вещества А). При отделении продукта теряется 10 %. Непрореагировавшее вещество А в дальнейшем не используется.

Определить минимальную себестоимость продукта при проведении процесса в непрерывнодействующих РИС и РИВ. Определить при этом степень превращения.

Задача 4.59. В реакторе идеального смешения проводят реакцию

Начальные концентрации, кмоль/м^3 : $C_{A,0} = 0,45$; $C_{R,0} = 0$. Цена вещества А — 5,6 у.е./кмоль. Объем реактора $V_p = 1,4 \text{ м}^3$, производственные затраты на его обслуживание — 0,0062 у.е./($\text{м}^3 \cdot \text{с}$). После реактора проводится разделение продукта и непрореагировавшего вещества А, причем 10 % непрореагировавшего вещества А теряются, а продукт выделяется полностью. Выделенное вещество А можно снова использовать в производстве. Производственные затраты на разделение составляют 1,2 у.е./(кмоль непрореагировавшего А). Оптовая цена продукта $R = 28,4 \text{ у.е./кмоль}$.

1. Определить максимальный доход при использовании РИВ и РИС. Объем реактора вытеснения $V_p = 1,4 \text{ м}^3$, производственные затраты на его обслуживание — 0,008 у.е./($\text{м}^3 \cdot \text{с}$). Найти себестоимость продукта.

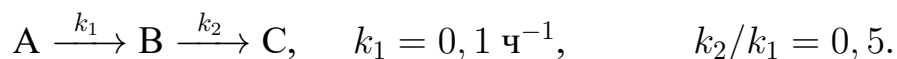
2. Определить скорость подачи для РИС и РИВ, при которой себестоимость продукта будет минимальной. Рассчитать эту себестоимость.

Задача 4.60. Реакция получения целевого продукта R:

Начальная концентрация вещества А $C_{A,0}$ равна 0,085 кмоль/м^3 . Реакцию предполагается проводить в реакторах идеального смешения, равных по объему. Затраты на обслуживание, у.е./($\text{с} \cdot \text{м}^3$), одного реактора — 0,00052, двух реакторов — 0,00042, трех реакторов — 0,00037, четырех реакторов — 0,00035. Цена вещества А — 3,5 у.е./кмоль.

Определить оптимальные скорости подачи, необходимые для получения минимальной себестоимости продукта в случае одного, двух, трех и четырех реакторов. Для каждого из указанных случаев определить себестоимость продукта и степень превращения X_A .

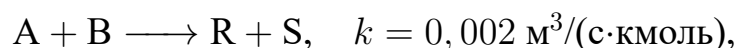
Задача 4.61. Целевой продукт В получают в изотермических условиях в реакторе идеального вытеснения объемом $2,5 \text{ м}^3$ при последовательных реакциях первого порядка:



Оптовая цена реагента равна 300 у.е./кмоль , затраты на выделение и рециркуляцию непревращенного вещества А составляют 10 у.е./кмоль , амортизационные отчисления по реакционному узлу, стадии отделения непревращенного вещества А и его рециркуляцию равны $0,2 \cdot C_{\text{об}}/8000 \text{ [у.е./ч]}$, где $C_{\text{об}} = 200000 \text{ у.е.}$ Концентрация исходного вещества А на входе в реакционный узел $C_{A,0} = 2 \text{ кмоль/м}^3$.

Найти оптимальную степень конверсии в условиях рециркуляции непревращенного реагента А, если побочный продукт утилизируется и его товарная цена составляет 20 у.е./кмоль .

Задача 4.62. В результате необратимой реакции второго порядка



протекающей в водной среде, образуется продукт R. Концентрация вещества А на входе в реакционный узел равна $C_{A,0} = 0,16 \text{ кмоль/м}^3$; скорость подачи $F_{A,0} = 0,000028 \text{ кмоль/с}$. Производительность по R $F_R = 0,000012 \text{ кмоль/с}$. Цена вещества А — 15 у.е./кмоль , цена вещества В — 125 у.е./кмоль . Продукт экстрагируют из реакционной среды, регенерация А и В невозможна.

Производственные затраты на обслуживание РИС равны $0,004 \text{ у.е./}(\text{с} \cdot \text{м}^3)$, а на обслуживание РИВ равны $0,015 \text{ у.е./}(\text{с} \cdot \text{м}^3)$.

Для обоих реакторов определить соотношение исходных реагентов и необходимый объем реактора, при которых достигаются минимальные производственные затраты, на проведение процесса в изотермических условиях, без учета затрат на дополнительный подогрев и экстрагирование продукта.

Задача 4.63. В реакторе идеального смешения проводят реакцию



в жидкой фазе в присутствии инициатора I. Реагент А является растворителем, а Y — газом, барботирующим через жидкость, вследствие чего их концентрации постоянны, $C_{A,0} = 10 \text{ кмоль/м}^3$. Реакция имеет псевдонулевые порядки по реагентам; скорость распада инициатора $r_I = 2,0 \cdot C_I \text{ [кмоль/}(\text{м}^3 \cdot \text{ч})]$. Степень конверсии инициатора — $0,95$. Скорость подачи исходного реагента А в реактор — $0,5 \text{ м}^3/\text{с}$. Стоимость инициатора 200 у.е./кмоль . Амортизационные отчисления по реакционному узлу $(0,15/8000) \cdot (1500 + 400 \cdot V_p) \text{ [у.е./ч]}$, где V_p — объем реакционной зоны, м^3 .

Найти оптимальную с точки зрения себестоимости начальную концентрацию инициатора для проведения реакции.

Задача 4.64. Необратимую реакцию получения R



предполагается проводить в каскаде из двух реакторов. Концентрация вещества A на входе в реакционный узел — $0,095 \text{ кмоль/м}^3$.

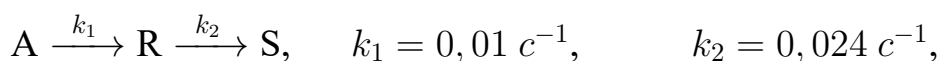
Имеется:

- 1) реактор идеального смешения рабочим объемом $0,5 \text{ м}^3$ (реактор 1);
- 2) реактор идеального смешения рабочим объемом $0,8 \text{ м}^3$ (реактор 2);
- 3) реактор идеального вытеснения объемом 1 м^3 (реактор 3).

Производственные затраты на обслуживание реакторов — $0,0038, 0,0031, 0,0074 \text{ у.е./}(\text{м}^3 \cdot \text{с})$, соответственно. Цена вещества A — 50 у.е./кмоль .

Составить систему двух последовательно соединенных реакторов так, чтобы себестоимость продукта R была наименьшей. Определить эту себестоимость.

Задача 4.65. Жидкофазная реакция получения R



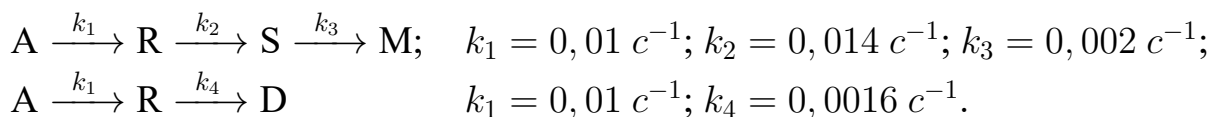
протекает без изменения плотности реакционной массы.

Концентрация вещества A на входе в реактор $C_{A,0} = 0,12 \text{ кмоль/м}^3$; скорость подачи $F_{A,0} = 0,0254 \text{ кмоль/с}$.

Цена вещества A — 14 у.е./кмоль ; вещества R — 68 у.е./кмоль ; вещества S — 10 у.е./кмоль . Производственные затраты на обслуживание реактора — $0,0052 \text{ у.е./}(\text{с} \cdot \text{м}^3)$. Затраты на разделение реакционной смеси определяются выражением: $Z_{\text{разд}} = 0,8 \cdot F_A + 1,6 \cdot (F_R + F_S) + 0,000003 \text{ у.е./с}$. При разделении теряется 10 % вещества A , 5 % вещества R и 2 % вещества S . Вещество A можно использовать повторно.

Сравните объем реактора и степень конверсии исходного вещества A , при которых достигается максимальная прибыль для реакторов идеального вытеснения и идеального смешения.

Задача 4.66. Определить объем непрерывного РИС, необходимый для того, чтобы при получении максимальной прибыли проведении в нем реакции

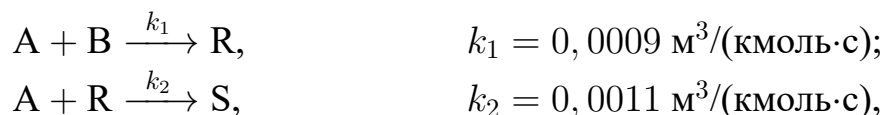


Концентрация вещества A на входе в реактор $C_{A,0} = 0,12 \text{ кмоль/м}^3$; скорость подачи $W_0 = 0,0041 \text{ м}^3/\text{с}$. Цена вещества A — $3,4 \text{ у.е./кмоль}$; вещества R — 68 у.е./кмоль ; вещества S — 10 у.е./кмоль ; вещества M — 2 у.е./кмоль ; вещества D — 8 у.е./кмоль . Производственные затраты на обслуживание реактора — $0,0052 \text{ у.е./}(\text{с} \cdot \text{м}^3)$. Затраты на разделение реакционной смеси равны

$Z_{\text{разд}} = 0,8 \cdot F_A + 1,6 \cdot (F_R + F_S + F_M + F_D) + 0,000003 \text{ у.е./с.}$ При разделении теряется 10 % вещества A , 5 % вещества R и по 2 % веществ S, M, D . Вещество A можно использовать повторно.

Найти степень превращения X_A .

Задача 4.67. В непрерывном РИВ объемом $0,9 \text{ м}^3$ протекают реакции:



где R — продукт реакции; S — побочный продукт. Концентрации исходных веществ на входе в реактор $C_{A,0} = 1,2 \text{ кмоль/м}^3$; $C_{B,0} = 1,2 \text{ кмоль/м}^3$.

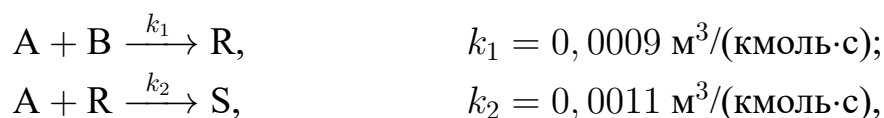
Цена вещества A — 25 у.е./кмоль; вещества B — 10 у.е./кмоль. Производственные затраты на обслуживание реактора — 0,0052 у.е./с. Затраты на разделение реакционной смеси определяются выражением:

$$Z_{\text{разд}} = 0,8 \cdot F_A + 0,1 \cdot F_B + 1,6 \cdot (F_R + F_S) + 0,000003 \text{ у.е./с.}$$

При разделении теряется 5 % вещества A , 10 % вещества B , 2 % вещества R и 2 % вещества S . Вещества A и B можно использовать повторно.

Определить скорость подачи исходных реагентов, необходимую для получения минимальной себестоимости продукта R .

Задача 4.68. В непрерывном РИС объемом $0,9 \text{ м}^3$ протекают реакции:



где R — продукт реакции; S — побочный продукт. Концентрации исходных веществ на входе в реактор $C_{A,0} = 1,2 \text{ кмоль/м}^3$; $C_{B,0} = 1,2 \text{ кмоль/м}^3$.

Цена вещества A — 25 у.е./кмоль; вещества B — 10 у.е./кмоль; вещества R — 120 у.е./кмоль; вещества S — 8 у.е./кмоль. Производственные затраты на обслуживание реактора определяются выражением:

$$Z_{\text{обсл.}} = 0,0052 \cdot V_P + 0,0012 \text{ у.е./с.}$$

Затраты на разделение реакционной смеси определяются выражением:

$$Z_{\text{разд}} = 0,8 \cdot F_A + 0,1 \cdot F_B + 1,6 \cdot (F_R + F_S) + 0,000003 \text{ у.е./с.}$$

При разделении теряется 5 % вещества A , 10 % вещества B , 2 % вещества R и 2 % веществ S . Вещества A и B можно использовать повторно.

Определить скорость подачи исходных реагентов и степень конверсии исходного реагента A , необходимую для получения максимальной прибыли.

Задача 4.69. Жидкофазная реакция

протекает в непрерывном РИВ объемом $1,8 \text{ м}^3$ без изменения плотности реакционной массы.

Концентрация вещества A на входе в реактор $C_{A,0} = 1,2 \text{ кмоль/м}^3$. Цена вещества A — 25 у.е./кмоль . Производственные затраты на обслуживание реактора — $0,0052 \text{ у.е./с} \cdot \text{м}^3$. Затраты на разделение реакционной смеси составляют: $Z_{\text{разд}} = 0,8 \cdot F_A + 1,6 \cdot (F_R + F_S + F_M) + 0,000003 \text{ у.е./с}$. При разделении теряется по 3 % каждого продукта, находящегося в реакционной массе. Вещество A можно использовать повторно.

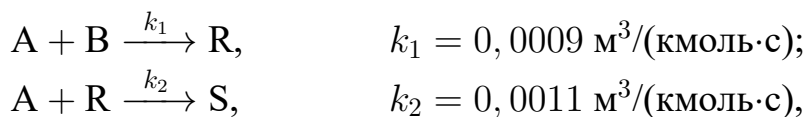
Определить скорость подачи исходного вещества A и степень конверсии исходного реагента A , необходимую для получения минимальной себестоимости продукта R .

Задача 4.70. Предполагается вести жидкофазную реакцию

в каскаде реакторов идеального смешения, равных по объему. В наличии имеются 3 типа реакторов рабочим объемом $0,5$; $0,8$ и $1,3 \text{ м}^3$.

Производственные затраты на обслуживание, $\text{у.е./с} \cdot \text{м}^3$, каскада реакторов: первого типа — $0,0038$; второго — $0,0033$; третьего — $0,0029$. Концентрация вещества A на входе в реактор $C_{A,0} = 0,12 \text{ кмоль/м}^3$; скорость подачи $F_{A,0} = 0,0000254 \text{ кмоль/с}$. Цена вещества A — 14 у.е./кмоль . Непрореагировавшее вещество A можно отделить от продуктов и вернуть снова в производство. При отделении теряется 2 % вещества A .

Определить тип и число реакторов в каскаде, чтобы обеспечить минимальную себестоимость при производстве продукта R , у.е./кмоль . Определить производительность системы по продукту.

Задача 4.71. В непрерывном РИС объемом $0,9 \text{ м}^3$ протекают реакции:

где R — продукт реакции; S — побочный продукт. Концентрации веществ на входе в реактор $C_{A,0} = 1,2 \text{ кмоль/м}^3$; $C_{B,0} = 1,2 \text{ кмоль/м}^3$.

Цена, у.е./кмоль , вещества A — 25 ; вещества B — 10 ; вещества R — 120 ; вещества S — 8 . Затраты на обслуживание реактора:

$$Z_{\text{обсл.}} = 0,0052 \cdot V_P + 0,0012 \text{ у.е./с}.$$

Затраты на разделение реакционной смеси:

$$Z_{\text{разд}} = 0,8 \cdot F_A + 0,1 \cdot F_B + 1,6 \cdot (F_R + F_S) + 0,000003 \text{ у.е./с}.$$

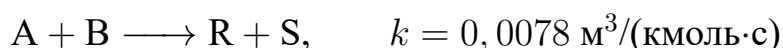
Затраты на организацию подачи и рециркуляции исходных веществ:

$$Z_{\text{рец}} = 3,5 \cdot W_0 + 1,2 \cdot (F_A + F_B) \text{ у.е./с.}$$

При разделении теряется 5 % вещества A , 10 % вещества B , 2 % вещества R и 2 % вещества S . Вещества A и B можно использовать повторно.

Определить степень конверсии исходного реагента A ; максимальную прибыль; скорость подачи исходных реагентов, необходимую для получения максимальной прибыли.

Задача 4.72. Реакция получения R



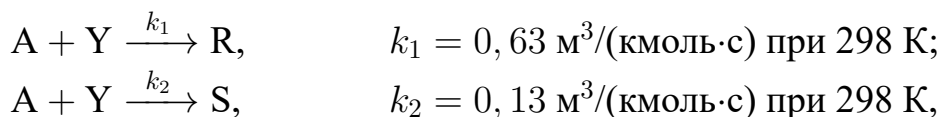
протекает в непрерывном реакторе идеального смешения.

Концентрация вещества A на входе в реактор $1,2 \text{ кмоль/м}^3$; скорость подачи $F_{A,0} = 254 \cdot 10^{-7} \text{ кмоль/с}$; производительность реакционного узла $F_R = 129 \cdot 10^{-7} \text{ кмоль/с}$. Цена веществ, у.е./кмоль: A — 14; B — 68.

Затраты на организацию подачи и рециркуляции исходных веществ — $Z_{\text{рец}} = 3,5 \cdot F_{A,0} + 1,2 \cdot (F_A + F_B) \text{ у.е./с}$. Затраты на обслуживание проточного РИС — $0,0038 \text{ у.е./ (с} \cdot \text{м}^3)$.

Рассчитать необходимый реакционный объем и определить оптимальный состав исходной смеси, при которых полные затраты на производство продукта были бы минимальными. Чему равны эти затраты?

Задача 4.73. Жидкофазную параллельную реакцию:

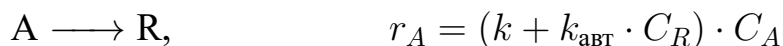


проводят в реакторе идеального смешения.

Энергии активации, Дж/моль: $E_1 = 60000$; $E_2 = 100000$. Концентрация исходных веществ на входе в реактор, кмоль/м³: $C_{A,0} = 0,12$; $C_{Y,0} = 0,15$. Скорость подачи $F_{A,0} = 0,00254 \text{ кмоль/с}$. Цена веществ, у.е./кмоль: A — 14; Y — 10; R — 54; S — 7. При рецикле теряется по 2 % веществ A и Y ; по 1 % веществ R и S .

Определить температуру процесса, при которой достигается максимальная прибыль. Определить производительность установки по продукту.

Задача 4.74. Жидкофазную автокаталитическую реакцию

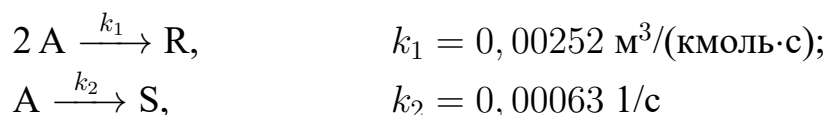


проводят в реакторе идеального смешения.

Константы скорости $k = 0,0048 \text{ 1/с}$; $k_{\text{авт}} = 0,0064 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$. Концентрация исходного вещества A на входе в реактор — $0,12 \text{ кмоль/м}^3$; скорость подачи — $0,00254 \text{ кмоль/с}$. Цена вещества A — 16 у.е./кмоль . Производственные затраты на обслуживание: проточного РИС — $0,38 \text{ у.е./}(\text{с}\cdot\text{м}^3)$.

При каком объеме реактора себестоимость продукта будет минимальна?

Задача 4.75. Жидкофазную параллельную реакцию



предполагается проводить в реакторе идеального смешения. В наличии имеются три типа реакторов рабочим объемом $0,5$; $0,8$ и $1,3 \text{ м}^3$.

Производственные затраты на обслуживание реакторов: первого типа — $0,0038 \text{ у.е./}(\text{с}\cdot\text{м}^3)$; второго — $0,0033 \text{ у.е./}(\text{с}\cdot\text{м}^3)$; третьего — $0,0029 \text{ у.е./}(\text{с}\cdot\text{м}^3)$. Концентрация исходного вещества A на входе в реактор — $1,2 \text{ кмоль/м}^3$.

Цена вещества A — 14 у.е./кмоль . Непрореагировавшее вещество A можно отделить от продуктов и вернуть снова в производство. При отделении теряется 2% вещества A .

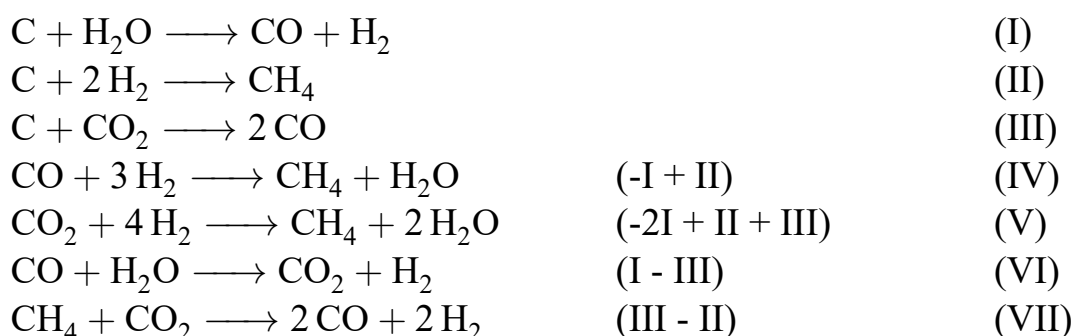
Определить: тип реактора, который обеспечил бы производство продукта R по минимальной себестоимости; минимальную себестоимость продукта R в каждом типе реактора; оптимальные условия проведения процесса: степень конверсии и мольную скорость подачи исходного вещества A , производительность реакционного узла по продукту R .

5. Оптимизация равновесных процессов

5.1. Примеры решений

Задача 5.1. В реакторе кипящего слоя проводят газификацию каменного угля смесью $\text{H}_2\text{O} - \text{CH}_4 - \text{CO}_2$ при температуре 850°C и давлении 1 атм (0,101325 МПа). Найти соотношение $\text{CH}_4 : \text{H}_2\text{O}$ в исходной смеси, при котором отношение $\text{H}_2 : \text{CO}$ в покидающем реактор газе равно 1,1:1 (обозначим это соотношение как γ). Отношение $\text{CO}_2 : \text{H}_2\text{O}$ в исходной смеси равно 0,1:1. Процесс конверсии в реакторе протекает до состояния равновесия.

Решение. При конверсии угля смесью газов возможно протекание следующих реакций:



Из этих семи реакций только три независимы. Выше показано, какие комбинации реакций I-III позволяют получить реакции IV-VII. Поэтому при термодинамическом анализе достаточно рассмотреть равновесие реакций I-III.

Примем, что в исходной газовой смеси содержится 1 кмоль H_2O , α кмоль CH_4 , β кмоль CO_2 .

Обозначим степень конверсии по реакции I через X_1 ; степень конверсии по реакции II — X_2 ; степень конверсии по реакции III — X_3 . Поскольку начальное количество воды принято равным 1 моль, степени конверсии численно совпадают с изменением числа молей в реакциях. Составим таблицу материального баланса (табл. 5).

Таблица 5 – Материальный баланс конверсии угля

Наименование компонента	Исходная смесь, кмоль	Равновесная смесь, кмоль
CO	—	$X_1 + 2X_3$
H_2	—	$X_1 - 2X_2$
CH_4	α	$\alpha + X_2$
CO_2	β	$\beta - X_3$
H_2O	1	$1 - X_1$
Сумма	$1 + \alpha + \beta$	$1 + \alpha + \beta + X_1 + X_3 - X_2$

$$K_{p,1} = \frac{P_{\text{CO}} \cdot P_{\text{H}_2}}{P_{\text{H}_2\text{O}}} \quad (5)$$

$$K_{p,2} = \frac{P_{\text{CH}_4}}{P_{\text{H}_2}^2} \quad (6)$$

$$K_{p,3} = \frac{P_{\text{CO}}^2}{P_{\text{CO}_2}} \quad (7)$$

$$\text{где } P_{\text{CO}} = P_0 \cdot \frac{X_1 + 2X_3}{1 + \alpha + \beta + X_1 - X_2 + X_3};$$

$$P_{\text{H}_2} = P_0 \cdot \frac{X_1 + 2X_2}{1 + \alpha + \beta + X_1 - X_2 + X_3};$$

$$P_{\text{CH}_4} = P_0 \cdot \frac{\alpha + X_2}{1 + \alpha + \beta + X_1 - X_2 + X_3};$$

$$P_{\text{CO}_2} = P_0 \cdot \frac{\beta + X_3}{1 + \alpha + \beta + X_1 - X_2 + X_3};$$

$$P_{\text{H}_2\text{O}} = P_0 \cdot \frac{1 - X_1}{1 + \alpha + \beta + X_1 - X_2 + X_3},$$

где P_0 — давление пара в аппарате, атм. Принимаем $P_0 = 1$ атм.

Приведенных сведений достаточно для определения равновесных степеней конверсии X_1, X_2, X_3

Расчет констант равновесия можно проводить по приближенным уравнениям, справедливым для температур 800 – 1200 К:

$$\lg K_{p,1}^0 = 7,54 - \frac{7120}{T}, \quad \lg K_{p,2}^0 = 5,60 - \frac{4600}{T}, \quad \lg K_{p,3}^0 = 9,28 - \frac{9000}{T}.$$

Решение системы трех нелинейных уравнений (5) – (7) можно провести каким-либо из описанных в литературе способами. Наиболее часто для этой цели используют метод Ньютона-Рафсона. Ниже приведен алгоритм расчета численным методом:

- вводятся исходные данные — температура, давление, требуемое мольное соотношение H_2/CO на выходе из реактора;
- проводится расчет констант равновесия;
- при определенном соотношении $\text{CH}_4 / \text{H}_2\text{O}$ в исходной смеси проводится решение системы нелинейных уравнений;
- рассчитывается мольное соотношение H_2 / CO .

- определение мольного соотношения $\text{CH}_4 / \text{H}_2\text{O}$ в исходной смеси проводится методом «золотого сечения» путем минимизации функции [квадрат разницы мольного соотношения H_2/CO (треб.) и мольного соотношения H_2/CO (расч.)].

Пример такого расчета приведен ниже.

Мольное соотношение $\text{CH}_4 : \text{H}_2\text{O}$ в исходной смеси	Мольное соотношение $\text{H}_2 : \text{CO}$ в исходной смеси
0,382	1,491
0,618	1,885
0,236	1,246
0,146	1,095
0,090	1,001
0,180	1,153
0,125	1,059
0,159	1,117
0,138	1,081
0,151	1,104
0,154	1,109
0,149	1,100
0,148	1,098
0,150	1,101
0,149	1,099
0,149	1,101
0,149	1,100

Необходимое соотношение $\text{H}_2 / \text{CO} = 1,10$ в равновесной смеси достигается при мольном соотношении $\text{CH}_4 / \text{H}_2\text{O}$ в исходной смеси равном 0,149.

Решение поставленной задачи можно также найти следующим способом. С учетом того, что $P_0 = 1$ атм, можно считать

$$K_{p,2} \cdot K_{p,3} = \frac{\alpha + x_2}{\beta - x_3} \cdot \frac{(x_1 + 2x_3)^2}{(x_1 - 2x_2)^2} = \frac{\alpha + x_2}{\beta - x_3} \cdot \frac{1}{\gamma^2}, \quad (8)$$

следовательно,

$$x_3 = \beta - \frac{\alpha + x_2}{\gamma^2 K_{p,2} K_{p,3}}.$$

С другой стороны,

$$\frac{K_{p,3}}{K_{p,1}} = \frac{(x_1 + 2x_3)^2}{\beta - x_3} \cdot \frac{1 - x_1}{(x_1 + 2x_3)(x_1 - 2x_2)} = \frac{1}{\gamma} \cdot \frac{1 - x_1}{\beta - x_3}, \quad (9)$$

следовательно,

$$x_1 = 1 - \frac{\alpha + x_2}{\gamma K_{p,2} K_{p,1}}.$$

Численными методами подбираем $\alpha + x_2$ таким образом, чтобы выполнялось условие:

$$\frac{x_1 + 2x_3}{K_{p,2} \cdot (\beta - x_3)} = 1.$$

Основываясь на выражении для K_2

$$(x_1 - 2x_2)^2 = \frac{\alpha + x_2}{K_2};$$

$$x_1^2 - 4x_1x_2 + 4x_2^2 = \frac{\alpha + x_2}{K_2};$$

или

$$x_2^2 - 4x_1x_2 + (4x_1^2 - \frac{\alpha + x_2}{K_2}) = 0;$$

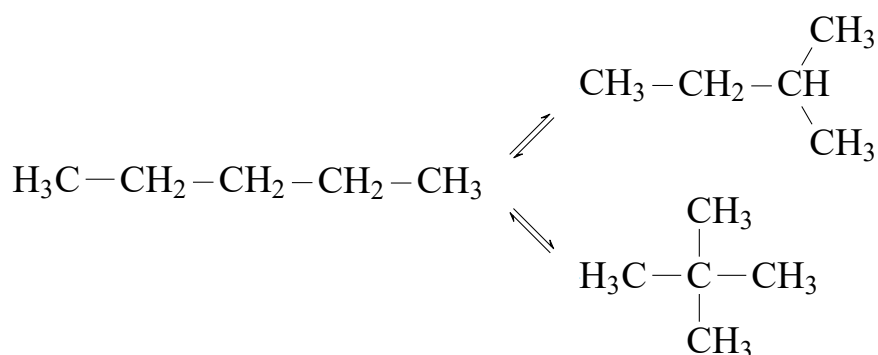
следовательно,

$$x_2 = \frac{4x_1 \pm \sqrt{16x_1 - 4 \cdot 4 \cdot (x_1^2 - \frac{\alpha + x_2}{K_2})}}{2 \cdot 4} = \frac{x_1 \pm \sqrt{\frac{\alpha + x_2}{K_2}}}{2}.$$

После этого определяем α .

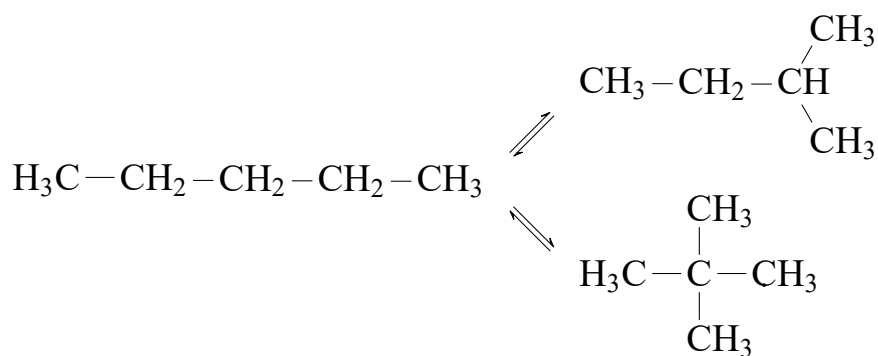
5.2. Задания для самостоятельного решения

Задача 5.2. Используя численные методы, найти оптимальную температуру, при которой достигается максимальный равновесный выход 2-метилбутана при изомеризации н-пентана.

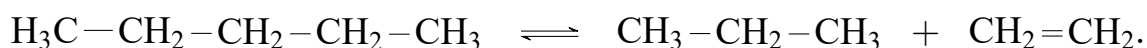


Реакция проводится в газовой фазе с использованием алюмосиликатного катализатора в температурном интервале 400 – 700 К.

Задача 5.3. Найти оптимальную температуру, обеспечивающую максимальный равновесный выход 2-метилбутана при изомеризации н-пентана.

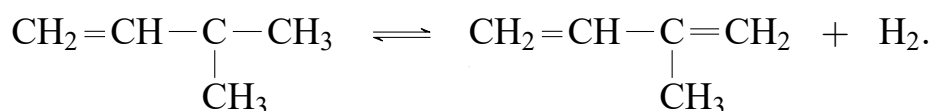


Реакция проводится в газовой фазе с использованием алюмосиликатного катализатора в температурном интервале 400 – 700 К при давлении 5 атм. Учесть, что возможно протекание следующей реакции:

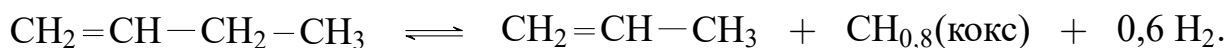


Задача 5.4. Определить температуру, соответствующую максимальному равновесному выходу суммы двух целевых продуктов, *транс*-бутена-2 и *цис*-бутена-2, при гетерогенно-каталитической изомеризации 2-метилпропена (изобутена). В равновесной смеси находятся также бутен-1 и 2-метилпропен. Температурный интервал реакции 500 – 1100 К.

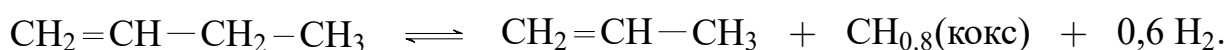
Задача 5.5. Определить температуру, соответствующую максимальному равновесному выходу суммы двух целевых продуктов, 2-метилбутена-1 и 3-метилбутена-1, при гетерогенно-каталитической изомеризации 2-метилбутена-2. Температурный интервал реакции 400 – 800 К; давление 1 атм. Побочная реакция



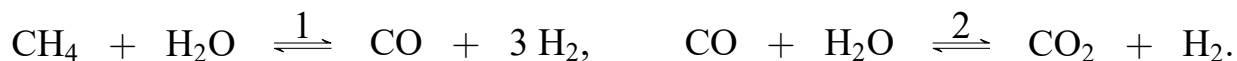
Задача 5.6. Определить температуру, соответствующую максимальному равновесному выходу суммы двух целевых продуктов — *цис*-бутена-2 и *транс*-бутена-2, при гетерогенно-каталитической изомеризации 2-метилпропена (изобутена). В равновесной смеси присутствуют также 2-метилпропен и бутен-1. Температурный интервал реакции 400 – 700 К, давление 10 атм. Побочная реакция



Задача 5.7. Определить температуру, соответствующую максимальному равновесному выходу *n*-бутенов, при гетерогенно-каталитической изомеризации 2-метилпропена (изобутена). В равновесной смеси находятся также бутен-1, *цис*-бутен-2 и *транс*-бутен-2. Температурный интервал реакции 400 – 700 К, давление 10 атм. Побочная реакция



Задача 5.8. Определить мольное соотношение водяного пара к метану в исходной смеси, соответствующее максимальному равновесному выходу оксида углерода при каталитической конверсии метана. Реакция проводится при 800 °С и давлении 20 атм. При расчете равновесного состава контактного газа принять, что в системе протекают только две реакции:



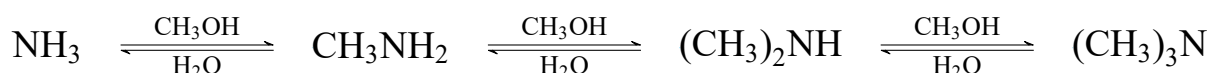
Задача 5.9. Определить мольное соотношение водяного пара к метану в исходной смеси, соответствующее максимальному равновесному выходу водорода при каталитической конверсии метана. Условия реакции — 800 °С, 20 атм. При расчете равновесного состава контактного газа принять, что в системе протекают только две реакции:



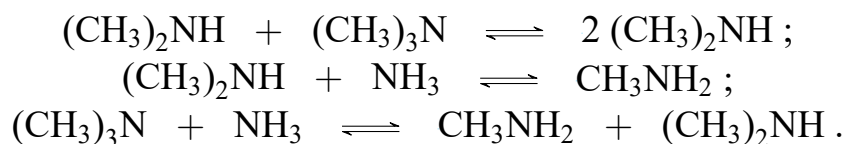
Задача 5.10. Процесс каталитической водяной конверсии метана проводится при 800 °С и давлении 20 атм. Определить мольное соотношение водяного пара к метану в исходной смеси, при котором отношение $\text{H}_2:\text{CO}$ в конвертированном газе, после конденсации паров воды, равно 3,5:1. При расчете равновесного состава контактного газа принять, что в системе протекают только две реакции:



Задача 5.11. При аммонолизе метанола (при 50 атм и 623 К):

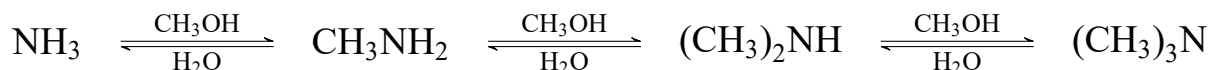


в случае необратимости записанных реакций, равновесие устанавливается за счет протекания реакций диспропорционирования:

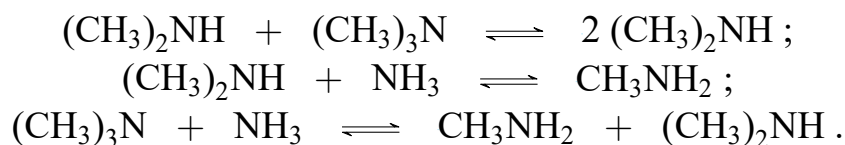


Найти мольное соотношение метанола к аммиаку, при котором достигается максимальный выход метиламина в равновесной смеси на выходе из реактора.

Задача 5.12. При аммонолизе метанола (при 50 атм и 623 К):

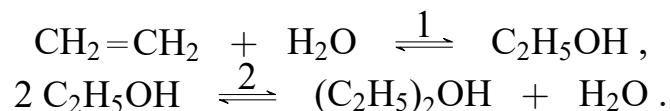


в случае необратимости записанных реакций, равновесие устанавливается за счет протекания реакций диспропорционирования:



Найти мольное соотношение метанола к аммиаку, при котором достигается максимальный выход диметиламина в равновесной смеси на выходе из реактора.

Задача 5.13. При парофазной гидратации этилена (80 атм, 573 К) протекают две независимые реакции:



Найти мольное соотношение водяного пара к этилену, обеспечивающее максимальный выход этанола в равновесной смеси на выходе из реактора.

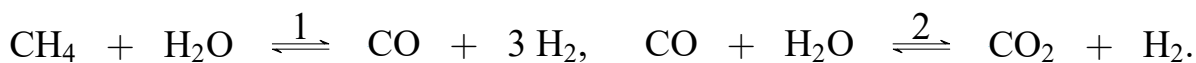
Задача 5.14. При синтезе метанола протекают две независимые реакции:



Процесс проводят при 80 атм и температуре 483 – 543 К. Состав синтез-газа, % об.: CO 14,474; CO₂ 7,514; H₂ 73,561; N₂ 0,290; CH₄ 3,694; H₂O 0,467.

Найти температуру, при которой достигается максимальный выход метанола в равновесной смеси на выходе из реактора.

Задача 5.15. Определить мольное соотношение водяного пара к метану в исходной смеси, соответствующее максимальному равновесному выходу оксида углерода при каталитической конверсии метана. Реакция проводится при 860 °С и давлении 25 атм. При расчете равновесного состава контактного газа принять, что в системе протекают две независимые реакции:

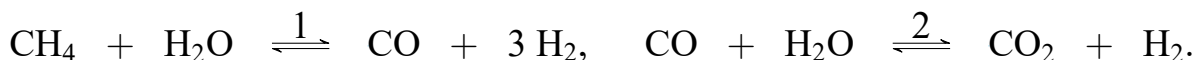


Задача 5.16. Определить предельные температуры жидкофазного и газофазного процесса получения метил-*трет*-бутилового эфира (МТБЭ) из метанола и изобутена, при которых равновесный выход МТБЭ не ниже 0,9. Мольное соотношение метанол/изобутен принять равным 1,02; фракция C₄ содержит 30 % изобутена; давление для газофазного процесса 1,6 атм; давление для жидкофазного 10 атм.

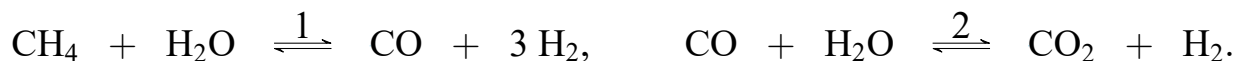
Задача 5.17. Определить предельные температуры жидкофазного и газофазного процесса получения метил-*трет*-бутилового эфира (МТБЭ) из метанола и *трет*-бутилового спирта, при которых равновесный выход МТБЭ не ниже 0,9. Мольное соотношение метанол/*трет*-бутиловый спирт принять

равным 1,02; давление для газофазного процесса 1,2 атм; давление для жидкофазного 4 атм. При газофазном процессе исходная спиртовая шихта на 80 % разбавлена азотом.

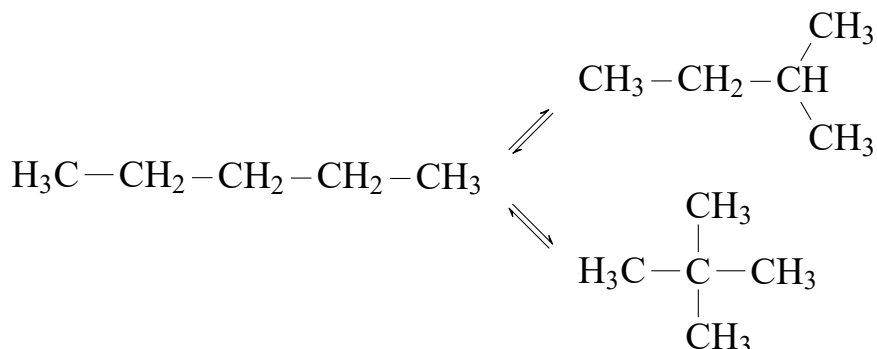
Задача 5.18. Процесс каталитической водяной конверсии метана проводится при 860 °С и давлении 16 атм. Определить мольное соотношение водяного пара к метану в исходной смеси, при котором отношение $\text{H}_2 : \text{CO}$ в конвертированном газе равно 3,5:1. При расчете равновесного состава контактного газа принять, что в системе протекают только две реакции:



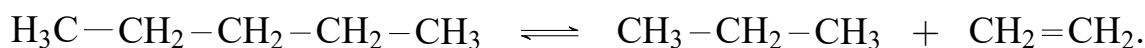
Задача 5.19. Определить мольное соотношение водяного пара к метану в исходной смеси, соответствующее максимальному равновесному выходу оксида углерода при каталитической конверсии метана. Реакция проводится при 860 °С и давлении 16 атм. При расчете равновесного состава контактного газа принять, что в системе протекают только две реакции:



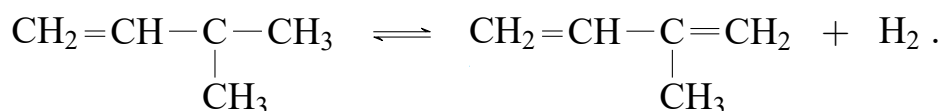
Задача 5.20. Найти оптимальную температуру, при которой достигается максимальный равновесный выход 2-метилбутана при изомеризации н-пентана.



Реакция проводится в газовой фазе с использованием алюмосиликатного катализатора в температурном интервале 400 – 700 К при давлении 10 атм. Учесть, что возможно протекание следующей реакции:



Задача 5.21. Определить температуру, соответствующую максимальному равновесному выходу суммы двух целевых продуктов: 2-метилбутена-1 и 3-метилбутена-1, при гетерогенно-каталитической изомеризации 2-метилбутена-2. Температурный интервал реакции 400 – 800 К; давление 10 атм. Побочная реакция



Библиографический список

1. Потехин, В. М. Основы теории химических процессов технологии органических веществ и нефтепереработки [Текст]: учебник для вузов / В. М. Потехин, В. В. Потехин. — 3-е изд., испр. и доп. — СПб.: Издательство «Лань», 2014. — 896 с. — ISBN: 978-5-8114-1662-2.
2. Кафаров, В. В. Методы кибернетики в химии и химической технологии [Текст]: учебник для вузов / В. В. Кафаров. — 4-е изд., испр. и доп. — М.: Химия, 1985. — 448 с.
3. Кафаров, В. В. Анализ и синтез химико-технологических систем [Текст]: учебник для вузов / В. В. Кафаров, В. П. Мешалкин. — М.: Химия, 1991. — 432 с. — ISBN 5-7245-0366.
4. Коган, В. Б. Теоретические основы типовых процессов химической технологии [Текст]: учеб. пособие / В. Б. Коган. — Л.: Химия, 1977. — 592 с.
5. Левеншпиль, О. Инженерное оформление химических процессов [Текст] / О. Левеншпиль; пер. с англ. под ред. и с доп. чл.-кор. АН СССР М. Г. Слинько. — М.: Химия, 1969. — 622 с.
6. Кузичкин, Н. В. Методы и средства автоматизированного расчета химико-технологических систем [Текст]: учеб. пособие / Н. В. Кузичкин, А. Е. Пунин, С. Н. Саутин и др. — Л.: Химия, 1987. — 150 с.
7. Островский, Г. М. Оптимизация химико-технологических процессов. Теория и практика [Текст] / Г. М. Островский, Т. А. Бережинский. — М.: Химия, 1984. — 239 с.
8. Холоднов, В. А. Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов [Текст]: практ. рук. / В. А. Холоднов, В. П. Дьяконов, Е. Н. Иванова, Л. С. Кирьянова. — СПб.: АНО НПО «Профессионал», 2003. — 480 с. — ISBN 5-98371-010-9.
9. Бальцер, Д. Химико-технологические системы: синтез, оптимизация и управление [Текст] / Д. Бальцер, В. Вайсс, В. К. Викторов; под ред. И. П. Мухленова. — Л.: Химия, 1986. — 422 с.
10. Колесников, И. М. Сборник задач по термодинамике физико-химических процессов [Текст]: учеб. пособие. В 2-х т. Т. 1 / И. М. Колесников, И. А. Семиохин, В. А. Винокуров, С. И. Колесников. — М.: Нефть и газ; РГУ нефти и газа им. И. М. Губкина, 2007. — 488 с. — ISBN 5-7246-0420-5.

11. Грязнов, И. А. Проектирование и расчет аппаратов основного органического и нефтехимического синтеза [Текст]: учебник для вузов / И. А. Грязнов, Н. Г. Дигуров, В. В. Кафаров, М. Г. Макаров; под ред. Н. Н. Лебедева. — М.: Химия, 1995. — 256 с. — ISBN 5-7245-0405-7.
12. Смирнов, Н. Н. Химические реакторы в примерах и задачах [Текст]: учеб. пособие / Н. Н. Смирнов, А. И. Волжинский. — Л.: Химия, 1986. — 224 с.