Facultatea de Inginerie Chimică şi Protecția Mediului
Departamentul de Polimeri Naturali şi Sintetici
Ştiința şi Ingineria Polimerilor

„Ingineria utilajelor pentru sinteza şi prelucrarea polimerilor 1"

Laborator nr. 6

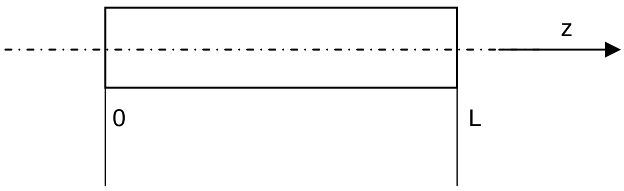
REACTORUL CU DEPLASARE TOTALĂ NEIZOTERM

1. Considerații teoretice generale

Fie o reacție chimică reversibilă exotermă:

$$A \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} R\ ,\quad -\Delta H_r < 0$$

Calea cea mai comodă pentru a se deduce ecuațiile caracteristice ale reactorului cu deplasare totală neizoterm porneşte de la ecuațiile reactorului discontinuu în care timpul se înlocuieşte cu o coordonată spațială.



Coordonatele spațiale utilizate în cazul RDT neizoterm

În acest caz:

$$\left.\begin{aligned} & t=\frac{spatiu}{viteza}=\frac{z}{u} \\ & M_v=S\cdot u \Rightarrow u=\frac{M_v}{S} \end{aligned}\right\} \Rightarrow t=\frac{z}{M_v}\cdot S \Rightarrow dt=\frac{S}{M_v}\cdot dz \qquad (1)$$

În aceste relații:

S – secțiunea de curgere

M_v – debitul volumic

F_{j0} – debitul molar = $M_v \cdot C_{j0}$

Înlocuind în *ecuațiile caracteristice RD neizoterm* se obține:

$$\begin{cases} \dfrac{dx_j}{dz} = \dfrac{S \cdot \left(-r_j\right)}{M_v \cdot C_{j0}} = \dfrac{S \cdot \left(-r_j\right)}{F_{j0}} \\ \dfrac{dT}{dz} = \dfrac{S \cdot \left(-\Delta H_r\right)\left(-r_j\right)}{M_v \cdot \rho \cdot c_p} - \dfrac{K \cdot A \cdot \left(T - T_a\right) \cdot S}{M_v \cdot \rho \cdot c_p \cdot V} \end{cases} \tag{2}$$

Notațiile sunt:

A – aria laterală a mantalei reactorului $A = \pi \cdot D \cdot L$

V – volumul reactorului $V = S \cdot L$

M_m – debitul masic $M_m = M_v \cdot \rho$

În aceste condiții sistemul de ecuații diferențiale ce descrie dinamica reactorului cu deplasare totală neizoterm are forma:

$$\begin{cases} \dfrac{dx_j}{dz} = \dfrac{S}{F_{j0}}\left(-r_j\right) & x_j(0) = x_{j0} \\ \dfrac{dT}{dz} = \dfrac{1}{M_m \cdot c_p}\left[S\left(-\Delta H_r\right)\left(-r_j\right) - \pi \cdot D \cdot K\left(T - T_a\right)\right], & T(0) = T_0 \end{cases} \tag{3}$$

În cazul reacțiilor simple acest sistem poate fi rezolvat analitic; în situații complexe se apelează la soluții numerice de rezolvare.

2. *Tipuri de operări*

2.1. Operarea izotermă

În cazul operării izoterme se lucrează la temperatură constantă şi deci $\dfrac{dT}{dt} = 0$. În aceste condiții prima ecuație din sistemul (3) ne conduce la ecuația de proiectare a reactorului cu deplasare izotermă. Din a doua ecuație rezultă:

$$\begin{gathered} \frac{S \cdot \left(-\Delta H_r\right) \cdot \left(-r_j\right)}{M_v \cdot \rho \cdot c_p} = \frac{K \cdot A \cdot S \cdot \left(T - T_a\right)}{M_v \cdot \rho \cdot c_p \cdot V} \Rightarrow \\ \left(-\Delta H_r\right) \cdot \left(-r_j\right) \cdot V = K \cdot A \cdot \left(T - T_a\right) \end{gathered} \tag{4}$$

deci căldura care rezultă în urma reacției trebuie să fie egală cu căldura schimbată.

Pentru a se atinge acest deziderat se apelează la aceleaşi căi ca şi în cazul reactorului discontinuu neizoterm.

2.2. Operarea adiabată

În cazul acestui tip de operare sistemul de ecuații caracteristice are forma:

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dz} = \dfrac{S}{F_{j0}} \cdot \left(- r_j\right) \\ \dfrac{dT}{dz} = \dfrac{S}{M_m \cdot c_p} \cdot \left(- \Delta H_r\right) \cdot \left(- r_j\right) \end{cases} \tag{5}$$

Ca şi în cazul reactorului discontinuu se împart cele două ecuații una la alta pentru eliminarea variabilei z:

$$\frac{dx_j}{dT} = \frac{S \cdot \left(- r_j\right) \cdot M_m \cdot c_p}{F_{j0} \cdot S \cdot \left(- \Delta H_r\right) \cdot \left(- r_j\right)} = \frac{M_v \cdot \rho \cdot c_p}{M_v \cdot C_{j0} \cdot \left(- \Delta H_r\right)} = \frac{\rho \cdot c_p}{C_{j0} \cdot \left(- \Delta H_r\right)}$$

Separând variabilele se obține ecuația liniei de operare adiabate:

$$x_j = \frac{\rho \cdot c_p}{C_{j0} \cdot \left(- \Delta H_r\right)} \cdot \Delta T \tag{6}$$

Similar cazului RD se determină factorul adiabat de creştere a temperaturii:

$$x_j = 1 \quad \Rightarrow \quad \Delta T_{ad} = \frac{C_{j0} \cdot \left(- \Delta H_r\right)}{\rho \cdot c_p} \tag{7}$$

şi:

$$\left. \begin{aligned} \Delta T &= \Delta T_{ad} \cdot x_j \\ \Delta T &= T - T_0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow T = T_0 + \Delta T_{ad} \cdot x_j \tag{8}$$

În aceste condiții ecuația de proiectare a *RDT neizoterm* pentru *operare adiabată* se poate scrie sub forma:

$$\frac{\tau}{C_{j0}} = \frac{V}{F_{j0}} = \int_0^{x_{jf}} \frac{dx_j}{k_0 \cdot C_{j0}^n \cdot \left(1 - x_j\right)^n \exp\left[\dfrac{- E}{R \cdot \left(T_o + T_{ad} \cdot x_j\right)}\right]} \tag{9}$$

ecuație ce poate fi rezolvată numeric.

c) Regim politrop

Ca şi în cazul RD neizoterm sistemul de ecuații diferențiale caracteristic are forma cea mai generală şi poate fi rezolvat numeric utilizând metode specifice:

$$\begin{cases} \dfrac{dx_j}{dz} = \dfrac{S}{F_{j0}} \cdot \left(-r_j\right)_{\left(x_j, T\right)} \\ \dfrac{dT}{dz} = \dfrac{1}{M_m \cdot c_p} \left[S \cdot \left(-\Delta H_r\right) \cdot \left(-r_j\right)_{\left(x_j, T\right)} - \pi \cdot D \cdot K \cdot \left(T - T_a\right)\right] \end{cases} \qquad (10)$$

Aplicație MathCad