Facultatea de Inginerie Chimică şi Protecţia Mediului
Departamentul de Polimeri Naturali şi Sintetici
Ştiinţa şi Ingineria Polimerilor

„Ingineria utilajelor pentru sinteza şi prelucrarea polimerilor 1”

Laborator nr. 5

APLICAŢII LA CURGEREA NEIDEALĂ ŞI REACTOARE REALE

1. Scopul lucrării

Lucrarea are drept scop performanţa reactorului real D, comparativ cu reactorul ideal cu deplasare totală, pentru diferite valori ale criteriului de dispersie D/μ·L, pentru reacţii de ordinul I.

2. Consideraţii teoretice

Reactorul D este un vas cu lungimea mult mai mare decât diametrul, cu funcţionare continuă, în care se admite existenţa unei curgeri dispersate cu un parametru şi în care se desfăşoară o reacţie chimică. Ecuaţia sa caracteristică se poate deduce pornind de la ecuaţia de proiectare a reactorului cu deplasare totală (RDT) în condiţii dinamice şi de la ecuaţia curgerii dispersate cu un parametru. Se poate scrie:

$$A_{\text{totala}} = A_{\text{curgere dispersata}} + A_{\text{reactie chimica}} \tag{1}$$

Deci:

$$\underbrace{\underbrace{\frac{\partial C_j}{\partial t} = -u\frac{\partial C_j}{\partial x}}_{\text{ec. RDT in conditii dinamice}} + D_L\frac{\partial^2 C_j}{\partial x^2}}_{\text{ecuatia curgerii dispersate cu un parametru}} + \underbrace{r_j}_{\text{ec. RDT in conditii dinamice}} \tag{2}$$

Se observă că dacă vrem să luăm în considerare fenomenele reale din reactor în ecuaţie apar termeni suplimentari care complică modelul. Acest model nu poate fi rezolvat analitic decât în unele cazuri particulare. Rezolvarea numerică este, de asemenea, complicată. Pentru a ne forma o imagine asupra modalităţii de rezolvare a ecuaţiei rectorului D să considerăm cazul reacţiilor de ordinul I în condiţii staţionare (reacţii fără modificare de volum, ε = 0):

$$\left.\begin{aligned} -r_j &= k\cdot C_j \\ \frac{\partial C_j}{\partial t} &= 0 \end{aligned}\right\} \Rightarrow D_L\frac{\partial^2 C_j}{\partial x^2} - u\frac{\partial C_j}{\partial x} - k\cdot C_j = 0 \tag{3}$$

Pentru rezolvarea ecuației se poate renunța la derivata parțială si relația devine:

$$D_L\frac{d^2C_j}{dx^2} - u\frac{dC_j}{dx} - kC_j = 0 \tag{4}$$

Rezolvarea ecuației se realizează pe două domenii, conform fig. 1 în care L = lungimea reactorului; D_I = spațiul în care avem doar curgere cu dispersie (conductă de alimentare); D_{II} = domeniul reactorului D.

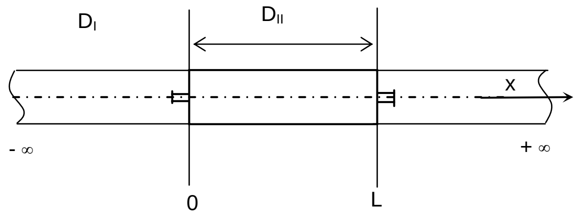

Fig.1. Domenii de rezolvare ale ecuației

Pentru domeniul D_I

$D_L\frac{d^2c}{dx^2} - u\frac{dc}{dx} = 0$ şi notând $\frac{dc}{dx} = r$ vom avea:

$$D_L\cdot r^2 - u\cdot r = 0 \Rightarrow r\cdot\left(D_L\cdot r - u\right) = 0 \text{ cu soluțiile: } \begin{cases} r_1 = 0 \\ r_2 = \dfrac{u}{D_L} \end{cases}.$$

Soluția generală a ecuației pentru acest domeniu are forma:

$$C = \alpha + \beta\cdot e^{\frac{u\cdot x}{D_L}} \tag{5}$$

deoarece în general:

$$C = \alpha\cdot\exp r_1x + \beta\exp r_2x \tag{6}$$

în care α şi β sunt constante de integrare.

Pentru domeniul D_{II} ecuația va avea forma:

$$D_L\frac{d^2y}{dx^2} - u\frac{dy}{dx} - ky = 0 \tag{7}$$

şi notând $\frac{dy}{dx} = r$ avem:

$$D_L \cdot r^2 - u \cdot r = 0 \Rightarrow r \cdot (D_L \cdot r - u) = 0 \tag{8}$$

de unde se obțin soluțiile:

$$r_{1,2} = \frac{u + \sqrt{u^2 + 4 \cdot k \cdot D_L}}{2D_L} = \frac{u}{2D_L}\left(1 \pm \sqrt{\frac{1 + 4 \cdot k \cdot D_L}{u^2}}\right) \tag{9}$$

Dacă se notează $r_{1,2} = \frac{u}{2D_L}(1 \pm a)$ soluția pentru acest domeniu va avea următoarea formă:

$$y = A \exp\left[\frac{ux}{2D_L}(1 + a)\right] + B \exp\left[\frac{ux}{2D_L}(1 - a)\right] \tag{10}$$

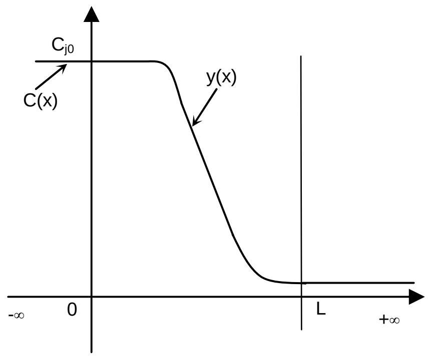

Fig.2. *Modul de variație al funcțiilor C(x) şi y(x) in spațiul de curgere*

Soluțiile găsite pentru cele două domenii conțin patru constante de integrare: *α, β, A, B*, pentru a căror determinare trebuie să se apeleze la patru condiții la limită. Dacă se consideră modul de variație al funcțiilor *C(x)* şi *y(x)* în spațiul de curgere (fig.2) aceste condiții sunt:

1. $x = -\infty; C_j = C_{j0} \Rightarrow C_{j0} = \alpha$

2. $x = 0; \; C = y$ (continuitatea solutiilor) $\Rightarrow \alpha + \beta = \mathrm{A} + \mathrm{B}$

3. $x = 0; \nabla C = \nabla y$ (continuitatea transportului dispersiv), deci:

cu:

$$\frac{dC}{dx} = \beta e^{\frac{ux}{D_L}} \cdot \frac{u}{D_L} \text{ şi } \frac{dy}{dx} = Ae^{\frac{ux}{2D_L}(1+a)} \cdot \frac{u}{2D_L}(1+a) + Be^{\frac{ux}{2D_L}(1-a)} \cdot \frac{u}{2D_L}(1-a)$$

Dacă $x = 0$ atunci:

$$\left.\frac{dC}{dx}\right|_{x=0} = \beta \cdot \frac{u}{D_L}$$

$$\left.\frac{dy}{dx}\right|_{x=0} = A \cdot \frac{u}{2D_L}(1+a) + B \cdot \frac{u}{2D_L}(1-a)$$

Din egalarea celor două expresii rezultă:

$$2\beta = A(1+a) + B(1-a)$$

4. $x = L \Rightarrow \nabla y = 0 \left(\text{sau } \frac{dy}{dx} = 0 \right)$ deci tangenta la curbă este zero (nu există transport dispersiv prin peretele frontal de la capătul reactorului).

În acest caz:

$$\left.\frac{dy}{dx}\right|_{x=L} = 0 \Rightarrow A \cdot (1+a)e^{\frac{uL}{2D_L}(1+a)} + B \cdot (1-a)e^{\frac{uL}{2D_L}(1-a)}$$

Grupând cele patru ecuații rezultate din condițiile la limită se obțin expresiile pentru α, β, A şi B precum şi *soluția finală pentru reactorul D*:

$$C = \frac{C_j}{C_{j0}} = 1 - x_j = \frac{2\exp\left(\frac{ux}{2D_L}\right)\left\{(1+a)\exp\left[\frac{ua}{2D_L}(L-x)\right] + (a-1)\exp\left[-\frac{ua}{2D_L}(L-x)\right]\right\}}{(a+1)^2\exp\frac{uLa}{2D_L} - (a-1)^2\exp\left(-\frac{uLa}{2D_L}\right)} \quad (11)$$

Această ecuație este deosebit de utilă în cazul proiectării reactoarelor reale, pentru diferite valori ale conversiei; rezultatele obținute pot fi comparate cu cele corespunzătoare unui reactor cu deplasare totală, evaluându-se asfel eficiența reactoarelor reale. În acest scop este utilă reprezentarea grafica a raportului volumelor celor două reactoare (real şi ideal) în funcție de conversie pentru diferite valori ale criteriului de dispersie.

Orientativ, se recomandă, pentru criteriul de dispersie, următoarele limite:

- Dispersie mică...................................... D/μ·L < 0,002
- Dispersie intermediară.............................D/μ·L = 0,025
- Dispersie mare..D/μ·L > 0,2

Aplicație MathCad