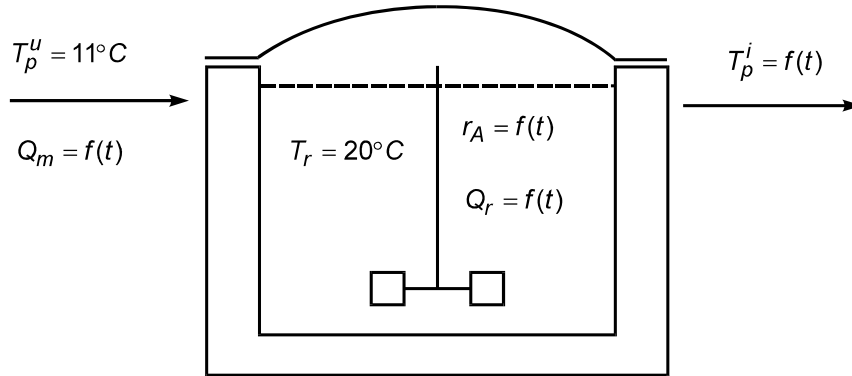


Izotermni način rada kotlastog reaktora

U kotlastom reaktoru polimerizira stiren na stalnoj temperaturi od 20 °C,



Predložen kinetički model: reakcija prvog reda,

$$r_A = kC_A \quad (1)$$

Specifična brzina, k na temperaturi od 20 °C iznosi

$$k = 0.0387 \left[\frac{1}{\text{min}} \right]$$

- Polimerizacija je egzotermna reakcija – reaktor je potrebno hladiti kroz plašt reaktora!
- Rashladni medij - voda.
- Tijekom reakcije, količina oslobođene topline se mijenja, pa je potrebno regulirati dotok rashladne vode uz neku izabranu ulaznu temperaturu.

Potrebno je izračunati profile koncentracije i protoka kao i izlazne temperature rashladne vode tijekom reakcije uz uvjet da je temperatura u reaktoru stalna i iznosi 20 °C.

Potrebni podaci za proračun:

$C_{A_0} = 2 \text{ mol dm}^{-3}$ (početna koncentracija stirena u benzenu),

$V_r = 0.4 \text{ dm}^3$ (volumen reakcijske smjese),

$c_{pv} = 4.18 \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ (toplinski kapacitet vode),

$U = 85 \text{ W dm}^{-2} \text{ K}^{-1}$ (ukupni koeficijent prijenosa topline),

$A_p = 3.25 \text{ dm}^2$ (površina prijenosa),

$(-\Delta H_r) = 69.5 \text{ kJ mol}^{-1}$ (toplina reakcije po molu polimeriziranog stirena),

$G_p = V_p = 0.1 \text{ kg}$ ili 0.1 dm^3 (masa (volumen) rashladnog medija - vode),

$t_r = 50 \text{ min}$ (vrijeme reakcije).

Pretpostavke o sustavu:

- miješanje unutar reaktora je idealno,
- miješanje unutar plašta je idealno,
- nema promjene gustoće za vrijeme reakcije.

Rješenje:

Potrebno je predložiti matematički model sustava reaktora i plašta na osnovi fizičke slike.

Model sadrži bilancu množine tvari A, bilancu topline reakcijske smjese te bilancu topline za rashladnu vodu.

Bilanca množine tvari

$$-\frac{dC_A}{dt} = r_A = kC_A = 0.04C_A \quad (2)$$

Bilanca topline za reakcijsku smjesu

Za izotermni rad kotlastog reaktora vrijedi

$$UA_p (T_p - T_r) = r_A V_r (-\Delta H_r) \quad (3)$$

Bilanca topline za vodu u plaštu

Idealno miješanje vode u plaštu - temperatura vode unutar plašta jednaka je onoj na izlazu

$$Q_m c_{p_v} (T_u - T_p) - UA_p (T_p - T_r) = V_p c_{p_v} \frac{dT_p}{dt} \quad (4)$$

Tri jednačbe (2-4) su matematički model sustava i moraju se simultano rješavati.

Nepoznate veličine zavisne o vremenu:

- koncentracija tvari A,
- izlazna temperatura rashladne vode te
- protok vode.

- **Vremenska promjena koncentracije tvari A** nalazi se numeričkim rješavanjem jed. (2) metodom Runge - Kutta. Iteracijski korak je 1 min.
- Na osnovi jed. (3)- bilance topline za reakcijsku smjesu, **računa se za svako vrijeme reakcije potrebna temperatura vode u plaštu** kako bi temperatura u reaktoru uvijek iznosila 20 °C.

$$T_p = T_r - \frac{V_r(-\Delta H_r)}{UA_p} r_A \quad (5)$$

- **Protok vode u pojedinim reakcijskim vremenima** računa se iz bilance topline za vodu u plaštu, jed. (4).
- Potrebno je povezati jed. (4) i jed. (5). jed. (5) može se napisati u kao

$$T_p = T_r - \frac{V_r(-\Delta H_r)}{UA_p} k C_A \quad (6)$$

a zatim derivirati po vremenu,

$$\frac{dT_p}{dt} = -\frac{V_r(-\Delta H_r)}{UA_p} k \frac{dC_A}{dt} \quad (7)$$

- Ako se uvrsti desna strana jed. (7) umjesto derivacije u jed. (4), može se neposredno izraziti protok vode kao funkcija vremena,

$$Q_m = \frac{V_p V_r (-\Delta H_r)}{UA_p (T_u - T_p)} k \frac{dC_A}{dt} + \frac{UA_p}{c_{p_v} (T_u - T_p)} (T_p - T_r) \quad (8)$$

Izraz dC_A/dt je brzina reakcije koja se računa u svakoj iteraciji procedure Runge - Kutta.

- Parametri u jednadžbama mogu se grupirati u konstante.

$$K_1 = \frac{V_r (-\Delta H_r) k}{UA_p}, \quad K_2 = V_p K_1, \quad K_3 = \frac{UA_p}{C_{p_v}}$$

- U svakoj iteraciji procedure Runge - Kutta računaju se vrijednosti za brzinu reakcije u vremenu t_i i koriste za izračunavanje temperature u plaštu, jed. (5) i protoka vode, jed. (8).

Algoritam rješenja na računalu može se prikazati jednadžbama:

$$\frac{dC_A}{dt} = F(t_i) = -kC_A(t_i)$$

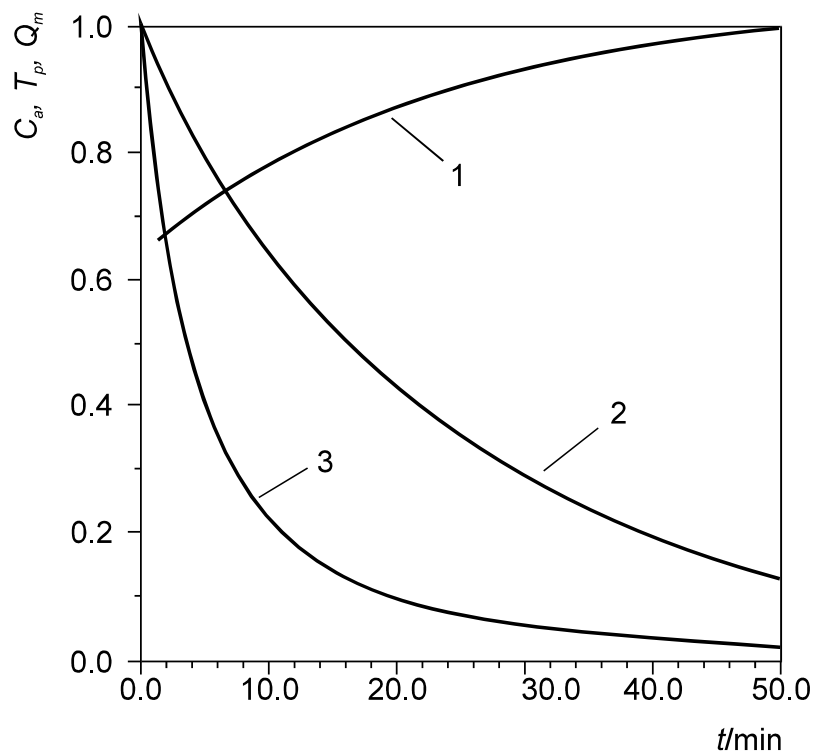
$$T_p(t_i) = T_r - K_1 F(t_i)$$

$$Q_m(t_i) = \frac{K_2}{T_u - T_p(t_i)} F(1) + \frac{K_3(T_p(t_i) - T_r)}{T_u - T_p(t_i)}$$

Zavisnost protoka rashladne vode i njene temperature o reakcijskom vremenu:

Vrijeme / min	X_A	$T_p / ^\circ\text{C}$	$Q_m /$ (ml/min)
0	0.00	12.57	404.70
5	0.21	13.67	157.16
10	0.36	14.82	89.95
15	0.47	15.75	59.09
20	0.57	16.52	41.64
25	0.65	17.15	30.60
30	0.71	17.67	23.12
35	0.76	18.09	17.80
40	0.81	18.44	13.90
45	0.84	18.72	10.96
50	0.87	18.95	8.71

Temperatura od 11 °C izabrana je za ulaznu temperaturu vode u plašt.



Zavisnost koncentracije reaktanta A, temperature u plaštu i protoka rashladne vode o reakcijskom vremenu;

1 - temperatura u plaštu,

2 - koncentracija reaktanta A,

3 - protok vode; (sve su veličine normalizirane)