

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	1
1. ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ И ПОДБОР РЕАКЦИИ	4
2. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР	4
3. КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ	4
4. МОДЕРИРОВАНИЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКОГО РИС.....	4
5. МОДЕЛИРОВАНИЕ АДИОБАТИЧЕСКОГО РИС	4
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	4
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	4

ВВЕДЕНИЕ

В условиях современного развития промышленности химическая отрасль занимает одно из ключевых мест, обеспечивая производство материалов, лекарственных средств, топлива и множества других продуктов, необходимых для функционирования экономики и общества в целом. Эффективность и безопасность таких производств во многом определяются качеством проектирования и оптимизации технологических процессов, важнейшим инструментом которых является математическое моделирование химических реакторов.

Математические модели позволяют описывать протекание химических реакций, прогнозировать поведение реакционной системы при различных условиях, оценивать основные технологические показатели и выявлять возможные направления для их улучшения. Применение моделирования существенно сокращает необходимость проведения дорогостоящих и трудоёмких экспериментов, а также повышает надёжность принимаемых инженерных решений [1].

Целью данной курсовой работы является разработка математической модели химического реактора для заданной схемы химических превращений. В процессе выполнения работы рассматриваются основные подходы к моделированию химических процессов, включая уравнения материального и теплового балансов, а также кинетические зависимости, описывающие скорость протекания реакций.

Актуальность выбранной темы обусловлена возрастающими требованиями к энергоэффективности, экологической безопасности и экономической целесообразности химических производств. Использование математических моделей позволяет оптимизировать режимы работы реакторов, снизить расход сырья и энергии, минимизировать выбросы вредных веществ и обеспечить стабильное качество конечного продукта [2].

В рамках работы последовательно рассматриваются основные этапы построения модели: формулировка исходных допущений и постановка задачи, выбор метода математического описания, численное решение полученной системы уравнений и анализ результатов моделирования. В результате разрабатывается

модель, способная адекватно описывать процесс химического превращения, представленный в заданной реакционной схеме, и служить основой для дальнейшего анализа и оптимизации процесса.

1. ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ И ПОДБОР РЕАКЦИИ

Начальные концентрации:

- $C_{A0} = 0.20 \text{ моль/л} = 200 \text{ моль/м}^3$

Значения констант скоростей при $T = 580 \text{ K}$:

- $k_1 = 0.37$

- $k_2 = 0.16$

- $k_3 = 0.15$

Значения энергий активации:

- $E_1 = 12.717 \cdot 10^4 \text{ Дж/моль}$

- $E_2 = 13.727 \cdot 10^4 \text{ Дж/моль}$

- $E_3 = 12.762 \cdot 10^4 \text{ Дж/моль}$

Расход потока:

- $Q_{v0} = 5000 \text{ л/ч} = 0.00139 \text{ м}^3/\text{с}$

Исходная схема:



Подобранная реакция:

Схема дегидратации этанола

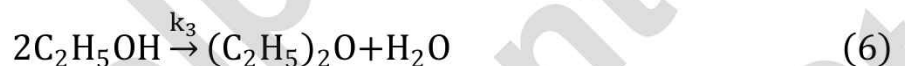


Схема подобранных реакций:



Целевой компонент – Этилен (B).

2. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

Химизм процесса

Процесс дегидратации этанола представляет собой каталитическое превращение этилового спирта в этилен с образованием воды, а также побочным образованием диэтилового эфира. Данный процесс широко применяется в химической и нефтехимической промышленности как перспективная альтернатива паровому крекингу углеводородов, особенно при использовании биоэтанола в качестве возобновляемого сырья [3–5].

В присутствии кислотных катализаторов (γ - Al_2O_3 , цеолиты типа ZSM-5) дегидратация этанола протекает по двум основным направлениям: внутримолекулярной дегидратации с образованием этилена и межмолекулярной дегидратации с образованием диэтилового эфира [3].

Образование этилена



Данная реакция является основной целевой стадией процесса. Этилен образуется в результате внутримолекулярной дегидратации этанола на кислотных активных центрах катализатора. Реакция является обратимой, и её равновесие существенно зависит от температуры и парциального давления воды. Повышение температуры и снижение концентрации воды смещают равновесие в сторону образования этилена [3,5].

Обратная реакция гидратации этилена



Обратная реакция протекает при повышенном содержании воды в реакционной среде и может снижать выход этилена. В кинетических моделях дегидратации этанола данная стадия учитывается при описании равновесного характера реакции образования этилена [3].

Образование диэтилового эфира



Межмолекулярная дегидратация этанола с образованием диэтилового эфира рассматривается как побочная реакция процесса. В большинстве кинетических и

технологических моделей данная реакция принимается необратимой, поскольку обратное превращение диэтилового эфира в этанол в условиях дегидратации практически не наблюдается [3-4]. Образование диэтилового эфира преимущественно происходит при более низких температурах и высокой концентрации этанола [5].

Целевым компонентом рассматриваемого процесса является этилен (В), выход и селективность которого определяются температурным режимом, типом катализатора и временем контакта реагентов с каталитическим слоем.

Типы применяемых реакторов

Для промышленной и полупромышленной реализации процесса дегидратации этанола в этилен применяются различные типы каталитических реакторов. Выбор типа реактора определяется тепловым эффектом реакции, требованиями к селективности по этилену, а также необходимостью обеспечения стабильной работы катализатора.

1. Реакторы с неподвижным слоем катализатора

Реакторы с неподвижным слоем катализатора представляют собой цилиндрические аппараты, в которых катализатор загружается в виде фиксированного слоя, а газовая реакционная смесь пропускается через него в осевом направлении. Данный тип реакторов широко применяется для дегидратации этанола на цеолитных катализаторах, в частности ZSM-5 [3-5].

К основным преимуществам реакторов с неподвижным слоем относятся простота конструкции, удобство эксплуатации и возможность достижения высокой селективности по этилену при правильно подобранных режимах работы. Такие реакторы позволяют эффективно реализовать процесс при атмосферном или близком к атмосферному давлению и температуре порядка 500–650 К.

Недостатком реакторов данного типа является возможность локального перегрева слоя катализатора вследствие экзотермического характера реакции дегидратации этанола, а также постепенная дезактивация катализатора из-за образования коксовых отложений, что требует периодической регенерации.

2. Реакторы с кипящим (псевдоожиженным) слоем катализатора

В реакторах с кипящим слоем катализатор находится в состоянии псевдооживления под действием восходящего потока газовой реакционной смеси. Такое конструктивное решение обеспечивает интенсивное перемешивание катализатора, равномерное распределение температуры по объёму реактора и эффективный теплоотвод.

Использование реакторов с кипящим слоем особенно целесообразно для процессов дегидратации этанола, протекающих при высоких тепловых нагрузках и требующих строгого контроля температуры для предотвращения образования побочных продуктов, таких как углекислый газ и вода в результате глубокого окисления [3].

Кроме того, реакторы с кипящим слоем облегчают проведение регенерации катализатора и позволяют реализовать непрерывную работу установки, что повышает производительность и стабильность процесса [4].

Режимы работы реакторов

Режимы работы реакторов дегидратации этанола в этилен определяются совокупностью технологических параметров, основными из которых являются температура процесса, давление, состав реакционной смеси, время контакта и свойства применяемого катализатора. Оптимальный подбор данных параметров позволяет обеспечить высокую конверсию этанола и селективность по целевому продукту — этилену [3–5].

1. Температурный режим

Температура является ключевым параметром, влияющим на направление протекания реакций дегидратации этанола. Для процессов, ориентированных на преимущественное образование этилена, температура реакции обычно находится в диапазоне 500–650 К (230–380 °С) [3,5].

При пониженных температурах возрастает вклад реакции образования диэтилового эфира, тогда как повышение температуры способствует смещению равновесия в сторону этилена и увеличению скорости внутримолекулярной дегидратации этанола. Однако чрезмерное повышение температуры может

приводить к интенсификации побочных реакций и ускоренной дезактивации катализатора [3].

2. Давление

Процесс дегидратации этанола, как правило, осуществляется при атмосферном или близком к атмосферному давлении. Повышение давления неблагоприятно сказывается на равновесии реакции образования этилена, так как приводит к смещению равновесия в сторону исходного этанола [4].

В промышленной практике давление подбирается таким образом, чтобы обеспечить стабильный режим работы реактора и минимальные энергетические затраты на сжатие газовой фазы [4,5].

3. Состав реакционной смеси

Состав подаваемой в реактор смеси оказывает существенное влияние на селективность процесса. Этанол, как правило, подаётся в газовой фазе, часто в смеси с инертным газом (азотом или водяным паром), что позволяет регулировать парциальные давления компонентов и снижать вероятность локального перегрева слоя катализатора [3].

Наличие воды в реакционной среде оказывает ингибирующее влияние на реакцию образования этилена и способствует смещению равновесия в обратную сторону. Поэтому в технологических схемах стремятся минимизировать содержание воды во входной смеси или обеспечивать её эффективное удаление из зоны реакции [5].

4. Время контакта

Время контакта реакционной смеси с катализатором является важным параметром, определяющим глубину превращения этанола и распределение продуктов реакции. Для реакторов с неподвижным слоем катализатора характерные значения времени контакта находятся в диапазоне долей секунды — нескольких секунд [3-4].

Увеличение времени контакта приводит к росту конверсии этанола, однако может сопровождаться снижением селективности по этилену и усилением

побочных реакций. Поэтому данный параметр подбирается с учётом компромисса между степенью превращения и селективностью процесса [5].

5. Стабильность катализатора и регенерация

В процессе эксплуатации катализатор дегидратации этанола постепенно теряет активность вследствие образования коксовых отложений на его поверхности. Для поддержания стабильной работы реактора предусматриваются периодические стадии регенерации катализатора, проводимые, как правило, в окислительной атмосфере при повышенной температуре [4].

Таким образом, успешная реализация процесса дегидратации этанола в этилен требует комплексной оптимизации режимных параметров реактора, что позволяет обеспечить высокую эффективность, селективность и надёжность промышленного процесса [3–5].

3. КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ



На основании закона действующих масс составим уравнения для скорости реакции. По нашей модели по уравнениям (1),(2),(3) получим:

$$W_1 = k_1 C_A \quad (8)$$

$$W_2 = k_2 C_B C_C \quad (9)$$

$$W_3 = k_3 C_A^2 \quad (10)$$

$$\frac{dC_A}{dt} = -W_1 + W_2 - 2W_3 \quad (11)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = W_1 - W_2 \quad (12)$$

$$\frac{dC_C}{dt} = W_1 - W_2 + W_3 \quad (13)$$

$$\frac{dC_D}{dt} = W_3 \quad (14)$$

Рассчитаем изменения концентраций с течением времени.

Таблица 1 - Порядки реакции и исходные единицы измерения k

Реакция	Порядок реакции	Исходные единицы измерения (k)
(1) $A \rightarrow B + C$	первый ((n=1))	c^{-1}
(2) $B + C \rightarrow A$	второй ((n=2))	$л/(моль \cdot с)$
(3) $2A \rightarrow D + C$	второй ((n=2))	$л/(моль \cdot с)$

Реакции (2) и (3) второго порядка, так как скорость пропорциональна произведению концентраций или C_A^2

$$k_1 = 0.37 \text{ с}^{-1}$$

$$k_2 = 0.16 \text{ л}/(\text{моль} \cdot \text{с})$$

$$k_3 = 0.15 \text{ л}/(\text{моль} \cdot \text{с})$$

Построим графики концентраций веществ используя Python

#Импортируем нужные библиотеки:

```
import numpy as np
```

```
import scipy.integrate as spi
```

```
import matplotlib.pyplot as plt
```

```
from scipy.optimize import fsolve
```

```
import math
```

#Задаем константы скорости реакций при $T = 580$ К.

```
k1 = 0.37 # 1/с
```

```
k2 = 0.16 # л/(моль*с)
```

```
k3 = 0.15 # л/(моль*с)
```

```
k = np.array([k1, k2, k3])
```

#Задаем уравнения (кинетическую модель) в виде python-функции.

```
def kinetics(t, C):
```

```
    #Создаем массив производных dCdt (скорости изменения концентраций),
```

```
    #заполняем его нулями для дальнейшей работы. У нас 4 вещества.
```

```
    dCdt = np.zeros(4)
```

```
    #Записываем скорости реакций.
```

```
    #Реакция (1):  $A \rightarrow B + C$ 
```

```
    W1 = k[0] * C[0]
```

```
    #Реакция (2):  $B + C \rightarrow A$ 
```

```
    W2 = k[1] * C[1] * C[2]
```

```
    #Реакция (3):  $2A \rightarrow D + C$ 
```

```
    W3 = k[2] * (C[0]**2)
```

```
    #Записываем дифференциальные уравнения материального баланса.
```

```
    #Для A:
```

```
    #в реакции (1) A расходуется: -W1
```

```
    #в реакции (2) A образуется: +W2
```

```
    # - в реакции (3) расходуется 2A: -2*W3
```

```
    dCdt[0] = -W1 + W2 - 2*W3
```

```
    #Для B:
```

```
    #в реакции (1) B образуется: +W1
```

```
    #в реакции (2) B расходуется: -W2
```

```
    dCdt[1] = W1 - W2
```

```
    #Для C:
```

```
    #в реакции (1) C образуется: +W1
```

```
    #в реакции (2) C расходуется: -W2
```

```
    #в реакции (3) C образуется: +W3
```

```
    dCdt[2] = W1 - W2 + W3
```

```
    #Для D:
```

```
    #в реакции (3) D образуется: +W3
```

```
    dCdt[3] = W3
```

```
    #Возвращаем массив производных
```

```

return dCdt
#Задаем начальные концентрации веществ (моль/л).
C0 = [0.2, 0, 0, 0]
#Создаем массив точек времени.
time_points = np.linspace(0, 20, 301)
#Решаем систему дифференциальных уравнений.
solution = spi.solve_ivp(
    kinetics, #основная функция
    [0, 20], #интервал
    C0, #начальные условия
    t_eval=time_points #точки времени
)
#Разбиваем полученные результаты на отдельные массивы.
t = solution.t # массив времени
CA = solution.y[0] # концентрация А
CB = solution.y[1] # концентрация В
CC = solution.y[2] # концентрация С
CD = solution.y[3] # концентрация D
#Строим кинетические кривые при T = 580 К.
plt.plot(t, CA, label='А (Этанол)')
plt.plot(t, CB, label='В (Этилен)')
plt.plot(t, CC, label='С (Вода)')
plt.plot(t, CD, label='D (Диэтиловый эфир)')
#легенда, подписи и название графика
plt.legend()
plt.title('Кинетические кривые при T = 580 К')
plt.xlabel('Время, с')
plt.ylabel('Концентрация, моль/л')
#Добавление сетки
plt.grid()
#Ограничиваем ось времени
plt.xlim(0, 20)
plt.show()

```

Получаем график зависимости концентрации веществ от времени, представленных на рисунке 1

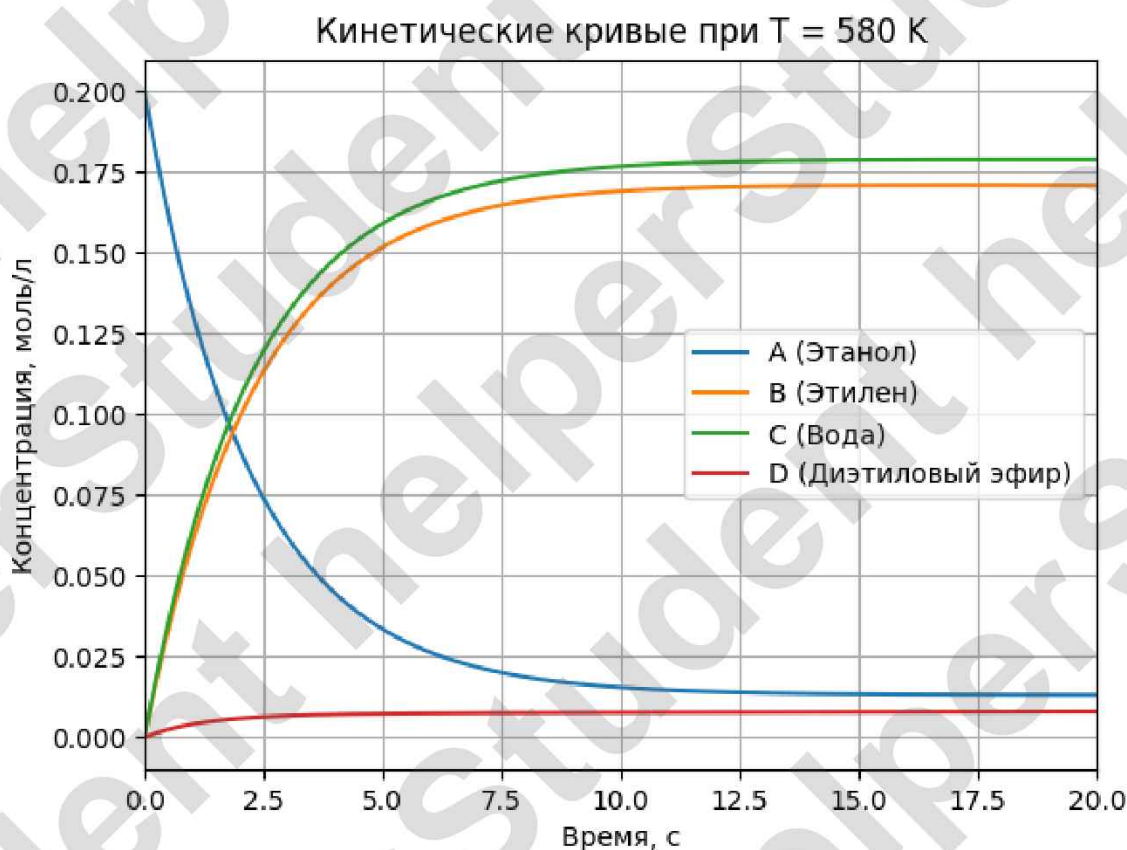


Рисунок 1 – График изменения концентраций веществ по времени

Согласно графику, концентрация исходного вещества А (этанол

) в начале процесса имеет максимальное значение и с течением времени уменьшается, что свидетельствует о его расходовании в ходе химических реакций.

Концентрация целевого продукта В (этилен) возрастает в начальный период реакции и затем постепенно стабилизируется. Примерно через 20 секунд концентрация этилена достигает практически постоянного значения, что можно считать максимальным выходом целевого продукта при данных условиях.

Концентрация С (воды) увеличивается на протяжении всего процесса, так как вода является продуктом протекающих реакций. Концентрация D (диэтилового эфира) возрастает незначительно и остается существенно ниже концентрации этилена, что указывает на малый вклад побочной реакции.

Таким образом, при температуре $T = 580 \text{ K}$ процесс дегидратации этанола характеризуется высокой степенью превращения исходного вещества и

значительным образованием целевого продукта — этилена, при этом основные изменения концентраций происходят в первые 20 секунд протекания реакции.

Выведем массив с результатами расчёта и найдём максимальную концентрацию Этилена

```
#Выводим массив с результатами расчета концентраций во времени
np.set_printoptions(threshold=np.inf)
np.set_printoptions(suppress=1)
print('Время, с  A (Этанол)  B (Этилен)  C (Вода)  D (Диэтиловый эфир)')
#Объединяем массивы в одну таблицу и выводим
print(np.column_stack((t, CA, CB, CC, CD)))
```

Получаем максимальное значение концентрации этилена 0.17093 моль/л представленное в таблице 2

Таблица 2 – Концентрации веществ

Время	Этанол	Этилен	Вода	Диэтиловый эфир
0	0.2	0	0	0
20	0.01313	0.17093	0.17889	0.00796

Проведем сравнительный анализ моделей РИС и РИВ для данной реакции.

```
#Распишем входные концентрации отдельно для дальнейших расчётов
```

```
CA_in = C0[0]
```

```
CB_in = C0[1]
```

```
CC_in = C0[2]
```

```
CD_in = C0[3]
```

```
#Функция расчета РИВ
```

```
def riv_model(tau):
```

```
    #Создаем массив точек времени
```

```
    time_points = np.linspace(0, tau, 200)
```

```
    #Решаем систему дифференциальных уравнений
```

```
    solution = spi.solve_ivp(kinetics, [0, tau], C0, t_eval=time_points)
```

```
    #Концентрации на выходе
```

```
    CA_out = solution.y[0, -1]
```

```
    CB_out = solution.y[1, -1]
```

```
    CC_out = solution.y[2, -1]
```

```
    CD_out = solution.y[3, -1]
```

```
    return [CA_out, CB_out, CC_out, CD_out]
```

```
#Функция расчета РИС
```

```
def ris_model(tau):
```

```
    #Задаем систему уравнений для fsolve
```

```

def equations(C):
    CA, CB, CC, CD = C
    #Скорости реакций
    W1 = k1 * CA
    W2 = k2 * CB * CC
    W3 = k3 * (CA**2)
    #Уравнения материального баланса для РИС
    eq1 = (CA_in - CA)/tau - W1 + W2 - 2*W3
    eq2 = (CB_in - CB)/tau + W1 - W2
    eq3 = (CC_in - CC)/tau + W1 - W2 + W3
    eq4 = (CD_in - CD)/tau + W3
    return [eq1, eq2, eq3, eq4]
#Начальное приближение
initial_guess = [CA_in, CB_in, CC_in, CD_in]
#Решаем систему
result = fsolve(equations, initial_guess)
return result

#Задаем диапазон времени пребывания
tau_values = np.linspace(1, 20, 20)
#Списки для концентраций этилена на выходе
CB_riv_values = []
CB_ris_values = []
#Считаем значения для каждого tau
for tau in tau_values:
    #РИВ
    riv_out = riv_model(tau)
    CB_riv_values.append(riv_out[1])
    #РИС
    ris_out = ris_model(tau)
    CB_ris_values.append(ris_out[1])
#Выводим значения
print('Этилен на выходе (РИВ):', CB_riv_values[-1])
print('Этилен на выходе (РИС):', CB_ris_values[-1])
#Сравниваем результат
if CB_riv_values[-1] > CB_ris_values[-1]:
    print('Рекомендуется использовать РИВ, так как он обеспечивает больший выход этилена.')
else:
    print('Рекомендуется использовать РИС, так как он обеспечивает больший выход этилена.')

```

Получаем

Этилен на выходе (РИВ): 0.17093438690912516

Этилен на выходе (РИС): 0.16041899709434349

Рекомендуется использовать РИВ, так как он обеспечивает больший выход этилена.

Теперь построим кинетические кривые при разных температурах.

Уравнение Аррениуса: $k = A \cdot e^{-E_A/(R \cdot T)}$

где k – константа скорости реакции; A – предэкспоненциальный фактор;

E_A – энергия активации; T – температура.

#Универсальная газовая постоянная

R = 8.31

#Исходная температура

T0 = 580 # K

#Энергии активации реакций

E1 = 12.717 * 10**4 #для реакции 1

E2 = 13.727 * 10**4 #для реакции 2

E3 = 12.762 * 10**4 #для реакции 3

E = np.array([E1, E2, E3])

#Рассчитываем предэкспоненциальные факторы A по уравнению Аррениуса

A1 = k[0] / math.exp(-E1 / (R * T0))

A2 = k[1] / math.exp(-E2 / (R * T0))

A3 = k[2] / math.exp(-E3 / (R * T0))

print('Предэкспоненциальные факторы A:', A1,A2,A3)

#Задаем диапазон температур для расчета

temperatures = range(520, 650, 30)

#Время расчета

time = np.linspace(0, 50, 301)

#26)Цикл по температурам

for T in temperatures:

 #массив для новых значений констант скорости

 k = np.zeros(3)

 #пересчитываем константы скорости при текущей температуре

 k[0] = A1 * math.exp(-E1 / (R * T))

 k[1] = A2 * math.exp(-E2 / (R * T))

 k[2] = A3 * math.exp(-E3 / (R * T))

 #решаем систему дифференциальных уравнений

 solution = spi.solve_ivp(kinetics,[0, 50],C0,t_eval=time)

 #Извлекаем концентрацию этилена

 CB = solution.y[1]

 #Строим кинетическую кривую

 plt.plot(time, CB, label=f'T = {T} K')

#Оформление графика

```
plt.legend()
plt.title('Кинетические кривые образования этилена при разных температурах')
plt.xlabel('Время, с')
plt.ylabel('Концентрация этилена, моль/л')
plt.grid()
plt.xlim(0, 50)
#Строим график
plt.show()
```

Получаем график

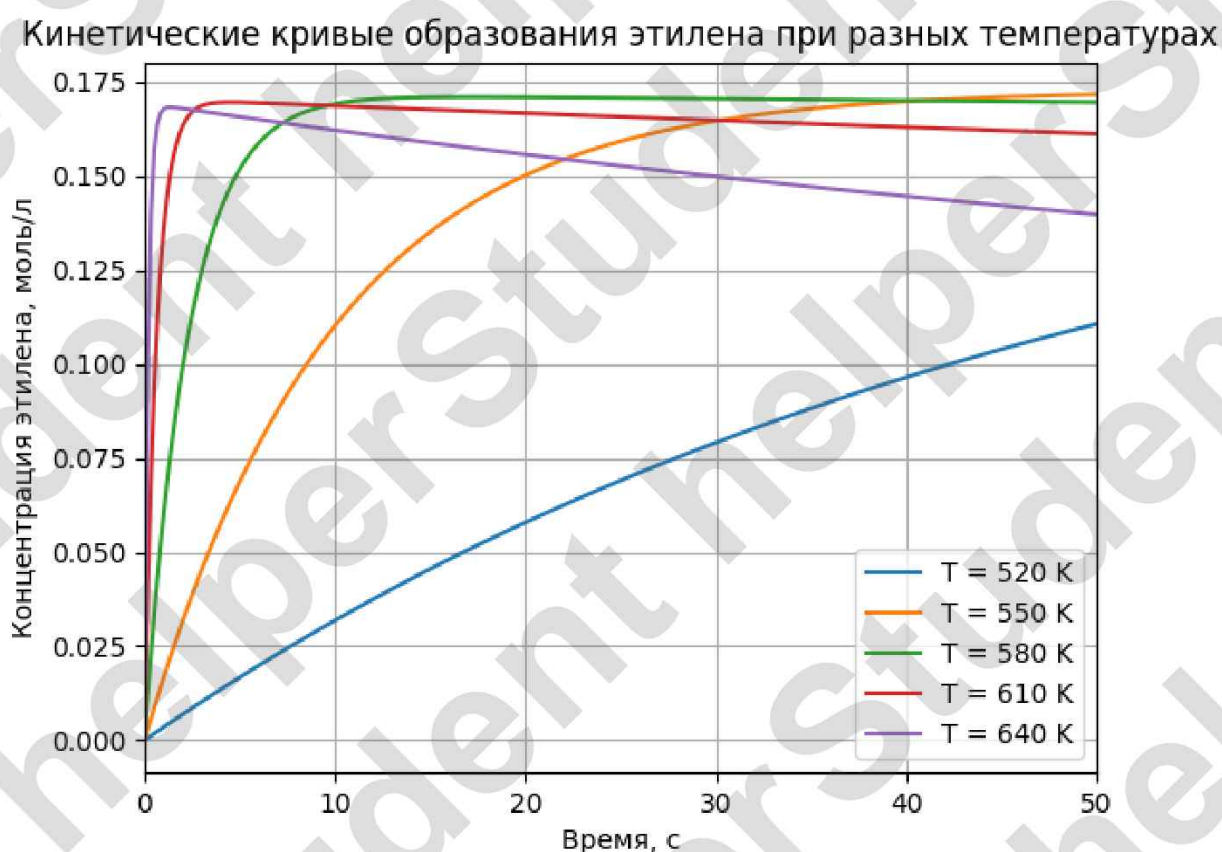


Рисунок 2 - График зависимости концентрации от времени при различных температурах.

Анализ графиков показывает, что при низких температурах (520–550K) скорость образования этилена невысока, и за нужное время реакция не достигает стационарного режима. Это приводит к меньшей концентрации целевого продукта.

При повышении температуры до 610–640K наблюдается очень быстрое образование этилена на начальном участке реакции, однако затем его концентрация снижается. Данное явление связано с усилением обратной реакции и смещением химического равновесия, что приводит к частичному расходованию этилена.

Наиболее оптимальной является температура 580K (зелёная кривая), при которой достигается высокая скорость образования этилена и максимальная устойчивая концентрация целевого продукта за сравнительно короткое время. При данной температуре процесс протекает достаточно быстро, при этом влияние обратной реакции выражено слабо.

Таким образом, температура 580K может быть выбрана в качестве оптимальной для проведения процесса дегидратации этанола с целью получения этилена, так как она обеспечивает рациональное сочетание высокой скорости реакции и максимального выхода целевого продукта.

4. МОДЕРИРОВАНИЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКОГО РИС

Гидродинамическая модель

Представляет систему дифференциальных уравнений гидродинамики идеального вытеснения, записанную для каждого из компонентов реакционной смеси:

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A + k_2 C_B C_C - 2k_3 C_A^2 - w \frac{dC_A}{dx} \quad (15)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_B C_C - w \frac{dC_B}{dx} \quad (16)$$

$$\frac{dC_C}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_B C_C + k_3 C_A^2 - w \frac{dC_C}{dx} \quad (17)$$

$$\frac{dC_D}{dt} = k_3 C_A^2 - w \frac{dC_D}{dx} \quad (18)$$

При стационарных условиях

$$\frac{dC_i}{dt} = 0 \quad (19)$$

$$w \frac{dC_A}{dx} = -k_1 C_A + k_2 C_B C_C - 2k_3 C_A^2 \quad (20)$$

$$w \frac{dC_B}{dx} = k_1 C_A - k_2 C_B C_C \quad (21)$$

$$w \frac{dC_C}{dx} = k_1 C_A - k_2 C_B C_C + k_3 C_A^2 \quad (22)$$

$$w \frac{dC_D}{dx} = k_3 C_A^2 \quad (23)$$

Энергетическая модель

Необходимо изучить особенности протекания реакций в широком диапазоне температур, то есть дополнить модель реактора частной энергетической моделью, учитывающей влияние температуры на константу скорости частной реакции в виде уравнения Аррениуса.

$$k = v_0 \cdot \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) \quad (24)$$

где k – константа скорости реакции;

v_0 – предэкспоненциальный множитель;

E_a – энергия активации, Дж/моль;

R – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К);

T – температура, К.

При формировании полной модели с учетом энергетики процесса необходимо также учитывать зависимость скорости потока от температуры, связанную с изменением объема реакционной смеси.

В связи с тем, что все вещества являются газообразными в данных условиях, то используется следующая формула для скорости потока газа:

$$w = w_0 \cdot \frac{T}{T_0} \text{ или } v = v(T) \quad (25)$$

где w_0 – начальная скорость линейного потока, м/с;

T – температура потока, К;

w – линейная скорость потока, м/с;

T_0 – начальная температура потока, К.

Но так как принята температура $T = 580$ К, то $\omega = \omega_0$

#Расход потока в м3/с

$Q = 5000/1000/3600$

#Геометрия реактора

$d = 0.05$ # диаметр реактора, м

$S = \text{math.pi} * d**2 / 4$ # площадь сечения, м2

#Линейная скорость потока

$w_0 = Q / S$

#Задаем кинетическую модель изотермического РИВ

def isothermal_riv(L, C):

 #Обновляем значения k

$k = \text{np.array}([k_1, k_2, k_3])$

 #Текущие концентрации

$CA = C[0]$

$CB = C[1]$

$CC = C[2]$

$CD = C[3]$

$w = w_0$

 #Скорости реакций

$r_1 = k[0] * CA$

$r_2 = k[1] * CB * CC$

$r_3 = k[2] * (CA**2)$

 #41) Уравнения материального баланса (РИВ) по длине L

```

dCAdL = (-r1 + r2 - 2*r3) / w
dCBdL = ( r1 - r2 ) / w
dCCdL = ( r1 - r2 + r3 ) / w
dCDdL = ( r3 ) / w
return [dCAdL, dCBdL, dCCdL, dCDdL]
#Длина реактора, м
L_points = np.linspace(0, 20, 201)
#Решаем систему уравнений
solution = spi.solve_ivp(isothermal_riv, [0, 20], C0, t_eval=L_points)
#Разбиваем результаты
L = solution.t
CA = solution.y[0]
CB = solution.y[1]
CC = solution.y[2]
CD = solution.y[3]
#Строим графики
plt.plot(L, CA, label='A (Этанол)')
plt.plot(L, CB, label='B (Этилен)')
plt.plot(L, CC, label='C (Вода)')
plt.plot(L, CD, label='D (Диэтиловый эфир)')
plt.legend()
plt.title('Изотермический РИВ при T = 580 K')
plt.xlabel('Длина реактора, м')
plt.ylabel('Концентрация, моль/м3')
plt.grid()
plt.xlim(0, 20)
plt.show()
#Выводим концентрации на выходе (последняя точка)
print('На выходе при L = 20 м:')
print('CA_out =', CA[-1])
print('CB_out =', CB[-1])
print('CC_out =', CC[-1])
print('CD_out =', CD[-1])

```

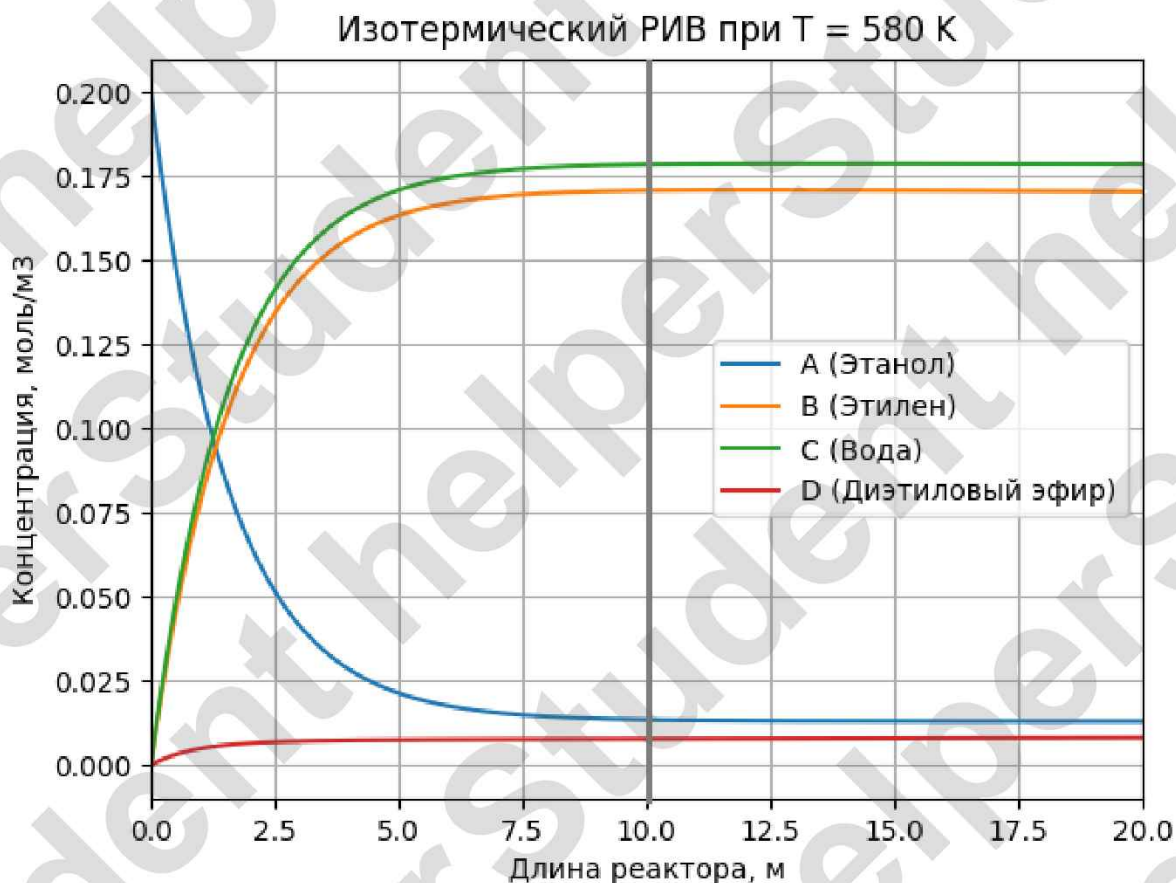


Рисунок 3 - График зависимости концентрации от длины изотермического РИВ при 580 K

По полученным данным можно определить необходимую длину изотермического реактора для максимального выхода целевого продукта, оптимальный размер реактора составляет 10 м. Концентрация этилена при такой длине 0.1705 моль/л.

Скорость потока w зависит от диаметра реактора D , причем необходимо обеспечить режим идеального вытеснения в рассчитанном аппарате, который гарантируется при соблюдении следующих условий:

Условия соблюдения режима идеального вытеснения $100 < \frac{L}{d} < 500$

$$10/0,05=200$$

5. МОДЕЛИРОВАНИЕ АДИОБАТИЧЕСКОГО РИС

В качестве первого действия пересчитаем заданные константы скоростей реакций при действительных температурах протекания реакций (4-6) для создания энергетической модели реакций.

Рассчитаем тепловые эффекты реакций

Таблица 3 — Стандартные энтальпии образования

Вещество	Обозначение	$\Delta_f H^\circ$, кДж/моль
Этанол	A	-234.7
Этилен	B	+52.47
Вода	C	-241.826
Диэтиловый эфир	D	-252.7

$$\Delta H_r^\circ = \sum \nu_i \Delta H_{f,i}^\circ (\text{прод}) - \sum \nu_i \Delta H_{f,i}^\circ (\text{исх}) \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \Delta H_4^\circ &= (\Delta H_f^\circ(C_2H_4) + \Delta H_f^\circ(H_2O)) - \Delta H_f^\circ(C_2H_5OH) \\ &= (52.47 - 241.826) - (-234.7) = 45.344 \text{ кДж/моль} \end{aligned}$$

$$\Delta H_5^\circ = -\Delta H_4^\circ = -45.344 \text{ кДж/моль}$$

$$\begin{aligned} \Delta H_6^\circ &= (\Delta H_f^\circ((C_2H_5)_2O) + \Delta H_f^\circ(H_2O)) - 2\Delta H_f^\circ(C_2H_5OH) \\ &= ((-252.7) + (-241.826)) - 2(-234.7) = -25.126 \text{ кДж/моль} \end{aligned}$$

Таблица 4 – Теплоёмкости газов

Компонент	$C_p(580, K)$, Дж/(моль·К)
этанол	105.52
этилен	69.06
водяной пар	36.09
диэтиловый эфир	182.23

#Тепловые эффекты реакций (Дж/моль)

$$dH1 = 45.344 * 1000$$

$$dH3 = -25.126 * 1000$$

#Теплоемкости

$$Cp_A = 105.748$$

```

Cp_B = 69.059
Cp_C = 36.090
Cp_D = 182.234
#Функция для теплоемкости смеси через молярные доли
def Cp_mix(CA, CB, CC, CD):
    Csum = CA + CB + CC + CD
    yA = CA / Csum
    yB = CB / Csum
    yC = CC / Csum
    yD = CD / Csum
    return yA*Cp_A + yB*Cp_B + yC*Cp_C + yD*Cp_D
#Адиабатический РИВ: x = [CA, CB, CC, CD, T]
def adiabatic_riv(L, x):
    #Записываем концентрации и температуру в массив
    dxdL = np.zeros(5)
    CA = x[0]
    CB = x[1]
    CC = x[2]
    CD = x[3]
    T = x[4]
    #Заново прописываем константы скорости по Аррениусу при текущей
    температуре
    k1 = A1 * math.exp(-E1/(R*T))
    k2 = A2 * math.exp(-E2/(R*T))
    k3 = A3 * math.exp(-E3/(R*T))
    #Скорость потока
    w = w0
    #Скорости реакций
    W1 = k1 * CA
    W2 = k2 * CB * CC
    W3 = k3 * (CA**2)
    #Материальные балансы
    dxdL[0] = (-W1 + W2 - 2*W3) / w
    dxdL[1] = ( W1 - W2 ) / w
    dxdL[2] = ( W1 - W2 + W3 ) / w
    dxdL[3] = ( W3 ) / w
    #Энергетическое уравнение
    #Для обратимой реакции берем (W1 - W2)
    q = dH1 * (W1 - W2) + dH3 * W3
    Csum = CA + CB + CC + CD
    Cp = Cp_mix(CA, CB, CC, CD)
    dxdL[4] = - q / (Csum * Cp * w)
    return dxdL

```

```

#Начальные условия
x0 = [0.2, 0, 0, 0, T0]
#Решаем систему уравнений
solution = spi.solve_ivp(adiabatic_riv, [0, 20], x0, t_eval=L_points)
#Разбиваем данные
L = solution.t
CA = solution.y[0]
CB = solution.y[1]
CC = solution.y[2]
CD = solution.y[3]
T = solution.y[4]
#Графики концентраций
plt.plot(L, CA, label='A (Этанол)')
plt.plot(L, CB, label='B (Этилен)')
plt.plot(L, CC, label='C (Вода)')
plt.plot(L, CD, label='D (Диэтиловый эфир)')
plt.legend()
plt.title('Адиабатический РИВ (концентрации)')
plt.xlabel('Длина реактора, м')
plt.ylabel('Концентрация, моль/м3')
plt.grid()
plt.xlim(0, 20)
plt.show()
#График температуры
plt.plot(L, T, label='T')
plt.legend()
plt.title('Адиабатический РИВ (температура)')
plt.xlabel('Длина реактора, м')
plt.ylabel('Температура, К')
plt.grid()
plt.xlim(0, 20)
plt.show()
print('На выходе при L = 20 м (адиабатический):')
print('CA_out =', CA[-1])
print('CB_out =', CB[-1])
print('CC_out =', CC[-1])
print('CD_out =', CD[-1])
print('T_out =', T[-1])

```

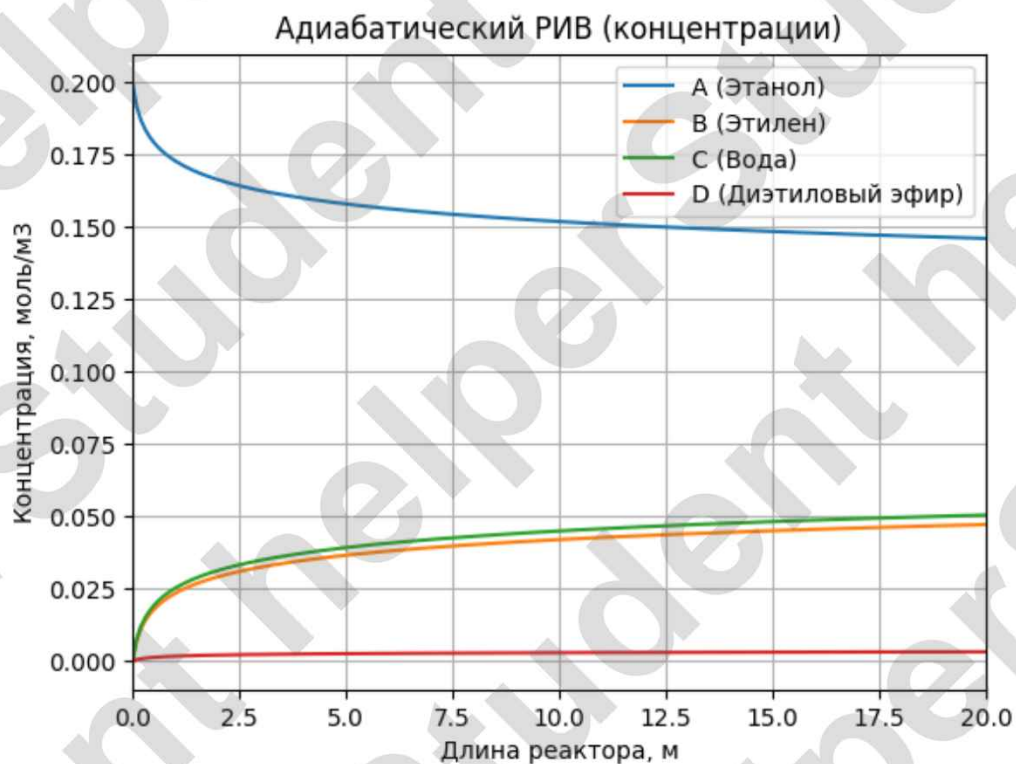


Рисунок 4 - График зависимости концентрации от длины адиабатического РИВ при 580 К

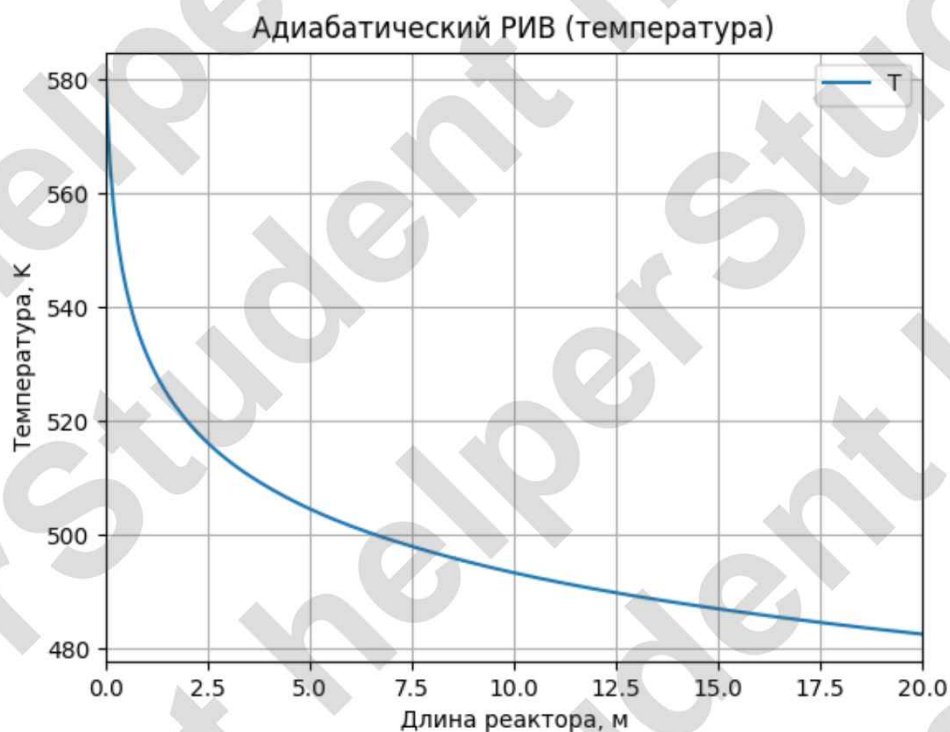


Рисунок 5 - График зависимости температуры от длины адиабатического РИВ при 580 К

При выполнении процесса при адиабатных условиях для реактора типа РИВ, температура процесса стремительно падает, это говорит, что реакции эндотермические и плохо протекают в адиабатных условиях.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основании исходных данных по схеме реакции подобраны целевые реакции при моделировании процесса дегидратации этанола с получением этилена как основного продукта реакции. Произведён выбор аппарата идеального вытеснения РИВ и выбрана, и описана кинетическая модель реактора.

По выбранным данным выполнен расчет реактора в Python в результате составления программы получаем цилиндрический изотермический реактор с подобранным диаметром $d = 0,05$ м, длина реактора $L = 10$ м. Выход вещества достигает 0.1705 моль/л.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. А.С. Гумеров, Математическое моделирование химико-технологических процессов, 2014. – 174 с.
2. 3 Н.А. Самойлов, Моделирование в химической технологии и расчет реакторов. – Уфа: Изд-во УГНТУ, 2006. – 195 с.
3. Aali N. A., Hadi G. J. Kinetic Study of Ethanol Dehydration to Ethylene and Diethyl Ether in Catalytic Packed Bed Reactor Over ZSM-5 Catalyst Diyala Journal of Engineering Sciences. — 2023.
4. Taheri H., Sarin Y., Ozero B. Reactor and process for dehydration of ethanol to ethylene Patent US 20130178674 A1. — Publ. 11.07.2013. — United States Patent and Trademark Office.
5. Wu C.-Y., Wu H.-S. Ethylene Formation from Ethanol Dehydration Using ZSM-5 Catalyst ACS Omega. — 2017. — Vol. 2, No. 8. — P. 4287–4296. — DOI 10.1021acsomega.7b00680.