

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКТОРА ОКИСЛЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Федоров А.Я., Мелентьева Т. А.

Тульский государственный университет

Тула, Россия

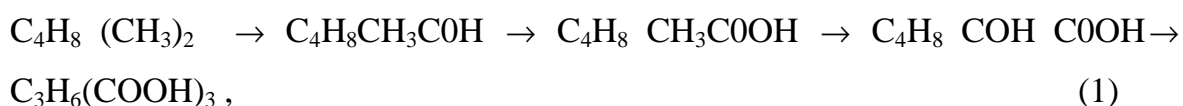
MATHEMATICAL MODELLING OF CHEMICAL REACTOR OF ORGANIC COMPOUND

Fedorov A. Yu. , Melenet'eva T. A.

Tula state university

Tula, Russia

В качестве объекта настоящего исследования взято математическое моделирование реактора окисления с механическим перемешиванием. В качестве катализатора используется кобальтмарганецбромидный катализатор при отношении ионов $Co^{2+} : Mn^{2+} = 2:1$. Окисление проводилось кислородом воздуха при давлении 25 – 28 ата и температурой реакционной смеси 200 – 220 °С. При этом реакционная смесь была насыщена кислородом. В основу математической модели жидкофазного реактора была положена кинетическая модель следующей брутто - схемы реакции:



где $C_4H_8(CH_3)_2$ – параксилол, $C_4H_8CH_3COH$ – паратолуиловый ангидрид, $C_4H_8CH_3COOH$ – паратолуиловая кислота, $C_4H_8COHCOOH$ – карбоксибензальдегид, $C_3H_6(COOH)_3$ – терефталевая кислота. Предполагается, что будет использоваться двурусная механическая мешалка. Для построения математической модели реактора построим физические модели микро – и макромасштабных процессов переноса. В дальнейшем процесс хемосорбции будем рассматривать в рамках модели турбулентного диффузионного пограничного слоя:

$$\frac{\partial \bar{c}_1}{\partial \tilde{t}} + u_0 \frac{\partial \bar{c}_1}{\partial x} = D_{\phi 1} \frac{\partial^2 \bar{c}_1}{\partial x^2}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \bar{c}_2}{\partial \tilde{t}} + u_0 \frac{\partial \bar{c}_2}{\partial x} = D_{\phi 2} \frac{\partial^2 \bar{c}_2}{\partial x^2},$$

где \bar{c}_1, \bar{c}_2 - средние концентрации веществ, переносимых вдоль химического реактора; u_0 - скорость конвективного потока; \tilde{t}, x - Эйлера система координат; $D_{\phi 1}, D_{\phi 2}$ - эффективные коэффициенты диффузии. Это система дифференциальных уравнений в частных производных с учетом химических реакций. Уравнения массопередачи, описывающие элементарный акт хемосорбции, принимались в соответствии с моделью:

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} + J_0(x) \frac{\partial c_1}{\partial x} = D_{m1} \frac{\partial^2 c_1}{\partial y^2} - k_1 c_1^{n_1}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} + J_0(x) \frac{\partial c_2}{\partial x} = D_{m2} \frac{\partial^2 c_2}{\partial y^2} - k_2 c_2^{n_2},$$

где c_1, c_2 - концентрации п - ксилола и п - карбоксибензальдегида; $J_0(x)$ - относительная скорость подъема пузыря; D_{m1}, D_{m2} - коэффициенты молекулярной диффузии; k_1, k_2 - кинетические константы соответствующих стадий процесса окисления; n_1, n_2 - порядки стадий. При этом предполагается, что лимитирующей стадией процесса является стадия расходования п - карбоксибензальдегида.

Уравнения (3) использовались со следующими граничными условиями:

$$c_1 = \bar{c}_1, c_2 = \bar{c}_2 \Big|_{x=0, y \geq 0, t > 0}, \quad (4)$$

$$c_1 = 0, \partial c_2 / \partial y = 0 \Big|_{y=0, 0 \leq x \leq l, t > 0},$$

$$c_2 = \bar{c}_2, \quad \partial c_1 / \partial y = 0 \Big|_{y \rightarrow \infty, 0 \leq x \leq l, t \rightarrow \infty},$$

где t – время жизни пузыря, зависящее от частоты турбулентности на верхнем уровне иерархической системы. В дальнейшем уравнения (3) обезразмеривались в соответствии со следующими выражениями:

$$t' = \frac{D_{m1} t}{l}; \quad x' = \frac{x}{d_1(D_{m1})}; \quad y' = \frac{y}{d_2(D_{m2})}; \quad (5)$$

$$c'_1 = \frac{c_1}{\bar{c}_1}; \quad c'_2 = \frac{c_2}{\bar{c}_2};$$

где $d_1(D_{m1})$ и $d_2(D_{m2})$ - величины соответствующих диффузионно – реакционных пограничных слоев. Решение системы уравнений (3) с граничными условиями (4) позволяет определить молекулярные диффузионные потоки на поверхность дисперсионного включения (пузыря) в следующем виде:

$$\bar{j}_1(x) = -D_{m1} \partial c_1 / \partial y, \quad (6)$$

$$\bar{j}_2(x) = -D_{m2} \partial c_2 / \partial y.$$

Процессы в ядре потока сплошной фазы ректора могут описываться диффузионной моделью Данквертса для химических реакций, протекающих с существенно различными скоростями. Для решения уравнений (2) в случае прямотока газовой и жидкой фаз необходимо задать следующие граничные условия:

$$\bar{c}_1 = \bar{c}_1^0, \quad \bar{c}_2 = \bar{c}_2^0(t) \Big|_{x=0, t>0}, \quad (7)$$

$$\bar{c}_1 = 0, \quad \bar{c}_2 = \bar{c}_2^0 \Big|_{x=L, t \rightarrow \infty},$$

где L - длина реактора (12,5 м.). Предполагая, что диффузионное сопротивление в межфазного переноса сосредоточено в ламинарном подслое, можно определить время пребывания реакционной смеси в

реакторе $t = 1$ час. Система уравнений (1-7) позволяет моделировать процессы переноса со сложными химическими реакциями в промышленных реакторах большой единичной мощности (150 тыс.т./год.)