

УДК 66.023:519.8

І. Лучейко

(Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя)

**РОЗРАХУНОК ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ПРОЦЕСУ
ЧЕРЕЗ КОЕФІЦІЄНТИ ПЕРЕТВОРЕННЯ ПІДСИСТЕМ
У СИСТЕМІ «ПРОТОЧНИЙ РЕАКТОР ЗМІШУВАННЯ +
ПОСЛІДОВНА РЕАКЦІЯ $A_1 \rightleftharpoons \alpha_2 A_2 \rightleftharpoons \alpha_3 A_3$ »**

Показано, що в стаціонарному режимі функціонування проточного реактора ідеального змішування (РІЗ) система рівнянь для визначення основних технологічних параметрів є алгебричною (всі величини – безрозмірні)

$$\begin{cases} x_0 = \bar{w}_{0(12)} - \alpha_2^{-1} \bar{w}_{0(21)} \\ \tilde{c}_{02} = \bar{w}_{0(12)} - \alpha_2^{-1} \bar{w}_{0(21)} - \alpha_2^{-1} \bar{w}_{0(23)} + \alpha_3^{-1} \bar{w}_{0(32)} \\ \tilde{c}_{03} = \alpha_2^{-1} \bar{w}_{0(23)} - \alpha_3^{-1} \bar{w}_{0(32)} = x_0 - \tilde{c}_{02}, \end{cases} \quad (1)$$

де $x_0 = 1 - c_0$ – ступінь перетворення реагента A_1 ; $\tilde{c}_{02} = c_{02} / \alpha_2$, $\tilde{c}_{03} = c_{03} / \alpha_3$ – зведені до стехіометричних коефіцієнтів концентрації продуктів A_2 й A_3 ; $\bar{w}_{0(j,j\pm 1)} \equiv \bar{w}_{0(j,j\pm 1)}^{\text{аєòò}}$ – номінальні швидкості витрачання A_j ; $j = 1, 2, 3$ – індекс, віднесений до інгредієнтів.

Вводяться коефіцієнти перетворення a_i (прямі реакції) та b_i (зворотні реакції) швидкостей щодо нескінченно малих змін ∂c_{0j} кінцевих концентрацій. Для ступеневої моделі кінетики $\bar{w}_{0(i,i+1)} = \bar{k}_{0(i,i+1)} c_{0i}^{n_i}$, $\bar{w}_{0(i+1,i)} = \bar{k}_{0(i+1,i)} c_{0(i+1)}^{m_i}$ ($i = 1, 2$ – індекс стадій)

$$a_i \equiv n_i \tilde{a}_i = \frac{\partial \bar{w}_{0(i,i+1)}}{\partial c_{0i}} = \frac{n_i \bar{w}_{0(i,i+1)}}{c_{0i}}, \quad b_i \equiv m_i \tilde{b}_i = \frac{\partial \bar{w}_{0(i+1,i)}}{\partial c_{0(i+1)}} = \frac{m_i \bar{w}_{0(i+1,i)}}{c_{0(i+1)}}. \quad (2)$$

Із (2) й (1) рівняння статичних зв'язків між елементами системи «РІЗ + реакція»

$$\left\{ \begin{array}{l} x_0 = \tilde{a}_1 c_0 - \tilde{b}_1 \tilde{c}_{02} \\ 1 + \tilde{a}_2 + \tilde{b}_1 \quad \tilde{c}_{02} = \tilde{a}_1 c_0 + \tilde{b}_2 \tilde{c}_{03} \\ 1 + \tilde{b}_2 \quad \tilde{c}_{03} = \tilde{a}_2 \tilde{c}_{02} \end{array} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} s_{02} = \tilde{a}_1 - y_0 / \tilde{b}_1 y_0 \\ s_{03} = \tilde{a}_2 s_{02} / (1 + \tilde{b}_2) = 1 - s_{02} \end{array} \right\}, \quad (3)$$

де $y_0 = x_0 / c_0$; $s_{0(i+1)} = \tilde{c}_{0(i+1)} / x_0$ – інтегральні селективності.

Тоді з (3) у неявній формі формули для розрахунку основних технологічних параметрів наберуть вигляду комбінацій коефіцієнтів перетворення окремих підсистем

$$\begin{aligned} x_0 &= \frac{\tilde{a}_1 \tilde{D}_2}{\tilde{A}_1 \tilde{D}_2 + \tilde{b}_1 \tilde{B}_2} \equiv \frac{\tilde{a}_1}{1 + \tilde{a}_1 + \tilde{b}_1} \frac{\tilde{a}_1}{1 + \tilde{b}_2} \frac{1}{1 + \tilde{a}_2 + \tilde{b}_2}, \\ s_{02} &= \frac{1}{1 + \tilde{a}_2 / \tilde{B}_2}, \quad \tilde{c}_{02} = \frac{\tilde{a}_1 \tilde{B}_2}{\tilde{A}_1 \tilde{D}_2 + \tilde{b}_1 \tilde{B}_2} \equiv \frac{\tilde{a}_1}{\tilde{b}_1 + \tilde{A}_1 \tilde{D}_2 / \tilde{B}_2}, \end{aligned} \quad (4)$$

де $\tilde{A}_i = 1 + \tilde{a}_i$, $\tilde{B}_i = 1 + \tilde{b}_i$, $\tilde{D}_i = 1 + \tilde{a}_i + \tilde{b}_i \equiv \tilde{A}_i + \tilde{B}_i - 1$ – зведені до порядків коефіцієнти перетворення підсистем відповідно «реактор + пряма реакція», «реактор + зворотна реакція», «реактор + пряма + зворотна реакція i -ої стадії».