



POLITECHNIKA WARSZAWSKA
WYDZIAŁ INŻYNIERII CHEMICZNEJ I PROCESOWEJ



Praca dyplomowa inżynierska

Rok akademicki 2012/2013

Temat: Problem selektywności przebiegu homogenicznych reakcji chemicznych w inżynierii produktu.

Autor: Anna Marta Rybałtowska

Promotor: prof. dr hab. inż. Jerzy Bałdyga

Opiekun: dr inż. Magdalena Jasińska

Sposoby prowadzenia reakcji złożonych są ukierunkowane na zapewnienie selektywnego przebiegu reakcji, a więc na otrzymanie czystego produktu pożądanego o możliwie wysokim stężeniu. Uzyskanie mniejszej selektywności przebiegu reakcji w kierunku produktu pożądanego powoduje niepotrzebne zużycie surowca oraz utrudnia jego separację oraz oczyszczenie.

Problem selektywności przebiegu homogenicznych reakcji chemicznych w inżynierii produktu związany jest z problemem mikromieszania. Na selektywność oprócz energii, wpływ mają również stężenia początkowe. Możliwy jest również efekt stosunku objętości substratów. Odpowiednio sterując tymi efektami można wpłynąć na zwiększenie selektywności produktu pożądanego.

W produkcji przemysłowej ważną rolę odgrywają aspekty ekonomiczne procesu. Dlatego przy projektowaniu układu należy uwzględnić koszty związane m.in. z oczyszczaniem produktu. Największe koszty podczas oczyszczania związane są z etapem zateżnienia, dlatego też oprócz selektywności ważne jest, aby otrzymać produkt możliwie jak najbardziej stężony. Celem prowadzenia procesu jest zatem uzyskanie produktu o możliwie wysokiej czystości i wysokim stężeniu.

Cel i zakres pracy:

- pokazanie wpływu mikromieszania i innych parametrów prowadzenia procesu na selektywność przebiegu złożonych homogenicznych reakcji chemicznych i skonfrontowanie tych wyników z kosztami oczyszczania produktu
- przeprowadzenie symulacji obliczeń selektywności przebiegu złożonych reakcji chemicznych
- określenie właściwych warunków prowadzenia procesu po uwzględnieniu obliczeń symulacyjnych i kosztów związanych z oczyszczaniem produktu.

Biorąc pod uwagę fakt, że celem prowadzenia procesu jest otrzymanie produktu o odpowiedniej czystości i stężeniu, czas przebiegu reakcji nie jest najważniejszą miarą efektywności procesu. Z tego powodu uzasadnione jest prowadzenie procesu w sposób półokresowy z wolnym dozowaniem substratu.

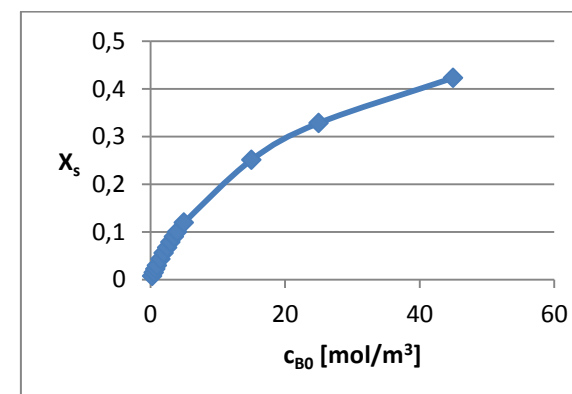
Obliczenia zostały wykonane dla układu dwóch reakcji równoległych jak również dla reakcji szeregowo-równoległych. W obu przypadkach pierwsza reakcja prowadzi do utworzenia produktu pożądanego i jest reakcją nieskończenie szybką. Natomiast druga reakcja jest zdecydowanie wolniejsza. Aby zminimalizować wpływ drugiej reakcji, jej szybkość musi być dużo mniejsza niż efektywna szybkość reakcji pierwszej, kontrolowanej przez mieszanie.

Do określenia selektywności przebiegu reakcji złożonych zastosowano model zagarniania, ponieważ warunki reakcji spełniały wszystkie założenia modelu. Korzystając z modelu zagarniania, zmianę stężenia składnika „i” w czasie można zapisać w następujący sposób:

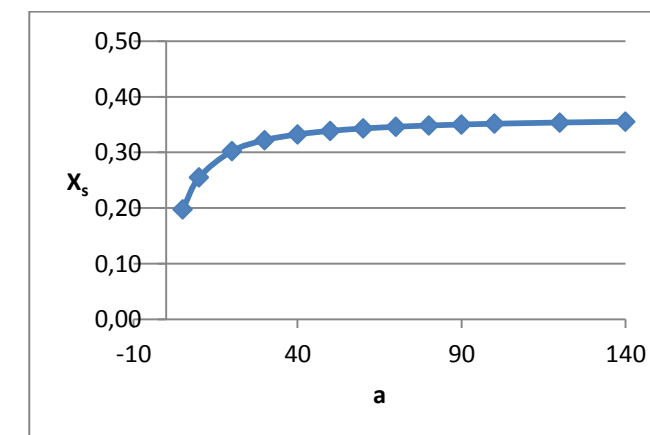
$$\frac{dc_i}{dt} = E(\langle c_i \rangle - c_i) + R_i$$

gdzie:

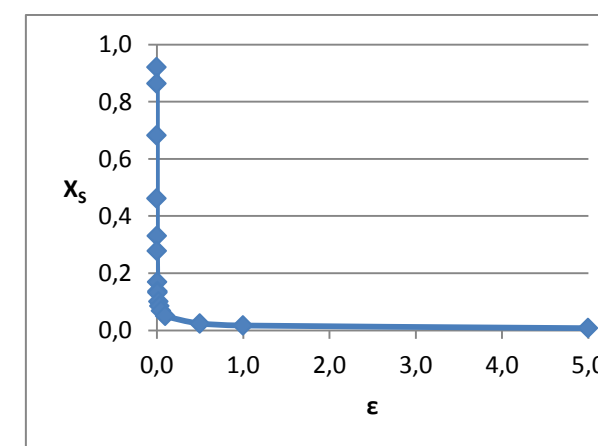
E –parametr intensywności zagarniania [1/s]



Wykres 6.1 Wpływ wartości stężeń na selektywność przebiegu reakcji szeregowo- równoległych



Wykres 6.2 Wpływ stosunku objętości na selektywność reakcji szeregowo- równoległych dla stałej wartości $\bar{D}a$



Wykres 6.3 Wpływ szybkości dyssypacji energii na selektywność reakcji szeregowo- równoległych

Wnioski :

- selektywność produktu pożądanego rośnie ze wzrostem dostarczania energii i zmniejszeniem stężeń początkowych
- wpływ stosunku objętości na selektywność przebiegu reakcji złożonych jest różny w zależności od sposobu realizacji zmiany tego stosunku
- warto stosować wyższe stężenia początkowe substratów i zachować możliwie niską objętość całkowitą reagentów, aby nie rozcieńczać produktu. Takie działania powodują spadek selektywności w kierunku wytwarzania produktu pożądanego, który można kompensować zwiększonym wydatkiem energetycznym.