



FKIT MCMXIX

Sveučilište u Zagrebu
Fakultet kemijskog
inženjerstva i tehnologije



REAKTORI I BIOREAKTORI

MODELI CIJEVNIH REAKTORA

Vanja Kosar, izv. prof.



MODELI CIJEVNIH REAKTORA

Osnovne značajke cijevnih reaktoru su:

Zavisnost parametara o prostornim koordinatama unutar reaktorskog prostora. Ova značajka je neposredna posljedica približno idealnog strujanja reakcijske smjese kroz reaktor.

Prisutnost jedne ili više faza. Posebnu i važnu grupu cijevnih reaktora čine reaktori s nepokretnim slojem krutog katalizatora.

Stacionarnost rada. Nestacionarni rad cijevnih reaktora važan je samo za početak, odnosno kraj rada te za probleme vezane uz vođenje i kontrolu.



MODELI CIJEVNIH REAKTORA

Općenito, složenost matematičkog modela zavisi o

- opisu realnog strujanja reakcijske smjese,
- opisu prijenosa topline kroz reaktor i stjenku,
- kinetičkom modelu reakcije (a) te
- prisutnosti jedne ili više faza.

Matematički modeli cijevnih reaktora uglavnom se dijele na:

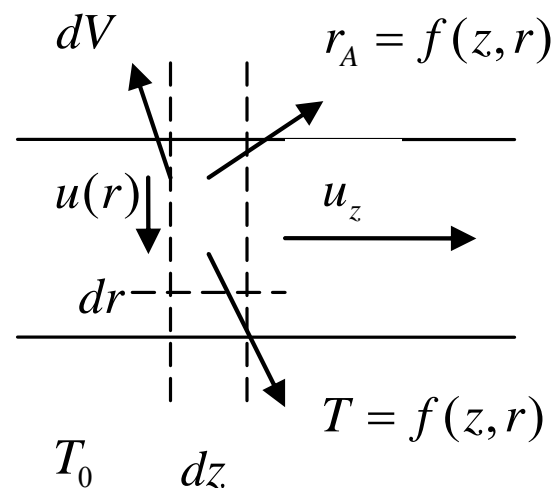
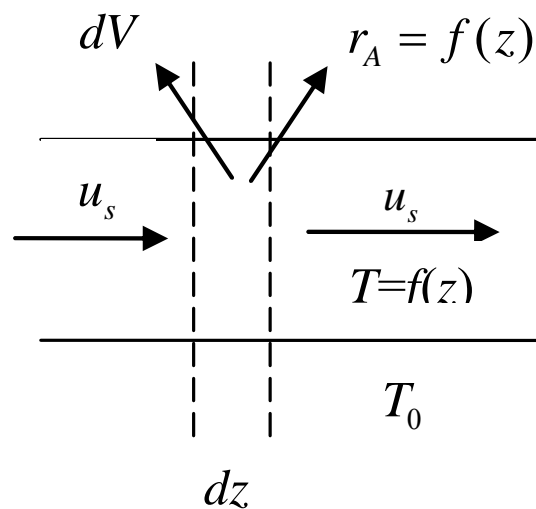
homogene, odnosno pseudohomogene modele i

heterogene modele.

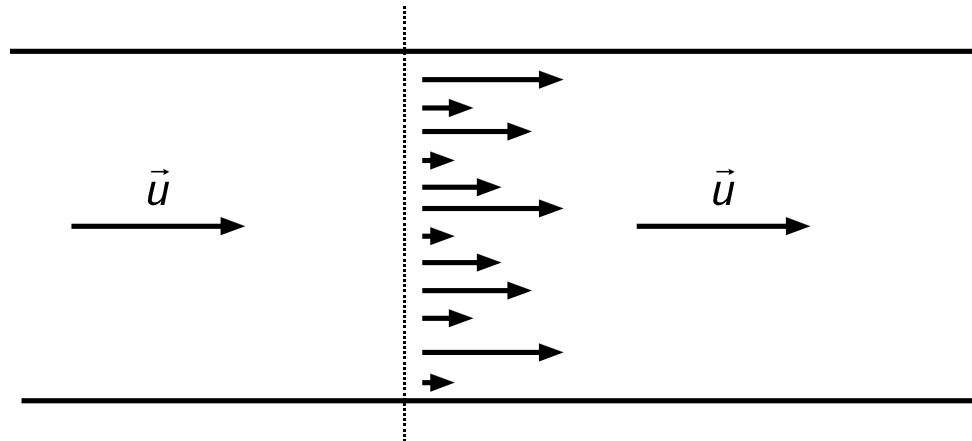
U svakoj od ove dvije osnovne grupe mogu postojati

tzv. **A)** jednodimenzijски i

B) dvodimenzijски modeli.



Model aksijalne disperzije

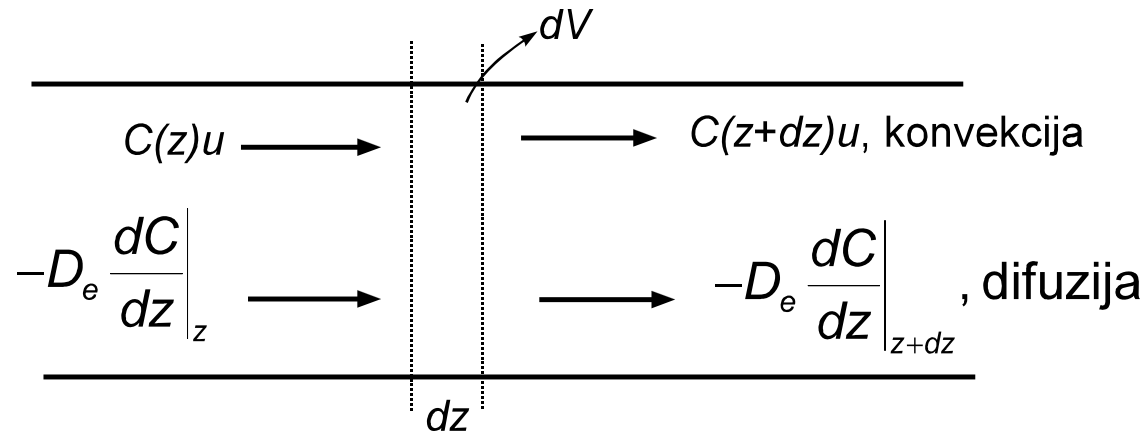


Modelom aksijalne disperzije aproksimirati se realno strujanje uz određene pretpostavke:

- linearna brzina fluida kao i koncentracija reaktanata po presjeku reaktora je stalna,
- disperzija uzrokovana difuzijom i drugim procesima nezavisna je o položaju unutar reaktora i svugdje je ista,
- ⁵reaktoru ne postoje mjesta sa stagnantnim strujanjem niti sa obilascima (bypass).

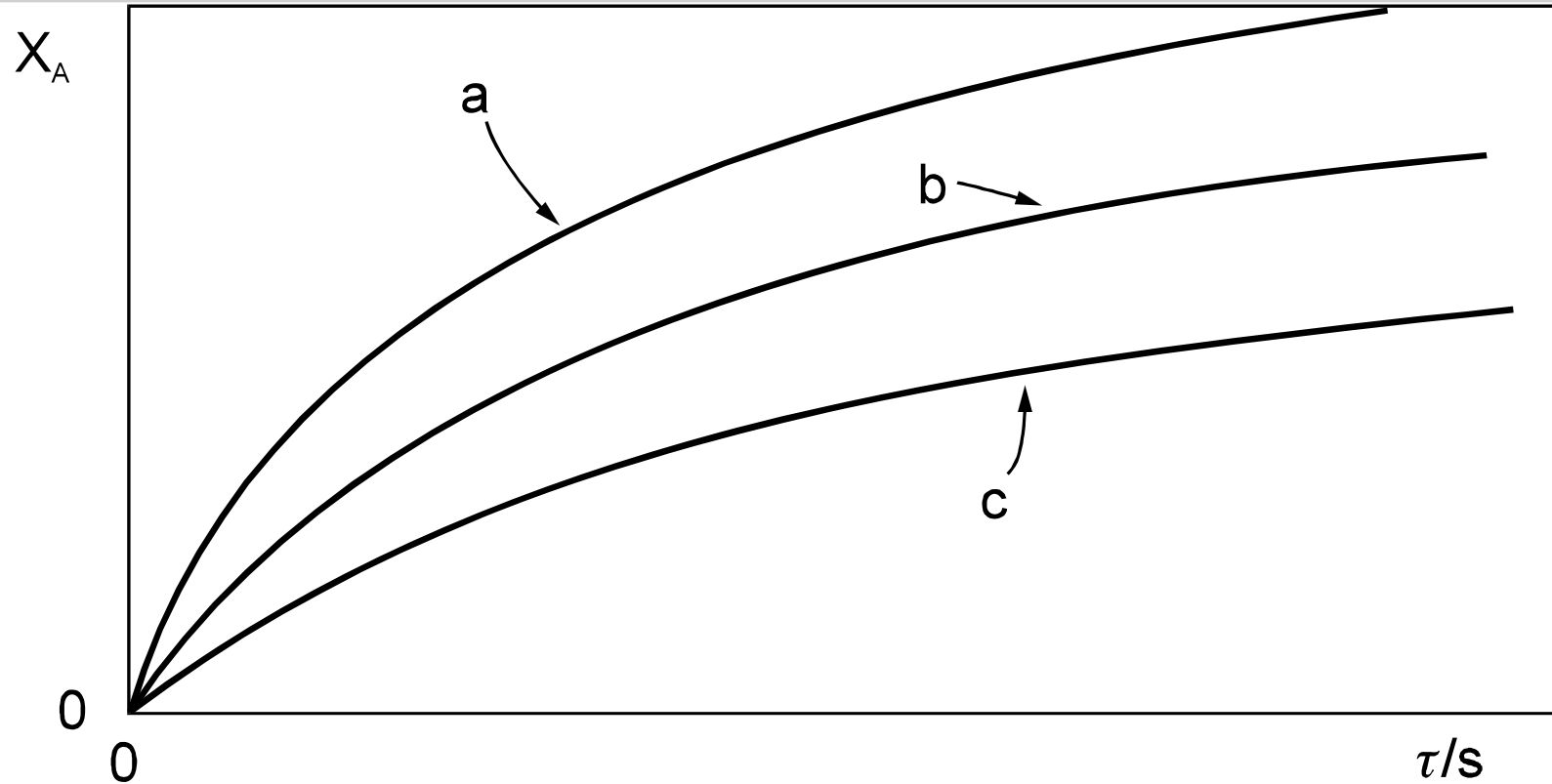
MODELI CIJEVNIH REAKTORA

$$-u \frac{dC_A}{dz} = r_A$$



$$u \frac{dC_A}{dz} - D_e \frac{d^2 C_A}{dz^2} + r_A = 0$$

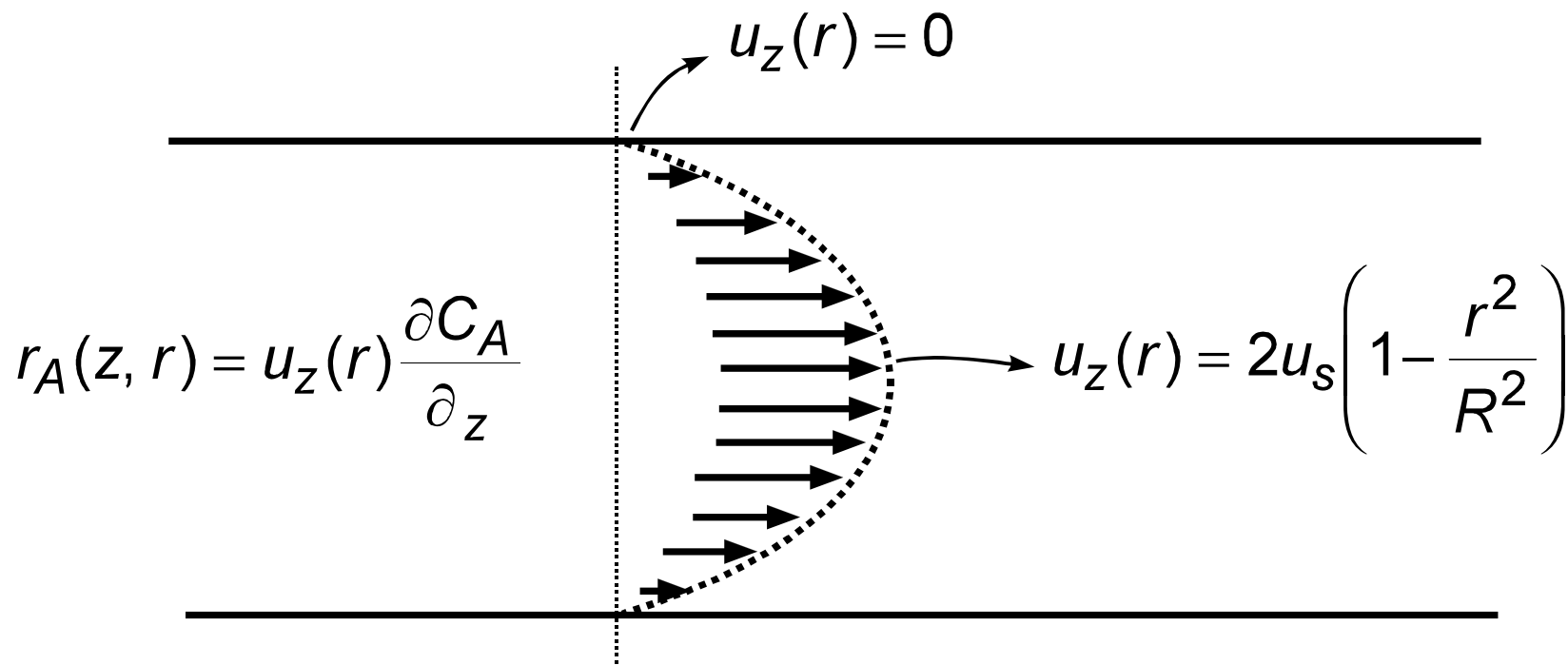
MODELI CIJEVNIH REAKTORA



Usporedba konverzija u pojedinim vrstama reaktora za reakciju prvog reda. a - cijevni reaktor, model idealnog strujanja, b - cijevni reaktor, disperzijski model, c - PKR reaktor, idealno miješanje.

Model cijevnog reaktora uz laminarno strujanje

- Brzina strujanja u cijevnim reaktorima obično nije velika tako da je laminarno strujanje u praksi često, posebice kod kapljevutih homogenih sustava.
- Kako je poznato, laminarno strujanje je segregirano, slojevito, a definirano je profilom brzina po presjeku reaktora.
- Treba napomenuti da ne postoji vektor brzine usmjeren u radijalnom smjeru.



MODELI CIJEVNIH REAKTORA

$$r_A = -u_z(r) \frac{\partial C_A}{\partial z}$$

$$u_z(r) = 2u_s \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] = u_{maks.} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right]$$

$$u_s = \frac{1}{2} u_{maks.} = \frac{v_0}{A_s}$$

$$-r_A = 2u_s \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \frac{\partial C_A}{\partial z}$$

$$C_{A_s} = \frac{1}{v_0} \int_0^R C_{A_i}(r) u_z 2\pi r dr$$



MODELI CIJEVNIH REAKTORA

MODELI REAKTORA ZA HETEROGENI SUSTAV

Za vrlo značajnu grupu cijevnih reaktora s nepokretnim slojem katalizatora koriste se složeniji modeli i to:

Dvodimenzijski pseudohomogeni model uz radijalnu raspodjelu koncentracija i temperature (RS model),

Heterogeni jednodimenzijski model s idealnim strujanjem (HID model) te

Heterogeni dvodimenzijski model koji uzima u obzir promjenu svojstava krute i fluidne faze u radijalnom smjeru (HRS model).



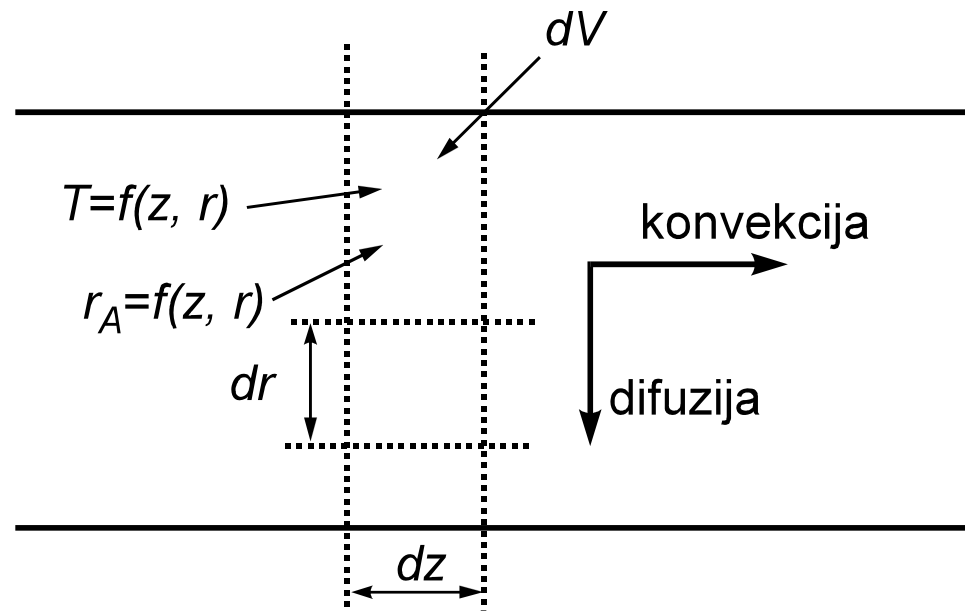
FKIT MCMXIX



MODELI CIJEVNIH REAKTORA

Dvodimenzijski pseudohomogeni model

Ovaj model nalazi najveću primjenu u modeliranju reaktora s nepokretnim slojem katalizatora. Treba napomenuti da je to pseudohomogeni model, odnosno unutar reaktorskog prostora ne razlikuje se posebno fluidna od krute faze - katalizatora. Reaktorski prostor je prema tome "homogen" a prijenos tvari i topline u radijalnom smjeru definira se tzv. prosječnim koeficijentima difuzije i vođenja topline. Kinetički model sadrži koncentracije komponenata u fluidu (plinu) a ne na/ili u katalizatoru što u određenim slučajevima nije realna situacija. Model se često koristi posebice za reakcije koje nisu jako egzotremne ili endotermne.



- Disperzija se u osnom, aksijalnom smjeru može zanemariti jer je konvekcijski član uvijek mnogo značajniji.
- Reakcijska smjesa kroz reaktor prolazi idealnim strujanjem.
- Prijenos tvari i topline uzima se u obzir u radijalnom smjeru a formalno se interpretira procesom difuzije.
- Parametri D_r , $D_{h,r}$ i U su stalni po čitavoj dužini reaktora.

$$u_s \frac{\partial C_A}{\partial z} - D_r \left(\frac{1}{r} \frac{\partial C_A}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2} \right) + \rho_k r_A = 0$$

$$u_s \frac{\partial T}{\partial z} - D_{h,r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right) + \frac{(-\Delta H_r) \rho_k r_A}{\rho_s c_{p_s}} = 0$$



MODELI CIJEVNIH REAKTORA

U cijevnom reaktoru s idealnim strujanjem vodi se izotermno reakcija prvog reda u kapljevitoj fazi oblika



Na izlazu iz reaktora postiže se 80% konverzija. Reaktor je duljine 2 m, dok je brzina strujanja, $u=0.2 \text{ m min}^{-1}$.

Potrebno je izračunati konstantu brzine reakcije te konverziju koja se postiže na polovici dužine reaktora.



IZBOR REAKTORA I TOPLINSKI UČINCI

S obzirom na iznose reakcijske entalpije i energije aktivacije, mogu se reakcijski sustavi grubo svrstati u tri grupe:

- a) **Reakcije koje nisu osjetljive na promjenu temperature**, tj. one koje općenito imaju manje iznose reakcijske entalpije i male energije aktivacije. Primjeri za to su razne organske sinteze, posebice u otapalu a zatim i reakcije u biološkim sustavima. Adijabatski način rada je najbolje rješenje uz predgrijavanje ulazne smjese ako je potrebno.

- b) **Reakcije koje su umjereno osjetljive na promjenu temperature**, što znači s prosječnim vrijednostima reakcijskih entalpija i energijama aktivacije. I za te reakcije treba kao jednu od alternativa razmotriti adijabatski način rada

- c) **Reakcije koje su vrlo osjetljive na promjenu temperature**, odnosno koje imaju veće iznose reakcijskih entalpija i energija aktivacije. Za ove reakcije potrebno je kontinuirano odvođenje ili dovođenje topline tijekom same reakcije. Kao primjer može se navesti jedan od tipova reaktora za sintezu amonijaka.

Temperaturna osjetljivost reakcija

adijabatskom značajkom (adijabatski porast temperature),

$$A_f = \frac{\Delta H_r C_{A_0} v_s}{C_{p_s}} = \frac{\Delta H_r Y_{A_0}}{C_{p_s}}$$

temperaturnom osjetljivosti i

$$O_f = \frac{dr_A}{r_A dT} = \frac{E_a}{R_g T^2}$$

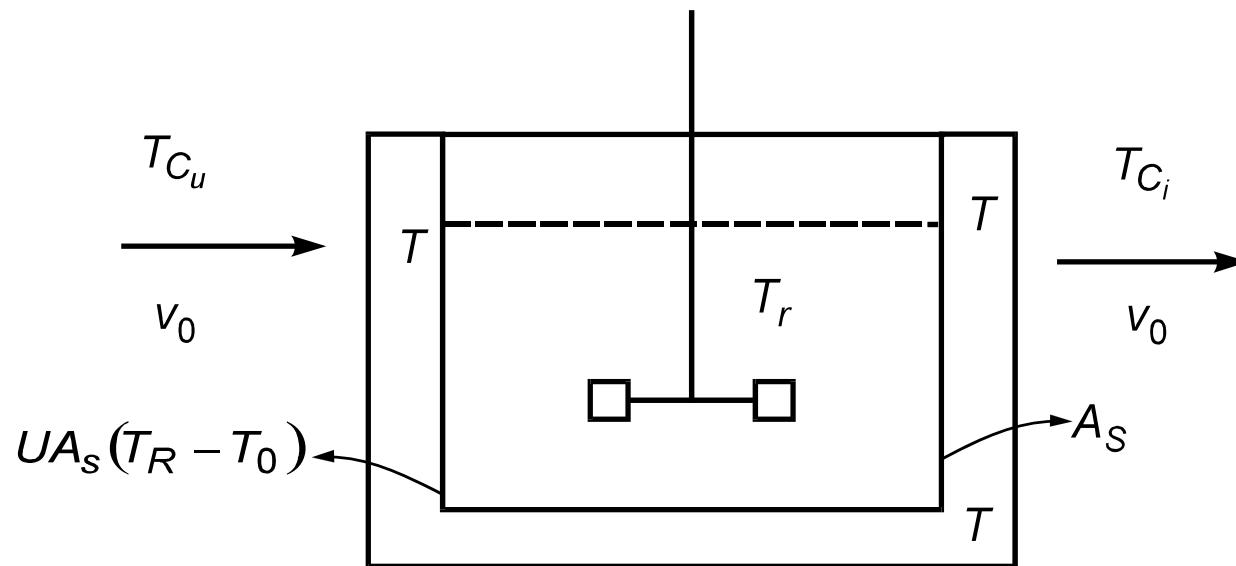
toplinskim potencijalom.

$$P_t = \frac{\Delta H_r Y_{A_0} E_a}{C_{p_s} T_0^2}$$

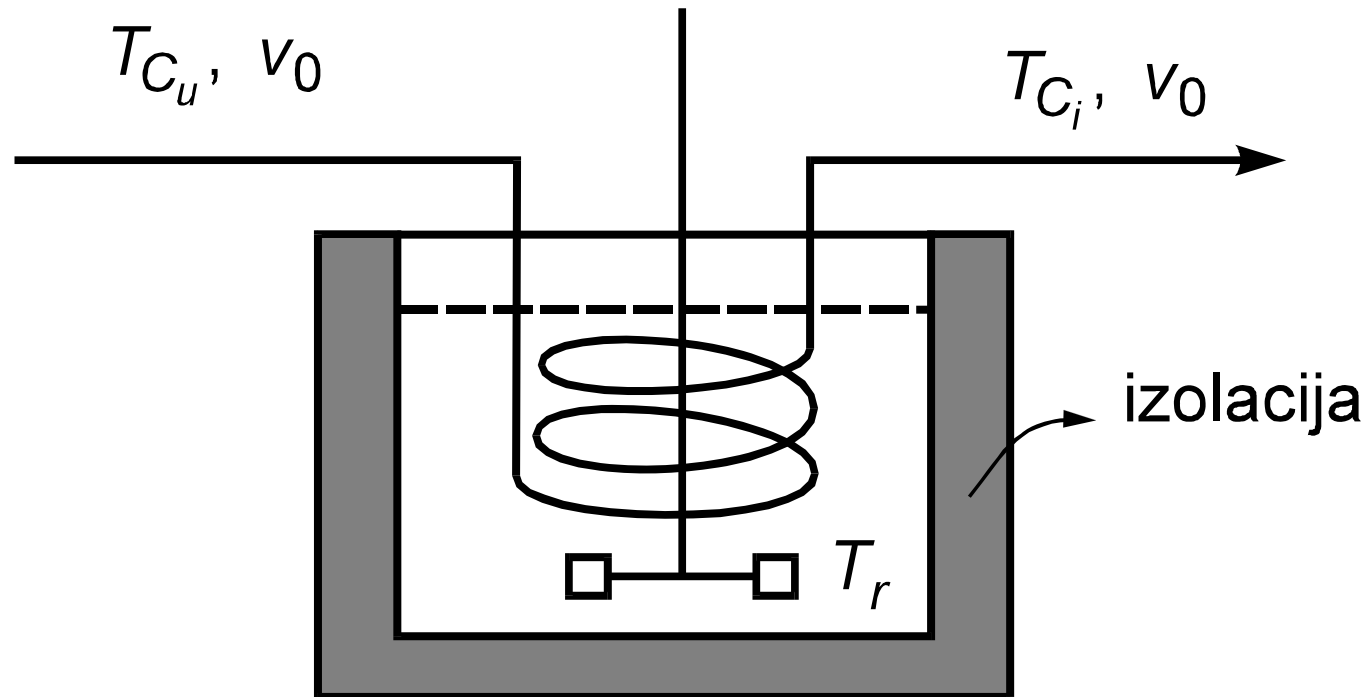
KOTLASTI REAKTORI

Osnovna bilanca topline predočena je relacijom

$$G_t c_p \frac{dT}{dt} = \Delta H_r r_A V + Q_r$$



$$Q_r = UA_s (T_0 - T_r)$$



$$Q_r = \int_0^L UA_s (T_c - T_r) dz$$

$$r_A = n_{A_0} \frac{dX_A}{dt}$$

$$G_t c_p (T - T_0) + \Delta H_r n_{A_0} X_A = \int_0^t Q_r dt$$

Adijabatski rad

$$T_0 - T = \frac{\Delta H_r n_{A_0}}{G_t c_p} X_A$$

$$T_0 - T = A_f = \frac{\Delta H_r n_{A_0}}{G_t c_p}$$

18 Izotermni rad

$$\Delta H_r n_{A_0} X_A = \int_0^t Q_r dt$$

Opća bilanca topline dana je izrazom

$$\frac{(T - T_u)(Q_{r_i} - Q_{r_u})}{G(t)c_p} + \frac{\Delta H_r r_A}{\rho(t)c_p} + \frac{UA_s(t)}{G(t)c_p}(T_0 - T) = \frac{dT}{dt}$$

bilanca topline reaktora u stacionarnom stanju je

$$Q_{r_0} c_p (T_u - T) + \Delta H_r r_A V + UA_s (T - T_0) = 0$$

$$v_0 \rho c_p (T_u - T) + \Delta H_r r_A + UA_s (T - T_0) = 0$$

IZBOR REAKTORA I TOPLINSKI UČINCI

ako se reakcija vodi adijabatski, tada nema prijenosa topline u okolinu pa je tada

$$T_0 - T = \frac{\Delta H_r}{v_0 \rho c_p} V r_A = \frac{\Delta H_r}{G c_p} V r_A$$

ako se brzina reakcije prevede u oblik,

$$r_A = \frac{C_{A_0} X_A}{\frac{V}{v_0}}$$

i uvrsti dobiva se

$$T = T_0 - \frac{\Delta H_r X_A C_{A_0}}{\rho}$$

Bilanca topline za medij koji prenosi toplinu

Prijenos topline kroz plašt. Pretpostavlja se idealno miješanje tj. temperatura je svuda jednaka u plaštu.

$$Q_m c_p (T_u - T_p) + Q_r = G_p c_p \frac{dT}{dt}$$

$$Q_r = UA_s (T_p - T_r)$$

U izotermnom radu toplina prenijeta kroz plašt mora biti jednaka reakcijskoj entalpiji, odnosno

$$Q_{mg} c_p (T_u - T_p) = UA_s (T_p - T_r) = \Delta H_r V r_A$$

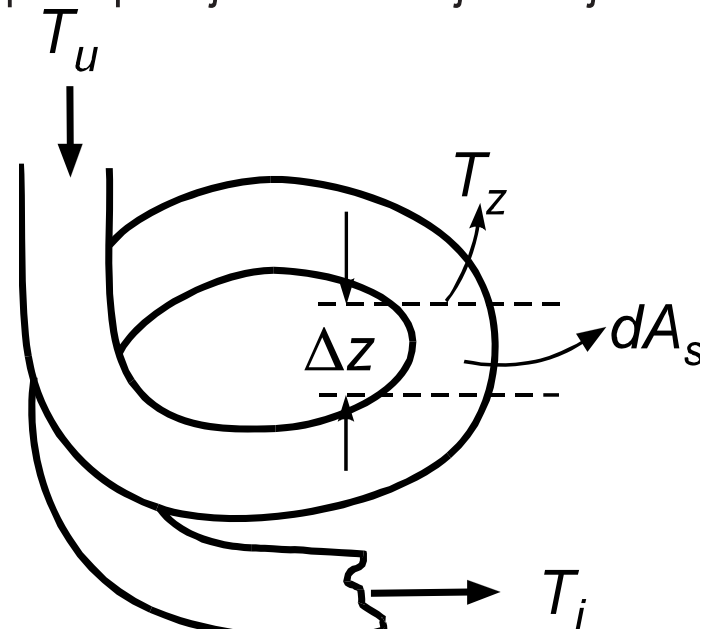
IZBOR REAKTORA I TOPLINSKI UČINCI

Prijenos topline kroz zmijaču. Pretpostavlja se idealno strujanje medija za prijenos topline kroz zmijaču pa je bilanca

$$Q_{m_z} c_p \frac{\partial T}{\partial z} + q_r = G_z c_p \frac{\partial T}{\partial t}$$

Ovdje je s q_r označena toplina koja se prenese kroz jediničnu površinu, odnosno površinu stjenke zmijače dužine dz . Prema tome, ukupna toplina prenijeta na medij u zmijači dana je izrazom

$$Q_r = \int_0^L q_r dz = \int_0^L UA_s (T_z - T_r) dz$$





IZBOR REAKTORA I TOPLINSKI UČINCI

1.) Egzotermna reakcija u kapljevitom reaktoru,



vodi se izotermno u protočno kotlastom reaktoru. Toplina se odvodi iz reaktora hlađenjem vodom kroz plašt. Potrebno je izračunati protok rashladne vode kroz plašt reaktora kako bi se zadržala stalna temperatura reakcijske smjese od 60°C , uz 80% konverziju reaktanta A.

Poznati su sljedeći podaci o reaktorskom sustavu:

- Volumen reakcijske smjese, $V=100 \text{ dm}^3$
- Volumni protok, $v_0=3 \text{ dm}^3 \text{ min}^{-1}$
- Površina hlađenja, $A_p=63 \text{ dm}^2$
- Ulazna koncentracija reaktanta A, $c_{A0}=1.5 \text{ mol dm}^{-3}$
- Ukupni koeficijent prijenosa topline kroz stijenu plašta, $U=60 \text{ W dm}^{-2} \text{ K}^{-1}$
- Ulazna temperatura rashladne vode, $T^0_v=15^{\circ}\text{C}$
- Toplinski kapacitet vode, $c_{pv}=4.18 \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$
- Reakcijska entalpija, $\Delta H_r= - 80 \text{ kJ mol}^{-1}$