



УНИВЕРЗИТЕТ „СВ. КИРИЛ И МЕТОДИЈ“  
ТЕХНОЛОШКО-МЕТАЛУРШКИ ФАКУЛТЕТ, СКОПЈЕ



Стефан Кувенџиев

# АНАЛИЗА И СИНТЕЗА НА ПРОЦЕСИ

Скопје, 2024

**Издавач:**

Технолошко-металуршки факултет, Универзитет „Св. Кирил и Методиј“ во Скопје, ул. „Руѓер Бошковиќ“ бр. 16, 1000 Скопје  
www.tmf.ukim.edu.mk

**Уредник за издавачка дејност на ТМФ, УКИМ:**

д-р Стефан Кувенциев, вонр. проф., декан

**Уредник на публикацијата:**

д-р Стефан Кувенциев, вонр. проф.  
Технолошко-металуршки факултет – Скопје

**Рецензенти**

1. проф. д-р Мирко Маринковски
2. проф. д-р Дејан Димитровски

**Техничка обработка**

д-р Стефан Кувенциев, вонр. проф.

**Лектура на македонски јазик:**

Ивана Коцевска

CIP - Каталогизација во публикација  
Национална и универзитетска библиотека "Св. Климент Охридски", Скопје

66.09:543.2(075.8)

66.09:542.913(075.8)

КУВЕНЦИЕВ, Стефан

Анализа и синтеза на процеси / Стефан Кувенциев. - Скопје :  
Универзитет „Св. Кирил и Методиј,“ Технолошко-металуршки факултет, 2024.  
- VI, 292 стр. : граф. прикази ; 25 см  
Библиографија: стр. 290-292

ISBN 978-9989-650-14-7

а) Технолошки процеси -- Анализа -- Синтеза -- Високошколски учебници

COBISS.MK-ID 64226053

*Оваа книџа им ја посветувам на моите најмили,*

*Ведран, Војдан и Виктор*

*Мојата сојуџа Сања,*

*Моите мајка и татко, Кристина и Владо*

*Мојата нана, Василка*



*Особена благодарност̄ за несебична̄та њомош и њоддршка до рецензент̄ӣе:*

*Проф. д-р Мирко Маринковски*

*Проф. д-р Дејан Димитровски*

*Особена благодарност̄ за континуирана̄та њомош и њоддршка до:*

*Проф. д-р Перица Пауновиќ*

*Проф. д-р Горан Начевски*



# Предговор

---

Ракописот со наслов „Анализа и синтеза на процеси“ од д-р Стефан Кувенциев, вонр. проф., е учебник кој претставува основна литература за студентите од четврта година на студиската програма Дизајн и менаџмент на технолошки процеси на Технолошко-металуршкиот факултет во Скопје. Исто така, учебникот може да го користат студентите од четврта година година на насоката Прехранбена технологија и Биотехнологија, како и студентите на втор и трет циклус студии и дипломираните инженери-технолози и металурзи како прирачна литература.

Содржинската структура на ракописот овозможува целесообразен, сеопфатен и детален осврт на анализата и синтезата на технолошките процеси во хемиското процесно инженерство. На почетокот авторот нè воведува во фундаменталните основи на процесната интеграција и феномените поврзани со анализата и синтезата на технолошките процеси. Во второто поглавје авторот продолжува со надградба на материјалот од претходното поглавје во насока на синтеза на процесни проточни дијаграми. Понатаму, обработени се феноменолошките и процесните аспекти на дизајнот на реактори и реакторските системи. Во четвртото поглавје се даваат основите за дизајнирање на сепарациски процеси и системите поврзани со нив, а ракописот завршува со енергетска (топлинска) интеграција на технолошките процеси.

Сите поглавја се поткрепени со практични примери и задачи, со кои се овозможува полесно апсолвирање на теоретските содржини, но и стекнување знаење за дизајнирање реални индустриски процеси во хемиското процесно инженерство. Ракописот е добра основа за стекнувања знаења кои овозможуваат идните инженери да ги применат во индустријата или за продолжување на нивното образование на втор и трет циклус студии.

Авторот покажува искуство во педагошката работа во областа на хемиското процесно инженерство, што се гледа во правилниот избор на структурата и содржината на учебникот, како и пренесување на изложениот материјал на едноставен и разбирлив јазик за студентите. Правилното балансирање на придонесот во областа на хемиското процесно инженерство е доста нагласено и изострено, со што се овозможува користење на учебникот во сите циклуси на студирање, зависно од претходните знаења на корисниците.

*Од рецензентите*



# СОДРЖИНА

## Поглавје 1

<b>Основи на анализа и синтеза на процеси</b> .....	1
1.1 Основи на анализа и синтеза на процеси.....	1
1.2 Хиерархиски пристап кон процесниот дизајн .....	7
1.3 Задачи .....	28

## Поглавје 2

<b>Синтеза на процесен проточен дијаграм</b> .....	54
2.1 Основни аспекти .....	54
2.2 Шаржен наспроти континуиран режим на работа – ниво 1 .....	59
2.3 Влезно-излезна структура – ниво 2 .....	63
2.3.1 <i>Степени на слобода – дизајн варијабли</i> .....	69
2.3.2 <i>Развој на материјален биланс</i> .....	70
2.3.3 <i>Алтернативен пристап за дефинирање на материјалниот биланс</i> .....	75
2.4 Рециклирачка структура на проточен дијаграм – ниво 3 .....	78
2.4.1 <i>Материјален биланс за процесен проточен дијаграм со рецикулација</i> .....	83
2.4.2 <i>Топлински ефекти во реакторскиот систем</i> .....	87
2.5 Задачи .....	99

## Поглавје 3

<b>Дизајн на реакторски системи</b> .....	119
3.1 Основни аспекти .....	119
3.2 Модел на идеален реактор .....	123
3.2.1 <i>Идеален шаржен реактор</i> .....	123
3.2.2 <i>Адијабатска работа на неизотермен шаржен реактор</i> .....	126

3.2.3 Идеален CSTR .....	129
3.2.4 Идеален неизотермен CSTR.....	129
3.2.5 Идеален PFR .....	132
3.2.6 Идеален неизотермен PFR .....	134
3.2.7 Адијабатска работа на неизотермен PFR .....	136
3.2.8 Каталитички реактори .....	138
3.3 Реакционен пат .....	139
3.4 Типови на реакциони системи .....	141
3.5 Избор на модел на идеален реакционен систем .....	147
3.5.1 Комбинирани паралелни и сериски споредни реакции .....	150
3.5.2 Реакции на полимеризација .....	151
3.5.3 Биохемиски реакции .....	152
3.6 Перформанси на реакторски систем .....	153
3.7 Задачи .....	156

## **Поглавје 4**

<b>Дизајн на сепарациски системи .....</b>	<b>171</b>
4.1 Сепарациски процеси .....	171
4.1.1 Дестилација .....	174
4.1.2 Азеотропна дестилација .....	175
4.1.3 Апсорпција .....	175
4.1.4 <i>Stripping</i> .....	176
4.1.5 Екстракција .....	176
4.1.6 Кристализација .....	176
4.1.7 Мембранска сепарација .....	177
4.1.8 Атсорпција и јонска измена .....	178
4.1.9 Флотација .....	178
4.1.10 Центрифугирање .....	178

4.1.11 Филтрација .....	179
4.2 Правила за дизајн на сепарациски систем .....	179
4.2.1 Генерална структура на сепарациски систем .....	180
4.2.2 Дизајн на VRS (Сепарациски систем за парна фаза) .....	182
4.2.3 Дизајн на течен сепарациски систем (TCC) .....	185
4.2.4 Метод на Портер и Момо (Porter&Момо) .....	195
4.2.5 Колони со повеќе од два продукти .....	196
4.2.6 Префракционирачка конфигурација на дестилациска секвенција ..	197
4.2.7 Топлинско интегрирање на дестилационите колони .....	200
4.2.8 Димензионирање на дестилациони колони .....	203
4.2.9 Колони со подови .....	203
4.2.10 FUG метод .....	205
4.2.11 Смокеров метод .....	207
4.2.12 Избор на тип на колона според основни технички карактеристики .....	212
4.2.13 Определување висина и дијаметар на колона со сито подови (Sieve-Tray Column) .....	214
4.3 Задачи .....	217
<b>Поглавје 5</b>	
<b>Енергетска интеграција на технолошки процеси</b> .....	234
5.1 Енергетска/топлинска интеграција.....	234
5.2 Специјални проблеми.....	246
5.3 Табличен алгоритам за идентификација на енергетските таргети.....	248
5.4 Идентификација на површина и цена на топлински изменувачи .....	255
5.4.1 Број на единици – графичка теорија .....	256
5.4.2 Површина за топлинска измена .....	258
5.5 PINCH технологија за дизајн на HEN.....	260

5.6 Задачи .....	274
<b>Литература</b> .....	290

# 1. Основи на анализа и синтеза на процеси

Содржина:

- 1.1 Основи на анализа и синтеза на процеси
- 1.2 Хиерархиски пристап кон процесниот дизајн
- 1.3 Задачи

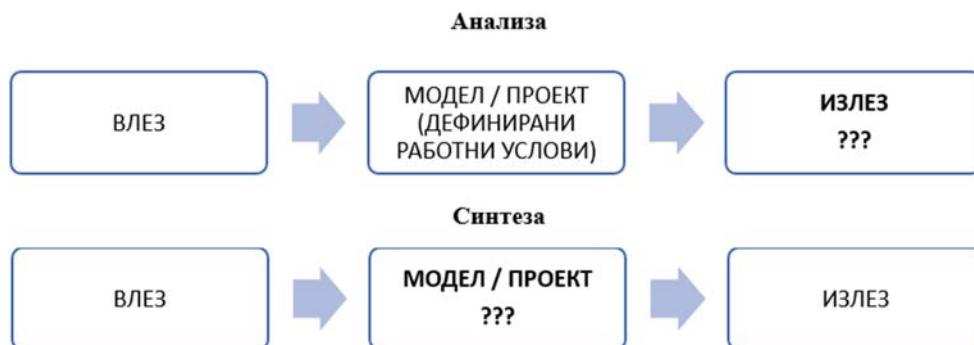
## 1.1 Основи на анализа и синтеза на процеси

Процесната интеграција претставува инженерска симбиоза на принципите на хемиското и контролното инженерство со принципите на економиката на технолошките процеси. Основни составни елементи на процесната интеграција се анализата и синтезата на процеси (слика 1.1).



**Слика 1.1** Шематски приказ на процесна интеграција

Проблематиката на процесната интеграција во суштина претставува спојување на принципите на хемиски инженеринг со принципите на економијата, бидејќи економскиот успех на хемискиот проект е есенцијален за одржливоста на индустријата. И затоа мораме секогаш да ја гледаме економичноста на секоја одлука што ја носиме за дизајнирање одреден процес. Постојат неколку предмети каде што се изучуваат дизајнот на топлински изменувачи, преносот на топлина, преносот на маса, инженерството за хемиски реакции, проектирањето процеси, дизајнот на процесна опрема, индустрискиот менаџмент.



**Слика 1.2** Шематски приказ на анализа и синтеза на процеси

Но, пристапот при процесната анализа и синтеза (слика 1.2) е различен, бидејќи нуди севкупен поглед на сите овие принципи од аспект на развој на процес или од гледна точка на потенцијален хемиско-инженерски проект. Хемиско-инженерските проекти играат посебна улога во одржливиот развој на општеството во нашиот секојдневен живот, со оглед на фактот што континуирано користиме производи во различни форми, како што се: фармацевтски производи, текстил, сапуни, детергенти, козметика, прехранбени производи, ѓубрива, горива, метал, полимерни материјали, а нивното производство се одвива во соодветно димензиониран индустриски постројки. Во основа, производна процесна (индустриска) постројка е постројка во која се одвива физичко-хемиска или биотехнолошка трансформација на појдовни сировини во производи со додадена вредност при оптимална експлоатација на неопходни ресурси, како што се: работна сила, енергија, вода, простор и финансиски средства. Различни фактори влијаат на дизајнот на еден индустриски процес за производство на конечен производ, па согласно со тоа, секоја индустриска постројка е симбиоза на оптимални комбинации на поединечни процеси и процесни единици.

Целите и приоритетите во дизајнот на процесот се под влијание на пазарот на кој тие се продаваат. Хемиските производи обично се класифицираат во три широки класи. Во првата група припаѓаат хемикалии со технички квалитет или хемикалии кои се произведуваат во големи количини и вообичаено во континуиран хемиски процес, а се продаваат врз основа на составот и чистотата, што ја одредува нивната цена. Примери за вакви хемикалии се: сулфурна киселина, азотна киселина, азот, кислород, етилен и хлор и многу други. Втората група ја сочинуваат т.н. фини хемикалии, односно хемикалии со повисок степен на чистота.

## 1. Основи на анализа и синтеза на процеси

---

Додека во третата група се хемикалии со специфична намена или функционални хемикалии.

Фините хемикалии, од друга страна, обично се произведуваат само во ограничени количини во шаржни услови. Бидејќи фините хемикалии се наменети за многу специфични цели и е неопходно да ги задоволуваат највисоките критериуми за степен на чистота, тие бараат сложени процеси, како што се: хемиска синтеза, биотехнолошки процес, екстракција, хидролиза. И конечно, специјалните или функционалните хемикалии се произведуваат за одредена или специфична примена. И функцијата на овие хемикалии е таа што ја одредува нивната цена, во корелација со хемискиот состав, како, на пример, парфеми, ароми или фармацевтски производи, дури и едноставни хемикалии, како што се разни средства за заштита од комарци или домашни средства за чистење.

Успешната примена на концептот на Анализа и синтеза на процеси во реални, индустриски рамки, претпоставува познавање на клучните области од хемиското и контролното инженерство: феномени на пренос, дизајн на хемиски и индустриски реактори, сепарациски процеси, топлинска интеграција на процеси, мерење и автоматска регулација во процесната индустрија, како и економска интеграција и оптимизација на процесните услови. Сепак, и покрај примената на основните принципи и начела од наведените области, дизајнот на нови технолошки процеси, како и редизајн на постоечките, претставуваат комплексна задача за секој инженер технолог и металург, доколку се земат предвид и ограничувањата од аспект на минимизирање на влијанието врз животната средина и здравствените аспекти на даденото технолошко решение. Токму во оваа фаза хемиско-инженерскиот дизајн се разликува од едноставна примена на индивидуалните технолошки операции и единици.

Развојот на нови процеси, почнувајќи од концептуална евалуација па сè до профитабилна реалност е комплексна проблематика и е дел од анализата и синтезата на процеси. Комплексноста на хемиско-инженерскиот дизајн потекнува од фактот што тој секогаш е *open-ended*, односно секогаш постои простор за оптимизација. Од друга страна, не секогаш ги имаме потребните информации, па во случај кога нема доволно податоци инженерот се повикува или на постапки за генерирање на потребните податоци (експериментални анализи, литературен преглед)

или на итеративни анализи врз база на искусвени претпоставки (т.н. *Educated guess*).

Но, хемиско-инженерскиот дизајн не е бесконечен процес, туку завршува во оној момент кога дополнителните промени не даваат пожелни и техничко-економски оправдани резултати. Во таа насока, и самото дефинирање на еден проект претставува проект сам по себе. Генерално, постојат два концептуално различни типови на интеграција:

- *Forward* интеграција, каде продуктите или нуспродуктите од еден процес претставуваат секундарна суровина во нов процес;
- *Backward* интеграција, каде се генерираат нови или модифицирани суровини за веќе постоечки процес.

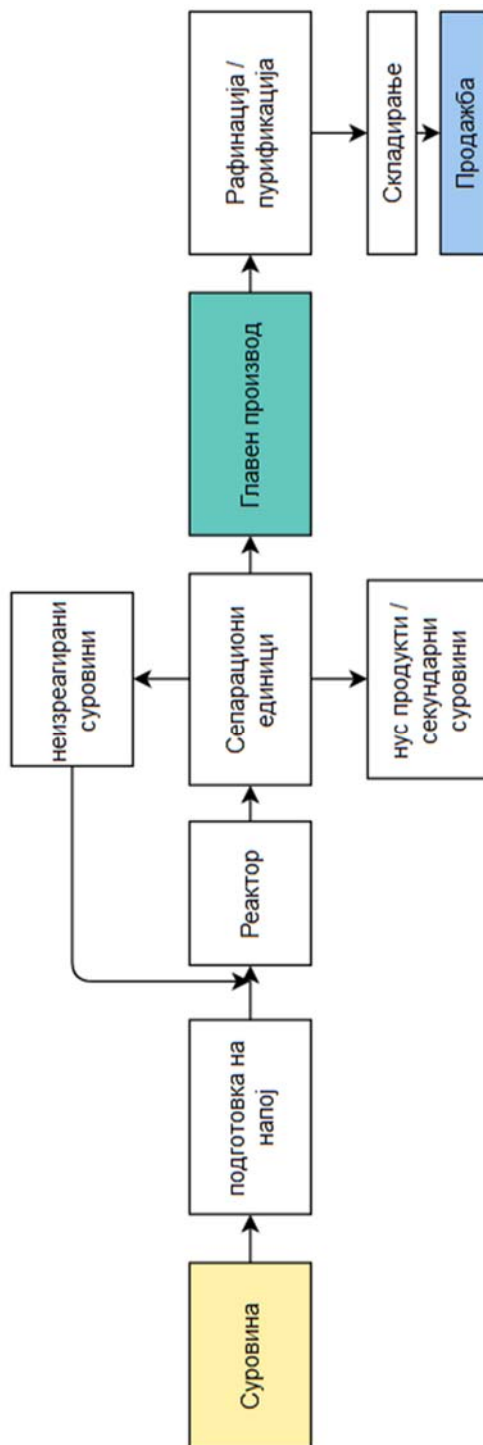
Секое технолошко решение треба да се вклопува во рамките на тоталниот менаџмент на квалитет, односно да ги интегрира и имплементира принципите на SHE заштита (*Safety Health & Environment*) и енергетската конзервација, со што како централни елементи на проблематиката на процесна интеграција се поставуваат масената и енергетската интеграција.

Појдовна точка во развојот на нови производи е истражувањето на пазарот, кое вклучува сегашни и идни состојби и побарувања, при што секогаш е поедноставна и подостапна анализата на пазарот (цени, количини) за постоечки производи. Генерално, постојат повеќе консекутивни чекори во развојот на хемиско-инженерскиот проект: создавање и инкубација на идеја, истражување на пазарот, дефинирање на соодветна и најдобра достапна технологија, дефинирање на профитабилност, изведување детални технолошки согледувања, избор на локација, генерирање детален техничко-економски извештај, изведба на студии (анализа на ризик, влијание врз животната средина и сл.), итн.

Основната анатомија на хемиско-инженерскиот дизајн е презентирана графички на слика 1.3, а во него се интегрирани изборот и распределбата (*equipment selection and arrangement*) на различни фази во процесот и дефинирање на спецификациите на потребната опрема.



## 1. Основи на анализа и синтеза на процеси



Слика 1.3 Основна анатомија на хемиско-инженерскиот дизајн

Ваквиот дизајн е комплетиран со топлинска интеграција на процесните струи и неопходните сервисни медиуми, што е последен чекор во процесната интеграција. Притоа, димензионирањето на мрежата на топлински изменувачи (*Heat Exchanger Network – HEN*) се базира на примена на основните инженерски постулати кон задоволување на енергетските (топлинските) потреби во еден дел на процесот со максимално интегрирано искористување на вишокот топлина продуциран во друг дел на процесот. Следењето на дефинираната архитектура во пристапот кон анализата и синтезата на технолошки процеси обезбедува димензионирање безбедни, одржливи, профитабилни, енергетски ефикасни и процеси со минимално влијание врз животната средина.



**Слика 1.4** *Хиерархиски пристап кон процесниот дизајн*

Концептуалната хиерархија на процесниот дизајн (слика 1.4) започнува со имплементација на правилата за развој на проточни дијаграми, по што следуваат: синтеза на проточен дијаграм, дизајн на реакторски систем и дефинирање на базичните економски потенцијали на процесот, дизајн на сепарациони систем во согласност со строгите барања во однос на процесните струи, како и енергетска интеграција на процесот. Неретко, процесниот дизајн има неколку алтернативи во однос на достапните технологии и можностите за масена и енергетска интеграција, па оттука произлегуваат и алтернативни проточни шеми за производство на ист конечен продукт. Во тој случај, конечниот избор од селектираните прифатливи технолошки решенија (алтернативи) се базира на економскиот аспект на хемиско-инженерскиот дизајн. Секоја од алтернативите го следи основниот модел за анализа и синтеза на процеси – моделот на кромид (слика 1.5). Во суштина, овој базичен модел се фокусира на реакторот како „срце“ на хемиско-инженерскиот дизајн, целосно интегриран со системите за масена и енергетска

## 1. Основи на анализа и синтеза на процеси

интеграција (*MRS – Mass Recovery System; ERS – Energy Recovery System*), како и примената на адекватни технологии за третман на отпадните токови (гасни, течни или хетерогени струи).



**Слика 1.5** Основниот модел за системски пристап при анализа и синтеза на процеси – модел на кромид

### 1.2 Хиерархиски пристап кон процесниот дизајн

Целта на процесот е да се создаде нова материјална вредност, која се создава преку хемиски или биохемиски трансформации на суровината во производи со додадена вредност. Процесниот дизајн може да вклучува:

- производство врз база на набавена суровина (искористување постоечки процес),
- производство врз база на конверзија на отпаден производ во производ со додадена вредност (искористување на постоечки процес, што значително ќе ги зголеми приходите од процесот и неговата профитабилност и/или ќе го намали нивото на емисии),
- создавање сосема нов материјал – врз база на креативни идеи.

Следниот тип на идеја би бил да се најдат нови начини за производство на постоечки материјал, односно да се имплементира нова технологија. Предложените алтернативи може да имаат предност од намалени капитални трошоци, намалени оперативни трошоци, побезбеден процес за животната средина, така што имплементацијата на нова технологија за производство на постоечки производ е резултат на креативна идеја за подобрување на дизајнот на процесот, што не подразбира само дизајнирање нов процес, туку и подобрување на постојниот процес, како и можна пренамена и реупотреба на постоечката процесна опрема.

Како се развива дизајнот на процесот, односно каде се генерира идеја? Идејата во основа се генерира во лабораторија. Секогаш кога истражуваме нов материјал за нашите нови процеси идејата секогаш се генерира во лабораторија. Сепак, не сите идеи што се генерираат во лабораторија би можеле да се трансформираат во вистински процес. Така, во фазата на истражување изгледите дека идејата може да се преведе во комерцијален процес е помала отколку што е вообичаено, да речеме, од 1 до 3 %. Потоа, ако идејата е доволно ветувачка, тогаш следува развојна фаза каде што не само што се проучуваат фундаменталните аспекти, туку и применетите аспекти. Во развојната фаза изгледите за успех се 10 – 25 %, по што следува пилот-фазата или фаза на дизајн и тестирање на процесот во пилот-постројка. Веќе во овој сегмент, изгледите за успех на инженерската идеја се значителни во насока на конечна имплементација во реален, комерцијален процес, а се движат околу 40 – 60 %. Ваквите статистички податоци укажуваат дека многу малку од идеите што се генерираат во лабораторија се трансформираат во комерцијален процес, а тоа значи дека треба да ги евалуираме идеите во секоја од консекутивните фази на процесниот дизајн, не само во фазата на истражување, туку и во фазата на развој и пилот-фазата.

Најчесто, во фазата на истражување недостатоците при дизајнот секогаш се должат на недоволно дефинирани процесни параметри и податоци, што значи дека многу малку од информациите што се достапни за дизајнирање целосен процес се достапни во оваа фаза. Податоците што недостасуваат се генерираат или со воведување инженерски искусвени претпоставки (*educated guess*) или преку примена на хеуристичките правила. Следниот сегмент е претставен со синтеза на процесен дијаграм, преку избор на потребната процесна опрема, меѓусебно поврзување помеѓу опремата и потоа

## 1. Основи на анализа и синтеза на процеси

---

трансформација на суровината во финален производ, како и потенцијалната појава на нуспроизводи. Токму затоа, процесниот дизајн сосема оправдано се разгледува како креативен процес, инженерски аналог на уметноста.

Нивоата на инженерски процесен дизајн се диференцираат во согласност со нивото на проценка на економските придобивки на процесот:

- Првото ниво на проценка е по редот на големината (*Order of Magnitude Estimate*). Ова ниво се базира на веќе достапни податоци и продуцира точност на економска проценка од  $\pm 50\%$ .

- Следното ниво на проценка е познато како студија или проценка на факторите (*Factor Estimate*). Кај ова ниво на проценка предвид се земаат и главните елементи на процесниот дизајн, а добиените вредности се со просечна прецизност од  $\pm 25\%$ .

- Прелиминарната проценка или проценка за авторизација на буџет (*Budget Authorization Estimate*) е преодна анализа која се заснова на повеќе податоци каде што не ја разгледуваме само главната опрема, туку и енергетскиот биланс, потребата од сервисни медиуми, друга мала опрема, итн., врз основа на неопходни податоци. Точноста е во опсег од  $\pm 15\%$ .

- Четвртата проценка е дефинитивната, предизведбена проценка (*Project Control Estimate*), која се заснова на речиси завршен процес, но пред да биде предадена на изведувач, каде што се направени конечните проточни скици и дефинирани конкретните активности. Точноста на оваа проценка е  $\pm 5\%$ .

- Конечната проценка е онаа која е позната како детална или проценка на изведувачот. Таа се заснова на комплетиран инженерски процесен дизајн и ги вклучува и истражувањата на пазарот, со податоци за локацијата, а овде точноста е околу  $\pm 3\%$ .

Преодот од пониските кон повисоките нивоа на пресметки е консекутивен процес, при што по комплетирањето на едно ниво се додава т.н. „нов слој“ на податоци за пристапување кон пресметка од повисоко ниво. Токму ваквиот пристап е основниот концепт на хиерархискиот пристап кон процесниот дизајн, кој овозможува скрининг и елиминација на

најголемиот дел од процесните алтернативи и насочување кон конечните, прифатливи решенија. Секое ниво продуцира адекватна економска анализа на тековниот процесен дизајн.

Реализацијата на овие проценки е дополнително отежната во случај на дизајн на нов процес каде што претходните податоци за трошоците не се достапни. Примарниот начин за изведба на проценката е преку воспоставување аналогија помеѓу новиот процес и студијата на случај, што во одреден степен може да продуцира одлична претпоставка.

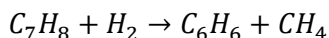
Но, сепак, таквата проценка е само проценка од типот – ред на големина, а соодветен системски пристап кон процесниот дизајн може да се постигне само со дизајнирање процес преку последователни слоеви на детали. Дури и со ваков пристап малку е веројатно да се добие единствена, оптимална алтернатива на процесот. Тој процес на евалуација е многу важен, познат и како скрининг на алтернативи и е главен аспект на дизајнот на процесот.

Токму затоа ќе го дефинираме хиерархискиот пристап кон дизајнот на процесите. Ваквиот сукцесивен пристап се темели на воведување сè поголемо количество детали, сè поголемо количество информации, односно идејата е да се развијат едноставни решенија за дизајн на процеси и потоа да се додаде дополнителен слој на детали. Во секоја фаза мораме да го оцениме економскиот потенцијал на процесот, ако потенцијалот е позитивен, тогаш одиме во следната фаза.

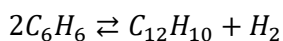
Во насока на практична демонстрација на систематскиот пристап кон процесниот дизајн го анализираме процесот на хидродеалкилација на толуен (HDA процес), при што како продукти се добиваат бензен, дифенил и метан.

### **Пример – хидродеалкилација на толуен за добивање бензен**

Овој процес се одвива во парна фаза, со механизам на реакција:



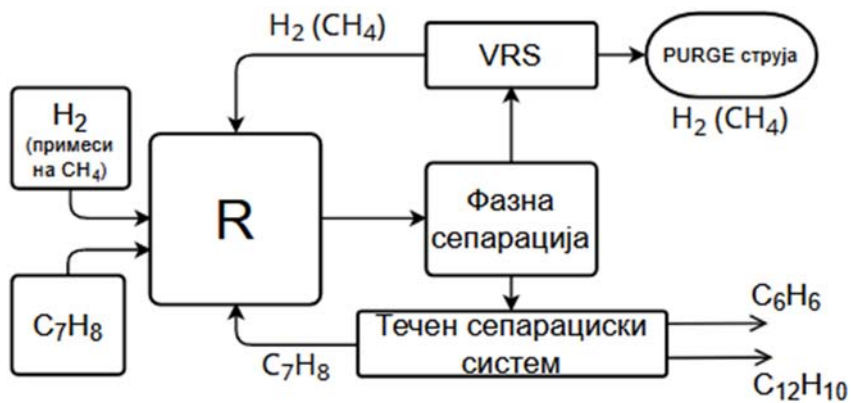
И споредна реакција, во која две молекули на бензен стапуваат во реверзибилна реакција, каде се добива дифенил, како нуспродукт:



## 1. Основи на анализа и синтеза на процеси

Реакцијата се одвива при работен притисок од 500 psi, температурен опсег од 1150 до 1300 °F (под 1150 °F, кинетиката на реакцијата е бавна, а над 1300 °F доаѓа до деградација на толуенот), а лимитирачки реактант е толуенот. Со цел да се фаворизира посакуваната реакција, за максимизирање на конверзијата на толуен и приносот на бензен, реакцијата се одвива во вишок на водород (моларен сооднос на влез во реактор  $y_{C_7H_8}:y_{H_2} = 1:5$ ).

Базичниот проточен дијаграм на анализираниот процес може да се претстави со основните процесни елементи, како на слика 1.6.



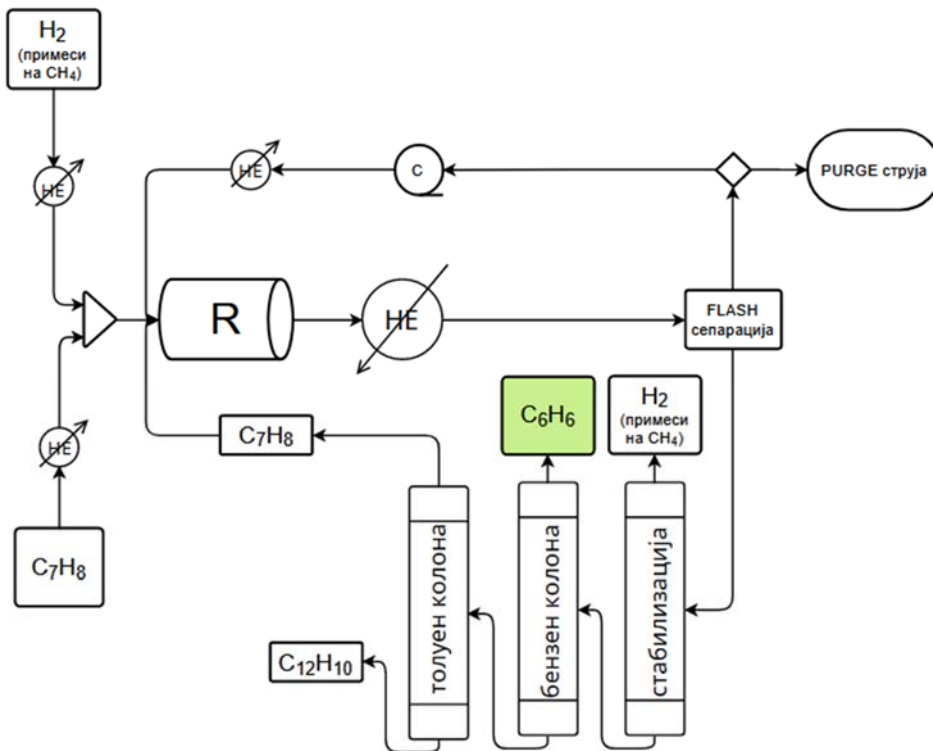
Слика 1.6 Базичен проточен дијаграм на HDA процесот

Иницијално, двата реактанта се загреваат и компримираат до оперативните вредности на работните параметри во реакторот. Имаме еден реактант, водород со одредена нечистотија на метан во него, бидејќи водородот се генерира преку реформирање на метанот со пара и втор реактант, толуен, кој е течен при STP услови. Значи, не само што треба да се загрее, туку и да испари и потоа да се внесе во реакторот.

Ефлуентот од реакторот или струјата што излегува од реакторот ќе го содржи главниот производ бензен, нуспроизвод дифенил, неконвертираниот толуен, водород и метан, кој е инертна нечистотија. Оваа смеса е на температура помеѓу 1150 и 1300 °F и содржи многу енергија. Оваа струја прво се лади, а потоа се транспортира во флеш-сепаратор каде што притисокот се редуцира, со што се постигнува фазна сепарација на ефлуентот на парна и течна струја. Водородот и метанот ја сочинуваат гасната фаза, и тие струи излегуваат од флеш-сепараторот како проток

на гас, кој содржи главно водород и метан (можни се траги од бензен и толуен), а додека течната струја (со одредено количество на водород и метан растворени во течната струја) содржи бензен, дифенил и толуен.

Дизајнот на адекватен систем за сепарација на посакуваните продукти од неизреагираните реактанти и нуспродуктите посочува кон анализа на гасната и течната струја на излез од флеш-сепараторот. Течната струја најпрво се внесува во колона за стабилизација каде што по пат на загревање се отстрануваат растворените гасови (траги од водород и метан). Следната колона е колона во која на врвот дестилира главниот производ од процесот – бензен. Оваа дестилациона колона е обележана како бензен колона, каде на дното се сепарираат тешките компоненти, односно толуенот и дифенилот. Во следната колона (толуен колоната) се врши сепарација на толуенот од дифенилот, при што толуенот се меша со свежиот напој на влез во реакторот, по претходно загревање, така што во суштина имаме изолација на дифенилот и рециклирање на неконвертиран толуен (слика 1.7).

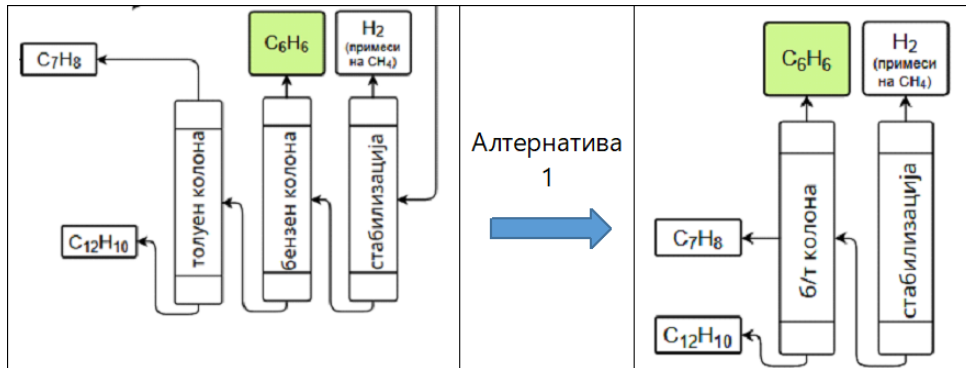


Слика 1.7 Процесен проточен дијаграм на HDA процесот



## 1. Основи на анализа и синтеза на процеси

Но, се поставува прашањето дали е потребно да има две колони за да се сепарираат три компоненти? Можеме да комбинираме некои од овие колони и да димензионираме дестилациона колона со странична струја. Во тој случај има алтернативно решение за дестилациона секвенција (*distillation train*) – алтернатива 1, која предвидува замена на бензенската и толуенската колона со една дестилациона колона, во која на врвот се добива бензен, остатокот на дното на колоната го сочинува дифенилот, додека толуенот се добива како странична струја:

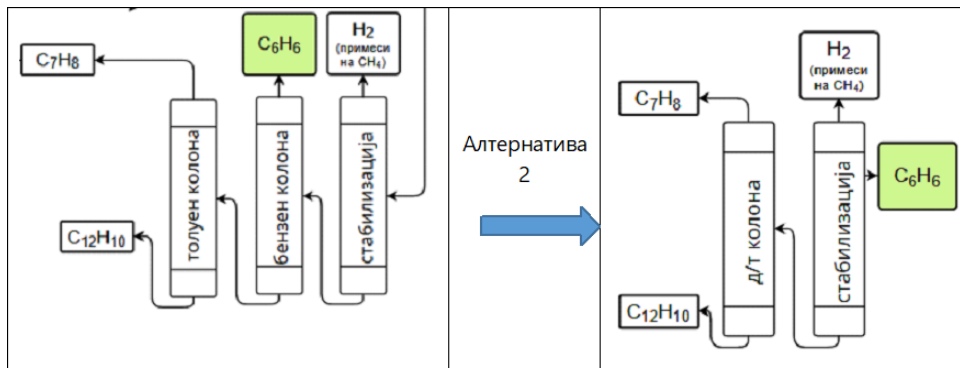


Ваквата конфигурација на течниот сепарациски систем (ТСС), кој предвидува една дестилациона колона (алтернатива 1), има своја техничко-економска оправданост поради фактот што страничната струја е сочинета од релативно чист толуен, а продуктот на врвот на колоната, бензенот е со висок степен на чистота (до 99 %).

Релативната испарливост помеѓу толуенот и дифенилот е доста висока. Значи, ако го погледнете долниот дел од колоната за дестилација, составот се менува многу брзо. Дното на колоната е речиси чист дифенил, а количината на дифенил во горните подови е релативно мала. Оттука, изолацијата на толуенот како странична струја од еден од подовите во близина на дното, тогаш може да се добие релативно чист толуен. Овој толуен можеби не е 99 % чист, но овој толуен се рециклира низ реакторот. Тоа не е производ, што значи дека можеме да направиме компромис со чистотата на толуенот.

Постои и алтернативно решение за ТСС (алтернатива 2), кое предвидува бензенот да се изолира како странична струја од колоната за стабилизација, каде на врвот од колоната се добиваат водородот и метанот, а на дното се содржани толуенот и дифенилот. Водородот и метанот што се

гасовити можат да се одвојат од бензенот многу лесно. Ако го анализираме составот на најгорните подови во првата колона, ќе констатираме многу брза промена на составот што е во близина на најгорниот под на врвот од колоната. Бензенот, во подовите од горниот дел на колоната за стабилизација ќе биде речиси чист и може да го извлечеме како странична струја од првата колона. Струјата од дното на оваа колона е влез во втората колона, каде се одвива сепарација на толуенот (на врвот) од дифенилот (на дното).



Изборот на соодветна алтернатива за конечно димензионирање на системот за сепарација на течната струја е резултат на детална техно-економска анализа и целосно согледување на потенцијалните капитални и оперативни трошоци, како и потенцијалните ефекти врз квалитетот на конечните продукти и можноста за рецикулација на неконвертираните суровини. Соодветниот „дестилациски воз“ – распоредот на колоните за дестилација може да се дизајнира само откако ќе го знаеме составот на ефлуентот од реакторот за кој треба да го дизајнираме самиот процес.

Следниот сегмент од анализата на системот за сепарација е фокусиран на протокот на гас што излегува од флеш-сепараторот. Оваа струја содржи големи количества на водород (неизреагиран и продуциран во споредната реакција). Метанот влегува во процесот како нечистотија преку напојот на водород, но и се создава во процесот, преку директната реакција. Доколку оваа струја се рециклира како што е – во реакторот, тогаш ќе се акумулира метан и тоа ќе го попречи процесот како од аспект на поместување на досегот на директната реакција спротивно од посакуваниот продукт, така и од аспект на создавање ризик од хаварија во реакторскиот систем. Затоа се воведува т.н. *purge* струја, што

## 1. Основи на анализа и синтеза на процеси

---

во суштина претставува исфрлување на дел од присутниот гас. Преостаниот гас потоа се компримира до 500 psi, а потоа и така се загрева до 1150 – 1300 °F и потоа се меша со свежиот напој на гасна струја што влегува во реакторот.

Протокот на гас што произлегува од фазната сепарација има четири компоненти: водород, метан и траги на толуен и бензен. Поради фактот што бензенот е канцероген, но и вреден производ кој мора да се рекуперира, неопходно е да се минимизира загубата на бензен од процесот. Евентуалните загуби во однос на конечниот продукт, бензенот, директно влијаат на целокупната економичност и одржливост на производствениот процес. Во сегашниот контекст, гасната фаза ја сочинуваат водород и метан, кои претставуваат горивни гасови за задоволување на енергетските потреби на процесот. Оваа струја може да се рециклира во процесот за да се задоволат потребите за енергија. Но, ако треба претходно да отстраниме пареа од гасот (траги од бензен и толуен), имаме неколку опции. Гасот во суштина е пареа која е далеку од својата критична точка, односно има термодинамички својства на гасна супстанција при амбиентални услови. На пример, водородот, метанот, азотот, кислородот се гасовити, додека бензенот и толуенот се пареи во анализираниот систем.

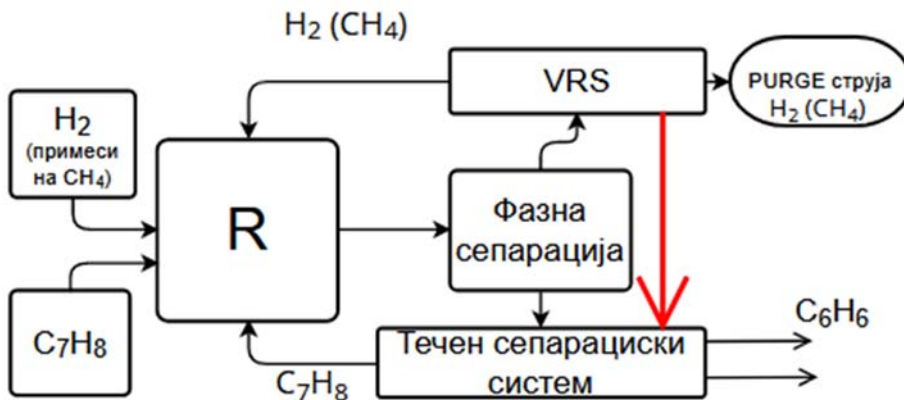
И овие компоненти може да се кондензираат релативно лесно, што во суштина претставува прва варијанта за дефинираната намена. Можеме да ги кондензираме пареите со компресија или со ладење на струјата или и двете истовремено. Тоа зависи од P–T карактеристиките на пареата. Втората опција за сепарација на пареите е воведување процес на апсорпција во соодветен растворувач. Третата опција е атсорпција на соодветен атсорбент, додека четвртата опција е примена на мембранска сепарација.

Првата одлука што треба да ја донесеме е дали е потребен систем за рекуперација на пареите (*VRS – Vapor Recovery System*) и ако е потребен, каква е економичноста на предложената изведба на VRS. Притоа, изведбата на VRS најчесто предизвикува дополнително оптоварување на системот за сепарација на течности (TSS). Да претпоставиме дека изборот на процес за сепарација на пареите е апсорпција, која е најекономична операција, како што е докажано во неколку студии. Сепак, за апсорпција ќе биде потребен растворувач и растворената супстанција треба да се поврати од растворувачот преку дестилација

или отстранување пареа (*steam stripping*). И затоа, треба да ја земеме предвид економичноста на процесот.

Досегашните согледувања ни овозможуваат дизајн на симплифициран проточен дијаграм на системот за сепарација (слика 1.8), чии компоненти се:

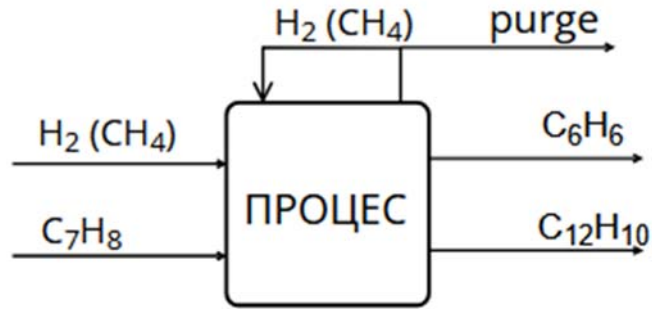
- 1) флеш-сепаратор (фазна сепарација – декомпресија и/или ладење);
- 2) ТСС – систем за сепарација на течната струја (колоните за дестилација, екстракциони единици, мембрански процеси);
- 3) VRS системот за рекуперација на пареи (апсорпција, атсорпција, кондензација, мембрански процеси).



**Слика 1.8** Дополнително оптоварување на ТСС по апсорпција (црвена линија)

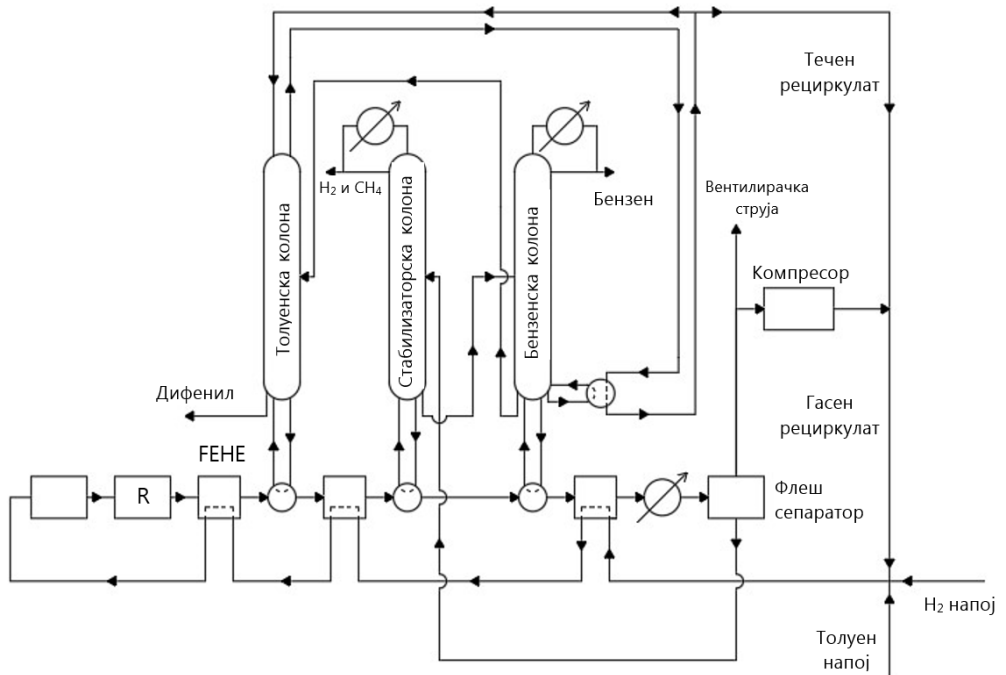
Следен аспект е анализа на рециркулирачката структура на студираниот процес, поради фактот што струите кои се рециркулираат во процесот се асоцираат со значајни трошоци (трошоци за сепарација на неизреагираните реактанти, трошоци за рециклирање). Во однос на трошоците за рециркулирање, кога се работи за течни струи, трошоците за транспорт (рециркулирање) се занемарливи, но кога се рециркулираат гасови, неопходно е компримирање на струјата, што резултира со зголемување и на капиталните (компресор) и на оперативните трошоци.

Поедноставувањето на проточниот дијаграм резултира со базична влезно-излезна структура на процесот (слика 1.9).



Слика 1.9 Влезно-излезна структура на HDA процесот

Влезно-излезната структура на базичниот дијаграм на процесот претставува основна презентација на процесните струи и овозможува појдовна проценка на економскиот потенцијал, каде цената на продуктите намалена за вредноста на работната сировина ја генерира додадената вредност во процесот, што е основен економски показател за економската оправданост и одржливоста на анализираниот процес.



Слика 1.10 ХДА процес – процесен проточен дијаграм на енергетски интегриран процес

Проточниот дијаграм на енергетски интегриран HDA процес е претставен на следната слика (слика 1.10) и претставува проточен дијаграм кој ја отсликува и можноста за интегрирање на енергетските потреби и процеси во процесот со вмрежување на топлите струи со струите кои треба да се загреат (како, на пример, вмрежување на напојните струи со ефлуентот од реакторот, односно дизајн на *FEHE* – *Feed-Effluent Heat Exchanger*). На пример, ефлуентот од реакторот е на многу висока температура, околу 845 K. Ова е типичен пример за топлинска размена помеѓу ефлуент и влезен напој. Преостанатиот вишок на топлина се изменува во соодветно димензиониран топлински изменувач со сервисен медиум.

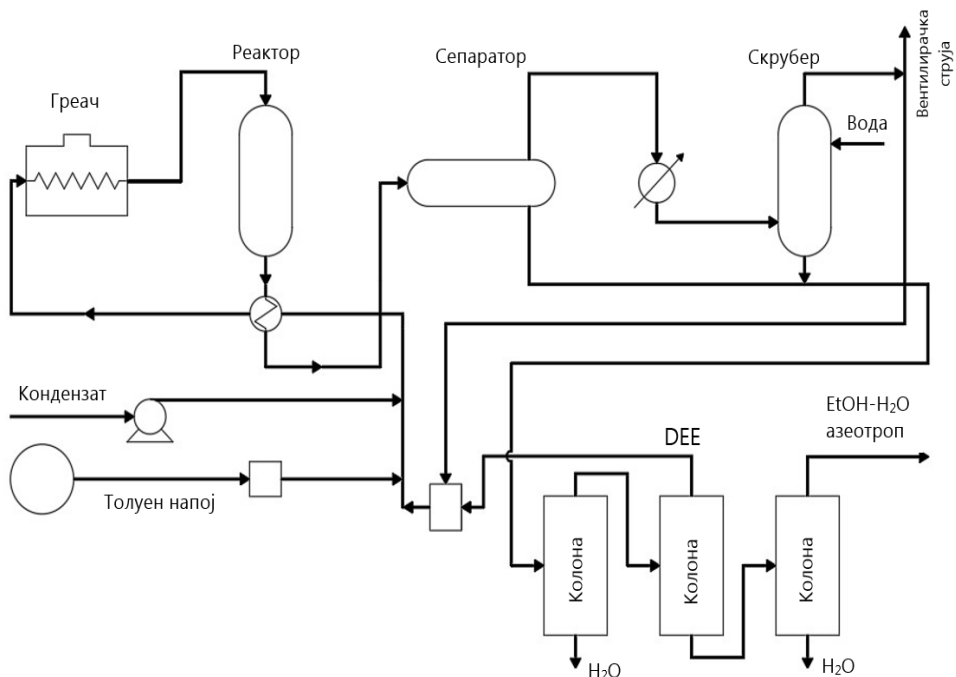
Систематскиот пристап кон процесниот дизајн може да се претстави како интегрирана целина на сукцесивни елементи и одлуки за синтеза на процесот по нивоа. Хиерархијата на одлуките е следна:

- 1) Шаржен или континуиран процес,
- 2) Влезно-излезна структура на процесот,
- 3) Рециркулирачка структура на процесот,
- 4) Сепарациски систем (TCC и VRS) и
- 5) Топлинска интеграција на процесот (HEN).

Овој пристап ни дава можност за проценка на економскиот потенцијал. За секое од презентираниите нивоа на интеграција, додека вклучуваме сè повеќе и повеќе информации за дизајнираниот процес, ги дефинираме капиталните и оперативните трошоци во детали, со што конечната синтеза на процесот резултира и со детален преглед на економската оправданост на процесот, како и евалуација на можните алтернативи.

### **Пример – синтеза на етанол со хидратација на етилен**

Една од технолошките постапки за производство на етанол е со примена на процесот на хидратација на етилен. Целосно интегриран технолошки процес за производство на етанол во согласност со дефинираната постапка е даден на слика 1.11.

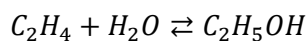


**Слика 1.11** Технолошка процесна шема за производство на етанол со хидратација на етилен

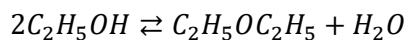
Врз база на овој процес, хиерархискиот пристап кон систематски процесен дизајн е следен:

### 1) Влезно-излезна структура на процесниот дизајн

Хемизмот на реакцијата е дефиниран со следната стехиометриска равенка:



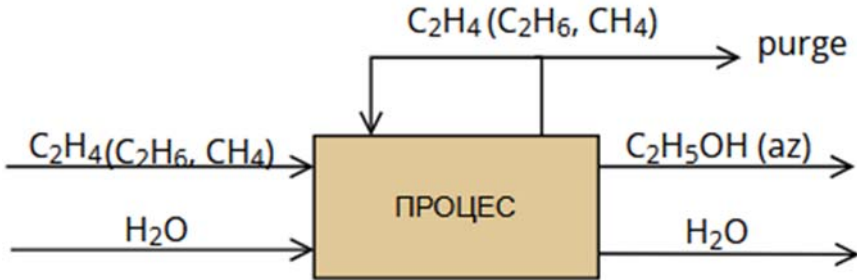
Но, се јавува и следната споредна реакција, каде две молекули на етанол продуцираат еден молекул на диетил етер (DEE) и еден молекул вода:



Реакцијата се одвива при следните работни услови: температура  $T = 560\text{ K}$  и притисок  $P = 69\text{ bar}$ . Степенот на конверзија при едно поминување на реактантите во реакторот е  $X = 0,07$  (или 7 %), а рамнотежната константа на споредната реакција е  $K_{DEE} = 0,2$ . Напојот

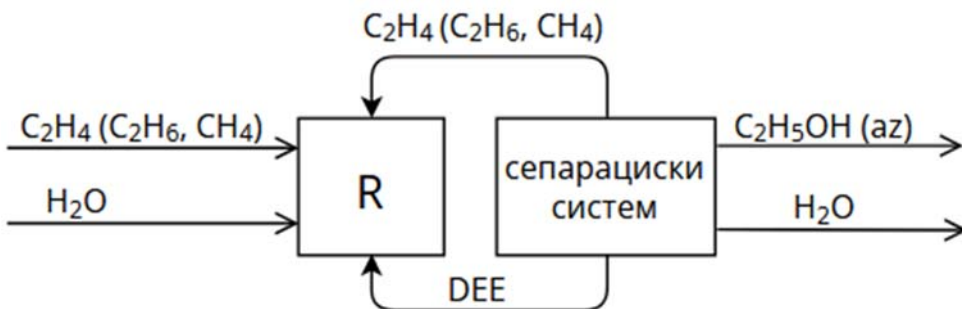
го сочинуваат две струи: струја на вода (чист реактант) и струја на етилен со состав: 90 %  $C_2H_4$ , 8 %  $C_2H_6$  и 2 %  $CH_4$ .

Во согласност со почетните услови, влезно-излезната структура на разгледуваниот процес може да се претстави како на слика 1.12.



**Слика 1.12** Влезно-излезна структура на процесот на производство на етанол од етилен

Гасната фаза од реакторскиот ефлуент содржи неизреагиран етилен, со нечистотии од етан и метан, а оваа струја делумно се емитира надвор од процесот (како *purge*) струја, додека поголемиот дел се рециркулира во процесот (реакторот) како за да се зголеми степенот на конверзија на етиленот, така и за да се фаворизира одвивањето на посакуваната реакција (синтеза на етанол). Врз база на дефинираната влезно-излезна структура на процесот, како и степенот на конверзија при едно поминување на реактантите, можеме да ја детерминираме рециркулирачката структура како на слика 1.13.



**Слика 1.13** Рециркулирачка структура на процесот на производство на етанол од етилен

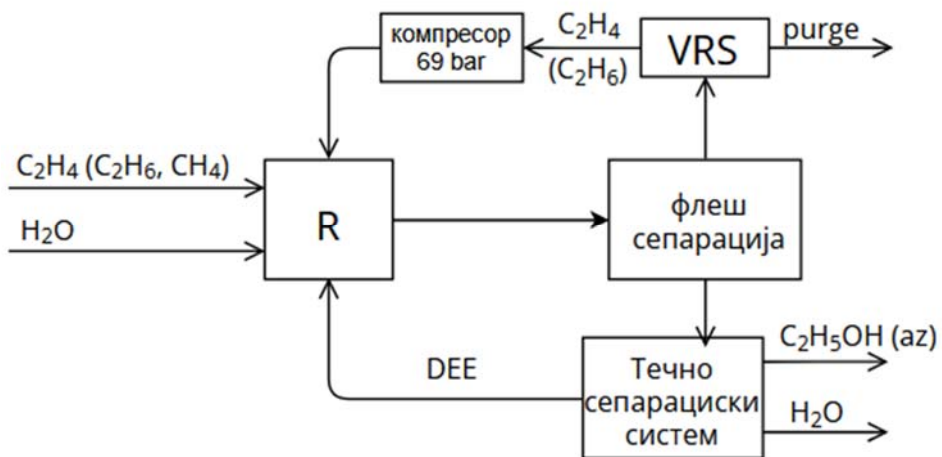


## 1. Основи на анализа и синтеза на процеси

Дадениот дизајн на рециркулирачката структура на разгледуваниот процес е во согласност со техничко-технолошката и економска оптимизација на процесот – зголемување на конверзијата на лимитирачкиот реактант и поместување на непосакуваната реакција „кон десно“ во однос на хемиската равенка, односно минимизирање на загубите на посакуваниот продукт (азеотропна смеса на етанол) во форма на диетил етер. Рециклирањето на диетил етерот назад во процесот ја зголемува концентрацијата на оваа непосакувана компонента, со што при константна вредност на оперативните услови се инхибира непосакуваната реакција (поради зголеменото количество продукт – DEE).

Дефинирањето на рециркулирачката структура на разгледуваниот процес ни овозможува да ја продолжиме синтезата на процесот во насока на дефинирање на сепарациониот систем, кој во конкретниот случај предвидува дизајн на систем за сепарација на парната фаза (VRS) и систем за сепарација на течната фаза (TCC). Конечно, во истражуваниот процес, во согласност со евалуираното технолошко решение, се рециркулираат две струи:

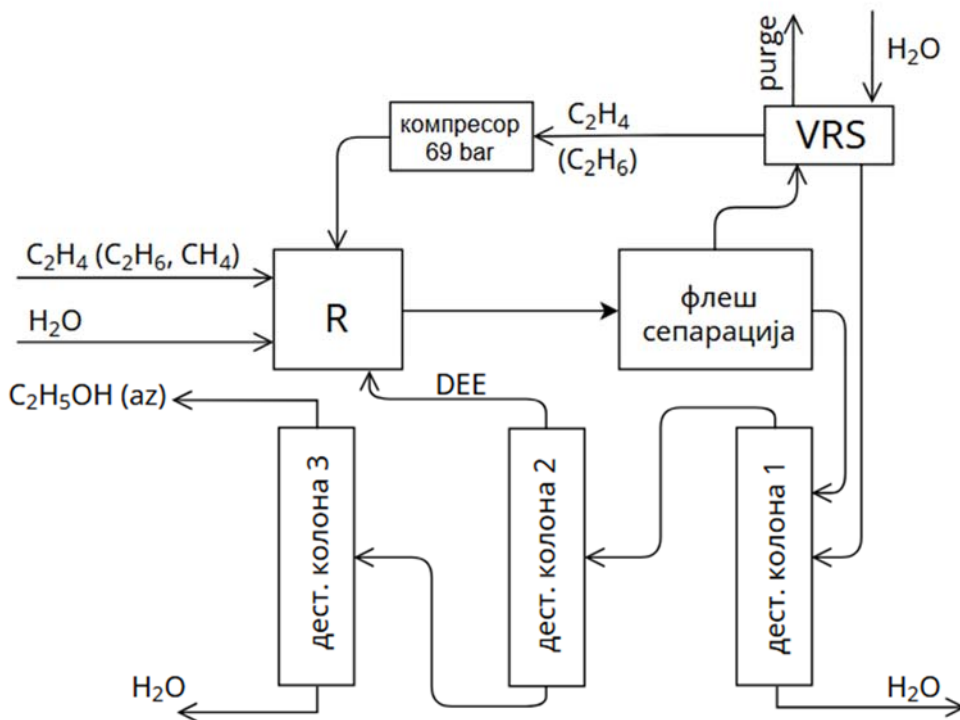
- Неизреагиран етилен (со нечистотии од етан и метан) – гасна рециркулирана струја и
- Продуциран диетил етер – течна рециркулирана струја



**Слика 1.14** Базичен приказ на сепарациониот систем на процесот на производство на етанол од етилен

Базичната процесна шема за процесот во кој се инкорпорирани и сепарациските системи е дадена на слика 14.

Флеш сепарацијата на реакторскиот ефлуент продуцира гасна струја, која ги содржи неизреагираниот етилен, нечистотиите од етан и метан, како и траги од пареите на етанол и диетил етер. Техничкото решение за гасната фаза од реакторскиот ефлуент, на излез од флеш сепараторот вклучува елиминација на трагите од пареите на двата продукти и рециркулирање на најголемиот дел од гасната фаза назад во реакторот, а мал дел од гасната фаза се ослободува во форма на *purge* струја, со цел минимизирање на нечистотиите на влез во реакторот, како и одржување на концентрациите на гасните компоненти во безбедни граници. Гасната струја која се рециркулира назад во процесот, прво се компримира до работниот притисок во реакторот (69 bar), за што е неопходен компресор позициониран помеѓу VRS и реакторот.



**Слика 1.15** Детална архитектура на сепарацискиот систем на процесот на производство на етанол од етилен

## 1. Основи на анализа и синтеза на процеси

Анализата на можните решенија за делот од сепарацискиот систем кој се однесува на парната фаза (VRS) нуди неколку решенија за соодветна технолошка изведба на ваков систем. Како најсоодветно и често применувано решение за VRS е процесот на апсорпција, со што овој систем во конкретниот случај е сочинет од еден апсорбер, а соодветен апсорбент за елиминација на трагите од етанол и диетил етер е водата. Струјата која ги содржи елиминираниите траги од пареите во гасната струја на излез од апсорберот претставува дополнителна струја која се транспортира до течниот сепарациски систем, на влез во првата дестилациона колона. Деталната структура на сепарацискиот систем за анализираниот процес е дадена на слика 1.15.

Првата дестилациона колона во суштина е стабилизациона колона, каде на дното се издвојува чиста вода, а на врвот е струјата богата со етанол и диетил етер. Оваа струја го сочинува напојот во втората дестилациона колона. Во овој сегмент на течниот сепарациски систем, изолираниот диетил етер се рециркулира назад во реакторот, додека струјата со етанол и вода претставува напој за третата дестилациона колона. Финалниот сегмент (третата дестилациона колона) продуцира азеотропна смеса на етанол и вода, во горниот дел на колоната, и чиста вода на дното од колоната.

Во согласност со реализираната хиерархија на одлуки за систематскиот дизајн на процесот на производство на етанол со хидратација на етилен, заклучно со решенијата за сепарацискиот систем на процесот, димензиониран е целосен проточен блок-дијаграм на процесот. Конечното технолошко решение за синтеза на процесот на производство на етанол како азеотропна смеса со вода, преку хидратација на етилен, предвидува и топлинска интеграција и детална економска евалуација и оптимизација.

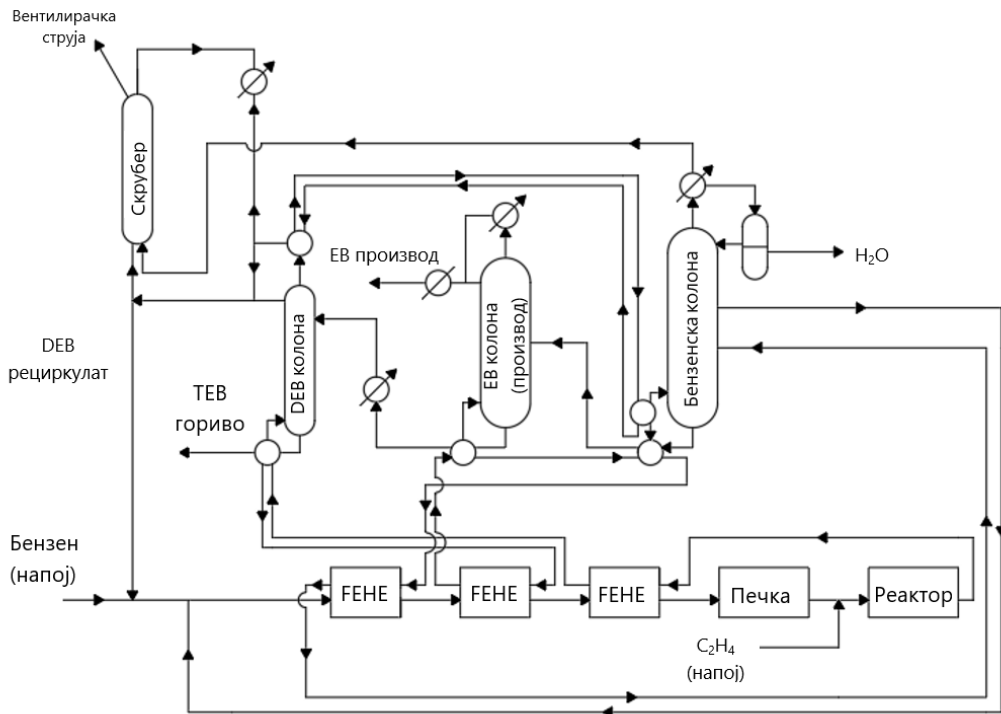
### Пример – производство на етил бензен

Примената на методот на хиерархиски одлуки поврзани со системскиот дизајн на проблеми од процесното инженерство, а во насока на синтеза на технолошки процес, може успешно да се имплементира и за процесот на производство на етил бензен (ЕВ,  $C_8H_{10}$ ) низ реакција помеѓу етилен и бензен, во присуство на катализатор. Директната реакција, како и споредните реакции, со кои се продуцираат диетил бензен (ДЕВ,  $C_{10}H_{14}$ ) и триетил бензен (ТЕВ,  $C_{12}H_{18}$ ) кои се јавуваат

паралелно со директната, се дефинирани со следните стехиометриски равенства:

- Директна реакција  $C_2H_4 + C_6H_6 \rightleftharpoons C_8H_{10}$
- Споредна реакција 1:  $C_2H_4 + C_8H_{10} \rightleftharpoons C_{10}H_{14}$
- Споредна реакција 2:  $C_2H_4 + C_{10}H_{14} \rightleftharpoons C_{12}H_{18}$
- Споредна реакција 3:  $2C_8H_{10} \rightleftharpoons C_6H_6 + C_{10}H_{14}$

Целосно интегриран технолошки процес за производство на етил бензен е презентирани на слика 1.16.



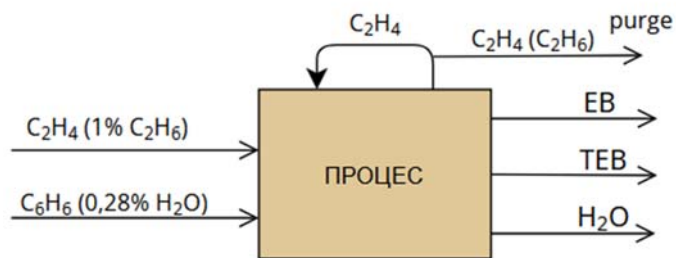
**Слика 1.16** Интегриран процес за производство на етил бензен со каталитичка реакција меѓу етилен и бензен

## 1. Основи на анализа и синтеза на процеси

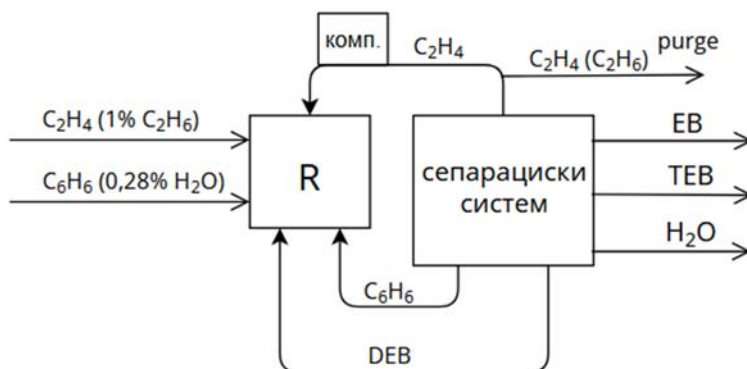
Оперативните услови се дефинирани:

- Работен притисок 300 psi
- Работна температура 820 °F
- Реакцијата се води во вишок на бензен, со цел да се постигне висока конверзија на етилен до етил бензен, а да се намали досегот на непосакуваните реакции, каде DEB претставува нечистотија во процесот, а ТЕВ е потенцијално гориво (енергенс);
- Напојот се состои од струја на бензен со 0,28 % вода (нечистотији) и струја на етилен со 1 % етан (нечистотији).

Анализата на почетните услови дава можност за конструкција на влезно-излезниот дијаграм на процесот (слика 1.17).



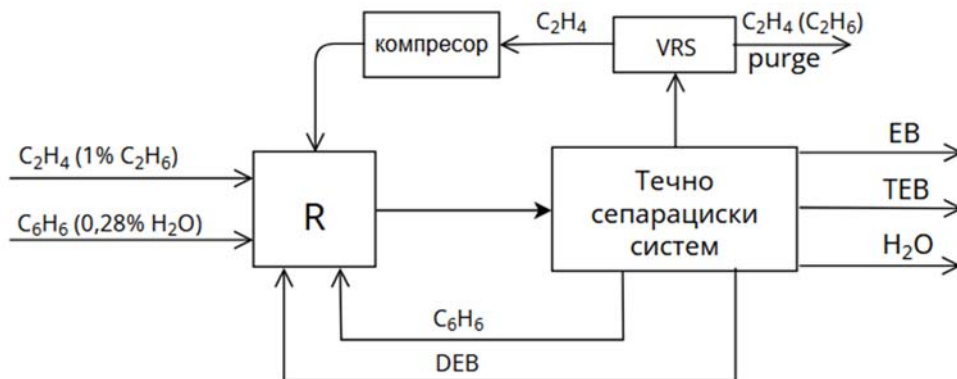
**Слика 1.17** Влезно-излезен дијаграм на процесот на производство на етил бензен



**Слика 1.18** Рециркулирачка структура на процесот на производство на етил бензен

Дефинирањето на типот на струите во процесот, како во однос на агрегатната состојба, така и во однос на составот, е појдовна точка за дефинирање на рециркулирачката структура, презентирана на слика 1.18.

Следејќи ја утврдената хиерархија на одлуки, следен дел од синтезата на проточниот дијаграм е конструкцијата на сепарацискиот систем. Оваа структура е прикажана на слика 1.19.



**Слика 1.19** Основен дијаграм на сепарацискиот систем на процесот на производство на етил бензен

Во однос на претходните примери, во конкретната студија на случај е изоставен флеш сепаратор, поради фактот што одлуката за фазна сепарација на реакторски еfluент директно зависи од  $P$ ,  $V$ ,  $T$  карактеристиките на еfluентот и од содржината на пари. Конечниот проточен дијаграм на истражуваниот процес, кој содржи детална архитектура на сепарацискиот систем, е даден на слика 1.20.

Дизајнот на соодветен проточен дијаграм за предложеното технолошко решение ги содржи следните клучни аспекти:

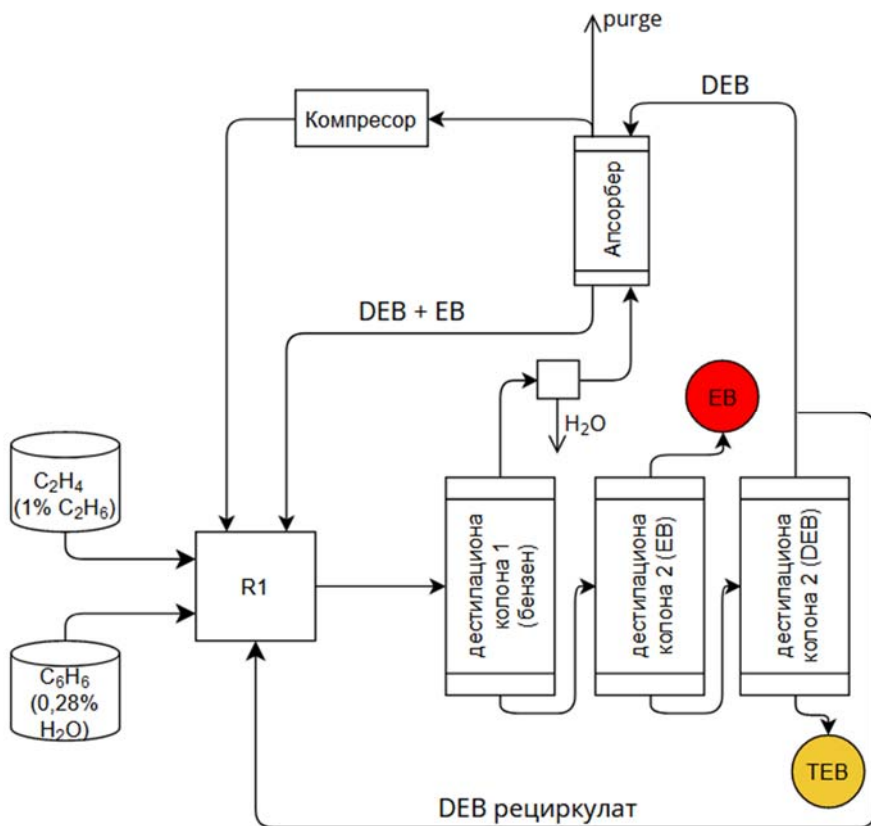
- Реакторскиот еfluент претставува напој во бензенската колона, каде се одвива сепарација на неизреагираниот етилен и трагите од пари, од водата;
- Гасната фаза се спроведува во апсорберот (VRS), каде како апсорбент се користи дел од течната струја на DEB. Течната струја на излез од апсорберот (содржи EB и DEB) се рециклира во реакторот. Гасната фаза,

## 1. Основи на анализа и синтеза на процеси

делумно се испушта како *purge* струја, а поголемиот дел се компримира и се рециркулира назад во реакторот;

- Сепаратот од долниот дел на бензенската колона се транспортира до втората дестилациона колона – продукт колона. Кај оваа колона на врвот се добива струјата на конечниот продукт (EB), а на дното споредните продукти (DEB и TEB);

- Третата дестилациона колона врши сепарација на DEB (како полесна компонента) и TEB (потешка компонента). Дел од струјата на врвот (DEB) се користи како апсорбент во VRS апсорберот, додека другиот дел се рециркулира во реакторот. TEB струјата се складира за понатамошна употреба како енергенс во процесот.



Слика 1.20 Финален проточен дијаграм на процесот на производство на етил бензен

## 1.3 Задачи

### Билансни проблеми

Пресметките кои се основен составен дел на хемиско-инженерскиот дизајн се дефинираат како билансни проблеми, кои се базираат на законите за одржување на масата и енергијата и прецизно ги детерминираат квалитативниот и квантитативниот состав на струите во технолошкиот процес, како и нивните топлински карактеристики. Овие пресметки го даваат основниот преглед на анализираниот процес од аспект на влезно-излезната и рециркулирачката структура на процесот, како база за утврдување на конечниот економски потенцијал и евалуација на процесните перформанси при синтезата на конечниот проект.

Всушност, билансот е математички модел на разгледуваниот процес, а билансот на материјалот и енергијата на стационарните процеси подразбира решавање на системот од билансни равенки. Најчесто се работи за алгебарски равенки кои можат да бидат линеарни или нелинеарни.

Прв чекор во дефинирање на билансниот проблем е да се селектираат границите на системот, да се дефинираат сите влезни и излезни струи, односно сите материјални токови низ границите на системот, да се идентификуваат сите хемиски учесници кои се содржани во секој таков систем. Понатаму, за да се овозможи сигурност во пресметките на сите влезно-излезни струи во системот, потребно е да се знаат протоците на секој хемиски учесник присутен во секоја струја.

### Билансни проблеми кај системи без хемиска реакција

Основен облик на материјалниот биланс кај системи без хемиска реакција е:

$$F = \sum_{j=1}^n F_j$$

$$G = \sum_{j=1}^n G_j$$

каде:



## 1. Основи на анализа и синтеза на процеси

$j$  – компонента  $j$  од струјата;

$F_j$  – молски проток на компонентата  $j$ ;

$G_j$  – масен проток на компонентата  $j$ ;

$F$  – молски проток на струјата;

$G$  – масен проток на струјата;

$n$  – број на компоненти.

Анализата на поставениот билансен проблем започнува со дефинирање на бројот на степени на слобода, што во основа претставува индекс на математичкиот биланс на бројот на променливи и равенки, а описно се дефинира како:

Број на степени на слобода = вкупен број на променливи –  
– вкупен број на независни билансни равенки –  
– вкупен број специфицирани променливи –  
– вкупен број на помошни релации

Ако степенот на слобода е позитивен, тогаш проблемот не е доволно специфициран и не може да се реши за сите непознати променливи.

Ако степенот на слобода е негативен, тогаш проблемот е над специфициран и вишокот (можеби и неконзистентни) информации мора претходно да бидат отстранети пред да може да се добие едно решение.

Ако степенот на слобода е нула, тогаш проблемот е коректно специфициран, а тоа значи дека бројот на непознати променливи е точно избалансиран со бројот на расположивите равенки и проблемот има едно единствено решение.

### Задача 1.1

Се разгледува процес на сепарација (фракциона дестилација) на  $1000 \text{ kmol/h}$  напојна струја, со следниот состав ( $\text{mol}$ ): 20 %  $C_3H_8$  (компонента 1), 30 % *iso* –  $C_4H_{10}$  (компонента 2), 20 % *iso* –  $C_5H_{10}$  (компонента 3) и 30 % *n* –  $C_5H_{10}$  (компонента 4). Дестилатот на врвот на колоната треба да го содржи целиот пропан, 80 % од *iso* –  $C_5H_{10}$  и 40 %

## Стефан Кувенциев Анализа и синтеза на процеси

---

*iso* –  $C_4H_{10}$ , додека во остатокот на дното е целиот *n* –  $C_5H_{10}$ . Да се изведе анализа на проблемот врз база на претходно дефиниран материјален биланс.

### Решение:

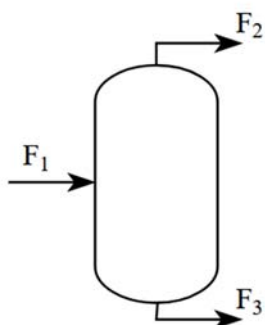
Специфицираниот проблем се состои од дестилациони колона и три струи – напој, дестилат и остаток и 4 компоненти (вкупно 12 променливи).

$F_1$  – влез (напојна струја) во колоната ( $1000 \text{ kmol/h}$ );

$F_2$  – излез (дестилат) на врвот на колоната;

$F_3$  – излез (остаток) на дно во колоната;

$x_{i,j}$  – молски удел на компонентата  $j$  во струјата  $i$ .



Дестилациона колона од пример 1.1

Општиот материјален биланс на разгледуваниот пример е следен:

$$F_1 = F_2 + F_3$$

Компонентните материјални биланси, за секоја од компонентите, се дадени со:

$C_3H_8$  (компонента 1):  $0,2 \cdot F_1 = x_{2,1} \cdot F_2$

*iso* –  $C_4H_{10}$  (компонента 2):  $0,3 \cdot F_1 = 0,4 \cdot F_2 + F_3 \cdot x_{3,2}$

## 1. Основи на анализа и синтеза на процеси

$iso - C_5H_{10}$  (компонента 3):  $0,2 \cdot F_1 = F_2(1 - 0,4 - x_{2,1}) + F_3(1 - x_{3,2} - x_{3,4})$

$n - C_5H_{10}$  (компонента 4):  $0,3 \cdot F_1 = F_3 \cdot x_{3,4}$

Едната од овие равенки може да се изостави, бидејќи со нивниот збир се добива равенката на општиот материјален биланс. Затоа и таа најчесто и се изоставува, па така бројот на независни билансни равенки е еднаков на бројот на присутните компоненти.

На крај е дадена и една помошна релација и еден специфициран проток:

- 80 % од  $iso - C_5H_{10}$  оди во дестилатот, односно:  $0,8(0,2 \cdot F_1) = F_2(1 - 0,4 - x_{2,1})$

-  $F_1 = 1000 \text{ kmol/h}$ .

Во согласност со поставените материјални биланси, бројот на степени на слобода е:

Број на променливи	12
Број на независни равенки	-4
Број на специфицирани струи	
Состави	-6
Протоци	-1
Број на помошни релации	-1
<b>Степени на слобода</b>	<b>0</b>

Значи, проблемот е соодветно специфициран и за него може да се добие едно решение.

При броењето на променливите и спецификациите на учесниците кои не се присутни во струите може да дојде до грешки. На пример, во разгледуваниот систем може да се објасни отсуството на пентан во дестилатот и пропан во остатокот, со едноставно собирање на само 3 променливи во секоја од овие струи. Така, проблемот ќе има 10 променливи. Меѓутоа, во овој случај бројот на специфицираните

## Стефан Кувенциев Анализа и синтеза на процеси

---

состави ќе се редуцира за 2 ( $x_{2,4} = 0$  и  $x_{3,1} = 0$ ). Резултатот за степенот на слобода ќе биде ист:

Број на променливи	10
Број на независни равенки	-4
Број на специфицирани струи	
Состави	-4
Протоци	-1
Број на помошни релации	-1
<b>Степени на слобода</b>	<b>0</b>

Конечното решение во насока на дефинирање на составот и протоците на струите во процесот е следно:

$$F_2 = 600 \text{ kmol/h}$$

$$F_3 = 400 \text{ kmol/h}$$

$$x_{2,1} = 0,333$$

$$x_{3,2} = 0,15$$

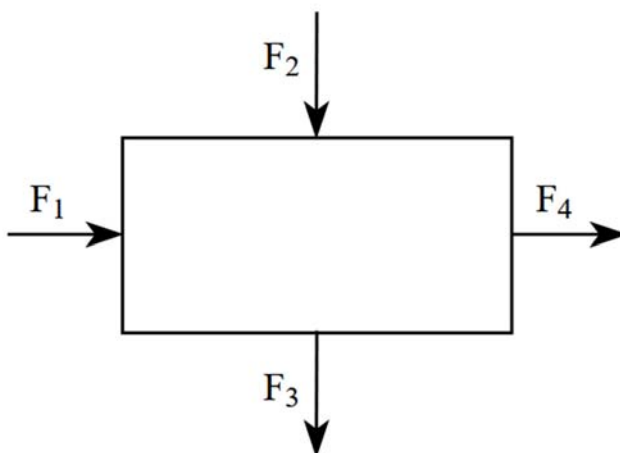
$$x_{3,4} = 0,75$$

### Задача 1.2

Титан диоксид  $TiO_2$  е бел пигмент кој се произведува во големи количини и се користи во индустријата за бои и хартија. Потребно е да се направи постројка кое ќе произведува  $4000 \text{ kg/h}$  сув  $TiO_2$ . Во протокот од солен воден раствор суспендираниот  $TiO_2$  се води на прочистување со миеење со чиста вода. Крајниот продукт треба да содржи помалку од  $100 \text{ ppm}$  сол на сува база. Солта се извлекува со миеење на преципитатот со вода. Ако суровината содржи  $40\%$   $TiO_2$ ,  $20\%$  сол, а остатокот вода (сите во тежински %) и ако измиениот пигмент по таложењето содржи  $50\%$   $TiO_2$ , да се дефинира составот на отпадната вода. Одговорот на ова прашање е од големо значење ако оваа солена вода се исфрла во локалниот водотек.

### Решение:

Основниот блок-дијаграм на процесот од пример 1.2 е даден на следната слика.



Основен приказ на системот од пример 1.2

Кај специфицираниот систем, бројот на променливи е 9:

Суровина	3
Вода за промивање	1
Измиен пигмент	3
Отпадна вода	2
Вкупно	9

Бројот на одделните компоненти во системот е 3:  $TiO_2$ , сол и вода. Бројот на специфицирани состави е три: два во суровината (за  $TiO_2$  и солта) и еден во измиениот продукт ( $TiO_2$ ). На крај, е даден и протокот во однос на сувата база од  $4000 \text{ kg/h}$ , како база за пресметка. Втората релација е дека сувата база од продуктот треба да содржи не повеќе од 100 ррт сол. Така бројот на помошните релации е 2. Сега може да се определи бројот на степени на слобода:

## Стефан Кувенциев Анализа и синтеза на процеси

---

Број на променливи	9
Број на независни равенки	-3
Број на специфицирани состави	-3
Број на помошни релации	-2
<b>Степени на слобода</b>	<b>1</b>

Анализата на вака поставениот проблем укажува на недоволна специфицираност на системот, односно проблемот е недоволно специфициран.

Билансните равенки се дадени со:

$$F_1 + F_2 = F_3 + F_4$$

$$TiO_2: \quad 0,4 \cdot F_1 = 0,5 \cdot F_3$$

$$\text{сол:} \quad 0,2 \cdot F_1 = g_{3,2} \cdot F_3 + g_{4,2} \cdot F_4$$

Дополнителна релација е зависноста која ја дефинира содржината на сол во промиениот пигмент на помалку од 100 ppm:

$$\frac{g_{3,2} F_3}{(0,5 + g_{3,2}) F_3} = \frac{100}{10^6}$$

$$g_{3,2} = 5,0005 \cdot 10^{-5}$$

Од условот на задачата, протокот на продуктот е 4000 kg/h и уделот на  $TiO_2$  (50 %) се дефинирани и оттука:

$$F_3(0,5 + g_{3,2}) = 4000 \text{ kg/h}$$

$$F_3 = 7999,2 \text{ kg/h}$$

Со замена во билансот за  $TiO_2$ :

$$F_1 = 9999 \text{ kg/h}$$

## 1. Основи на анализа и синтеза на процеси

Од билансот на солта и вкупниот биланс, имаме 2 равенства со 3 непознати ( $F_2$ ,  $F_4$  и  $g_{4,2}$ ):

$$0,2 \cdot 9999 = 5,0005 \cdot 10^{-5} \cdot 7999,2 + g_{4,2} \cdot F_4$$

$$9999 + F_2 = 7999,2 + F_4$$

Претставениот систем на равенки сугерира дека анализираниот проблем е недоволно специфициран и недостасува вредноста на една променлива, како што може да се заклучи и од иницијалната пресметка на степените на слобода. Во таа насока, потребно е искусвена инженерска претпоставка за една од проектните променливи, а врз база на економската логика на предложениот дизајн.

Доколку се претпостави дека оптималната потрошувачка на вода за промивање е 6 kg/h вода на 1 kg/h напој, што е вредност која може и експериментално да се верификува, тогаш имаме уште една дополнителна помошна релација и бројот на степени на слобода се сведува на 0, со што проблемот е соодветно специфициран и има само едно решение:

$$\frac{F_2}{F_1} = 6$$

$$F_1 = 59994 \text{ kg/h}$$

$$F_4 = 61993,8 \text{ kg/h}$$

$$g_{4,2} = 0,0323$$

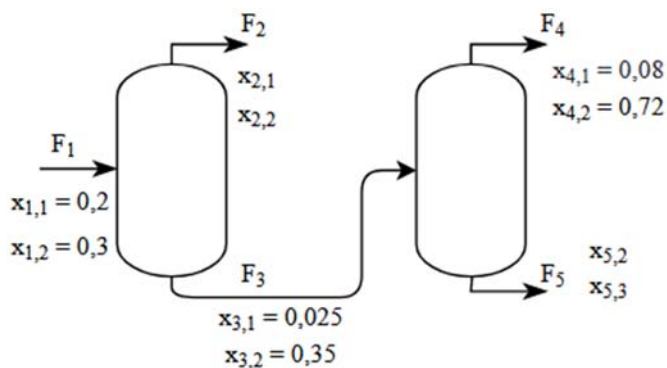
Токму овој пример на билансен проблем укажува на потребата од интегрален и искусвен пристап при дефинирањето и дизајнирањето на хемиско-инженерскиот дизајн на еден процес, особено доколку се земе предвид можноста за експериментална верификација на дополнително специфицираните дизајн варијабли. Често проблемите кои ги разгледуваме при синтезата на процеси се недоволно специфицирани и ваквиот пристап е неопходен.

### Задача 1.3

Сепарациски систем, претставен на сликата, е димензиониран за сепарација на трикомпонентна смеса од бензен, толуен и ксилен. Напојот во

## Стефан Кувенциев Анализа и синтеза на процеси

првата колона е со молски проток од 1000 kmol/h, со следниот состав: 20 % бензен, 30 % толуен и остаток ксилен. Остатокот на првата колона содржи 2,5 % бензен и 35 % толуен, а дестилатот на втората колона содржи 8 % бензен и 72 % толуен. Дестилатот на првата колона содржи само бензен и толуен, а остатокот од втората – само толуен и ксилен. Да се дефинира бројот на степени на слобода на секоја од единиците и на целиот систем, како и целосно да се специфицира билансниот проблем.



Сепарациски систем од пример 1.3

### Решение:

Анализата на бројот на степени на слобода за секоја од колоните, како и за целиот систем, е дадена табеларно:

	Колона 1	Колона 2	Процес
Број на променливи	8	8	13
Број на независни биланси	3	3	6
Број на специфицирани променливи			
Состави	4	4	6
Протоци	1	0	1
Број на помошни релации	0	0	0
<b>Степени на слобода</b>	<b>0</b>	<b>1</b>	<b>0</b>



## 1. Основи на анализа и синтеза на процеси

Прелиминарната анализа го потенцира фактот дека сумата на билансни равенки на секоја од колоните ја дава конечната бројка на билансни равенки за процесот, што не е случај кај бројот на компонентите поради тоа што составите на струјата 3 се претставени и во билансот на првата и на втората колона.

Материјалниот биланс е дефиниран со:

### Колона 1:

$$F_1 = 1000 \text{ kmol/h}$$

$$\text{Бензен: } 0,2 \cdot F_1 = x_{2,1}F_2 + 0,025 \cdot F_3$$

$$\text{Толуен: } 0,3 \cdot F_1 = x_{2,2}F_2 + 0,35 \cdot F_3$$

$$\text{Ксилен: } 0,5 \cdot F_1 = 0,625 \cdot F_3$$

### Колона 2:

$$\text{Бензен: } 0,025 \cdot F_3 = 0,08 \cdot F_4$$

$$\text{Толуен: } 0,35 \cdot F_3 = 0,72 \cdot F_4 + x_{5,2}F_5$$

$$\text{Ксилен: } 0,625 \cdot F_3 = 0,2 \cdot F_4 + (1 - x_{5,2})F_5$$

### За колона 1:

$$\text{Од билансот за ксилен: } F_3 = 800 \text{ kmol/h}$$

$$\text{Од билансот за толуен: } 0,3 \cdot 1000 = (1 - x_{2,1})F_2 + 0,35 \cdot 800$$

$$\text{Од билансот за бензен: } 0,2 \cdot 1000 = x_{2,1}F_2 + 0,025 \cdot 800 \text{ или } x_{2,1} = \frac{180}{F_2}$$

Симултаното решавање на билансите на толуен и бензен ни ги дава преостанатите 2 варијабли:

$$F_2 = 200 \text{ kmol/h}$$

$$x_{2,1} = 0,9$$

За колона 2:

$$0,025 \cdot 800 = 0,08 \cdot F_4$$

$$F_4 = 250 \text{ kmol/h}$$

$$F_5 = 550 \text{ kmol/h}$$

### 1.3.3 Билансни проблеми кај системи со хемиска реакција

Кај системите со хемиска реакција доаѓа до хемиски трансформации на појдовните компоненти (реактанти) во системот, а таквата појава, во согласност со неприкосновеноста на законот за одржување на масата, нужно предвидува воведување нов член во изразите за билансите на секоја од компонентите. Некои од компонентите ќе се трошат со самата реакција, додека други ќе се генерираат, а појдовен облик за дефинирање на брзината на генерирање на одредена компонента (негативна ако се работи за реактант или позитивна ако се работи за продукт), во стационарни услови (без акумулација со време) е:

$$R_i = F_{i,\text{ИЗЛЕЗ}} - F_{i,\text{ВЛЕЗ}}$$

Брзина на реакција, како израз подготвен за воведување во дизајн равенка на реактор:

$$r_i = \frac{R_i}{\sigma_i}$$

каде:  $\sigma_i$  – стехиометриски коефициент на учесникот  $i$ .

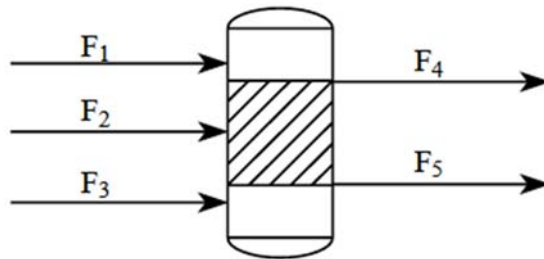
Основен дизајн параметар кај реакторските системи е степенот на конверзија на лимитирачкиот реактант:

$$X_i = \frac{F_{i,\text{ВЛЕЗ}} - F_{i,\text{ИЗЛЕЗ}}}{F_{i,\text{ВЛЕЗ}}}$$

Оваа зависност се користи како помошна релација во дефинирањето на билансни проблеми со хемиска реакција.

**Задача 1.4**

Стехиометриска смеса на  $N_2$  и  $H_2$  (25 % – 75 %) за синтеза на  $NH_3$  се добива со мешање гас со состав (mol %): 78 %  $N_2$ , 20 %  $CO$  и остаток  $CO_2$  со воден гас со состав 50 %  $H_2$  и остаток  $CO$ .  $CO$  е катализаторски отров во процесот за синтеза на  $NH_3$ , поради што е неопходна негова елиминација. Тоа се постигнува со негова оксидација до  $CO_2$  со водена пара:  $CO + H_2O = CO_2 + H_2$ . Добиениот  $CO_2$  потоа се отстранува од системот со апсорпција. Под претпоставка дека процесот се одвива во вишок пара и до целосна конверзија на  $CO$ , да се пресмета односот во кој треба да се мешаат двата гаса.



Основен дијаграм на процесот од пример 1.4

**Решение:**

Системот се состои од 5 струи и 5 компоненти:

$F_1$ : 78 %  $N_2$ , 20 %  $CO$ ,  $CO_2$

$F_2$ : 50 %  $H_2$ ,  $CO$

$F_3$ :  $H_2O$

$F_4$ :  $CO_2$

$F_5$ : 75 %  $H_2$ ,  $N_2$

$N_2$ :  $x_{1,1} = 0,78$ ,  $x_{5,1} = 0,25$

$CO$ :  $x_{1,2} = 0,2$ ,  $x_{2,2} = 0,5$

$H_2O$ :  $x_{3,3}$

## Стефан Кувенциев Анализа и синтеза на процеси

---

$$CO_2: x_{1,4} = 0,02, x_{4,4}$$

$$H_2: x_{2,5} = 0,5, x_{5,5} = 0,75$$

Разгледуваниот систем содржи 9 променливи во 5 струи и дополнително – израз за брзина на реакција. Од присутните 5 компоненти, 4 се учесници во реакцијата, а 1 е инертен гас. Во согласност со прелиминарните согледувања, бројот на степени на слобода е даден табеларно:

Број на променливи	9+1
Број на независни биланси	5
Број на специфицирани променливи	
Состави	4
Протоци	0
Број на помошни релации	0
<b>Степени на слобода</b>	<b>1</b>

Според прикажаното, системот е недоволно специфициран, но ваквиот проблем лесно се надминува со избор на соодветна база на пресметка. Во конкретниот случај, ја земаме струја 1, односно  $F_1 = 100 \text{ kmol/h}$ . Со тоа, добиваме еден дефиниран проток, па новата анализа на степените на слобода дава:

Број на променливи	9+1
Број на независни биланси	5
Број на специфицирани променливи	
Состави	4
<b>Протоци</b>	<b>1</b>
Број на помошни релации	0
<b>Степени на слобода</b>	<b>0</b>

Со избраната база на пресметки, може да се дефинира протокот на струјата  $F_5$ , од билансот за  $N_2$ , а последователно и останатите параметри на материјалниот биланс.

$$N_2: 0,25 \cdot F_5 = 0,78 \cdot F_5$$

$$CO: 0,2 \cdot F_1 + 0,5 \cdot F_2 - r = 0$$

$$H_2O: F_3 - r = 0$$

$$CO_2: 0,02 \cdot F_1 + r = F_4$$

$$H_2: 0,5 \cdot F_2 + r = 0,75 \cdot F_5$$

$$F_5 = 312 \text{ kmol/h}$$

$$F_2 = 214 \text{ kmol/h}$$

$$F_3 = 127 \text{ kmol/h}$$

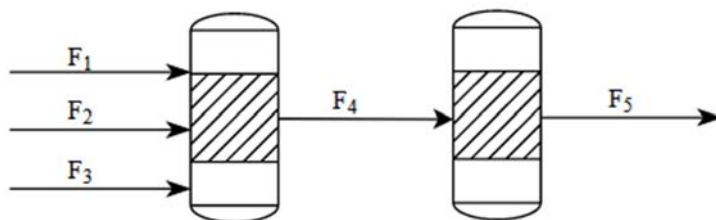
$$r = 127 \text{ kmol/h}$$

$$F_4 = 129 \text{ kmol/h}$$

$$\frac{F_2}{F_1} = 2,14$$

### Задача 1.5

Со оглед на фактот што во претходниот пример од особено значење е постигнување комплетна конверзија на  $CO$ , кој е каталитички отров во дефинираниот затворен систем, реакцијата се поставува во два одвоени реактори со различни типови на катализатори. Во првиот, каде се одвива поголемиот дел од конверзијата, се содржи поекономичен катализатор, додека во вториот е искористен поскап катализатор, и во овој реактор се довршува комплетната конверзија на преостанатиот  $CO$ . Во процесот, претставен на слика подолу, смесата од двата гаса како во претходниот пример реагира со пареата за да се произведе продукт кој содржи  $N_2:H_2 = 1:3$ . Ако протокот на пареата што се додава во реакторот е двапати поголем во однос на сувиот гас и ако 80 % од конверзијата се одвива во првиот реактор, да се пресмета составот на средната струја.



Шема на реакторскиот систем од пример 1.5

**Решение:**

При определување на степенот на слобода за системот, се забележува дека и двата реактора ја вклучуваат реакцијата. Така, секој од нив ќе ја има променливата  $r$ , т.е. брзината на реакцијата, односно влезниот процес мора во себе да ги вклучи овие две променливи. Меѓутоа, при разгледувањето на вкупниот биланс, овој систем се разгледува како еден реактор во кој се одвива оваа реакција. Така, при правењето на вкупниот биланс ќе има само една брзина на реакција.

	Колона 1	Колона 2	Процес	Вкупен биланс
Број на променливи	11+1	9+1	15+2	10+1
Број на независни биланси	-5	-5	-10	-5
Број на специфицирани променливи				
Состави	-3	-	-3	-3
Број на релации				
Вишок пара ( $H_2O$ )	-1	-	-1	-1
Конверзија	-1	-	-1	-
$N_2:H_2$	-	-1	-1	-1
<b>Степени на слобода</b>	<b>2</b>	<b>4</b>	<b>1</b>	<b>1</b>
<b>БАЗА</b>	<b>-1</b>		<b>-1</b>	<b>-1</b>
	<b>1</b>		<b>0</b>	<b>0</b>

## 1. Основи на анализа и синтеза на процеси

База за пресметка е  $F_1 = 100 \text{ kmol/h}$ .

Вкупниот биланс на анализираниот систем е следен:

$F_1$ : 78 %  $N_2$ , 20 %  $CO$ ,  $CO_2$

$F_2$ : 50 %  $H_2$ ,  $CO$

$F_3$ :  $H_2O$

$F_4$ :  $N_2$ ,  $H_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$

$F_5$ :  $H_2$ ,  $N_2$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$

$$N_2: \quad x_{1,1} \cdot F_1 = x_{5,1} \cdot F_5$$

$$CO: \quad x_{1,2} \cdot F_1 + x_{2,2} \cdot F_2 - r = 0$$

$$H_2O: \quad F_3 - r = x_{5,3} \cdot F_5$$

$$CO_2: \quad x_{1,4} \cdot F_1 + r = x_{5,4} \cdot F_5$$

$$H_2: \quad x_{2,5} \cdot F_2 + r = x_{5,5} \cdot F_5$$

Со замена на почетните услови и поставените вредности за составите на струите:

$$x_{5,1} \cdot F_5 = 0,78 \cdot 100$$

$$0,2 \cdot 100 + 0,5 \cdot F_2 - r = 0$$

$$F_3 - r = x_{5,3} \cdot F_5$$

$$0,02 \cdot 100 + r = x_{5,4} \cdot F_5$$

$$0,5 \cdot F_2 + r = x_{5,5} \cdot F_5$$

Имајќи го предвид почетниот услов за соодносот  $H_2:N_2 = 3:1$ , следува:

$$x_{5,5} \cdot F_5 = 3 \cdot x_{5,1} \cdot F_5$$

## Стефан Кувенциев Анализа и синтеза на процеси

---

$$x_{5,5} \cdot F_5 = 3 \cdot 78 = 234 \text{ kmol/h}$$

$$F_3 = 2(F_1 + F_2)$$

$$r = 20 + 0,5 \cdot F_2$$

$$x_{5,5} \cdot F_5 = 0,5 \cdot F_2 + (20 + 0,5 \cdot F_2), \text{ односно } x_{5,5} \cdot F_5 = F_2 + 20$$

$$F_2 = 214 \text{ kmol/h}$$

$$r = 127 \text{ kmol/h}$$

$$F_3 = 628 \text{ kmol/h}$$

Од билансот за  $CO_2$ :

$$x_{5,4} \cdot F_5 = 0,02 \cdot 100 + 127, \text{ од каде следува: } x_{5,4} \cdot F_5 = 120 \text{ kmol/h}$$

Од билансот за  $H_2O$ :

$$x_{5,3} \cdot F_5 = 628 - 127 = 501 \text{ kmol/h}$$

Дефинирањето на вкупниот биланс ни овозможува понатамошно дефинирање на непознатата струја 4, помеѓу двата реактори. Билансите на поединечните реактори во реакторскиот систем се специфицираат консеквентно. Почетната анализа на бројот на степени на слобода кај реакторот 1 е 2, па доколку се познати 2 од вкупно 3 влезни протоци во реакторот, билансот на овој реактор ќе биде целосно дефиниран. Понатаму, почетниот број на степени на слобода кај реакторот 2 е 4. Оттука, ако дефинираме три променливи (состав на 3 компоненти во струја 5), а четвртата променлива е дефинирана со соодносот  $H_2:N_2$ , и една дополнителна променлива од струјата 4, тогаш целосно ќе го дефинираме и билансот на реакторот 2. Со оглед на тоа што со вкупниот биланс се определени протоците на струите 1, 2, 3 и 5, како и составот на струјата 5, степенот на слобода на реакторот 2 е сведен на 1, додека степенот на слобода кај првиот реактор е 0. Затоа, пресметките на билансниот проблем продолжуваат со биланс на реакторот 1.

Брзината на реакција е дадена со:

$$r_1 = \frac{X_{CO}(x_{1,2}F_1 + x_{2,2}F_2)}{\sigma_2} = \frac{0,8(0,2 \cdot 100 + 0,5 \cdot 214)}{1}$$



$$r_1 = 101,6 \text{ kmol/h}$$

Протоците на секоја од компонентите во струја 4 може да се пресметаат:

$$N_2: \quad 0,78 \cdot 100 = 78 \text{ kmol/h}$$

$$CO: \quad 127 - r_1 = 25,4 \text{ kmol/h}$$

$$H_2O: \quad 628 - 101,6 = 526,4 \text{ kmol/h}$$

$$CO_2: \quad 2 + r_1 = 103,6 \text{ kmol/h}$$

$$H_2: \quad 107 + r_1 = 208,6 \text{ kmol/h}$$

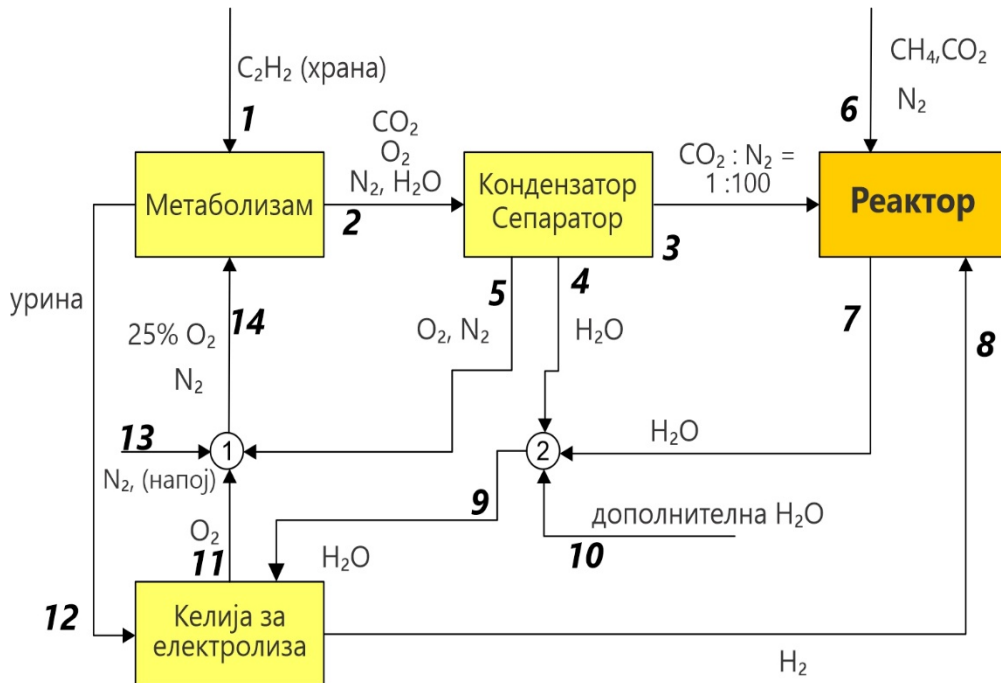
Составот на струјата 4 е соодветно дефиниран (со истиот редослед на компоненти):

$$x_{4,1} = 0,083 ; x_{4,2} = 0,027 ; x_{4,3} = 0,559 ; x_{4,4} = 0,11 \text{ и } x_{4,5} = 0,221$$

### Задача 1.6

При проектирањето на опремата на вселенските летови, значајно внимание треба да се посвети на доводот на вода, воздух и храна, како и отстранувањето на телесниот отпад и респираторните гасови. Кога се работи за кратки мисии, потребите и отпадот може да се складираат, меѓутоа за долги мисии рецикулацијата на отпадните продукти станува важна цел за да ги минимизира потребите од големи резерви. Најважен рецикулационен систем е системот за враќање на респираторниот  $CO_2$ , репроцесирање на  $O_2$ , како и враќање и повторна употреба на водата од дишењето и урината. Ваквиот комплексен систем со повеќе единици (види слика подолу) е соодветен пример за сукцесивното решавање проблеми со серија на меѓусебно зависни и функционални единици.

Храната која е претставена како  $C_2H_2$ , бидејќи односот на C/H во просечната диета е околу 1, се метаболизира до  $CO_2$  и  $H_2O$ , со трошење на неопходен  $O_2$  од атмосферата во кабината.  $O_2$  и  $H_2$  се добиваат по електролитички пат од водата. Кислородот се враќа за користење во метаболизмот на храната, додека  $H_2$  се употребува за редукција на  $CO_2$  до  $CH_4$  и  $H_2O$ . Редукцијата на  $CO_2$  е позната како Себатие (*Sebatier*) реакција и може да се одвива во цевен реактор на *Ru* катализатор.

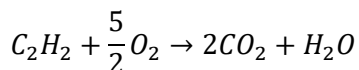


Проточен дијаграм на примерот 1.6

Продуктите на реакцијата можат лесно да се одвојат така што водата ќе рециркулира во ќелијата за електролиза, додека  $CH_4$  се исфрла во просторот. Најглавно прашање при развојот на билансот на разгледуваниот систем е при претпоставка дека сите реакции се одвиваат до крај и сепарирањето е целосно, кои хемиски компоненти ( $O_2$ ,  $H_2$  или  $H_2O$ ) мора да бидат складирани за да се одржи системот. Второто прашање е колку од овие компоненти треба да се обезбедат на единица храна ( $C_2H_2$ ) за да се одвиваат непречено биохемиските процеси на метаболизмот.

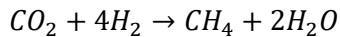
Во овој процес на рецикулација на  $CO_2$  и  $H_2O$  од дишењето и урината за повторна употреба се одвиваат неколку реакции:

### Метаболизирање храна:



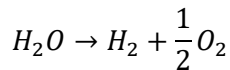
Продуктите од дишење се одделуваат со кондензација на  $H_2O$ , а остатокот на гасот, кој содржи  $N_2:CO_2 = 1:100$ , реагира за добивање  $H_2O$ .

**Реакција на Себатие:**



Притоа, кондензираната вода се враќа во ќелијата за електролиза за добивање  $O_2$  и  $H_2$ :

**Електролиза:**



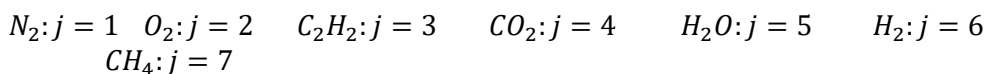
За да се воспостават атмосферски услови во кабината, неопходната количина на азот се меша со кислород со цел да се добие напоен воздух со содржина на  $O_2$  од 25 %. Бидејќи постојат одредени загуби на  $N_2$  во издувниот гас, неопходно е негово надополнување со свежи количини. Како основа се зема потрошувачка од  $7,5 \text{ mol } O_2/1 \text{ mol } C_2H_2$  и 10 % од произведената вода со оксидација на храната се извлекува со урината, да се дефинираат сите протоци и состави на струите во системот базиран на  $1 \text{ mol } C_2H_2$  на ден.

**Решение:**

Проточниот дијаграм на анализираниот процес содржи 3 реактори, во кои се одвиваат независни реакции. Билансите на секој од реакторите предвидуваат дефинирање брзина на реакција како варијабла при пресметка на степените на слобода на целиот процес.

Врз основа на поставената база  $1 \text{ mol } C_2H_2/\text{ден}$ , потребното количество на  $O_2$  е  $7,5 \text{ mol } O_2/\text{ден}$ , а вкупната количина на воздух во кабината е  $\frac{7,5}{0,25} = 30 \text{ mol}/\text{ден}$ .

Системот има 14 струи, а обележувањ/ето на компонентите на системот е следно:



Анализата на степените на слобода е дадена табеларно:

## Стефан Кувенџиев Анализа и синтеза на процеси

	Метаболизам	Кондензатор	Електролиза	Себатије реактор	Миксер 1	Миксер 2	Процес
Број на променливи	8+1	9	4+1	7+1	6	4	22+3
Број на биланси	-5	-4	-3	-5	-2	-1	-20
Број на специфицирани променливи							
Состави	-1	-	-	-	-1	-	-1
Број на релации							
( $H_2: CO_2$ )	-	-1	-	-1	-	-	-1
( $O_2: C_2H_2$ )	-1	-	-	-	-	-	-1
$H_2O$ , делење	-1	-	-	-	-	-	-1
<b>Степени на слобода</b>	1	4	2	2	3	3	1
<b>БАЗА</b>	-1						-1
	0						0

Може да се состават следните билансни равенки базирани на упростената реакција на метаболизам, од каде започнува решавањето на овој пример:

$$N_2: \quad x_{14,1} \cdot F_{14} = F_{2,1} = 22,5 \text{ mol/ден}$$

$$O_2: \quad x_{2,2} \cdot F_2 = F_{2,2} = 7,5 - \frac{5}{2}r_1$$

$$C_2H_2: \quad x_{2,3} \cdot F_2 = 0 = 1 - r_1$$

$$CO_2: \quad x_{2,4} \cdot F_2 = F_{2,4} = 0 + 2 \cdot r_1$$

$$H_2O: \quad x_{2,5} \cdot F_5 + x_{12,5} \cdot F_{12} = F_{2,5} + F_{12,5} = 0 + r_1$$

$$r_1 = 1 \text{ mol/ден}$$

$$F_{2,2} = 5 \text{ mol } O_2/\text{ден}$$

## 1. Основи на анализа и синтеза на процеси

$$F_{2,4} = 2 \text{ mol } CO_2/\text{ден}$$

Во согласност со почетниот услов дека 10 % од водата произведена со оксидација на храната оди во урина:

$$0,1 \cdot (F_{2,5} + F_{12,5}) = F_{12,5}$$

$$0,1 \cdot 1 = F_{12,5}$$

$$F_{2,5} = 0,9 \text{ mol}/\text{ден}$$

Струјата 2 ги содржи следните компоненти:

$$(F_{2,CO_2}, F_{2,O_2}, F_{2,N_2}, F_{2,H_2O}) = (2; 5; 2,25; 0,9)$$

Со комплетирање на билансот на реакцијата на метаболизмот, определена е и струјата 12, а со овој влезен проток во ќелијата за електролиза, степенот на слобода се редуцира на 1. На сличен начин, бидејќи е определен и протокот 14, степенот на слобода на миксерот 1 ќе се редуцира за 1 и ќе изнесува 2. На крај, бидејќи и сите протоци и количини на струјата 2 се определени, значи се добиваат 4 нови специфицирани состави, со што степенот на слобода на кондензаторот/сепараторот се редуцира на 0. Ова покажува дека решавањето на билансот на кондензатор/сепараторот треба да биде следен чекор.

	Метаболизам	Кондензатор	Електролиза	Себатие реактор	Миксер 1	Миксер 2
Почетен степен на слобода	0	<b>4</b>	2	2	3	3
По биланс на метаболизам	-	<b>-4</b>	-1	-	-1	-
		<b>0</b>	1	2	2	3

$$N_2: \quad x_{2,1} \cdot F_2 = x_{3,1} \cdot F_3 + x_{5,1} \cdot F_5, \text{ ОДНОСНО } F_{2,1} = F_{3,1} + F_{5,1}$$

$$O_2: \quad x_{2,2} \cdot F_2 = x_{5,2} \cdot F_5, \text{ ОДНОСНО } F_{2,2} = F_{5,2}$$

## Стефан Кувенциев Анализа и синтеза на процеси

$$CO_2: \quad x_{2,4} \cdot F_2 = x_{3,4} \cdot F_3, \text{ ОДНОСНО } F_{2,4} = F_{3,4}$$

$$H_2O: \quad x_{2,5} \cdot F_2 = x_{4,5} \cdot F_4, \text{ ОДНОСНО } F_{2,5} = F_{4,5}$$

$$22,5 \text{ mol/ден} = F_{3,1} + F_{5,1}$$

$$F_{5,2} = 5 \text{ mol/ден}$$

$$F_{3,4} = 2 \text{ mol/ден}$$

$$F_{4,5} = 0,9 \text{ mol/ден}$$

Од соодносот  $N_2:CO_2 = 1:100$  и  $F_{3,4} = 2 \text{ mol/ден}$ , следува  $F_{3,1} = 0,02 \text{ mol/ден}$  и со замена се наоѓа и  $F_{5,1} = 22,48 \text{ mol/ден}$ .

Со тоа целосно е дефинирана струјата 3:  $(F_{3,4}, F_{3,1}) = (2; 0,02)$ .

Внесувањето на новите информации во билансниот проблем резултира со редуцирање на бројот на степени на слобода кај Себатие реакторот на 1. Притоа, протокот на струја 4 е познат, а степенот на слобода кај миксерот 2 е 2, но степенот на слобода кај миксерот 1 е 0, бидејќи 2 компоненти од струјата 5 се веќе дефинирани. Токму затоа, следниот биланс е билансот на миксерот 1.

	Метаболизам	Кондензатор	Електролиза	Себатие реактор	Миксер 1	Миксер 2
Почетен степен на слобода	0	4	2	2	<b>3</b>	3
По биланс на метаболизам	-	-4	-1	-	<b>-1</b>	-
		0	1	2	<b>2</b>	3
По биланс на кондензатор				-1	<b>-2</b>	-1
Степен на слобода				1	<b>0</b>	2

$$N_2: \quad F_{13,1} + F_{2,1} = F_{14,1}, \text{ ОДНОСНО } F_{13,1} + 22,48 = 22,5$$

$$O_2: \quad F_{11,2} + F_{5,2} = F_{14,2}, \text{ ОДНОСНО } F_{11,2} + 5 = 7,5$$

## 1. Основи на анализа и синтеза на процеси

$$F_{13,1} = 0,02 \text{ mol/ден}$$

$$F_{11,2} = 2,5 \text{ mol/ден}$$

Со дефинирањето на протокот на струја 11 и струја 12, степенот на слобода кај ќелијата за електролиза е 0, со што оваа единица е следна во sukcesивната пресметка на билансниот проблем. Во ќелијата се одвива една реакција:  $H_2O \rightarrow H_2 + \frac{1}{2}O_2$ . Билансите за вода, водород и кислород се:

$$H_2O: \quad F_{9,5} + F_{12,5} - r_3 = 0$$

$$H_2: \quad F_{8,6} = r_3$$

$$O_2: \quad F_{11,2} = \frac{1}{2}r_3$$

$$H_2O: \quad F_{9,5} + 0,1 - r_3 = 0$$

$$H_2: \quad F_{8,6} = r_3$$

$$O_2: \quad 2,5 = \frac{1}{2}r_3$$

$$r_3 = 5 \text{ mol/ден}$$

$$F_{8,6} = 5 \text{ mol/ден}$$

$$F_{9,5} = 4,9 \text{ mol/ден}$$

Така степенот на слобода на мешачот 2 се редуцира на само 1, дури откако се познати 9 струи, а, пак, степенот на слобода на Себатие реакторот се редуцира на 0, па следува дека неговиот материјален биланс е следен за пресметување. Во реакторот се одвива реакцијата 2:  $CO_2 + 4H_2 \rightarrow CH_4 + 2H_2O$ .

Во прилог следува соодветна формулација на компонентните материјални биланси за реакторот.

$$CO_2: \quad F_{6,4} = F_{3,4} - r_2$$

$$H_2: \quad F_{8,6} - 4 \cdot r_2 = 0$$

$$CH_4: F_{6,7} = 0 + r_2$$

$$H_2O: F_{7,5} = 0 + 2 \cdot r_2$$

$$N_2: F_{6,1} = F_{3,1}$$

$$CO_2: F_{6,4} = 2 - r_2$$

$$H_2: 5 - 4 \cdot r_2 = 0$$

$$CH_4: F_{6,7} = r_2$$

$$H_2O: F_{7,5} = 2 \cdot r_2$$

$$N_2: F_{6,1} = 0,02 \text{ mol/ден}$$

Со сукцесивно решавање на поставените биланси ги дефинираме сите променливи:

$$r_2 = 1,25 \text{ mol/ден}$$

$$F_{6,7} = 1,25 \text{ mol/ден}$$

$$F_{7,5} = 2,5 \text{ mol/ден}$$

$$F_{6,4} = 0,75 \text{ mol/ден}$$

$$F_{6,1} = 0,02 \text{ mol/ден}$$

Од пресметките на билансите кај миксерот 2, се добива количината на вода во струја 10.

$$F_{10,5} + F_{7,5} + F_{4,5} = F_{9,5}$$

$$F_{10,5} = 1,5 \text{ mol/ден.}$$



## **1. Основи на анализа и синтеза на процеси**

---

Конечниот одговор на поставените прашања во врска со анализираниот систем е дека за метаболизирање на  $1 \text{ mol } C_2H_2/\text{ден}$  е потребно да се произведе  $1,5 \text{ mol } H_2O/\text{ден}$  и да се складираат  $0,02 \text{ mol } N_2/\text{ден}$ .

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

---

### Содржина:

1. Основни аспекти
2. Шаржен наспроти континуиран режим на работа
3. Влезно-излезна структура
4. Рециклирачка структура на проточен дијаграм – ниво 3
5. Задачи

### 2.1 Основни аспекти

Успешната синтеза на проточен дијаграм за еден технолошки процес во својата основа го претставува концептуалниот дизајн на студираниот хемиски процес на производство на бараниот продукт, кој се реализира низ серија на круцијални одлуки кои ги опфаќаат сите аспекти на разгледуваниот систем. Примарна одлука која се однесува на синтезата на проточен дијаграм е водењето на процесот од аспект на дизајн на соодветен реакторски систем за дадена производност на конечен продукт, односно дали производството би се изведувало во шаржен или континуиран режим.

Одлуката во насока на избор на соодветен режим на работа се базира на иницијалните информации, достапни во почетна фаза на дизајн:

1. Хемизам на реакција и работни услови;
2. Посакуван производствен капацитет;
3. Посакувана чистота на продукт;
4. Информации за продукт во корелација со степенот на чистота;
5. Кинетика на хемиска реакција и механизам (на пр., степен на регенерација на катализаторот);

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

6. Процесни ограничувања;
7. Податоци за постројка и локација;
8. Физичко-хемиски карактеристики на сите компоненти;
9. Токсичност, влијание на животна средина и
10. Комерцијални вредности на сировини и продукти.

Неопходните информации кои се однесуваат на хемиската реакција на која се базира производството на бараниот продукт вклучуваат:

- Хемизам на реакција;
- Работни услови;
- Можни странични реакции (потенцијални) и „нуспродукти“ (изоставувањето на нуспродукти во конечните биланси ја нарушува економичноста на процесот) и
- Максимизирање на приносот на реакција, дефинирање услови за  $Y_{\max}$ .

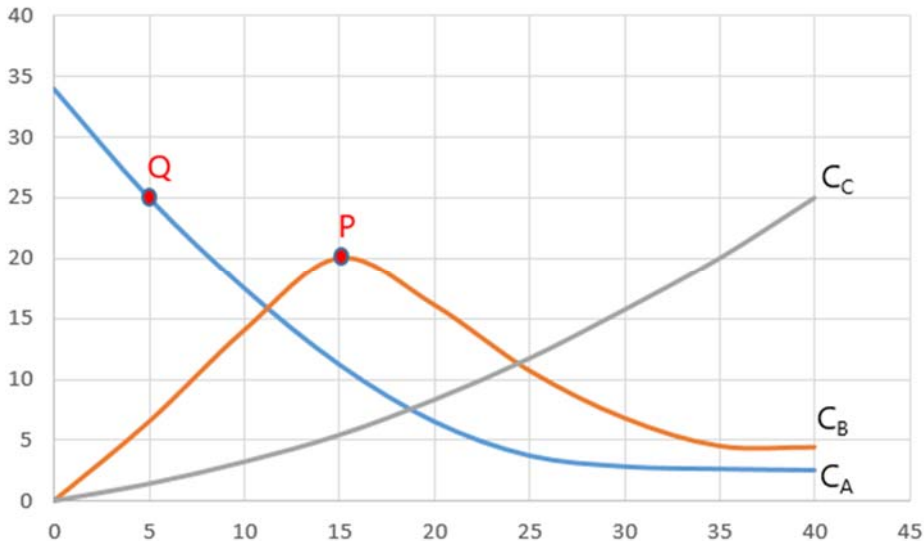
Некогаш работните услови за постигнување на  $Y_{\max}$  не се најекономична варијанта за процесниот дизајн. Доколку разгледаме пример на сериска реакција од типот:



каде B е посакуваниот продукт, тогаш првичниот заклучок сугерира на избор на точката  $P = \max Y_b$  (слика 2.1) како оптимална точка во однос на работните услови.

Толкувањето на експериментално добиените податоци кои ја презентираат временската промена на концентрацијата на секој од учесниците во реакцијата овозможува анализа на динамиката на реакцијата и реакционата кинетика. Од една страна, реакционата динамика ја опишува временската промена која се однесува на механизмот на реакцијата во елементарен (диференцијален) реакционен волумен, односно дава одговор на прашањето зошто и со каква брзина се одвива хемиската

промена. Додека, реакционата кинетика ја дефинира брзината на реакција на макро ниво, односно промената на концентрациите на учесниците во реакцијата во единица време.



**Слика 2.1** Промена на концентрација на учесниците во сериска реакција со времето:  $C = f(t)$  (кинетика на сериска реакција)

Деталната анализа која се однесува на изборот на работните услови укажува на следните аспекти:

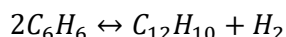
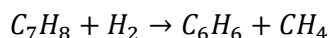
- Ако цената на посакуваниот продукт В е значително повисока од А, тогаш е оправдана работата при време на реакција адекватно на точка Р од дијаграмот, односно водење на реакциониот систем со цел максимизирање на приносот на продуктот В;
- Ако цената на В не е  $> A$ , тогаш не може да се дозволи загубата на скап реактант (А) преку продукција на непосакуваниот продукт С! Во таков случај, реакцијата се води во зона на ниски вредности за досегот на реакција (работна точка Q), што пак ќе продуцира дополнителен трошок за сепарација на А и рецикулација во реактор;
- Решението за оптимизација на студираниот процес (студија на случај) е резултат на детална анализа на техно-економските параметри поврзани со разгледуваниот затворен систем.

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

Селективноста е еден од основните параметри за евалуација на разгледуваните решенија за водење на процесот од аспект на селекција на оптималните работни услови. Дескриптивно, селективноста е дефинирана со:

$$\text{селективност} = \frac{\text{mol B добиени}}{\text{mol A изреагирани}} \quad \text{ИЛИ} \quad \frac{\text{mol B добиени}}{\text{mol C добиени}}$$

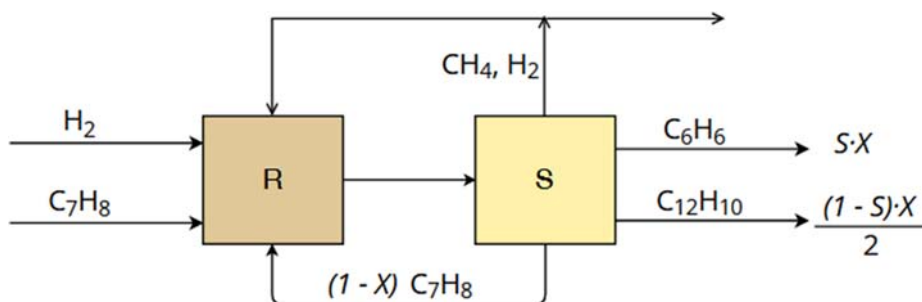
Доколку како пример го разгледаме веќе споменатиот HDA процес:



Деталната анализа во однос на селективноста на реакциониот систем започнува со биланс конструиран во однос на лимитирачкиот реактант:  $S \cdot X$  (потрошен лимитирачки реактант за производство на бензен) и  $\frac{(1-S)}{2} \cdot X$  (потрошен лимитирачки реактант за производство на нуспродукт).

$$C_7H_8 \rightarrow \begin{cases} (1 - X) \text{ mol неизреагиран } C_7H_8 \\ X \text{ mol изреагиран } C_7H_8 \begin{cases} S \cdot X \text{ mol продуциран } C_6H_6 \\ \frac{(1-S)}{2} \cdot X \text{ mol продуциран } C_{12}H_{10} \end{cases} \end{cases}$$

Односно, доколку го претставиме графички овој биланс (слика 2.2), а со цел поедноставување на пресметките во однос на степенот на конверзија на лимитирачкиот реактант и селективноста изразена како производство на посакуваниот продукт – бензен, ги занемаруваме гасните продукти:



Слика 2.2 Основен блок-дијаграм на HDA процесот

Дополнително, во однос на механизмот на реакција и динамиката на одвивањето на реакциите во дизајнираниот систем влијаат и други фактори, како, на пример, деактивацијата на катализаторот кај каталитичките реакции, што е дополнителен аспект при дефинирањето на режимот на работа и работните услови кај каталитичките реактори. При тоа, неопходно е да се дефинираат:

- Брзината на деактивација на катализатор треба да се дефинира при дизајн на катализаторски реакции (променлива во процесот);
- Повторување на сите пресметки, кога ќе се дефинираат нови информации!

Во однос на основниот дизајн параметар за димензионирање на реакторски систем – производност на бараниот продукт, иницијалните согледувања се вклучени во утврдувањето на степенот на производност. Оптимален степен на производство опфаќа:

- дали е нов производ или веќе е на пазарот;
- „животниот век“ на производот;
- „пристап“ до пазарот (50 % или 5 %);
- удел во пазарот;
- економика на производствен капацитет – намалување на цената на производство со зголемување на капацитетот на производство;
- режим на работа – производност на голем реактор наспроти серија;
- услови на пазарот – побарувачката се менува!

Во рамките на основните согледувања кои се однесуваат на евентуален пласман е посакуваната чистота на производот, како и на појдовните работни суровини:

- исто зависи од пазарот, како од тековната понуда на конкретниот производ, така и од аспект на комерцијалната вредност на квалитативната градација;

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

- од друга страна, со зголемување на чистотата – расте оперативниот трошок (поскап производ) на производствениот процес;
- при лабораториските истражувања се користат вообичаено суровини со повисок степен на чистота, кои се недостапни и/или нееконични за евентуално индустриско производство;
- степенот на онечистување кај користените суровини има директно влијание врз квалитетот на конечниот продукт и економичноста на целиот процес, односно ја инкорпорира „осетливоста“ на процесот кон присуството на други компоненти, во таа насока од особено значење е дали таа компонента е инертна или не.

Почетните согледувања при синтезата на процесниот проточен дијаграм за конкретен технолошки процес неизбежно ги интегрираат и евентуалните процесни ограничувања, кои се однесуваат на различни аспекти на производството:

- Безбедност, термичка и оксидативна стабилност на материјалот (продукт и суровини);
- Кај експлозивни смеси концентрациите се држат на минимално ниво (под запалива точка) и ниски оперативни температури;
- Можна токсичност, корозивност на некоја од компонентите;
- Податоци кои потекнуваат од локацијата на постројката (*Plant and Site Data*);
  - Локација, пристап (патишта, пристапност);
  - Струја, вода (инфраструктура).

### 2.2 Шаржен наспроти континуиран режим на работа – ниво 1

Веројатно примарната одлука при синтезата на процесниот дијаграм е утврдување на соодветниот режим на работа, што во основа дава одговор дали процесот ќе се одвива во шаржен или континуиран реакторски систем.

Во суштина, шаржниот режим на работа е најчесто применлив кај постројките кои предвидуваат релативно пониски производствени капацитети, при производство на конечни продукти кои имаат повисоки комерцијални цени, при водење на процесите во зона на повисок степен на конверзија на лимитирачките реактанти. Од друга страна, континуираното производство е применливо за дизајн на реакторски системи со повисоки вредности за производност на посакуваниот продукт, кај реакторски ефлуенти кои предвидуваат едноставна и ефикасна сепарација на неизреагираните реактанти и добиените продукти, но и можност за рецикулација на неизреагираните реактанти назад во реакторот.

Основните дизајн вредности на континуирани процеси (24 часа на ден, 7 дена во неделата) во однос на ефективното време на работа се 8 000 работни часови годишно (во поразвиените земји 7 200 работни часови годишно) – 333 дена, а остатокот (до 365 дена) се прераспределува на помошни операции - чистење, *start-up* на реакторот итн.

Кај шаржните производствени системи времето на реакција (конверзија на суровините до продукти) директно зависи од процесот на планирање на производството од аспект на неопходното време за одвивање на помошните операции во завршувањето на секоја шаржа. Затоа, често се предвидуваат паралелни реакторски системи, каде едната линија е во активна состојба и во неа се одвиваат предвидените реакции, додека другата е во фаза на изведуваче на помошните операции (чистење, подготовка на инструментите, обезбедување на напојот, *start-up* на реакторот, итн.).

Освен при теоретските согледувања и анализи на моделите на хемиски и биохемиски реактори, во суштина не постои целосно континуиран систем (или е редок), туку димензионирањето се темели на т.н. хибриден дизајн, каде одреден дел од постројката работи во паралелни шаржни линии, додека останатиот дел од постројката е во континуиран модул на работа. Така, на пример, кај одредени технолошки решенија реакторот работи шаржно, а дестилационата колона континуирано.

Вообичаено, врз база на основните хеуристички правила за избор на шаржен или континуиран режим на работа, се следат неколку правила за избор (шаржен/континуиран):



## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

1) Капацитет на производство (*scale of production*):

- над 5000 t/y = континуиран процес
- под 500 t/y = шаржен процес.

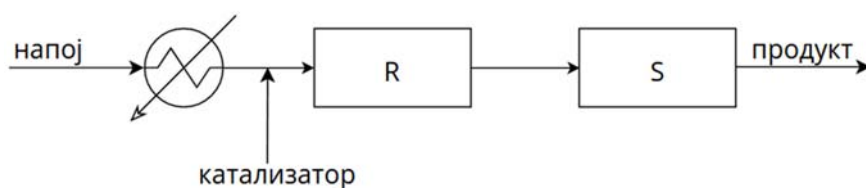
2) Кај дизајнот на процесен проточен дијаграм каде имаме непознати (недефинирани) параметри – прелиминарните анализи се изведуваат прво во шаржни услови:

- шаржни реакторски системи димензионирани за лабораториски истражувања се едноставни и флексибилни во однос на потенцијалната пренамена (за повеќе производствени линии), во зависност од потребите за истражување и развој.

3) Пазарни услови – за сезонски производи најчесто, а воедно и најекономично решение е шаржен реактор (на пример, за добивање ѓубриво).

4) Оперативни проблеми – бавни (хетерогени) реакции се изведуваат лабораториски во шаржен реактор со цел детална анализа на механизмот на дадената реакција, како и на реакционата кинетика.

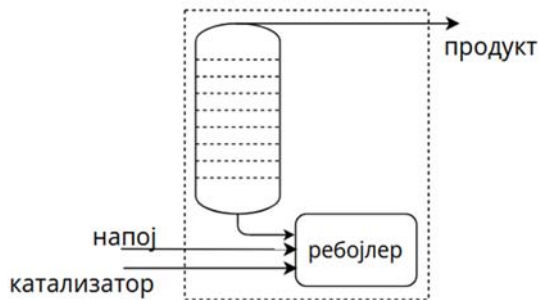
На пример, доколку разгледуваме каталитичка реакција, која се одвива во континуирани услови, како на слика 2.3, неопходни се неколку процесни единици.



**Слика 2.3** Пример за процесен проточен дијаграм на континуиран реакторски систем со каталитичка реакција

Дадениот процесен проточен дијаграм содржи 3 единици, додека можната техничко-технолошка алтернатива за замена на дадениот систем со шаржен е презентирана на слика 2.4. Претставениот систем во суштина предвидува двојна намена на ребојлерот на една дестилациона колона како каталитички реактор, во кој се додаваат напојот и катализаторот.

Со ваквото процесно решение би се намалиле капиталните и оперативните трошоци, а дополнително би се постигнал и зголемен степен на конверзија на реактантите и зголемена производност на конечниот продукт.



**Слика 2.4** Алтернатива на претходниот процесен проточен дијаграм во шаржни услови

Сумарно, прелиминарната фаза на синтезата на процесен проточен дијаграм, од аспект на евалуација на алтернативите за шаржен наспроти континуиран режим на работа вклучува:

1. Избор на соодветни процесни единици;
2. Утврдување секвенции и услови за нивна интерконекција;
3. Евалуација на селектирани процесни алтернативи;
4. Дефинирање на главните параметри за дизајн и оптимизација на затворениот систем (доминантни променливи);
5. Дефинирање оптимални вредности на работните параметри (оптимални оперативни услови);
6. Селекција на најдобри решенија врз основа на анализираните алтернативи;

На пример, кај шаржен процес често е неопходно да се утврди:

- Кои единици ќе работат шаржно, а кои континуирано?

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

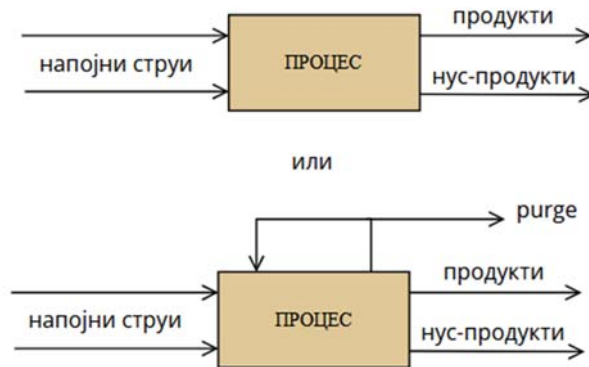
- Кои операции се изведуваат во еден сад, а за кои се потребни посебни садови?
- Паралелни процесни линии и паралелно поставени процесни единици?
- Соодветен избор на капацитет за складирање.

### 2.3 Влезно-излезна структура - ниво 2

Дефинирањето на влезно-излезната структура е наредниот, сукцесивен чекор во синтезата на процесниот проточен дијаграм, по одлуката за избор на соодветен режим на работа на реакторскиот систем. Во суштина, влезно-излезна структура претставува материјален и енергетски биланс на процесните струи – сировините и продуктите.

Влезно-излезната структура на дадениот процес е основен предуслов за детална техничко-економска евалуација, а се реализира низ призмата на инженерски одлуки и искусвени претпоставки:

- Во основа, треба да се дефинира додадената вредност на процесот, како разлика во комерцијалната вредност на продукти и комерцијална вредност на сировини;
- Хеуристичко правило – да се искористи 99 % од вредноста на материјалот (дел од вредноста и ќе се „изгуби во процесот“, како загуба на најевтините сировини кои се додаваат во вишок);
- Воведување вентилирачка/прочистувачка и рециклирачка струја – кај гасни реактанти со нечистотии или гасни споредни продукти (слика 2.5);
- Гасни реактанти се често во вишок – за стимулирање повисока конверзија на лимитирачкиот реактант.



**Слика 2.5** Алтернативи за влезно-излезна структура за процес кој генерира гасни продукти

Пример: вишок  $H_2$   $\xrightarrow{\text{HDA процес}}$  поголем  $X_{C_7H_8}$

- Загуба на  $H_2$  (со  $CH_4$ ) има кај *purge* струјата (отпадната гасна струја);

- *Purge* струјата и рециклираната струја додаваат број на степени на слобода во дизајнот; дополнителни степени на слобода кај системот за сепарација на гасови:

- 1) Сооднос отпадна струја/рециркулат;
- 2) Состав на отпадна струја (удел на гасните компоненти) и
- 3) Удел на вишокот гасен реактант во напојот на процесот.

Наведениот пример укажува на неопходноста на следните одлуки за влезно-излезната конфигурација на процесот, соодветни за **ниво 1 на интеграција** на процесниот дијаграм:

1. Дали треба да се прочисти напојот пред влез во реакторот (пурификација на напој)?
2. Дали е потребна сепарација и отстранување на споредните продукти?
3. Дали е потребно воведување рециркулирачка/отпадна струја?
4. Колку струи на продукти се потребни?

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

5. Дали да се предвиди сепарација и рецикулација (*recover&recycle*) на неизреагираниот реактант?

6. Дефинирање дизајн варијабли.

7. Евалуација на економскиот потенцијал и конечните придобивки.

Во однос на **пурификација на напојните струи** пред влез во реакторскиот систем ваквиот пристап предвидува дизајн на препурификациски систем, кој се темели на неколку фактори:

- каков тип на сепарационски систем е неопходен за таа намена

- квалитативно, одлуката зависи од повеќе фактори:

- ако нечистотиите не се инерти или ако ги има во големи количини, неопходно е нивно отстранување пред влез во реакторскиот систем;

- кај можните решенија кои предвидуваат сепарација на гасни компоненти од гасна струја, прво се разгледуваат решенија БЕЗ пурификација, затоа што ваквите решенија често генерираат зголемување на инвестициските и особено, оперативните трошоци (на пример, мембранска сепарација). Но деталната анализа секогаш се базира на интегрално согледување на сите техничко-економски фактори, па ваквите решенија во одредени случаи се неизбежни (на пример, кога некоја од гасните компоненти го контаминира катализаторот);

- ако нечистотиите во течна струја се, исто така, и нуспродукт во реакторот, тогаш напојот треба да се воведе во процесот кај сепарационскиот систем;

- ако нечистотијата во течна струја формира азеотропна смеса со реактант, а притоа е неопходна нејзина елиминација од напојот, се избегнува конвенционална дестилација; во таков случај, прифатлива алтернатива е екстрактивната дестилација, при што се додава соодветно екстракционно средство (растворувач) со висока точка на вриење, во кое се раствора една од компонентите кои ја формираат азеотропната смеса; со тоа се разбива формируваниот азеотроп и се овозможува ефикасна сепарација на компонентите од смесата по пат на конвенционална дестилација;

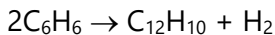
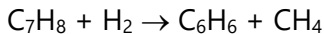
- ако е „технички поедноставно“ да се отстрани нечистотијата од продуктот отколку од реактантот, тогаш најисплатлива варијанта е изоставување на препурификацијата;

- ако се можни и двете претходно дефинирани решенија – сепарација на нечистотиите со препурификација или сепарација на нечистотиите на излез од реакторскиот систем, тогаш конечната одлука зависи од конкретните специфичности на разгледуваниот процес, притоа анализирајќи ги придобивките и недостатоците дефинирани како:

а) зголемување на капиталните и оперативните трошоци со дизајн на препурификациски систем;

б) подобрување на селективноста и генерирање повисок принос на конечен продукт со инсталација на препурификациски систем, со што се намалува капиталниот трошок на сепарациониот систем за реакторскиот ефлуент.

Во однос на можноста за **сепарација и рециклирање на споредните продукти** во реакторскиот систем (*Recovery & recycle*), повторно како пример го разгледуваме споменатиот HDA процес:



Толкувањето на можностите за сепарација и рециклирање на споредните продукти во реакторскиот систем се базира на следните согледувања:

- ако  $C_{12}H_{10}$  се рециклира назад во реакторот, неизбежно концентрацијата на  $C_{12}H_{10}$  ќе достигне до рамнотежно ниво за дадените работни услови и ќе се постигне инхибиција на споредната реакција во системот, но неопходни се поголеми процесни единици (реактор, систем за сепарација) за ваков режим на работа;

- од друга страна, со рециркулирањето на  $C_{12}H_{10}$  се заштедува од аспект на редуцирани капитални трошоци за опрема за сепарација на  $C_{12}H_{10}$  од реакторскиот ефлуент и нема загуба на реактант;

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

- ако се „рециркулира“  $C_{12}H_{10}$ , теоретски нема загуба на  $C_7H_8$  во производство на нуспродукти;
- дополнително, проточниот дијаграм не предвидува ни дестилационна колона за сепарација на неизреагираниот  $C_7H_8$  од  $C_{12}H_{10}$ ;
- во тој случај, имајќи ја предвид можноста  $C_{12}H_{10}$  да се користи како гориво, ќе мора да се обезбеди друг потенцијален енергенс.

Одлуките поврзани со системот за сепарација на гасната фаза од реакторскиот ефлуент, а со фокус на можноста за рециклирање и/или вентилирање на гасовите (**Recycle/Purge струја**), основните сегменти произлегуваат од фактот кои од реактантите се дел од гасната фаза (*light ends*). Овие компоненти или се рециклираат назад во реакторот или се вентилираат (*purge* струја), но за нивно втечнување неопходно е обезбедување на соодветните *P-T* услови за наведената фазна промена со ладење и/или компримирање.

Како база за дефинирање на т.н. *light ends* се зема пропилен, односно ако точката на вриење на една компонента е помала од точката на вриење на пропиленот ( $-48\text{ }^{\circ}\text{C}$ ), тогаш се работи за лесна компонента (*light end*), со што се исполнува предусловот за воведување *recycle/purge* струја.

Реакторскиот ефлуент, по соодветните постапки во системите за сепарација, произведува струи на крајни продукти, при што бројот на сепарациони единици (особено кај системот за сепарација на течна фаза) се оптимизира во согласност со појдовното хеуристичко правило: не се сепарираат и ремиксираат 2 струи. **Бројот на продукт-струи** се дефинира во почетната фаза на конструкција на влезно-излезната структура на процесот, а се иницира со утврдување список на учесници на реакција кои излегуваат од реактор/реакторски систем.

Со цел успешно детерминирање на конечниот број на продукт-струите, неопходно е компонентно класифицирање:

1. гасен спореден продукт и напојни нечистотии
2. гасни реактанти (неизреагирани) + мала количина инерти
3. реакциони интермедиери, азеотропни смеси – реверзибилен спореден продукт (од повратна реакција)
4. примарен продукт

5. споредни продукти со вредност
6. споредни продукти за гориво
7. споредни продукти – *need to be treated*
8. гасни/течни реактанти кои не се рециклирани.

Соодветните решенија за анализираните компоненти се дадени во прилог:

- Кај компонентите специфицирани во точките 1 и 2, соодветно решение е инсталација на скрабер за гас;
- Кај компонентите специфицирани во точка 3 – рециркулација назад во реактор;
- Кај компонентите специфицирани во точките 4 и 5 – складирање и пакување;
- Кај споредните продукти со горивни карактеристики (точка 6) – печка или мрежа на топлински изменувачи (HEN);
- Кај споредните продукти, кои е неопходно да бидат третирани пред конечниот испуст (точка 7) – соодветна постројка за третман (WWTP пример);
- Кај компонентите дадени во точка 8 – излез од процес (*vented gaseous react*).

Конечната евалуација на креираниот процесен проточен дијаграм директно зависи од конечните решенија за сите продукт-струи, нуспродукти и инерти, кои го напуштаат процесот.

Конструкцијата на влезно-излезната структура на еден процес продолжува со поставување соодветни изрази за материјален биланс на единицата или процесот. Соодветното поставување на материјалниот и енергетскиот биланс на процесот е основен предуслов за дизајн на реакторскиот систем, како и целосен преглед на економските аспекти на даденото производство – дефинирање на ценовните аспекти на процесните струи (т.н. *stream cost model*). Токму функционалната зависност на изразот на материјалниот биланс и составниот модел на вредности на струите од вредноста на дизајн варијаблите е основата на економската оптимизација на технолошкиот процес. Идентификацијата



## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

на дизајн променливите и поставувањето вкупен материјален биланс зависат од достапните податоци за реакциониот систем. Притоа, материјалниот биланс содржи независни променливи кои се неспецифицирани и го даваат бројот на степени на слобода на анализираниот процес.

### 2.3.1 Степени на слобода – дизајн варијабли

Кај процеси со повеќе реакции (комплексни реакции) секогаш ќе има корелација во дистрибуцијата на продукти како функција од дизајн варијаблите соодветни за **ниво 2 на интеграција**:

- Конверзија на лимитирачки реактант  $X_A$ ;
- Молски сооднос на реактанти на влез во реактор ( $\theta_i$ );
- Работна температура во реакторот ( $T_R$ );
- Работен притисок во реактор ( $P_R$ );
- Количина на катализатор ( $W_{Cat}$ ).

Од аспект на работната температура, зголемување на температурата ја забрзува кинетиката на реакцијата и директно влијае на енергијата на активација ( $E_a$ ); ако  $E_a$ -те на сите реакции кои се одвиваат во реакторот се од сличен ред на големина, тогаш промената на  $T_R$  нема да влијае на селективноста (продуктите).

Промената на вредноста на  $P_R$  кај реакциите во течна фаза нема значително влијание врз досегот на реакција и реакторските перформанси, додека кај системите во гасна фаза, при услови на нееднаквост на стехиометриските коефициенти на реактантите и продуктите (т.е.  $\sum \nu_i \neq 0$ ) има значително влијание, како на степенот на конверзија на лимитирачкиот реактант, така и врз целокупните перформанси на реакторот.

Кај **шаржните реактори** степенот на конверзија на лимитирачкиот реактант е во директна функционална зависност од досегот на реакцијата, а со тоа самиот дизајн на ваков реактор претставува детерминација на **времето на одвивање на реакцијата** за постигнување на проектираниот степен на конверзија. Волуменот на шаржниот реактор се одредува како функционална зависност од предвидената производност на конечните продукти. Кај **проточните реактори**, дизајнот на реактор се базира на димензионирање на работниот волумен на реакторот, кој во корелација со волуменскиот проток на реакционата

смеса ни овозможува дефинирање на **времето на задржување** на секој од учесниците во реакцијата во реакторот.

Во опсегот на утврдување на архитектурата на процесниот проточен дијаграм, изборот на соодветен реакторски систем вклучува дополнителни одлуки соодветни за **ниво 2 на интеграција** на процесниот проточен дијаграм:

- Избор на реактор: во оваа прва фаза – одлука дали е шаржен или проточен систем;
- Кинетички податоци: најчесто нема доволно податоци на почетокот, од каде произлегува неопходноста на успешно планирање експерименти со помош на кои во лабораториски услови се генерираат потребните емпириски податоци;
- Прелиминарни пресметки за димензии на реактор и конфигурација на можниот реакторски систем (паралелно или сериски поврзани единици);
- Детерминација на останатите дизајн аспекти:
  - Дали ќе се рециклираат сите реактанти;
  - Употреба на *recycle/purge (%recovery)* на гасната струја (се дефинира во колкав вишок се додава гасен реактант како моларен сооднос со лимитираниот реактант);
  - Содржина на инертни супстанции;
  - Дефинирање на молски сооднос на рециклирачката и вентилирачката струја *recycle/purge* гас.

### 2.3.2 Развој на материјален биланс

Поставувањето на појдовниот материјален биланс на процесот зависи од изборот на база за пресметки како почетна точка:

I. Почетна точка – производност на продукт кај нова постројка или нова линија (за постоечки постројки)

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

II. Почетна точка кај експанзија на постоечки процес – напојни струи.

1. Производноста на посакуваниот продукт е дефинирана и во комбинација со основниот биланс и стехиометриската таблица претставува појдовна точка за прелиминарните пресметки на потребните количества на реактанти;

2. Од основниот облик на хемиската реакција, каде се дефинирани механизмот на реакција, стехиометријата и кинетичките и термодинамичките податоци – се димензионираат реакторот, како и протокот на споредните продукти;

3. Пресметка на содржината на нечистотиите, чие присуство е можно како во напојните струи, така и на излез од реакторот. Овие пресметки се неопходни за соодветно димензионирање на сепарациските системи со цел отстранување или рециклирање на нечистотиите, доколку се предвидува целосна сепарација и рецикулација на неизреагираните реактанти;

4. Пресметка на излезен проток на реактанти (загуба на реактанти) во однос на специфицирана количина вишок – каде реактантите не се целосно „уловени“ во сепарацискиот систем и рециклирани, што е карактеристично за гасните струи (гасниот рецикулат и вентилирачката струја – *recycle/purge* струите);

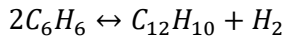
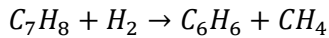
5. Влезно-излезни протоци за нечистотиите, кои влегуваат во процесот со реактантните струи (напојни струи).

Ограничувањата при ваквиот пристап кон развојот на материјален биланс за даден процес се следните:

- Претпоставуваме 100 % (целосна) ефикасност на системот за сепарација на вредните компоненти.
- Идентификација на регион на оптимални вредности на дизајн варијаблите кои влијаат на влезните и излезните протоци, со цел детерминирање на загубите (претходните точки 4 и 5).
- Процеси кои продуцираат повеќе вредни продукти (на пример, хлорирање метан, кое дава  $CH_3Cl$ ,  $CH_2Cl_2$ ,  $CHCl_3$  и  $CCl_4$ , а секој од

продуктите има своја комерцијална вредност). Во таков случај, конечната дистрибуција на продуктите има централна улога при конечната формулација на влезно-излезната структура на процесот.

Повторно, како пример го разгледуваме наведениот HDA процес:



Напојот од „свеж“ толуен се конвертира до посакуваниот продукт, но неизреагираниот дел останува за рециклирање. Иреверзибилните реакции секогаш се кон максимизирање на степенот на конверзија, или конверзија „по единечно минување низ реакторски систем“. Под претпоставка за целосна сепарација и отстранување на бензенот од реакторскиот ефлуент, селективноста може да се дефинира како количина на продуциран бензен во однос на потрошеното количество на толуен (почетно – крајно количество на толуен):

$$\text{- селективност } S = \frac{n_{C_6H_6}}{n_{0,C_7H_8} - n_{C_7H_8}}$$

Додека, пак, производноста на бензен,  $P_b$  [mol/h] е во корелација со селективноста и напојот на чист толуен ( $F_{FT}$ ):

$$F_{FT} = \frac{P_b}{S}$$

Аналогно, производноста на метан во реакторот е дадена со изразот:

$$P_{R,CH_4} = \frac{P_b}{S}$$

Производноста на споредната реакција, која резултира со загуба на бензен од (1-S), изразена преку производноста на  $C_{12}H_{10}$  е:  $F_{FT} \left( \frac{1-S}{2} \right) = \frac{P_b(1-S)}{2S}$  (ако во струјата на  $C_7H_8$  нема нечистотии и дополнителни споредни продукти).

Анализа на струјата *Recycle/Purge* (биланс на  $H_2$ ): водородот се додава во вишок со цел да се фаворизира целосна конверзија на толуенот.

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

$$[H_2 \text{ на влез}] = [H_2 \text{ во реакција 1}] + [H_2 \text{ од реакција 2}] \\ + [H_2 \text{ на излез} - \text{вишок}]$$

$$y_{F,H_2} \cdot F_G - \frac{Pb}{S} + \left(\frac{Pb}{S} \cdot \frac{1-S}{2}\right) = F_{E,H_2}$$

каде:  $F_{E,H_2}$  – вишок на водород, на излез од системот,  $y_{F,H_2}$  – удел на водородот во напојната струја на гас,  $F_G$  – проток на напојната гасна струја.

Производството на метан се дефинира преку билансот на метан во процесот:

$$P_{CH_4} = (1 - y_{F,H_2})F_G + \frac{Pb}{S}$$

каде членот  $(1 - y_{F,H_2})F_G$  одговара на количината на метан која влегува со напојната гасна струја во процесот, а  $\frac{Pb}{S}$  е членот кој го дефинира производството на метан во реакцијата.

Целата продуцирана количина на метан се одведува со *purge* струјата надвор од процесот, со цел да се избегне акумулирање метан во системот, со што директно би се нарушила безбедноста на постројката. Дополнително, *purge* струјата го содржи и вишокот на водород добиен со споредната реакција.

$$P_G(\text{purge}) = F_E + P_{CH_4} = F_E + (1 - y_{F,H_2})F_G + \frac{Pb}{S}$$

Која од варијаблите ќе ја користиме како дизајн променлива за димензионирање на рециркулирачката струја зависи од изборот на една од двете опции: или како база за пресметка ќе ја користиме количината на вишок на водород ( $F_E$ ) или содржината на водород во *purge* струјата ( $y_{P,H_2}$ ). Притоа,  $y_{P,H_2} = \frac{F_E}{P_G}$  се преферира поради дополнителните вредносни ограничувања (мора да е од 0 до 1).

Ги изведуваме изразите за *purge* струјата и за напојната гасна струја,  $P_G$  и  $F_G$ , како зависни од уделот на водородот во *purge* струјата,  $y_{P,H_2} = f(P_G, F_G)$ .

Компонентен биланс на водородот:

$$y_{F,H_2} \cdot F_G = \frac{Pb}{S} - \frac{Pb}{S} \left( \frac{1-S}{2} \right) + y_{P,H_2} P_G$$

Компонентен биланс на метанот:

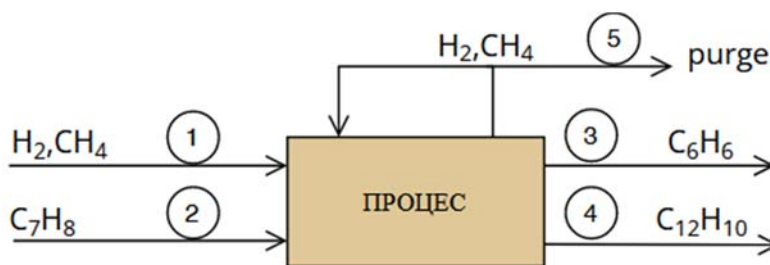
$$(1 - y_{P,H_2}) P_G = \frac{Pb}{S} + (1 - y_{F,H_2}) F_G$$

Овие две равенки ни даваат систем со две непознати -  $F_G$  и  $P_G$ . Со нивно решавање, преку собирање на двата изрази, и последователно средување се добива:

$$P_G = F_G + \frac{Pb}{S} \left( \frac{1-S}{2} \right)$$

$$F_G = \frac{\frac{Pb}{S} \left[ 1 - (1 - y_{P,H_2}) \left( \frac{1-S}{2} \right) \right]}{S(y_{F,H_2} - y_{P,H_2})}$$

Развојот на материјалниот биланс за анализираниот пример ни укажува дека ни се потребни вредностите на само неколку дизајн варијабли за да можеме успешно да ги дефинираме сите степени на слобода на овој пример. За целосно дефинирање на материјалниот биланс, неопходни ни се вредностите на: производноста на бензен, селективноста и една од варијаблите: вишок на водород или состав на *purge* струјата (слика 2.6).



Слика 2.6 Влезно-излезна структура на HDA процесот

Деталниот приказ на струите и компонентите присутни во нив е даден во табелата на струи и компоненти (табела 2.1):

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

**Табела 2.1** Табела на процесни струи за разгледуваниот пример на HDA процесот

Компонента	Струја 1	Струја 2	Струја 3	Струја 4	Струја 5
$H_2$	$F_{H_2}$	0	0	0	$F_{E,H_2}$
$CH_4$	$F_{CH_4}$	0	0	0	$F_{CH_4} + \frac{P_b}{S}$
$C_6H_6$	0	0	$P_b$	0	0
$C_7H_8$	0	$\frac{P_b}{S}$	0	0	0
$C_{12}H_{10}$	0	0	0	$\frac{P_b}{S} \left( \frac{1-S}{2} \right)$	0

каде што:

$$F_{H_2} = F_E + \frac{P_b}{S} \left( \frac{1-S}{2} \right)$$

$$F_{CH_4} = (1 - y_{F,H_2}) F_G$$

Дополнителните согледувања кои се однесуваат на конечната структура на влезно-излезната структура на процесниот проточен дијаграм ја наметнуваат можноста за разгледување на дифенилот и продуцираниот метан, како потенцијални енергенси за производствениот процес, со што значително би се намалиле оперативните трошоци.

### 2.3.3 Алтернативен пристап за дефинирање на материјалниот биланс

Доста често, во индустриски услови, производствениот процес е проследен и со повеќе паралелни или сериски споредни реакции, при што е неопходно да се дефинираат параметрите на **досег на реакција**, за секоја од реакциите поединечно. Дефинирањето на материјалниот биланс изразен преку досегот на реакција е претставено преку примерот на HDA процесот. Во однос на директната и споредната реакција (досег на првата реакција -  $\zeta_1$  и на втората реакција -  $\zeta_2$ ):

Реакција 1:  $\zeta_1$  mol или [mol/h]  $C_7H_8$  реагираат со  $\zeta_1$  mol или [mol/h]  $H_2$  за да дадат  $\zeta_1$  mol или [mol/h]  $C_6H_6$  и  $\zeta_1$  mol или [mol/h]  $CH_4$ .

Реакција 2:  $2\zeta_2$  mol или [mol/h]  $C_6H_6$  реагираат реверзибилно за да продуцираат  $\zeta_2$  mol или [mol/h]  $C_{12}H_{10}$  и  $\zeta_2$  mol или [mol/h]  $H_2$ .

Во однос на секој од учесниците во мултиреакциониот систем, нето досегот е дефиниран:

Бензен:  $\zeta_1 - 2\zeta_2$

Метан:  $\zeta_1$

Дифенил:  $\zeta_2$

Толуен:  $-\zeta_1$  (лимитирачки реактант)

Водород:  $\zeta_2 - \zeta_1$

Со цел воопштување на изразот за нето досег на реакција за секој од учесниците, важи:

$$n_j = n_j^0 + v_{ij}\zeta_i$$

каде индексите во изразот се:  $j$  – реакција,  $i$  – учесник во реакцијата.

$v_{ij}$  – стехиометриски коефициент на учесникот  $i$  во реакцијата  $j$ , кој е позитивен ако учесникот се продуцира во реакцијата (продукт) или негативен ако тој учесник се троши во реакцијата (реактант).

Ваквиот модел може да се претстави и со матрици:

$$\begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ \dots \\ n_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n_1^0 \\ n_2^0 \\ \dots \\ n_j^0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} v_{11} & v_{12} & \dots & v_{1j} \\ v_{21} & v_{22} & \dots & v_{2j} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ v_{31} & v_{32} & \dots & v_{ij} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \dots \\ \zeta_i \end{bmatrix}$$

Корелацијата на двата пристапи за развој на изразот за материјален биланс, даден преку примерот на разгледуваниот HDA процес, е следна (врз база на потрошениот толуен):

$$\zeta_1 = \frac{Pb}{S}$$



## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

$$Pb = \zeta_1 - 2\zeta_2$$

Со комбинација на овие два изрази, се добива:

$$\zeta_2 = \frac{1}{2}(\zeta_1 - Pb) = \frac{Pb}{2} \left( \frac{1-S}{S} \right)$$

Економскиот потенцијал на процесот може дескриптивно да се претстави како:

$$EP = [\text{вредност на продукт}] + [\text{вредност на нуспродукти}] \\ - [\text{вредност на суровини}]$$

За конкретниот пример на HDA процесот, економскиот потенцијал на ниво 2 е:

$$EP = [\text{цена на бензен}] + [\text{горивна цена на дифенил}] \\ + [\text{горивна цена на } purge \text{ струја}] - [\text{цена на толуен}] \\ - [\text{цена на напој од гас}]$$

Вака претставениот EP претставува груба пресметка на потенцијален профит (годишен) без капитални трошоци и трошоци за сервисни струи.

Доколку **вредноста на EP ниво 2 е негативна вредност, тогаш процесот е непрофитабилен** и нема основа за понатамошен дизајн. Во таков случај, неопходно е дефинирање на алтернативни суровини или алтернативи на самиот процес (друг механизам) за добивање на планираниот продукт.

Процесните алтернативи, применети кај HDA процесот, дефинирани се како одлуки поврзани со:

- 1) Дали да се воведат пурификација на напојна струја ( $H_2$  струјата)?
- 2) Дали да се отстрани или да се рециклира дифенилот назад во реакторот?
- 3) Дали да се воведат пурификација кај струјата за рецикулација на  $H_2$  кон реакторот?

Ваквите можности овозможуваат широк спектар на алтернативи на конечни процесни решенија за HDA процесот, но постојат соодветни

алатки за елиминација на некои од алтернативите, со цел дефинирање на неколку оптимални (најдобри) решенија.

## 2.4 Рециклирачка структура на проточен дијаграм – ниво 3

Во досегашниот дел од развојот на билансите за процесниот проточен дијаграм е дефинирана **дистрибуцијата на продукти како зависност од степенот на конверзија**. Во случај на пониски вредности на степенот на конверзија, неопходна е успешна сепарација на неизреагираните реактанти од добиените продукти и нивна рецикулација во реакторскиот систем, со цел максимално искористување на работните суровини, во прв план – максимална конверзија на лимитирачкиот реактант.

Токму кај ниво 3 (рециркулирачка структура на процесниот проточен дијаграм) е евидентно значењето на сепарацијата и рециклирањето на дел од реакторскиот ефлуент. Особено се важни ваквите одлуки кај **гасните реактанти**, каде е неопходен **компресор**, кој значително влијае на капиталните и оперативните трошоци, додека кај **течните компоненти** се користи **пумпа**, која има значително помали импликации на капиталните и оперативните трошоци. Но, самата сепарација на течните компоненти е енергетски интензивен процес и има високи оперативни трошоци, со оглед на фактот што најчесто применувани единици се дестилационите колони.

Во основа, одлуките за дефинирање на рециркулирачката структура започнуваат со **изборот на типот на реактор**. Токму дизајнот на реакторот го диктира степенот на конверзија, а со тоа и влијае врз конечниот дизајн на рециркулирачката структура на дијаграмот.

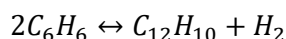
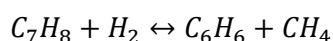
Појдовните одлуки за дизајн на рециркулирачката структура на дијаграмот се:

- број на реактори кај реакторскиот систем и дали има сепарација помеѓу;
- број на рециклирачки струи;
- дали некој реактант е во вишок?
- дали има потреба од гасен компресор (капацитет, цена)?

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

- топлински податоци за реактор – адијабатски или изотермен режим на работа;
- како да се „помести“ рамнотежата кај реверзибилната реакција, со цел фаворизирање на посакуваната реакција и зголемување на степенот на конверзија;
- EP – како реакторот (цената) влијае на EP и на процесот?

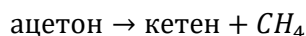
Во однос на првиот критериум, **број на реактори во реакторскиот систем**, разгледан е примерот на HDA процесот.



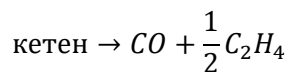
Во согласност со вредностите на работните параметри во реакторот,  $T = 1150 - 1300$  °F,  $P = 500$  psi, двете реакции се одвиваат во гасна фаза. Оваа реакција не е каталитичка и се изведува во **еден реактор**.

Но, кај реакции каде е предвидена промена на вредностите на работен притисок и/или работна температура, неопходни се најмалку два реактори.

На пример, кај процесот на производство на ацетатен анхидрид, дефиниран описно:

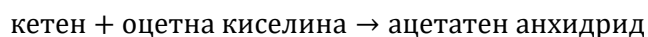


но, кетенот е релативно нестабилен, па се разградува до јаглерод монооксид и етилен:



овие две реакции се изведуваат при  $T = 700$  °C и  $P = 1$  atm.

Понатаму, се додава оцетна киселина, која реагира со кетенот и дава ацетатен анхидрид:



Оваа реакција се одвива при значително пониска температура, и при ист работен притисок,  $T = 80\text{ }^{\circ}\text{C}$  и  $P = 1\text{ atm}$ .

Во овој конкретен пример, **неопходни се 2 реактори**, во кои има 2 различни работни температури. Притоа, R1 е првиот реактор, каде се одвиваат првите две реакции, додека R2 е вториот реактор, каде се добива конечниот продукт, ацетатен анхидрид.

Кај ваквите проточни дијаграми, неопходно е асоцирање на напојните струи и рециркулирачките струи со конкретниот реактор.

Во врска со вториот критериум, **број на рециклирачки струи**, инженерите се водат од истото правило кое важи кај продуктните струи - **да не се сепарираат струи кои повторно ќе се ремиксираат** на влез во реакторот.

Одлуката дали некоја струја ќе се рециклира во реакторот зависи од фазата на струјата и од нејзиниот состав. Како пример, повторно го разгледуваме HDA процесот, каде ги класифицираме компонентите според физичко-хемиските карактеристики (точки на вриење) и конечната дестинација.

Компоненти	Дестинација	Точка на вриење (при NTP) [ $^{\circ}\text{C}$ ]
$\text{H}_2$	Рециклирање/Purge	-213
$\text{CH}_4$	Рециклирање/Purge	-161
$\text{C}_6\text{H}_6$	Примарен продукт	80
$\text{C}_7\text{H}_8$	Рециклирање до реактор	110
$\text{C}_{12}\text{H}_{10}$	Нуспродукт (гориво)	255

Од наведените карактеристики на компонентите во HDA процесот, како и предвидената дестинација, може да се заклучи дека лесните компоненти,  $\text{H}_2$  и  $\text{CH}_4$ , одат заедно како струја 1, додека толуенот, бензенот и дифенилот се струи 2, 3 и 4, соодветно. Во согласност со тоа имаме:

- 2 рециклирачки струи

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

- 2 продукт струи

- 1 отпадна струја (*purge*)

Доколку оваа анализа ја примениме и кај производството на ацетатен анхидрид, добиваме:

Компоненти	Дестинација	Точка на вриење (при NTP) [°C]
Ацетон	Рециклирање во R1	
Оцетна киселина	Рециклирање во R2	
Ацетатен анхидрид	Примарен продукт	
$CO$	Гориво	
$CH_4$	Гориво	
$C_2H_4$	Гориво	

Во согласност со тоа, имаме:

- 2 рециклирачки струи,

- 2 продукт струи.

Во однос на третиот критериум, **вишок на реактанти**, одредени реактанти се додаваат во вишок со цел фаворизирање на степенот на конверзија на лимитирачкиот реактант, „потиснување“ на формирањето на споредни продукти во реакторот или како топлински носачи (медиуми).

Го разгледуваме следниот пример на производство на изооктан:



Споредна реакција е : бутен + изооктан ~ повисоки јаглеводороди

- директна:  $C_4H_8 + C_4H_{10} = C_8H_{18}$
- споредна:  $C_4H_8 + C_8H_{18} = \text{повисоки јаглериоди}$

- Бутенот,  $C_4H_8$  е незаситена молекула и пореактивна, па изобутанот,  $C_4H_{10}$  се додава во вишок (се форсира директна реакција и селективноста кон изооктанот)

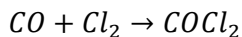
- од друга страна, повеќе  $C_4H_{10}$  значи и повеќе неизреагирани реактанти, односно поголем систем за сепарација и поголеми транспортни уреди за рецикулација (зголемување на капитални и оперативни трошоци)!

- затоа – се размислува за **оптимален вишок!**

Доколку ваквиот концепт се примени и кај HDA процесот, може да се заклучи дека  $H_2$  е реактантот кој треба да се додава во вишок, со што:

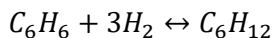
- се форсира степенот на конверзија на толуенот
- се инхибира споредната реакција (се поместува кон „лево“), каде  $H_2$  се јавува како продукт
- се согоруваат формираните саѓи во реакторот
- вишокот  $H_2$  дејствува и како терморегулатор во реакторот – го апсорбира вишокот на топлина.

Сличен е примерот на производство на фозген, кој е боев отров:



Каде  $CO$  се додава во вишок, со цел да се зголеми степенот на конверзија на хлорот, до негово целосно искористување.

Во одредени случаи тешко се сепарираат продукти од реактанти, поради нивната физичко-хемиска сличност. На пример, при производство на циклохексан:



- отстранување на  $C_6H_6$  од  $C_6H_{12}$  е тешко поради хемиската сличност, при што релативната испарливост на овие две компоненти е блиску до 1. Но, од друга страна,  $C_6H_6$  е канцероген, па дури и траги **мора да се отстранат!**

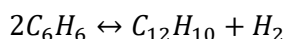
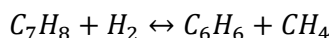
## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

- Затоа,  $H_2$  се додава во вишок кај оваа реакција (форсирање максимален степен на конверзија на  $C_6H_6$ ).

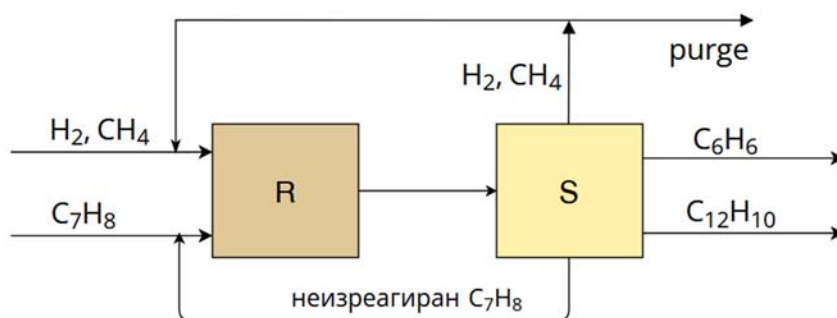
Во суштина, моларниот однос на реактантот на влез во реакторскиот систем е битен дизајн параметар. Како што видовме од наведените примери, дури и вишокот на реактант има свој „оптимум“, за кој нема воопштени, хеуристички правила, туку е предмет на итеративни испитувања.

### 2.4.1 Материјален биланс за процесен проточен дијаграм со рецикулација

Со цел детална презентација на развојот на материјалниот биланс на процесен проточен дијаграм со рецикулација, како пример го разгледуваме HDA процесот (пример 1):



Во претходниот дел овој процес го презентиравме со 1 блок (слика 2.6), соодветно за ниво 2 на интеграција на проточниот дијаграм, но сега ќе направиме експанзија на тој дијаграм, при што посебно се анализирани сегментите на реакторски и сепарациски систем, графички презентирани како посебни процесни блокови (слика 2.7).



Слика 2.7 Систем реактор-сепаратор за HDA процесот

Во однос на лимитирачкиот реактант, толуен, билансот на влез во реакторот е:

$$F_T = F_{FT} + (1 - X)F_T$$

Каде:  $F_T$  – толуен на влез во реакторот;  $F_{FT}$  – свеж толуен од напојната струја;  $(1 - X)F_T$  – рециркулиран (неизреагиран) толуен.

Степенот на конверзија може да се претстави како конверзија по еден циклус на задржување на реакционата смеса во реакторот ( $X$ ). Со средување на изразот, се добива:

$$F_T = F_{FT} + F_T - XF_T$$

А по скратување:

$$F_{FT} = XF_T$$

$$F_T = \frac{F_{FT}}{X}$$

Ваквиот израз е валиден за лимитирачкиот реактант во анализираниот процес, под претпоставка за целосен поврат на неизреагираниот  $C_7H_8$  и негово рециркулирање назад во реакторот. Но, бидејќи секогаш дел од неизреагираниот  $C_7H_8$  ќе „избега“, **неопходно е овој материјален биланс да се модифицира!**

Билансот во однос на водородот зависи од одлуките поврзани со рециркулирачката структура. Имено, соодносот на количините на водород и лимитирачки реактант, на влез во реакторскиот систем директно зависи од фактот дали толуенот и дифенилот заедно се рециркулираат во реакторот или неизреагираниот толуен се сепарира и како таков се враќа во системот, а дифенилот се складира како нуспродукт. Притоа, се подразбира претходна сепарација на бензенот од реакторскиот ефлуент. Односно:

$$\theta_{H_2} = \frac{\text{mol } H_2}{\text{mol } C_7H_8} \text{ или } \theta_{H_2} = \frac{\text{mol } H_2}{\text{mol } (C_7H_8 + C_{12}H_{10})}$$

$$[\text{вкупен } H_2 \text{ на влез во реактор}] = \theta_{H_2} \cdot \frac{F_{FT}}{X}$$

каде што:

$$[\text{вкупен } H_2 \text{ на влез во реактор}] = R_G \cdot y_{R,H_2} + F_G \cdot y_{F,H_2}$$

$R_G$  – вкупен проток на рециклиран гас;



## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

$y_{R,H_2}$  – удел на  $H_2$  во рециклираниот гас (кој е ист со уделот на  $H_2$  во *purge* струјата  $y_{P,H_2}$ );

$F_G$  – вкупен проток на напоен гас (95 %  $H_2$  и 5 %  $CH_4$ ) – свеж напој;

$y_{F,H_2}$  – удел на  $H_2$  во напоен гас.

$$R_G \cdot y_{R,H_2} + F_G \cdot y_{F,H_2} = \theta_{H_2} \cdot \frac{F_{FT}}{X}$$

Со изведување на даденото равенство за напој на свеж гас и замена на напојот на толуен со производноста на бензен и селективноста ( $P_b, S$ ) и имајќи предвид дека  $y_{R,H_2} = y_{P,H_2}$ :

$$F_G = \frac{P_b}{S(y_{F,H_2} - y_{P,H_2})} \left[ 1 - (1 - y_{P,H_2}) \frac{(1 - S)}{2} \right]$$

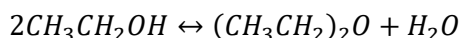
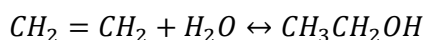
А во однос на рециркулирачката гасна струја:

$$R_G = \frac{P_b}{S \cdot y_{P,H_2}} \left( \frac{\theta_{H_2}}{X} - \frac{y_{F,H_2}}{y_{F,H_2} - y_{P,H_2}} \right)$$

Во согласност со изведените изрази за материјалниот биланс на HDA процесот со рециркулирачка структура (ниво 3), може да се заклучи дека токму дизајн варијаблите  $P_b, S, y_{P,H_2}, y_{F,H_2}, \theta_{H_2}$  и  $X$  се неопходните променливи чии вредности го диктираат дизајнот (синтезата) на процесниот проточен дијаграм и се предмет на консеквентна процесна оптимизација.

Пример 2: Производство на етанол со хидратација на етилен

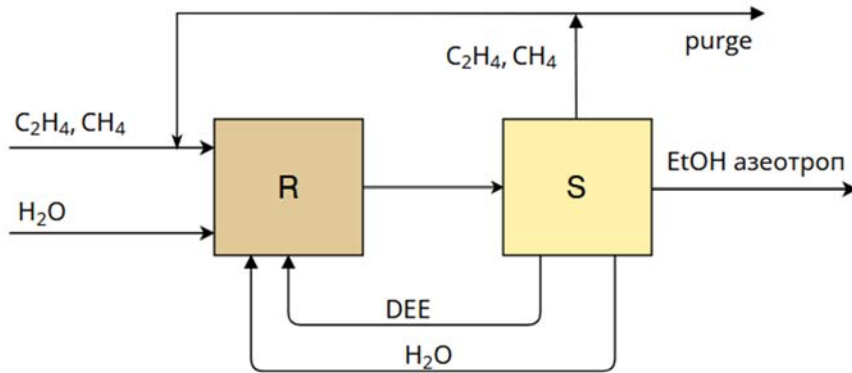
Хемизмот на наведениот пример е даден со следните стехиометриски равенки:



За изведување на пресметките на овој пример посакуваната производност на етанол (како азеотропна смеса со 85,4 % mol етанол) е 783 mol/h.

$$P_E = 783 \text{ mol/h}$$

Овој процес се изведува во 1 реактор, бидејќи дветереакции се одвиваат при исти оперативни услови. Структурата на процесниот проточен дијаграм е дадена на слика 2.8.



**Слика 2.8** Процесен проточен дијаграм на процесот на производство на етанол

Кај овој пример лимитирачки реактант е водата, при што компонентниот биланс на водата го вклучува и делот кој го напушта процесот со конечниот продукт како азеотропна смеса. Во вкупната количина на излезен продукт, уделот на етанолот произлегува од дефинираниот состав на азеотропната смеса:

$$y_{EtOH} \cdot P_E = 0,854 \cdot 783 \frac{\text{mol}}{\text{h}} = 669 \text{ mol/h}$$

Оттука, количината на вода во излезната струја (продукт струјата) изнесува  $114 \text{ mol/h}$ .

Компонентниот биланс за водата е даден со изразот:

$$F_W = F_{W,P} + F_{W,R}$$

$$F_{H_2O} = y_{H_2O} \cdot P_E + (1 - y_{EtOH}) \cdot P_E$$

$$F_{H_2O} = 0,854 \cdot 783 + (1 - 0,854) \cdot 783 = 783 \text{ mol/h}$$

каде:

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

$F_W$  – вкупна вода;

$F_{W,P} = (1 - y_{EtOH}) \cdot P_E$  – вода што го напушта системот со продуктот (во азеотропна смеса);

$F_{W,R} = y_{H_2O} \cdot P_E$  – вода потребна за реакција.

Со замена на изразите, се добива:

$$(F_{W,P} + F_{W,R}) + [F_W(1 - X) - F_{W,P}] = F_W$$

По средување на последниот израз, се добива:

$$F_{W,R} = F_W \cdot X$$

А вкупното количество на вода е дефинирано со:

$$F_W = \frac{F_{W,R}}{X}$$

Со тоа е дефиниран вкупниот потребен напој од вода како проток на вода потребен за реакцијата, поделен со степенот на конверзија.

Со цел комплетирање на материјалниот биланс на процесот, неопходно е да се дефинираат и протоците на останатите компоненти:

- 1) Проток на лимитирачки реактант;
- 2) Молски сооднос на другите учесници во реакцијата со лимитирачкиот реактант.

### 2.4.2 Топлински ефекти во реакторскиот систем

Во зависност од топлинските ефекти на реакциите кои се одвиваат во реакторот или реакторскиот систем, како и врз основа на реакциониот план, можни се три режими на работа: изотермно, адијабатски, со размена на топлина.

Постојат ограничувања во однос на изборот на соодветен режим на работа, но претходно ги анализираме основните аспекти на топлинскиот ефект  $\Delta H_r$ , како топлина генерирана (кај егзотермните реакции) или потребна топлина за одвивање на реакција (кај ендотермните реакции)

Топлинскиот напој во реакторот е дефиниран како производ на реакционата енталпија (топлина на реакција) и вредноста на протокот на свеж напој на лимитирачки реактант:

$$[\text{Топлински напој на реакторот}] = [\text{топлина на реакција}] \cdot [\text{свеж напој на лимитирачки реактант}].$$

Временската промена на  $T$  во адијабатски услови – ПОЈДОВНА ТОЧКА!  
Во суштина, промената на температурата во реакторот која е резултат на адијабатска работа на системот е резултат на термодинамичките карактеристики на реакционата смеса. Повторно, како пример го разгледуваме HDA процесот, кој е егзотермен.

**Пример:** HDA процес:  $\Delta H_r = -21530 \text{ Btu/mol } C_7H_8$

$$(-22715 \text{ kJ/mol } C_7H_8)$$

$$\text{- нето топлина ослободена} = -21530 \cdot \frac{Pb}{S}$$

$$F_{FT} = \frac{Pb}{S}$$

Како база за пресметка, земаме:  $Pb = 265 \text{ mol/h}$  и  $S = 0,98$ .

$$F_{FT} = 273 \text{ mol/h}$$

$$\Delta H_r = -21530 \cdot 273 = -5878 \cdot 10^6 \text{ Btu/h}$$

Доколку целта е изотермно водење на процесот, токму генерираната топлина е количината на топлина што треба да се одведува од реакторот (потребна топлина отстранување  $Q_R = 5.878 \cdot 10^6 \text{ btu/h}$ ).

Реактантите влегуваат во реакторот на температура од  $1150 \text{ }^\circ\text{F}$ . Доколку, пак, одлуката е адијабатска работа на реакторот, пресметаното количество на генерирана топлина ќе се акумулира во реакционата смеса (реактанти и продукти).

Под претпоставка за степенот на конверзија,  $X = 0,75$  (по поминување – *per pass conversion*) и содржината на водород во *purge* струјата,  $u_{P,H_2} = 0,4$ , може да се дефинира составот на реакторскиот ефлуент.

Реакторскиот ефлуент се состои од:

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

$$C_6H_6 = 265 \text{ mol/h;}$$

$$C_7H_8 = 91 \text{ mol/h (неизреагиран);}$$

$$C_{12}H_{10} = 4 \text{ mol/h;}$$

$$F_G = 496 \text{ mol/h;}$$

$$R_G = 3371 \text{ mol/h.}$$

Вкупната количина на толуен на влез во реакторот  $C_7H_8$  претходно е дефинирана и изнесува 273 mol/h.

Прво, анализираме адијабатска работа, каде целата  $Q_R = 5.878 \cdot 10^6 \text{ Btu/h}$  се „апсорбира“ од  $F_T$ ,  $F_G$ ,  $R_G$ , со што ќе се зголеми температурата во самата реакциона смеса:

$$Q = m \cdot C_p \cdot \Delta T = m \cdot C_p \cdot (T_{IN} - T_{OUT})$$

За овие пресметки неопходни ни се литературни податоци за специфичните топлински капацитети на секоја од компонентите во реакционата смеса, кои се дадени табеларно:

Компонента	$c_p$ [Btu/mol °F]
$H_2$	7
$CH_4$	10,1
$C_7H_8$	48,7

Со оглед на тоа што составот на *purge* струјата и рециркулирачката струја е идентичен (нема сепарација кај гасната струја), може да се пресмета и специфичниот топлински капацитет на рециркулирачката гасна струја, која се состои од  $H_2$  и  $CH_4$ :

$$c_{p,R} = 0,4 \cdot 7 + 0,6 \cdot 10,1 = 8,86 \text{ Btu/mol } ^\circ\text{F}$$

Овој параметар ни е неопходен за пресметка на температурата на реакторскиот ефлуент (и на реакционата смеса):

$$Q = m \cdot C_p \cdot \Delta T = \sum m C_p \cdot (T_{IN} - T_{OUT})$$

Односно, со замена на вредностите се добива:

$$-5.878 \cdot 10^6 = [(273 + 91) \cdot 48.7 + 496 \cdot 7 + 3371 \cdot 8.86] \cdot (1150 - T_{OUT}).$$

$$T_{OUT} = 1265 \text{ }^\circ\text{F}$$

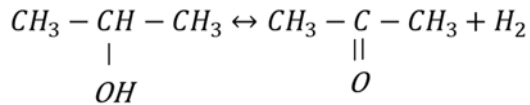
Оваа вредност за излезна температура и температура во реакторот, постигната при адијабатска работа, е во согласност со претходно дефинираните оптимални вредности за работна температура (1150 – 1300 °F).

Во случај кога реакторот работи со размена на топлина, за дефинирање на потребната површина за измена на потребното количество топлина, неопходно е да го дефинираме вкупниот коефициент на пренос на топлина,  $U$ :

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T$$

$$A = \frac{Q}{U \cdot \Delta T}$$

**Пример:** Процес на производство на ацетон (ендотермна реакција) со дехидрогенација на изопропанол:



$$\Delta H_R = 25800 \text{ btu/mol}$$

Како база за пресметки се претпоставува производност на ацетон од 3 kg/h, односно 51,3 mol/h. Потребното количество на топлина во единица време е:

$$Q = 51,3 \cdot 25800 = 1.324 \cdot 10^6 \text{ Btu/h}$$

Влезната температура на напојот (напој и рециркулат) во реакторот изнесува  $T_{in} = 576 \text{ }^\circ\text{F}$ . Во согласност со предвидениот реакционен план, се определуваме за изотермна работа!

Додека пак, изборот на соодветен модел на реакторски дизајн, особено кога се работи за каталитички проточен реактор, зависи од повеќе фактори, а во основа се дефинира според моделот на експлоатација на катализаторот:

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

- Фиксен слој (Fixed bed system)
- Подвижен слој (Moving bed system)
- Флуидизиран слој (Fluidized bed system), со две најчести изведби:
  - Bubbling fluidized bed
  - Circulating fluidized bed.

Во однос на соодветните модели и изведби на реакторскиот дизајн, потребен е соодветен избор на процесна единица (реактор), која овозможува температурна контрола во системот, како од аспект на потребната површина за топлинска размена, така и од аспект на топлинските карактеристики. Наведени се неколку комерцијално распространети типови на реакторски дизајн:

Кај реакторите со фиксен слој, *Fixed bed*, обично површината на пренос на топлина е од 6000 до 8000 ft<sup>2</sup>

- кај реакција во парна (гасна) фазна реакција, типично  $U \cong 20 \text{ btu/h ft}^2\text{°F}$ , па оттука, ако  $Q = 1 \cdot 10^6 \text{ btu} \Rightarrow 1 \cdot 10^6 = 20 \cdot A \cdot \Delta T$ , ако  $\Delta T = 50 \text{ °F} \Rightarrow A = 1000 \text{ ft}^2$

- затоа, во вакви услови, топлината која може да се размени е  $6 \div 8 \cdot 6 \text{ btu!}$

- ваквата пресметка помага во определување на молскиот проток на влезниот (лимитирачки) реактант!

**Пример:** кај HDA -  $Q = -5.8 \cdot 10^6 \text{ btu}$ , значи може во 1 реактор (во нашиот пример).

Топлински носачи (инертни компоненти со поволни термодинамички карактеристики), овозможуваат:

- температурна контрола
- топлински напој „врзан“ за свежиот напој
- за температурна регулација – *recycle* неизреагиран реактант (или *by-product*)

- додавање инерт кај HDA – **CH<sub>4</sub>**, при рециклирање на гасната струја и CH<sub>4</sub> влегува во реактор, а има улога на топлински разредувач со доволно висок Ср.

- кај оксидациони системи – иста улога на N<sub>2</sub>.

### Рециклирачка струја – дел 2

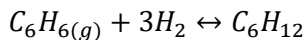
Дефинирањето на рециркулирачката структура на процесниот проточен дијаграм директно зависи од оперативната структура на технолошкиот процес, па затоа е неопходно да биде усогласено со:

- I. Рамнотежните ограничувања на студираниот процес
- II. Реакторски дизајн

Во однос на рамнотежните ограничувања, од примарно значење е дефинирањето на рамнотежниот степен на конверзија при специфицирани вредности на работните параметри, кој за реверзибилните реакции е максимален степен на конверзија.

Како пример го анализираме процесот на производство на циклохексан:

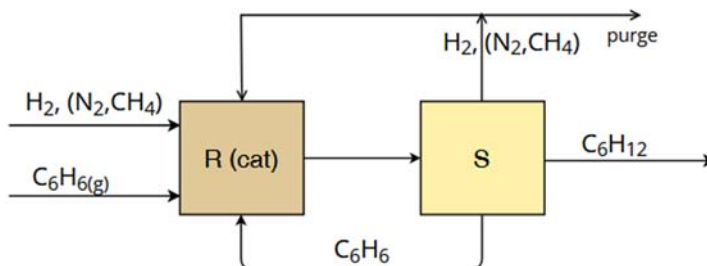
**Пример 1.** Синтеза на циклохексан со каталитичка реакција на хидрогенација на бензен. Реакцијата се одвива во парна фаза, при работна температура од 497 K.



Овој процес има типичен процесен проточен дијаграм, каде реакторскиот систем е претставен со каталитички реактор и каде лимитирачкиот реактант е бензенот, а H<sub>2</sub> се додава во вишок, со цел да се максимизира конверзијата на лимитирачкиот реактант и производството на циклохексан (слика 2-9).



## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм



**Слика 2.9** Процесен проточен дијаграм за процесот на синтеза на циклохексан

Реакторскиот ефлуент е комплексен систем, во кој се присутни продуктот и неизреагираните реактанти, што неминовно упатува на соодветно димензиониран сепарациски систем. Но, во конкретниот случај, лимитирачкиот реактант и посакуваниот продукт ( $C_6H_6$  и  $C_6H_{12}$ ) се слични по своите физичко-хемиски својства, па тешко се одделуваат траги од  $C_6H_6$  во продуктната струја.

Составувањето на материјалниот биланс за процесот ги вклучува следните претпоставки:

- максимална ефикасност на сепарацискиот систем во однос на сепарацијата на неизреагираниот бензен и негово целосно рециклирање назад во реакторот;
- Како база за пресметки е дефинирана производност  $P_{C_6H_{12}} = 100 \text{ mol/h}$ ;
- Бидејќи нема споредни реакции, селективноста  $S = 1$ ;
- Напојот на лимитирачкиот реактант,  $C_6H_6$ , е  $100 \text{ mol/h}$ ;
- Напој на свеж гас,  $F_{F,H_2}$  има состав: 97,5 %  $H_2$ , а остатокот се примеси ( $N_2, CH_4$ );
- Вкупниот напој на гас на влез во реактор е  $F_G = 3 \cdot P_{C_6H_{12}} + F_{F,H_2}$ ;
- Вкупниот напој на водород во реакторот е  $F_{T,H_2} = 0,975 \cdot F_G$ .

Билансот на вентилирачкиот гас (*purge* струјата),  $P_G$ , е следен:

$$P_G = F_{F,H_2} + 0,025 \cdot F_G$$

Уделот на водородот во оваа струја може да се претстави како:

$$y_{P,H_2} = \frac{F_{F,H_2}}{F_{F,H_2} + 0,025 \cdot F_G}$$

Билансот дефиниран преку напојот на свеж гас:

$$0,975 \cdot F_G = 3 \cdot P_{C_6H_{12}} + y_{P,H_2} (F_{F,H_2} + 0,025 \cdot F_G)$$

каде што:

$$F_{F,H_2} = 0,975 \cdot F_G - 3 \cdot P_{C_6H_{12}}$$

Со замена во горното равенство, се добива:

$$0,975 \cdot F_G = 3 \cdot P_{C_6H_{12}} + y_{P,H_2} (0,975 \cdot F_G - 3 \cdot P_{C_6H_{12}} + 0,025 \cdot F_G)$$

А по средување на изразот:

$$F_G = \frac{3 \cdot P_{C_6H_{12}} (1 - y_{P,H_2})}{0,975 - y_{P,H_2}}$$

Билансот на струјата во однос на неизреагираниот  $H_2$  во гасниот рециркулат, под претпоставка дека гасниот рециркулат,  $R_G$ , има ист состав како и *purge* струјата, е следен:

$$R_{G,H_2} = R_G \cdot y_{P,H_2}$$

Во билансните изрази го воведуваме напојниот сооднос на  $H_2$  со лимитирачкиот реактант:  $\theta_{H_2} = \frac{n_{H_2}}{n_{C_6H_6}}$ . Напојот на бензен, во согласност со реакционата стехиометрија, кореспондира со неопходниот напој на  $H_2$ ,  $F_B = \frac{P_C}{X}$ .

$$\left[ \begin{array}{c} \text{вкупен } H_2 \\ \text{на влез во } R \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} \text{рециркулиран} \\ H_2 \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{c} \text{свеж напој} \\ H_2 \end{array} \right]$$

$$\frac{P_C}{X} \cdot \theta_{H_2} = R_G \cdot y_{P,H_2} + 0,975 \cdot F_G$$

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

По средовање на изразот, се добива:

$$R_G = \frac{1}{y_{P,H_2}} \cdot (\theta_{H_2} \cdot \frac{P_C}{X} - 0.975F_G)$$

Излезот од реакторот, односно реакторскиот ефлуент ги содржи продуктот  $C_6H_{12}$ , неизреагираните реактанти  $C_6H_6$  и  $H_2$ , како и гасните примеси  $N_2$  и  $CH_4$ . Содржината на поединечните компоненти може да се претстави како:

- $C_6H_{12} \rightarrow P_C \text{ mol/h}$
- $C_6H_6 \rightarrow \left(\frac{P_C}{X}\right) \cdot (1 - x) \rightarrow \text{неизреагиран mol/h}$
- $H_2 \rightarrow \theta_{H_2} \cdot \frac{P_C}{X} - 3P_C = P_C \left(\frac{\theta_{H_2}}{X} - 3\right) \text{ mol/h}$
- инерти  $\rightarrow 0,025F_G + (1 - y_{P,H_2})R_G = \left(\frac{1 - y_{P,H_2}}{y_{P,H_2}}\right) \left(\frac{\theta_{H_2}}{X} - 3\right) P_C \text{ mol/h}$

Сумарно, вкупниот израз за биланс на ефлуент на R:

$$R_{EFF} = P_C \left[ \frac{1}{X} + \left( \frac{\theta_{H_2}}{X} - 3 \right) \cdot \frac{1}{y_{P,H_2}} \right]$$

Од аспект на константата на рамнотежа за реверзибилната реакција, која во согласност со процесните параметри се одвива во парна фаза, потребно е составот да го изразиме преку фугацитетите на поединечните компоненти:

$$K_e = \frac{f(C_6H_{12})}{f(C_6H_6) \cdot f^3(H_2)}$$

Каде:  $f_i = v_i \cdot y_i$  е фугацитет на компонентата  $i$ ,  $v_i$  – коефициент на фугацитет на компонента  $i$  и  $y_i$  – молски удел на компонентата  $i$ .

$$K_e = \frac{v_{C_6H_{12}} \cdot y_{C_6H_{12}}}{(v_{C_6H_6} \cdot y_{C_6H_6}) \cdot (v_{H_2} \cdot y_{H_2} \cdot P_t)^3}$$

Под претпоставка за  $v_{H_2} \cong 1$  и  $\frac{v_{C_6H_{12}}}{v_{C_6H_6}} = 1.13$ , следува:

$$1,13P_t^3 K_e = \frac{X_e}{1 - X_e} \left[ \frac{Y_{P,H_2} - 3X_e + \theta_{H_2}}{(\theta_{H_2} - 3X_e)Y_{P,H_2}} \right]^3$$

Анализата на поставениот биланс а во корелација со избраните дизајн варијабли, резултира со следните заклучоци:

1. Работа при зголемени вредности на  $P_t$ : повисока цена на реактор  $\uparrow$ , неопходен е компресор со поголем капацитет, а голем напој резултира во зголемување на  $\uparrow$  капитални и оперативни трошоци;

2. Работа со зголемен вишок на водород на влез во реакторот – зголемен  $\theta_{H_2}$ : подобра конверзија на бензенот –  $X_B$ , но и поголеми количини неизреагиран  $H_2$ , поголем компресор (оперативни трошоци  $\uparrow$ );

3.  $T$ : реакцијата е егзотермна, ладењето влијае  $\uparrow$  позитивно на рамнотежната конверзија, но и негативно на кинетиката на самата реакција, што, пак, резултира во потреба од поголем реактор (поголеми капитални трошоци).

Во врска со рамнотежните ограничувања, еден од примарните начини за ефективно зголемување на степенот на конверзија на лимитирачкиот реактант, односно поместување на рамнотежата на реверзибилната реакција „на десно“, а притоа задржувајќи ја константна вредноста на работната температура и другите оперативни параметри, е примена на интегриран реактор-сепаратор систем. Ваквото инженерско решение претставува интеграција на двата елементарни сегменти на технолошкиот процес, при што имаме континуирано одведување на еден од продуктите.

**Пример 2.** Производство на ацетон во процес на дехидратација на изопропанол

- оваа реакција се одвива при  $300^\circ F$ , а рамнотежната конверзија,  $X_E$ , е мала ( $X_E = 0,32$ )

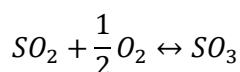
- катализаторот е суспендиран во зовриен растворувач, а изопропанолот се додава постепено во оваа смеса,

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

- работната температура се одржува над  $T_{\text{вриење}}$  на ацетонот → оттука, во моментот на формирање ацетон, заедно со пареата го напушта реакторот, се отстранува со реакторскиот ефлуент (се поместува  $K_E$  на десно).

**Алтернатива:** 3 CSTR-и со комплетна рециркулација.

**Пример 3.** Производство на  $H_2SO_4$  во присуство на катализатор  $V_2O_5$ . Оваа реакција е силно егзотермна.



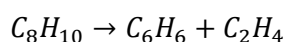
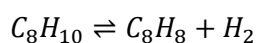
Се применува DCDA протокол (смеса од  $SO_2$  и  $O_2$  се загрева и се спроведува низ слојот катализатор и  $T$  многу брзо расте). По одреден степен на  $X$ , струјата продукт со  $SO_3$ ,  $SO_2$  и  $O_2$  се отстранува од реакторот, се лади и се транспортира во втор реактор за дополнителна конверзија. Во суштина, процесниот проточен дијаграм предвидува 2 контакти на реактантите со катализаторот, но со предвидено интерконекциско ладење на процесната струја што го напушта првиот реактор.

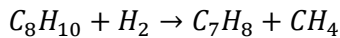
Следен стадиум на разгледуваниот процес е апсорпција на  $SO_3$  во разредена  $H_2SO_4$  за да се формира олеум –  $H_2S_2O_7$ . Со понатамошно разредување се добива  $H_2SO_4$ .

Високата работна температура обезбедува поголема брзина на реакција – побрза кинетика, и помал волумен на реактор ( $V_R$ ), но бидејќи вредноста на рамнотежната конверзија,  $X_E$ , е мала и има големи (оперативни) трошоци за рециркулација на реакторскиот ефлуент.

Во овој случај, посакувана алтернатива на процесниот дијаграм е решението: преку DCDA процесот да се постигне зголемување на  $X_E$ , но по цена на 2 каталитички реактори со пакување.

**Пример 4.** Производство на стирен со дехидрогенизација на етил бензен, при што се јавуваат 2 споредни реакции, кои продуцираат бензен и толуен. Хемизмот на реакциите кои се одвиваат во реакторскиот систем е следен:





Овие реакции се одвиваат спонтано при исти оперативни услови од 20 *psia* и 1100 °F;

Со оглед на фактот што промената на оперативните услови при одвивањето на реакцијата не резултира со поголема селективност кон посакуваниот продукт, неопходно е алтернативно решение: се додава водена пара на влез во R, со етил бензенот, со што се намалува парцијалниот притисок на стирен и H<sub>2</sub> во реакторот и со тоа се поместува рамнотежата на првата реакција на десно, односно се фаворизира производството на стирен.

Воведената пара останува како нечистотија/инерт и кондензира, но водата е често не се меша со јаглеводороди, па лесно се отстранува како посебна фаза (раздвојување на фази). Доколку некој органски материјал се раствора во кондензираната вода, неопходна е сепарација по пат на *stream stripping*.

Кај системите, кај кои е неопходна рецикулација на гасна фаза (*gas recycle/purge* струи), потребно е соодветно димензионирање на адекватна компресорска единица, која во основа значително ги зголемува капиталните и оперативните трошоци. Најчесто користени единици се од центрифугален тип. Нивната теоретска моќност,  $P_T$  може да се претстави со корелацијата:

$$P_T = \left(\frac{3.03 \cdot 10^{-5}}{\gamma}\right) p_{in} Q_{in} \left[\left(\frac{p_{out}}{p_{in}}\right)^\gamma - 1\right]$$

каде:  $p_{in}$  – влезен притисок,  $Q_{in}$  – влезен проток, константа  $\gamma = \frac{(C_p/C_v - 1)}{(C_p/C_v)}$ .

При адијабатска компресија, излезната температура може да се пресмета од зависноста:

$$\frac{T_{out}}{T_{in}} = \left(\frac{P_{out}}{P_{in}}\right)^\gamma$$

Вообичаено, ефикасноста на компресорската единица за прелиминарни пресметки, а доколку ги земеме во предвид загубите од триење и

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

останатите фактори, ја претпоставуваме со вредност од 90 % од пресметаната теоретска моќност.

Во процеси, кога треба да се постигне компресија до високи притисоци, односно да се постигне голема разлика помеѓу влезниот и излезниот притисок, тогаш често се одбира повеќестепена компресија (со ладење помеѓу фазите):

На пример, вкупната работа кај систем со 3 компресори е дадена со:

$$\text{Работа на компресор} = M_{in} \cdot R \cdot T_{in} \cdot \left[ \left( \frac{P_2}{P_1} \right)^\gamma + \left( \frac{P_3}{P_2} \right)^\gamma + \left( \frac{P_4}{P_3} \right)^\gamma - 1 \right]$$

каде:  $M_{in}$  – молска маса на гасната фаза,  $R$  – универзална гасна константа,  $T_{in}$  – температура на влезната гасна струја.

→ најмала работа (оптимални работни услови) – кога се еднакви интерфазните односи на компресија (*intermediate compression ratios*):

$$\frac{P_2}{P_1} = \frac{P_3}{P_2} = \frac{P_4}{P_3}$$

### 2.5 Задачи

#### Задача 2.1

Две паралелни реакции со кинетика од прв ред се одвиваат изотермно, во шаржен (или PFR) реактор. Напојот во реакторот е чист реактант. Да се дефинира функционалната зависност на селективноста од степенот на конверзија. Стехиометријата на реакциите, каде  $P$  е посакуваниот продукт, а  $W$  е отпад, е дадена:



**Решение:**

$$S = f(x)$$

$$S = \left[ \frac{n_P}{n_{A, \text{конвертирани}}} \right] = \frac{n_P}{n_{A0} \cdot x}$$

$$r_P = \frac{dC_P}{dt} = k_1 C_A \quad (1)$$

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A - k_2 C_A \quad (2)$$

Почетен услов: при  $t=0$ ,  $C_A=C_{A0}$

Бидејќи реакцијата се изведува изотермно,  $k_1, k_2 = const$

Со решавање на равенката (2):

$$\frac{dC_A}{dt} = -C_A(k_1 + k_2)$$

$$\int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A} = - \int_0^t (k_1 + k_2) dt$$

$$\frac{1}{-(k_1 + k_2)} \ln(C_A - C_{A0}) = t,$$

ОДНОСНО:

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = e^{[-(k_1+k_2) \cdot t]}$$

или во конечен облик:

$$C_A = C_{A0} \exp[-(k_1 + k_2) \cdot t] \quad (3)$$

Во однос на конвертираните mol-ови А, кои може да се изразат како  $C_{A0} - C_A$  и степенот на конверзија X:

$$X = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}$$

$$C_{A0}X = C_{A0} - C_A$$

Со замена за  $C_A$  од претходниот израз:

$$C_{A0}X = C_{A0} - C_A = C_{A0}[1 - e^{-(k_1+k_2) \cdot t}] \quad (4)$$

Со замена на (3) во (1), се добива:



$$\frac{dC_P}{dt} = k_1 C_{A0} \exp[-(k_1 + k_2) \cdot t]$$

Со групирање на променливите, имаме:

$$\int_0^{C_P} dC_P = \int_0^t k_1 C_{A0} \exp[-(k_1 + k_2) \cdot t] dt$$

$$C_P = k_1 C_{A0} \frac{1}{-(k_1 + k_2)} e^{-(k_1 + k_2) \cdot t} \Big|_0^t$$

$$C_P = \frac{k_1 C_{A0}}{-(k_1 + k_2)} [e^{-(k_1 + k_2) \cdot t} - 1]$$

Или, по средовање на изразот:

$$C_P = \frac{k_1 C_{A0}}{(k_1 + k_2)} [1 - e^{-(k_1 + k_2) \cdot t}] \quad (5)$$

Селективноста може да се дефинира и како:

$$S = \left[ \frac{n_P}{n_{A, \text{конвертирани}}} \right] = \frac{C_P}{C_{A0} \cdot x}$$

А со замена на равенките (4) и (5) во изразот за селективност, се добива:

$$S = \frac{\frac{k_1 C_{A0}}{(k_1 + k_2)} [1 - e^{-(k_1 + k_2) \cdot t}]}{C_{A0} [1 - e^{-(k_1 + k_2) \cdot t}]}$$

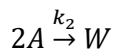
Или, во конечна форма, по кратење на изразот, за селективноста се добива:

$$S = \frac{k_1}{(k_1 + k_2)}$$

Конечниот облик на изразот за селективност посочува кон заклучокот дека селективноста не зависи од степенот на конверзија во дефинираниот реакторски систем и има константна вредност при дефинирани вредности на температурата, во услови на изотермна работа на избраниот реактор.

## Задача 2.2

Паралелни реакции се одвиваат изотермно, во шаржен (или PFR) реактор, со кинетика од прв ред во однос на реактантот за првата реакција и кинетика од втор ред за втората реакција, како што е дадено во стехиометриските изрази. Напојот во реакторот е чист реактант. Да се дефинира функционалната зависност на селективноста од степенот на конверзија. Хемизмот на реакциите, каде  $P$  е посакуваниот продукт, а  $W$  е отпад, е даден:



**Решение:**

$$S = f(x)$$

$$S = \left[ \frac{n_P}{n_{A, \text{конвертирани}}} \right] = \frac{C_P}{C_{A0} \cdot x}$$

$$\frac{dC_P}{dt} = k_1 C_A \quad (1)$$

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A - k_2 C_A^2 \quad (2)$$

$$-\frac{dC_A}{dt} = k_1 C_A + k_2 C_A^2 \quad (2.1)$$

Од соодносот на кинетичките изрази (1) и (2), произлегува:

$$-\frac{dC_P}{dC_A} = \frac{k_1 C_A}{k_1 C_A + k_2 C_A^2}$$

Доколку ги скратиме горниот и долниот израз на десната страна на равенството со  $k_1 C_A$ , тогаш:

$$-\frac{dC_P}{dC_A} = \frac{1}{1 + \left(\frac{k_2}{k_1}\right) C_A}$$

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

Решавањето на оваа диференцијална равенка, за почетни услови:  $t = 0$ ;  $C_P = 0$ ,  $C_A = C_{A0}$ :

$$\int_0^{C_P} dC_P = - \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{1 + \left(\frac{k_2}{k_1}\right) C_A}$$

Или со замена на долната и горната граница на интегралот на десната страна, со цел елиминација на знакот „минус“:

$$\int_0^{C_P} dC_P = \int_{C_A}^{C_{A0}} \frac{dC_A}{1 + \left(\frac{k_2}{k_1}\right) C_A}$$

Левата страна на равенството веднаш се решава, додека за десната воведуваме замена  $1 + \left(\frac{k_2}{k_1}\right) C_A = X$ , па соодветно и  $\frac{k_2}{k_1} dC_A = dX$ . Средувањето на горниот израз ни дава:

$$C_P = \frac{k_1}{k_2} \ln \left[ \frac{1 + \frac{k_2}{k_1} C_{A0}}{1 + \frac{k_2}{k_1} C_A} \right] \quad (3)$$

За изразот (3) е потребно да ја изразиме крајната (излезната) концентрација на лимитирачкиот реактант А преку степенот на конверзија, т.е.  $C_{A0}X = C_{A0} - C_A$ , или  $C_A = C_{A0}(1 - X)$

$$C_P = \frac{k_1}{k_2} \ln \left[ \frac{1 + \frac{k_2}{k_1} C_{A0}}{1 + \frac{k_2}{k_1} C_{A0}(1-X)} \right] \quad (4)$$

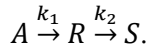
Изразот за селективност, со замена на равенката (4) во изразот за селективност, добива облик:

$$S = \frac{C_P}{C_{A0} \cdot x} = \frac{\frac{k_1}{k_2} \ln \left[ \frac{1 + \frac{k_2}{k_1} C_{A0}}{1 + \frac{k_2}{k_1} C_{A0}(1-X)} \right]}{C_{A0} X}$$

Понатамошното средување на крајниот израз само ја потврдува зависноста на изразот за селективност од степенот на конверзија, т.е.  $S = f(X)$ !

### Задача 2.3

Во шаржен реактор изотермно се одвива хемиска реакција, која по хемизмот е сериска. Кинетиката е од прв ред, во согласност со стехиометрискиот израз:



Селективнста може да се изрази како  $S = \frac{\text{mol } R \text{ продуцирани}}{\text{mol } A \text{ потрошени}}$ .

Да се направи анализа на функционалната зависност на селективноста од степенот на конверзија.

**Решение:**

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A \quad (1)$$

$$\frac{dC_R}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_R \quad (2)$$

$$\frac{dC_S}{dt} = k_2 C_R \quad (3)$$

Почетни услови:  $t = 0$ ;  $C_R = 0$ ,  $C_A = C_{A0}$

Во однос на реактантот  $A$ , билансот е следен:

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A$$

$$\int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{-k_1 C_A} = \int_0^t dt$$

$$-\frac{1}{k_1} \ln \frac{C_A}{C_{A0}} = t \ln \frac{C_A}{C_{A0}} = -k_1 t$$

$$C_A = C_{A0} \cdot \exp(-k_1 \cdot t) \quad (4)$$

Изразено преку степенот на конверзија, концентрацијата на реактантот е  $X = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}$ .

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

Со замена на  $C_{A0}X = C_{A0} - C_A$ , односно  $C_A = C_{A0} \cdot (1 - X)$  во изразот (13), добиваме:

$$C_{A0}X = C_{A0}(1 - e^{-k_1 t}) \quad (5)$$

Со досредување на претходниот израз се воспоставува релацијата време-степен на конверзија:

$$1 - X = e^{-k_1 t} \quad (5.1)$$

$$\ln(1 - X) = -k_1 t$$

Мултиплицирање на двете страни на равенството со  $k_2$  резултира со  $k_2 \ln(1 - X) = -k_1 k_2 t$ , притоа  $\frac{k_2}{k_1} \ln(1 - X) = -k_2 t$  што може да се претстави и како:

$$e^{-k_2 t} = (1 - X)^{\frac{k_2}{k_1}} \quad (5.2)$$

Во однос на продуктот  $R$ , билансот е следен:

$$\frac{dC_R}{dt} = k_1 C_{A0} \cdot e^{-k_1 t} - k_2 C_R$$

$$\frac{dC_R}{dt} + k_2 C_R = k_1 C_{A0} \cdot e^{-k_1 t}$$

Со примена на правилото, според кое израз од обликот  $\frac{dy}{dx} + P \cdot y = Q$ , се заменува со  $y \cdot e^{\int P dx} = \int Q \cdot e^{\int P dx} + const$ , последниот израз го заменуваме директно со:

$$C_R \cdot e^{\int k_2 dt} = \int k_1 C_{A0} \cdot e^{-k_1 t} \cdot e^{\int k_2 dt} + const$$

$$C_R \cdot e^{k_2 t} = \int k_1 C_{A0} \cdot e^{-k_1 t} \cdot e^{k_2 t} + const$$

$$C_R \cdot e^{k_2 t} = k_1 C_{A0} \int e^{(k_2 - k_1) \cdot t} + const$$

$$C_R \cdot e^{k_2 t} = \frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1} \cdot e^{(k_2 - k_1) \cdot t} + const$$

Вредноста на константата се определува ако го земеме почетниот услов,  $t = 0$ ;  $C_R = 0, C_A = C_{A0}$ :

$$const = -\frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1}$$

Со замена на константата во горниот израз, и со делење на двете страни од равенството со  $e^{k_2 t}$  следува:

$$C_R = \frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1} \cdot e^{(-k_1) \cdot t} - \frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1} \cdot e^{(-k_2)t}$$

$$C_R = \frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1} \cdot (e^{(-k_1) \cdot t} - e^{(-k_2)t}) \quad (6)$$

Бидејќи изразите (5) и (6) се подготвени за примена во равенството за селективност, следува:

$$S = \frac{C_R}{C_{A0} \cdot x} = \frac{\frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1} \cdot (e^{(-k_1) \cdot t} - e^{(-k_2)t})}{C_{A0}(1 - e^{-k_1 t})}$$

Со воведување на равенствата (5.1) и (5.2) во последниот израз, се врши замена на променливите  $e^{(-k_1) \cdot t}$  и  $e^{(-k_2)t}$ ;  $t \rightarrow X$ , односно се воведува променливата степен на конверзија во студираниот израз:

$$S = \frac{\frac{k_1}{k_2 - k_1} \left[ (1 - X) - (1 - X)^{\frac{k_2}{k_1}} \right]}{[1 - (1 - X)]}$$

$$S = \frac{k_1 \left[ 1 - X - (1 - X)^{\frac{k_2}{k_1}} \right]}{(k_2 - k_1)X}$$

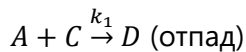
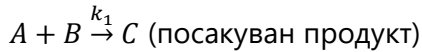
Анализата на добиениот конечен облик на изразот за селективност сугерира дека директно влијание врз селективноста имаат степенот на конверзија, како и вредностите на брзинските константи на двете реакции. Во ваков случај, анализата од аспект на хемиско реакционо инженерство продуцира заклучок дека е неопходно да се направи детална анализа на кинетичките изрази и вредностите на брзинските константи при различни вредности на работната температура. Со оглед на тоа што во условот на поставениот проблем е претпоставено изотермно водење

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

на реакцијата, пожелни вредности за работна температура се вредностите при кои  $k_1$  има повисока вредност.

### Задача 2.4

Во идеален CSTR реактор се одвиваат две паралелни реакции, со следниот механизам:



За наведениот систем познати се работната температура и притисок -  $T[\text{K}]$  и  $P[\text{bar}]$ , вкупниот волуменски проток,  $Q[\text{m}^3/\text{s}]$ , волуменот на реакторот,  $V[\text{m}^3]$ , соодносот на реактантот  $B$  и лимитирачкиот реактант  $A$  на влез во реакторот,  $\theta_B = F_{B0}/F_{A0}$  и времето на задржување на реакционата смеса во реакторот,  $\tau_Z = V/Q$ . Да се дефинира функционалната зависност на селективноста од степенот на конверзија, како и зависноста  $X_B = f(X_A)$ .

### Решение:

Количински биланс во однос на сите учесници во реакциите:

- Реактант  $A$ :  $F_{A0} - F_A = \tau \cdot (k_1 F_A F_B + k_2 F_A F_C)$
- Реактант  $B$ :  $F_{B0} - F_B = \tau \cdot (k_1 F_A F_B)$
- Продукт  $C$ :  $F_C = \tau \cdot (k_1 F_A F_B - k_2 F_A F_C)$
- Отпад  $D$ :  $F_D = \tau \cdot (k_2 F_A F_C)$

$$S = \frac{F_C}{F_{B0} - F_B} = \frac{\tau \cdot (k_1 F_A F_B - k_2 F_A F_C)}{\tau \cdot (k_1 F_A F_B)} = 1 - \frac{k_2 F_C}{k_1 F_B}$$

$$S = 1 - K \cdot \frac{F_C}{F_B}$$

Решавајќи за излезниот проток на продуктот  $C$ , се добива:

$$\frac{F_C}{F_{B0} - F_B} = 1 - K \cdot \frac{F_C}{F_B}$$

$$F_C = \frac{F_{B0} - F_B}{1 + K \cdot \frac{F_{B0} - F_B}{F_B}} \quad (1)$$

Исто така:

$$F_C = (F_{B0} - F_B) - (F_{A0} - F_A)$$

$$F_{A0} - F_A = F_{B0} - F_B - F_C$$

А со замена на изразот (1), во горното равенство, се добива:

$$F_{A0} - F_A = F_{B0} - F_B - \frac{F_{B0} - F_B}{1 + K \cdot \frac{F_{B0} - F_B}{F_B}}$$

Со оглед на дефиницијата за степен на конверзија,  $X_B = \frac{F_{B0} - F_B}{F_{B0}}$  и следствено  $F_B = F_{B0}(1 - X_B)$ , се добива:

$$F_{A0} - F_A = F_{B0}X_B - \frac{F_{B0}X_B}{1 + K \cdot \frac{F_{B0}X_B}{F_{B0}(1-X_B)}}$$

Доколку ја воведеме истата замена за степенот на конверзија во однос на реактантот А:

$$F_{A0}X_A = F_{B0}X_B - \frac{F_{B0}X_B}{1 + K \cdot \frac{X_B}{F_B}}$$

$$F_{A0}X_A = F_{B0}X_B \left( 1 - \frac{1}{1 + K \cdot \frac{X_B}{(1-X_B)}} \right)$$

$$F_{A0} - F_A = F_{A0}X_A = F_{B0}X_B \cdot \frac{KX_B}{1-X_B+KX_B} \quad (2)$$

$$X_A = \theta_B X_B \left( \frac{KX_B}{1-X_B+KX_B} \right) \quad (3)$$

равенството (3) ја дефинира зависноста на степенот на конверзија на реактантот А и реактантот В.



## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

Дополнително, селективноста може да се дефинира како  $S = \frac{F_C}{F_{A0} - F_A}$ , па со замена на (18) и (19) во изразот за селективност

$$S = \frac{\frac{F_{B0} - F_B}{1 + K \cdot \frac{F_{B0} - F_B}{F_B}}}{F_{B0} X_B \cdot \frac{K X_B}{1 - X_B + K X_B}} = \frac{\frac{F_{B0} X_B}{1 + K \cdot \frac{F_{B0} X_B}{F_{B0}(1 - X_B)}}}{F_{B0} X_B \cdot \frac{K X_B}{1 - X_B + K X_B}}$$

Со кратење на членот  $F_{B0} X_B$ , се добива:

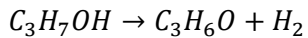
$$S = \frac{\frac{1}{1 + K \cdot \frac{X_B}{(1 - X_B)}}}{\frac{K X_B}{1 - X_B + K X_B}} = \frac{1 - X_B}{1 - X_B + K X_B}$$

Со средување на последниот израз, се добива математичкиот облик на зависноста на селективноста од степенот на конверзија на реактантот  $B$ , а индиректно и од степенот на конверзија на реактантот  $A$ .

$$S = \frac{1 - X_B}{K X_B}$$

### Задача 2.5

Енергетски интегриран процес за производство на ацетон од појдовна суровина – изопропил алкохол е прикажан на сликата. Процесниот дизајн е базиран на  $100 \text{ mol/h}$  ацетон. Напојната струја е азеотропна смеса со 70 % IPA (изопропил алкохол). Реакцијата се води изотермно, со вкупен коефициент на пренос на топлина од  $10 \text{ Btu/ft}^2 \text{ h } ^\circ\text{F}$ , во реактор-топлински изменувач од типот *shell&tube*, а реакцијата е ендотермна. Степенот на конверзија е 80 %, влезната температура е  $572 \text{ }^\circ\text{F}$ , реакционата енталпија  $25800 \text{ Btu/mol}$ , а специфичниот топлински капацитет на азеотропната смеса  $22 \text{ Btu/mol } ^\circ\text{F}$ . Неопходната топлина за изотермно водење на реакцијата се обезбедува со кондензација на *Dowtherm* течност во обвивката на реакторот (*shell*) при температура од  $600 \text{ }^\circ\text{F}$ . *Dowtherm* течноста се испарува во печка поврзана со реакторот, која има термичка ефикасност од 60 %. Загубите на топлина низ цевките меѓу печката и реакторот се 20 %. Цената на горивото неопходно за работа на печката е  $355 \text{ ден/mmt Btu}$ . Да се претпостави дека реакторот функционира  $8000 \text{ h/годишно}$ . Реакцијата ја има следната стехиометрија:

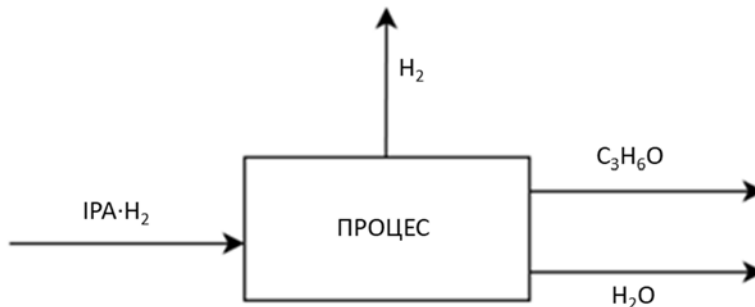


Да се:

- 1) Определи влезно-излезната структура на проточниот дијаграм за процесот;
- 2) Определат протоците на сите компоненти на влез и излез од процесот;
- 3) Скицира рециркулирачката структура и да се определи масениот биланс на рецикулатот;
- 4) Определи потребната површина за реакција кај реакторот;
- 5) Определат годишните трошоци за гориво во процесот.

**Решение:**

- 1) *Влезно-излезна структура*



- 2) *Напојот* е азеотропна смеса на изопропанол и вода, во сооднос 70:30 (% mass). Во согласност со реакционата стехиометрија и почетните услови:

$$P_A = P_{H_2} = 100 \text{ mol/h}$$

За продукција на дефинираното количество А (ацетон), потребен е  $F_{IPA} = 100 \text{ mol/h}$ , додека вкупниот напој ќе содржи и вода (W):

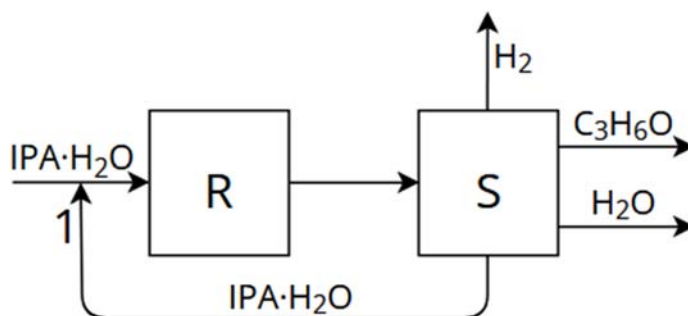
$$0.7 = \frac{100}{W + 100}, \text{ односно } W = 42,9 \text{ mol/h}$$

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

Оттука, влезниот (вкупниот) напој како азеотропна смеса е  $F_{T0} = 142,9 \text{ mol/h}$ .

### 3) Рециркулирачка структура на процесот

- Степенот на конверзија во реакторот, по циклус, изнесува  $X = 0,8$ .
- Остатокот неизреагиран IPA е во вишок вода, која мора да се отстрани, пред рециклирање назад во реакторот (најмалку 2 дестилациони колони). Прво се одделува ацетонот од ефлуентот, а потоа и вишокот вода од азеотропната смеса на IPA. Добиената азеотропна смеса се рециркулира назад во реакторот.



Потребната количина на IPA на влез во реакторот за да се обезбеди проектираната производност на ацетон од  $100 \text{ mol/h}$ , изнесува  $F_{0,IPA} = F_{IPA}/X = 125 \text{ mol/h}$ .

Доколку претпоставиме т.н. *complete recovery*, односно дека целата неизреагирана количина на IPA завршува во струјата за рецикулација, тогаш:

$$F_{S,IPA} = 125 \cdot 0,2 \text{ mol/h} = 25 \text{ mol/h}$$

Бидејќи оваа количина на IPA е содржана во азеотропна смеса, каде уделот на IPA е 70 %, вкупната струја за рецикулација (под претпоставка дека втората дестилациона колона на дното продуцира азеотропна смеса со 70 % IPA) изнесува  $F_{REC} = 35,7 \text{ mol/h}$ , од кои  $10,7 \text{ mol/h}$  се вода.

Конечно, на влез во реакторот ( $F_{0,R}$ ) имаме  $142,9 \text{ mol/h}$  свеж напој ( $F_{T0}$ ) и  $35,7 \text{ mol/h}$  рецикулат, односно  $178,6 \text{ mol/h}$  азеотропна смеса.

$$F_{0,R} = F_{T0} + F_{REC}$$

4) Топлински ефект на реактор – потребна површина за реакција

- Со цел обезбедување на потребната топлина за изотермно водење на оваа ендотермна реакција ( $T_{FEED} = T_{EFFLUENT}$ ), неопходно е следното количество топлина:

$$Q = \Delta H_r \cdot P_A = 25800 \frac{Btu}{mol} \cdot 100 \frac{mol}{h}, Q = 2,58 \cdot 10^6 Btu/h$$

Dowtherm пареата кондензира на 600 °F, а напојот е на 572 °F, па следува:

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T$$

$$2,58 \cdot 10^6 \frac{Btu}{h} = 10 \frac{Btu}{ft^2 h^\circ F} \cdot (600 - 572)^\circ F \cdot A$$

$$A = 9214 ft^2, \text{ односно } A = 856 m^2$$

5) *Годишни трошоци за гориво*

- Оваа пресметка се темели на почетните услови: ефикасност на печката од 60 %, загуби 20 %, цена од 3 550 ден/10<sup>6</sup> Btu, и годишни работни часови 8000 h/год.

$$[Q_{LOAD}] = \frac{2,58 \cdot 10^6 \frac{Btu}{h}}{0,6 \cdot (1 - 0,2)} = 5,375 \cdot \frac{10^6 Btu}{h}$$

На годишно ниво,  $Q_{ANNUAL} = 5,375 \cdot \frac{10^6 Btu}{h} \cdot 8000 \frac{h}{год}$ , односно  $Q_{ANNUAL} = 43000 \cdot \frac{10^6 Btu}{год}$

Со вкупен трошок од  $C = 43000 \cdot \frac{10^6 Btu}{год} \cdot 3550 \frac{ден}{10^6 Btu} = 152650000 \frac{ден}{год}$

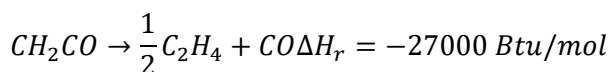
$$C = 2,49 \text{ мил } \text{€}/\text{год}$$

## Задача 2.6

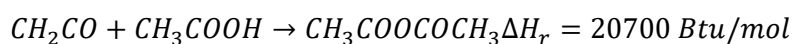
Ацетатен анхидрид се произведува од ацетон и оцетна киселина, во два сериски поврзани реактори. Во првиот реактор се одвива разлагање на ацетонот до кетен и метан, при работни услови од 700 °C и 1 atm.

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

Реакцијата е проследена и со споредна реакција, при што се добива непосакуван етилен, а стехиометријата и реакционата енталпија на двете реакции се дадени:



- Во вториот реактор се одвива реакцијата меѓу кетенот и глицерална оцетна киселина, при што како продукт се добива ацетатен анхидрид, при работни услови од 80 °C и 1 atm:



- Производноста на конечниот продукт, 99 % ацетатен анхидрид, е 16,58 mol/h. Селективноста, изразена како молови кетен на излез од првиот реактор (R1) во однос на конвертирани молови ацетон, е изразена со  $S = 1 - \frac{4}{3}X$ . Конверзијата на ацетон во R1 изнесува 10 %.

- Економски параметри:

Супстанција	Цена на чинење
Ацетон	15,66 \$/mol
Оцетна киселина	15 \$/mol
Ацетатен анхидрид	44,41 \$/mol
Гориво	4 \$/10 <sup>6</sup> Btu

Пиролитичкиот реактор R1 функционира како горивна печка, а неговата цена се определува според зависноста:

$$IRC [\text{\$}] = \left( \frac{M\&S_{2018}}{280} \right) \cdot (5,52 \cdot 10^3) \cdot Q^{0,85} \cdot (1,27 + F_c),$$

каде што:

$IRC$  – Цена на инсталиран реактор – капитален трошок за реакторот;

$M\&S_{2018}$  – Маршал и Свифт (*Marshall&Swift*) индекс за цена на процесна опрема;

$F_C$  – комбиниран фактор на корекција на цена,  $F_C = F_d + F_{TM} + F_P = 1,17 + 0,35 + 0$ ;  $F_C = 1,52$ ;

- Ефикасноста на печката (*fuel efficiency*) е 60 %;
- За ануализација на цената на процесот да се земе вредност на факторот  $CCF = 0,33$  (*Capital Charge Factor*);
- Цената на R2 е занемарлива во однос на вкупните трошоци;
- Количинскиот сооднос на влез во R2 е оцетна киселина : кетен = 6 : 1.

Потребно е:

- 1) Да се дефинира вкупниот материјален биланс и да се направи основна пресметка за економскиот потенцијал на процесот на ниво 2 (влезно-излезна структура);
- 2) Да се дефинира материјален биланс на рециркулирачката структура;
- 3) Да се определи неопходното количество топлина за работа на реакторот R1;
- 4) Да се определи капиталниот трошок за реакторот R1 и да се направи ануализација на трошоците;
- 5) Со примена на ануализираната капитална вредност, да се најде економскиот потенцијал на процесот на ниво 3 (рециркулирачка структура).

**Решение:**

- 1) МБ на ниво 2: Производност на ацетатен анхидрид



Производноста на ацетатен анхидрид е  $P_{AA} = 16,58 \text{ mol/h}$

## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

За да се обезбеди ваква производност на конечен продукт, се земаат предвид реакционата стехиометрија (во однос на ацетонот), селективноста (бидејќи се одвиваат 2 реакции) и степенот на конверзија. Со вклучување на селективноста и степенот на конверзија (0,1):  $S = 1 - \frac{4}{3} \cdot 0,1$ , односно  $S = 0,87$ , па потребното количество на ацетон (конвертиран ацетон до кетен) е:

$$F_{0,A} = \frac{P_{AA}}{S} = \frac{16,58 \text{ mol/h}}{0,87} = 19,06 \text{ mol/h}$$

Од оваа количина на продуциран кетен,  $16,58 \text{ mol/h}$  претставуваат суровина за ацетатен анхидрид, додека  $2,48 \text{ mol/h}$  се загуба на кетен во споредната реакција (производство на етилен).

Во согласност со тоа, ефлуентот се карактеризира со:

$$P_{AA} = 16,58 \text{ mol/h}$$

$$P_{CH_4} = 19,06 \text{ mol/h}$$

$$P_{CO} = 2,48 \text{ mol/h}$$

$$P_{C_2H_4} = \frac{1}{2} \cdot 2,48 \text{ mol/h} = 1,24 \text{ mol/h}$$

Добиените гасни нуспродукти,  $CH_4$ ,  $CO$  и  $C_2H_4$ , се користат како горивни гасови, при што генерираат топлина на согорување од:

$$H_{CH_4} = -0,761 \frac{10^6 \text{ Btu}}{\text{mol}}$$

$$H_{C_2H_4} = -1,254 \frac{10^6 \text{ Btu}}{\text{mol}}$$

$$H_{CO} = -0,268 \frac{10^6 \text{ Btu}}{\text{mol}}$$

Конечно, користејќи ги овие податоци може да се дефинира економскиот потенцијал на процесот на ниво 2:

$$E_{P,L2} = [\text{вредност на AA}] - [\text{вредности на реактанти}] + [\text{горивна цена на нуспродукти}]$$

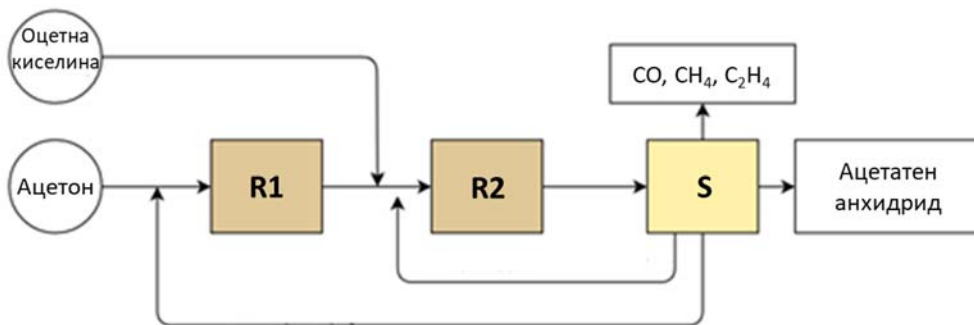
$$E_{P,L2} = \left[ 44,41 \frac{\$}{mol} \cdot 16,58 \frac{mol}{h} \right] - \left[ 15 \frac{\$}{mol} \cdot 16,58 \frac{mol}{h} + 15,66 \frac{\$}{mol} \cdot 19,06 \frac{mol}{h} \right] + \left[ \left( 19,06 \frac{mol}{h} \cdot 0,761 \frac{10^6 Btu}{mol} + 2,48 \frac{mol}{h} \cdot 0,268 \frac{10^6 Btu}{mol} + 1,24 \frac{mol}{h} \cdot 1,254 \frac{10^6 Btu}{mol} \right) \cdot 4 \frac{\$}{10^6 Btu} \right]$$

$$E_{P,L2} = 256,02 \frac{\$}{h}$$

Економскиот потенцијал базиран на проточен дијаграм на ниво 2, на годишно ниво е:

$$E_{P,L2} = 2,05 \cdot 10^6 \text{ \$/y}$$

2) Проточниот блок-дијаграм од ниво 3 (рециркулирачка структура) е даден на сликата:



На влез во реакторот R1, во согласност со познатата стехиометрија и степенот на конверзија на ацетонот, може да се дефинира:

- Во однос на ацетонот

Количество на вкупен ацетон на влез во R1 -  $F_{R1,0A} = \frac{F_{0,A}}{X} = \frac{19,06}{0,1} = 190,6 \text{ mol/h}$

Неизреагиран ацетон на излез од R1 -  $F_{R1,A} = F_{R1,0A} \cdot (1 - X) = 171,54 \text{ mol/h}$



## 2. Синтеза на процесен проточен дијаграм

Под претпоставка за максимална ефикасност на системот за сепарација (100 % recovery), количината на рециркулиран ацетон е:

$$F_{A,R} = F_{R1,A} = 171,54 \text{ mol/h}$$

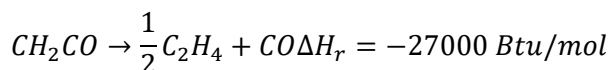
- Во однос на оцетната киселина

Сооднос на влез во R2 е оцетна киселина : кетен = 6 : 1, со што се обезбедува максимална конверзија на кетен, во вишок на оцетна киселина. Под оваа претпоставка, струјата за рецикулација од вториот реактор, R2, содржи само неизреагирана оцетна киселина:

$$F_{O,R} = (6 - 1) \cdot 16,58 = 82,9 \text{ mol/h}$$

3) *Неопходното количество топлина за работа на реакторот R1 (топлински биланс)*

- Во реакторот R1 се одвиваат 2 реакции (директна и споредна), со познати реакциони енталпии:



$$Q = [F_{O,A} \cdot \Delta H_{r,1}] + [P_{CO} \cdot \Delta H_{r,2}]$$

$$Q = \left[ 19,06 \frac{\text{mol}}{\text{h}} \cdot 34700 \frac{\text{Btu}}{\text{mol}} \right] - \left[ 2,48 \frac{\text{mol}}{\text{h}} \cdot 27000 \frac{\text{Btu}}{\text{mol}} \right]$$

$$Q = 594422 \text{ Btu/h}$$

$$Q = 0,594422 \cdot \frac{10^6 \text{ Btu}}{\text{h}}$$

4) *Капитални трошоци за реакторот (реакторскиот систем)*

$$\text{IRC} [\text{\$}] = \left( \frac{M\&S_{2018}}{280} \right) \cdot (5,52 \cdot 10^3) \cdot Q^{0,85} \cdot (1,27 + F_C)$$

$$\text{IRC} [\text{\$}] = \left( \frac{1600}{280} \right) \cdot (5,52 \cdot 10^3) \cdot 0,594422^{0,85} \cdot (1,27 + 1,52)$$

$$\text{IRC} [\text{\$}] = 56557 \text{ \$}$$

- Ануализирана вредност на капиталните трошоци -  $IRC_{AN}$ :

$$IRC_{AN} = IRC [\text{\$}] \cdot CCF = 56557 \cdot 0,33 = 18852 \text{ \$/y}$$

Оперативни трошоци за R1 (трошоци за гориво –  $C_F$  и одржување -  $C_M$ ):

$$C_F = \frac{Q \cdot \frac{8000 \text{ h}}{y} \cdot \frac{4 \text{ \$}}{10^6 \text{ Btu}}}{\text{efficiency}}$$

$$C_F = \frac{0,594422 \cdot \frac{10^6 \text{ Btu}}{\text{h}} \cdot \frac{8000 \text{ h}}{y} \cdot \frac{4 \text{ \$}}{10^6 \text{ Btu}}}{0,6}$$

$$C_F = 31703 \text{ \$/y}$$

Под претпоставка дека трошоците за одржување се занемарливи во однос на трошоците за гориво ( $C_M = 0$ ), вкупните годишни трошоци ( $C_{TOT}$ ) се:

$$C_{TOT} = IRC_{AN} + C_F = 18852 + 31703 = 50555 \text{ \$/y}$$

5) *Економскиот потенцијал на ниво 3:*

$$E_{P.L3} = E_{P.L2} - C_{TOT} = 2050000 - 50555 \approx 2 \cdot 10^6 \text{ \$/y}$$

Во согласност со реализираните пресметки и анализата на добиените резултати, може да се заклучи дека економскиот потенцијал на студираниот процес е задоволителен. Дополнително, мора да се земе предвид дека цените за рециркулирање на двете струи во реакторите не се вкалкуирани во конечната пресметка, но се работи за два транспортни уреди за транспорт на течности при NTP услови, па слободно може да се констатира дека овие трошоци не би имале значително влијание во конечната проценка на економскиот потенцијал на процесот.

# 3. Дизајн на реакторски системи

---

## Содржина:

- 3.1 Основни аспекти
- 3.2 Модел на идеален реактор
- 3.3 Реакционен пат
- 3.4 Типови на реакциони системи
- 3.5 Избор на модел на идеален реакционен систем
- 3.6 Перформанси на реакторски систем
- 3.7 Задачи

## 3.1 Основни аспекти

Основните концепти на хемиското процесно инженерство го препознаваат реакторот или реакторскиот систем како срце на секој технолошки процес. Од дефинирањето на соодветен реактор, појдовните суровини, конечните продукти, како и оптималните вредности на работните параметри започнува планирањето на индустриското комерцијално производство и директно зависи синтезата на кој било технолошки процес. Одделите за истражување и развој на производствените компании континуирано работат на дизајн и оптимизација на производствените процеси, со строго придржување кон хиерархијата на процесниот дизајн: прво, реакциите и механизмите се поставуваат во лабораториски услови, односно во лабораториски сад – реактор. Кога оваа фаза ќе даде задоволителни резултати при евалуација на перформансите од технички и економски аспект, реакцијата се поместува во т.н. *Bench-scale* реактор (лабораториски реактор), кој е дизајниран во согласност со техничките карактеристики на комерцијалните процесни единици и претставува појдовна точка за успешно проектирање (*scale-up*) на реакторски системи со поголем капацитет. Позитивната евалуација на перформансите на реакторот во оваа фаза води кон примена на *pilot-*

*scale* реактор и финално, до *commercial-scale* реактор. Секоја од наведените четири фази подлежи на детална консекутивна евалуација на перформансите на дизајнираниот систем при *scale-up*.

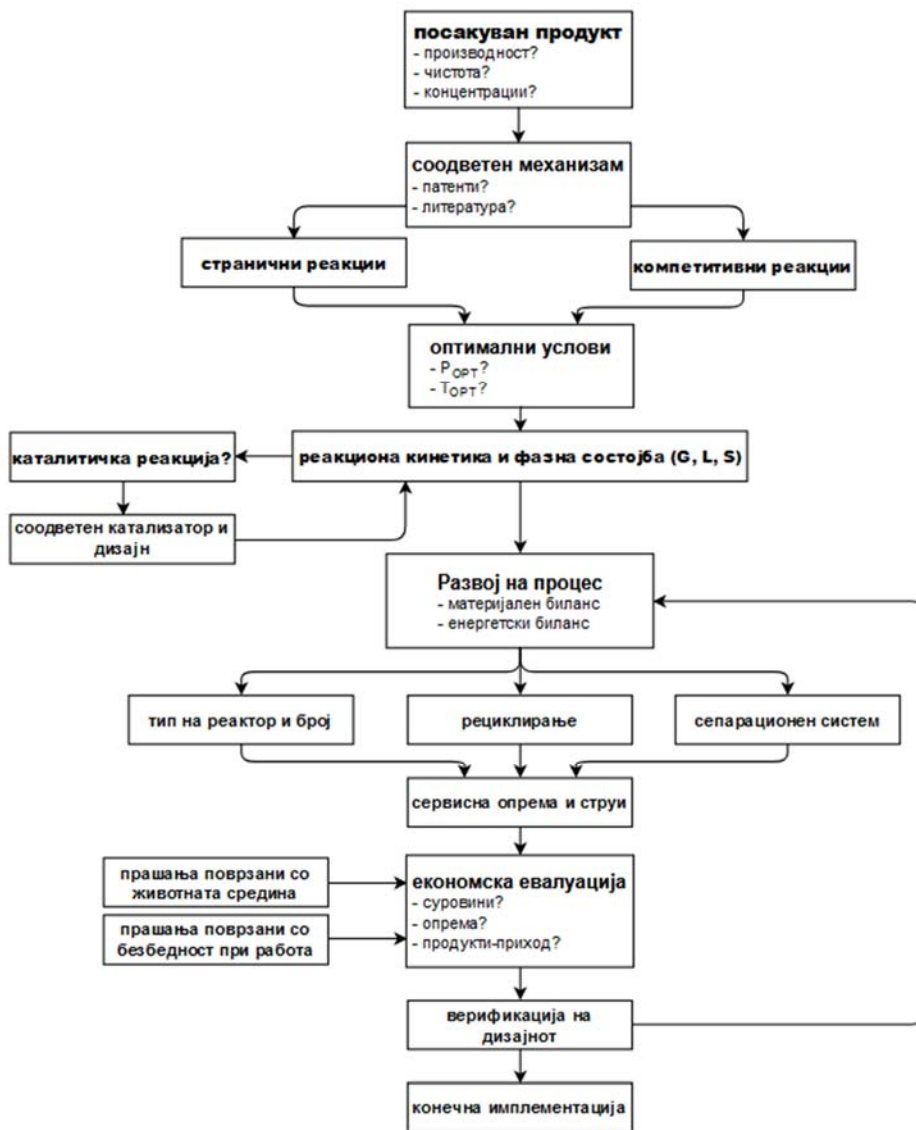
Со оглед на фактот што синтезата на еден технолошки процес започнува со реакторот, првите одлуки се оние што водат до избор на реактор. Овие одлуки се меѓу најважните во дизајнот на целиот процес. Добрите перформанси на реакторот се од огромно значење во одредувањето на економската исплатливост на целокупниот дизајн, а воедно имаат и фундаментално значење за влијанието на процесот врз животната средина. Покрај посакуваните производи, реакторите произведуваат и несакани нуспроизводи, кои не само што доведуваат до губење на приходите, туку можат да создадат и еколошки проблеми. Во согласност со основните начела на современите циклични производствени концепти и зеленото процесно инженерство, најдоброто решение за еколошките проблеми не е имплементацијата на адекватни методи за третман, туку воведување технолошки решенија што не произведуваат отпад.

Откако ќе се дефинираат спецификациите на производот, треба да се донесат некои одлуки во врска со патеката на реакцијата. Понекогаш има различни патишта до истиот производ. На пример, да претпоставиме дека треба да се произведува етанол. Етилен може да се користи како суровина и да реагира со вода за да се произведе етанол. Алтернатива би била да се започне со метанол како суровина и да се реагира со гас за синтеза (мешавина од јаглерод моноксид и водород) за да се добие истиот производ. Овие две патеки користат технологија базирана на хемиска реакција. Третата патека може да користи биохемиска реакција (или ферментација) која ги искористува метаболичките процеси на микроорганизмите во биохемиски реактор. Затоа, етанолот може да се произведе и со ферментација на јаглехидрати.

Алгоритмот за дизајн на адекватен реактор или реакторски систем може да се прикаже графички (слика 3.1).

Основните принципи за дизајн на соодветен математички модел на реактор се базираат на дефинирање на:

### 3. Дизајн на реакторски системи



Слика 3.1 Алгоритам за дизајн на реактор

1) Брзинскиот израз во согласност со утврдениот механизам на реакција;

2) Материјалниот биланс на реакторот (феномени на пренос на маса) и соодветно структурирана стехиометриска таблица за реакциониот систем;

3) Енергетски биланс (феномени на пренос на топлина, реакциона енталпија и топлински карактеристики на учесниците на реакцијата –  $Q_{\text{реакција}}, \Delta H_r, c_p, i$ );

4) Економска евалуација и

5) Согледување на посебни ограничувања.

Општиот дескриптивен облик на материјалниот и енергетскиот биланс на еден реакционен систем може да се дефинира како:

Материјален биланс:

$$\left[ \begin{array}{c} \text{ВЛЕЗ} \\ \text{компонента } i \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{ИЗЛЕЗ} \\ \text{компонента } i \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{c} \text{ГЕНЕРИРАЊЕ} \\ \text{компонента } i \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} \text{АКУМУЛАЦИЈА} \\ \text{компонента } i / \text{единица волумен} \end{array} \right]$$

Енергетски биланс:

$$\left[ \begin{array}{c} \text{ВЛЕЗ на } E \\ \text{со напој} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{ИЗЛЕЗ на } E \\ \text{со ефлуент} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{c} \text{ГЕНЕРИРАЊЕ на } E \\ \text{со реакција} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} \text{АКУМУЛАЦИЈА на } E \\ \text{во единица волумен} \end{array} \right]$$

Реакторите може да се класифицираат како хемиски или биохемиски. Повеќето реактори, без разлика дали се хемиски или биохемиски, се катализираат. Стратегијата ќе биде да се избере катализаторот, доколку треба да се користи, и идеалните карактеристики и работните услови потребни за системот за реакција. Прашањата што мора да се дефинираат за успешен дизајн на реакторот вклучуваат:

- Тип на реактор;
- Тип на катализатор;
- Оперативни услови во реакторот (притисок, температура);
- Димензионирање на реакторот;
- Напојни услови (концентрации на учесниците, температура, притисок) и
- Број на фази (хомоген или хетероген систем).

Откако ќе се донесат основните одлуки во врска со овие прашања, се избира практично решение за реактор, приближувајќи се што е можно поблиску до моделот на идеален реактор, за да може дизајнот да продолжи. Сепак, дизајнот на реакторот не може да се комплетира во оваа фаза на синтеза на процесот. Фокусот овде ќе биде ставен на изборот на реакторот, а не на неговата детална големина и изведба.

### 3.2 Модел на идеален реактор

Со оглед на фактот дека дизајнот на соодветен реактор е комплексен мултиваријабилен проблем, неопходно е дефинирање на дизајн равенките за различните типови на реактори, кои се базираат на материјалните и енергетските биланси за даден реакционен систем. Со цел дефинирање соодветен математички модел – дизајн равенка, неопходно е да се воведат моделот на идеален реактор, како за шаржниот, така и за проточните системи. Идеален реактор претпоставува униформност на својствата на реакционата смеса во секој момент од времето на одвивање на хемиската или биохемиската реакција. Ваквата општа дефиниција ги опфаќа двата екстреми на мешање на реакционата смеса: идеално мешање (униформна дистрибуција на секој учесник на реакцијата во секој диференцијален дел од реакционата смеса) и „нула“ мешање, односно отсуство на мешање на диференцијално малите сегменти на реакционата смеса. Првиот тип на мешање е претпоставен кај реакторите од резервоарски тип со мешалка – идеалниот шаржен реактор и идеалниот проточен реактор од резервоарски тип (идеален CSTR), додека вториот тип е инкорпориран во моделот на проточен реактор со клипно протекување на реакционата смеса (идеален PFR). Дополнително, моделите на идеални реактори претпоставуваат и униформна температурна дистрибуција кај реакционата смеса при составувањето на енергетскиот биланс за неизотермните реактори.

#### 3.2.1 Идеален шаржен реактор

Основниот облик на дизајн равенката за **идеален изотермен шаржен реактор** се изведува од материјалниот биланс:

$$F_{i0} - F_i + G_i = \frac{dn_i}{dt}$$

$$F_{i0} - F_i + r_i \cdot V = \frac{dn_i}{dt}$$

За компонента А, која е најчесто лимитирачкиот реактант:

$$r_A \cdot V = \frac{dn_A}{dt}$$

$$n_{A0} \cdot X = n_{A0} - n_A$$

$$n_{A0} \cdot dX = -dn_A$$

$$r_A \cdot V = -\frac{n_{A0} \cdot dX}{dt}$$

$$n_{A0} \frac{dX}{dt} = (-r_A)V$$

$$\int_0^t dt = n_{A0} \int_0^X \frac{dX}{(-r_A)V}$$

$$t = n_{A0} \cdot \int_0^X \frac{dX}{(-r_A)V} \quad (3.1)$$

Равенката 3.1 претставува основен облик на дизајн равенка за идеален изотермен шаржен реактор.

Кај неизотермната работа на идеалниот шаржен реактор е неопходно да ја внесеме и равенката на енергетскиот биланс, а со цел да ја дефинираме  $T - X$  (температура – степен на конверзија) зависноста при дизајнот на идеален шаржен реактор.

Се поаѓа од равенката на енергетскиот биланс:

$$\left(\frac{dE}{dt}\right)_{\text{систем}} = \dot{Q} - \dot{W}_S + \sum_{i=1}^N F_{i0}H_{i0} - \sum_{i=1}^N F_iH_i$$

А бидејќи се работи за шаржен реактор,

$$\left(\frac{dE}{dt}\right)_{\text{систем}} = \dot{Q} - \dot{W}_S$$

го разгледуваме членот  $\left(\frac{dE}{dt}\right)_{\text{систем}}$  :

$$E_{\text{систем}} = U_{\text{систем}} = \sum_{i=1}^N n_i E_i = \sum_{i=1}^N n_i (H_i - PV_i)$$

$$\frac{dE}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \sum_{i=1}^N n_i H_i \right) - \frac{d}{dt} \left( P \sum_{i=1}^N n_i V_i \right)$$



### 3. Дизајн на реакторски системи

Каде што  $\sum_{i=1}^N n_i V_i = V$ , а бидејќи  $PV = \text{const}$ , тогаш извод од константа е нула:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \sum_{i=1}^N n_i H_i \right)$$

$$\frac{dE}{dt} = \sum_{i=1}^N n_i \frac{dH_i}{dt} + \sum_{i=1}^N H_i \frac{dn_i}{dt}$$

Се зема за првиот член дека:

$$H_i(T) = H_i^0(T_R) + \int_{T_R}^T C_{p,i} dT$$

$$\frac{dH_i}{dt} = C_{p,i} \frac{dT}{dt}$$

А за вториот член од равенката:

$$\frac{dn_i}{dt} = r_i V = \frac{\nu_i}{(-\nu_A)} (-r_A) V$$

Со замена на овие два изрази во горната равенка на енергетски биланс:

$$\frac{dE}{dt} = \sum_{i=1}^N n_i C_{p,i} \frac{dT}{dt} + \frac{(-r_A)}{(-\nu_A)} V \sum_{i=1}^N \nu_i H_i$$

Од термодинамичката зависност на топлина на хемиска реакција како зависност од топлините на формирање на секој од учесниците:

$$\Delta H_r = \frac{1}{(-\nu_A)} \sum_{i=1}^N \nu_i H_i$$

И со замена во горното равенство:

$$\frac{dE}{dt} = \sum_{i=1}^N n_i C_{p,i} \frac{dT}{dt} + (\Delta H_r) (-r_A) V$$

Со замена на оваа зависност во оригиналниот израз за енергетски биланс:

$$\sum_{i=1}^N n_i C_{p,i} \frac{dT}{dt} + (\Delta H_r)(-r_A)V = \dot{Q} - \dot{W}_S$$
$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W}_S + (-\Delta H_r)(-r_A)V}{\sum_{i=1}^N n_i C_{p,i}}$$

Оваа равенка се решава во систем со равенката за дизајн на шаржен реактор.

Доколку го изразиме енергетскиот биланс преку конверзијата:

$$n_i = n_{A0} \left( \theta_i + \frac{\nu_i}{-\nu_A} X \right) \quad \Delta C_p = \frac{1}{-\nu_A} \sum_{i=1}^N \nu_i C_{p,i}$$
$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W}_S + (-\Delta H_r)(-r_A)V}{n_{A0} (\sum_{i=1}^N \theta_i C_{p,i} + \Delta C_p X)}$$
$$n_{A0} \frac{dX}{dt} = (-r_A)V$$

Енергетскиот биланс на шаржен реактор може да се изрази и преку средни вредности:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W}_S + (-\Delta H_r)(-r_A)V}{V \rho_{\text{смеса}} \tilde{C}_{p,\text{смеса}}}$$

### 3.2.2 Адијабатска работа на неизотермен шаржен реактор

При адијабатска работа,  $\dot{Q} = 0$ , а ако се занемари и енергијата што мешалката ја пренесува на реакционата смеса,  $\dot{W}_S = 0$ .

$$\frac{dT}{dt} = \frac{(-\Delta H_r)(-r_A)V}{n_{A0} (\sum_{i=1}^N \theta_i C_{p,i} + \Delta C_p X)}$$
$$n_{A0} \left( \sum_{i=1}^N \theta_i C_{p,i} + \Delta C_p X \right) \frac{dT}{dt} = (-\Delta H_r)(-r_A)V$$

$$n_{A0} \frac{dX}{dt} = (-r_A)V$$

По замената:

$$n_{A0} \left( \sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} + \Delta \tilde{C}_p X \right) \frac{dT}{dt} = (-\Delta H_r) n_{A0} \frac{dX}{dt}$$

Ако се знае дека:

$$\Delta H_r(T) = \Delta H_r(T_R) + \Delta \tilde{C}_p (T - T_R)$$

$$\left( \sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} + \Delta \tilde{C}_p X \right) \frac{dT}{dt} = -[\Delta H_r(T_R) + \Delta \tilde{C}_p (T - T_R)] \frac{dX}{dt}$$

Односно, со средување на равенката преку делење со  $dX$  и групирање по променливи:

$$\frac{dT}{-[\Delta H_r(T_R) + \Delta \tilde{C}_p (T - T_R)]} = \frac{dX}{\left( \sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} + \Delta \tilde{C}_p X \right)}$$

Со интегрирање на двете страни, граници од  $T_0$  до  $T$  и од  $0$  до  $X$ , се добива:

$$-\frac{1}{\Delta \tilde{C}_p} \ln \left( \frac{\Delta H_r(T_R) + \Delta \tilde{C}_p (T - T_R)}{\Delta H_r(T_R) + \Delta \tilde{C}_p (T_0 - T_R)} \right) = \frac{1}{\Delta \tilde{C}_p} \ln \left( \frac{\sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} + \Delta \tilde{C}_p X}{\sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i}} \right)$$

$$\left( \frac{\Delta H_r(T_0)}{\Delta H_r(T)} \right) = \frac{\sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} + \Delta \tilde{C}_p X}{\sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i}}$$

За да добиеме експлицитно решение:

$$\Delta H_r(T_0) \sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} = \Delta H_r(T) \left( \sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} + \Delta \tilde{C}_p X \cdot \Delta H_r(T) \right)$$

Или поделено со  $\Delta H_r(T)$ :

$$\frac{\Delta H_r(T_0)}{\Delta H_r(T)} \sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} = \sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} + \Delta \tilde{C}_p X$$

$$\Delta \tilde{C}_p X = \sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} \left( \frac{\Delta H_r(T_0)}{\Delta H_r(T)} - 1 \right)$$

$$\Delta \tilde{C}_p X = \sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} \left( \frac{\Delta H_r(T_0) - \Delta H_r(T)}{\Delta H_r(T)} \right) = \sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} \left( \frac{-\Delta C_p(T - T_0)}{\Delta H_r(T)} \right)$$

По делење со  $\Delta \tilde{C}_p$  од двете страни:

$$X = \frac{\sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i}}{-\Delta H_r(T)} (T - T_0)$$

Доколку се изрази експлицитно температурата, тогаш:

$$(T - T_0) = \frac{-\Delta H_r(T)}{\sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i}} \cdot X$$

Или, доколку го имаме податокот  $\Delta H_r(T_0)$  наместо  $\Delta H_r(T)$ :

$$(T - T_0) = \frac{-\left(\Delta H_r(T_0) + \Delta \tilde{C}_p(T - T_0)\right)}{\sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i}} \cdot X$$

По средување:

$$(T - T_0) = \frac{-\left(\Delta H_r(T_0)\right)}{\left(\sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} + \Delta \tilde{C}_p X\right)} \cdot X$$

Овие две равенки го претставуваат енергетскиот биланс за адијабатски шаржен реактор!

Доколку се дадени средните вредности на реакционата смеса, тогаш:

$$(T - T_0) = \frac{-\Delta H_r(T)}{m_{\text{смеса}} \tilde{C}_{p,\text{смеса}}} \cdot n_{A0} X$$

### 3.2.3 Идеален CSTR

Основниот облик на дизајн равенката за **идеален изотермен CSTR** се изведува од материјалниот биланс за овој тип на реактор:

$$F_{i0} - F_i + G_i = \frac{dn_i}{dt}$$

$$F_{i0} - F_i + r_i \cdot V = \frac{dn_i}{dt}$$

За работа на реакторот во стационарни услови, односно без акумулација на маса ( $\frac{dn_i}{dt} = 0$ ), што претставува и реална основа за работа на проточен реактор во реални услови, за компонента A:

$$F_{A0} - F_A + r_A \cdot V = 0$$

Со замена за конверзијата,  $F_{A0} - F_A = F_{A0} \cdot X$ , следува:

$$V = F_{A0} \cdot \frac{X}{(-r_A)} \quad (3.2)$$

Равенката 3.2 претставува основен облик на дизајн равенка за идеален изотермен CSTR при стационарни услови на работа во однос на акумулација на маса. Оваа равенка е експлицитна, бидејќи во согласност со претпоставката за идеално мешање, конверзијата на A (како и концентрацијата на кој било од учесниците) во секој елементарен сегмент од реакционата смеса е ист, како и за целата реакциона смеса, па резултантниот биланс се однесува на **макро волуменот**.

### 3.2.4 Идеален неизотермен CSTR

Кај овој тип на реактори енергетскиот биланс се составува за стационарен (алгебарска равенка) или нестационарен (диференцијална равенка) режим на работа.

$$\left(\frac{dE}{dt}\right)_{\text{систем}} = \dot{Q} - \dot{W}_S + \sum_{i=1}^N F_{i0}H_{i0} - \sum_{i=1}^N F_iH_i$$

**Во стационарен режим на работа**

$$0 = \dot{Q} - \dot{W}_S + \sum_{i=1}^N F_{i0} H_{i0} - \sum_{i=1}^N F_i H_i$$

Од молскиот биланс:  $F_{i0} - F_i = (-r_i)V$ , односно  $F_i = F_{i0} + r_i V$ ,

$$0 = \dot{Q} - \dot{W}_S + \sum_{i=1}^N F_{i0} H_{i0} - \sum_{i=1}^N F_{i0} H_i - V \sum_{i=1}^N r_i H_i$$

Притоа,  $r_i = \frac{v_i}{(-v_A)} (-r_A)$  и  $H_i(T) = H_i^0(T_R) + \int_{T_R}^T C_{p,i} dT$ , односно

$$H_i^0(T_0) - H_i(T) = - \int_{T_R}^T C_{p,i} dT$$

$$0 = \dot{Q} - \dot{W}_S + \sum_{i=1}^N F_{i0} (H_{i0} - H_i) - V \frac{1}{(-v_A)} (-r_A) \sum_{i=1}^N v_i H_i$$

ако се занемари  $\dot{W}_S$ :

$$0 = \dot{Q} - \sum_{i=1}^N F_{i0} \int_{T_R}^T C_{p,i} dT + V (-\Delta H_r) (-r_A)$$

Бидејќи  $F_{i0} = \theta_i F_{A0}$

$$0 = \dot{Q} - F_{A0} \sum_{i=1}^N \int_{T_R}^T \theta_i C_{p,i} dT + V (-\Delta H_r) (-r_A)$$

Оваа равенка е енергетски биланс за стационарен CSTR!

Во комбинација со молскиот биланс преку конверзија:  $F_{A0} X = (-r_A)V$ , се добива:

$$0 = \dot{Q} - F_{A0} \sum_{i=1}^N \int_{T_R}^T \theta_i C_{p,i} dT + (-\Delta H_r) F_{A0} X$$

$$X_{\text{ЕБ}} = \frac{\dot{Q} - F_{A0} \sum_{i=1}^N \int_{T_R}^T \theta_i C_{p,i} dT}{(-\Delta H_r) F_{A0}}$$

Доколку се познати средни вредности за  $C_p$  на смесата:

$$0 = \dot{Q} + \nu \rho_{\text{смеса}} \tilde{C}_{p,\text{смеса}} (T_0 - T) + (-\Delta H_r)(-r_A)V$$

### Во нестационарен режим на работа

$$\left(\frac{dE}{dt}\right)_{\text{систем}} = \dot{Q} - \dot{W}_S + \sum_{i=1}^N F_{i0} H_{i0} - \sum_{i=1}^N F_i H_i$$

Ако го разгледаме членот:

$$\frac{dE}{dt} = \sum_{i=1}^N n_i \frac{dH_i}{dt} + \sum_{i=1}^N H_i \frac{dn_i}{dt}$$

а притоа  $\frac{dn_i}{dt} = F_{i0} - F_i + r_i V = \frac{d(C_i V)}{dt}$ :

$$\frac{dE}{dt} = \sum_{i=1}^N n_i C_{p,i} \frac{dT}{dt} + \sum_{i=1}^N H_i (F_{i0} - F_i + r_i V)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \sum_{i=1}^N F_{i0} \int_{T_R}^T \theta_i C_{p,i} dT + V(-\Delta H_r)(-r_A)}{\sum n_i C_{p,i}}$$

### Адијабатски стационарен CSTR

$$0 = -F_{A0} \sum_{i=1}^N \int_{T_R}^T \theta_i C_{p,i} dT + (-\Delta H_r)(-r_A)V$$

$$\sum_{i=1}^N \int_{T_R}^T \theta_i C_{p,i} dT = X(-\Delta H_r)$$

$$X_{\text{ЕБ}} = \frac{\sum \theta_i C_{p,i} (T - T_0)}{-[\Delta H_r(T_R) + \Delta C_p (T - T_R)]}$$

$$X_{\text{ЕБ}} = \frac{\sum \theta_i C_{p,i} (T - T_0)}{-[\Delta H_r]}$$

Преку средни вредности за  $C_p$  на смесата  $X_{\text{ЕБ}} = \frac{v \rho_{\text{смеса}} \tilde{C}_{p,\text{смеса}}}{F_{A0} (-\Delta H_r)} (T - T_0)$ .

### 3.2.5 Идеален PFR

Основниот облик на дизајн равенката за **идеален изотермен PFR** се изведува од материјалниот биланс за овој тип на реактор:

$$F_{i0} - F_i + G_i = \frac{dn_i}{dt}$$

$$F_{i0} - F_i + r_i \cdot V = \frac{dn_i}{dt}$$

За работа при стационарни услови, за диференцијално мал дел од реакционата смеса ( $\Delta V$ ), следува:

$$F_{i0|V} - F_{i|V+\Delta V} + r_i \cdot \Delta V = 0$$

За компонентата A:

$$F_{A0|V} - F_{A|V+\Delta V} + r_A \cdot \Delta V = 0$$

$$\lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{F_{A0|V} - F_{A|V+\Delta V}}{\Delta V} = (-r_A)$$

$$\lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{-\Delta F_A}{\Delta V} = (-r_A)$$

$$\frac{-dF_A}{dV} = (-r_A)$$

Со воведување на конверзијата преку изразот  $F_{A0} \cdot X = F_{A0} - F_A$ , добиваме:

$$F_{A0} \cdot dX = -dF_A$$

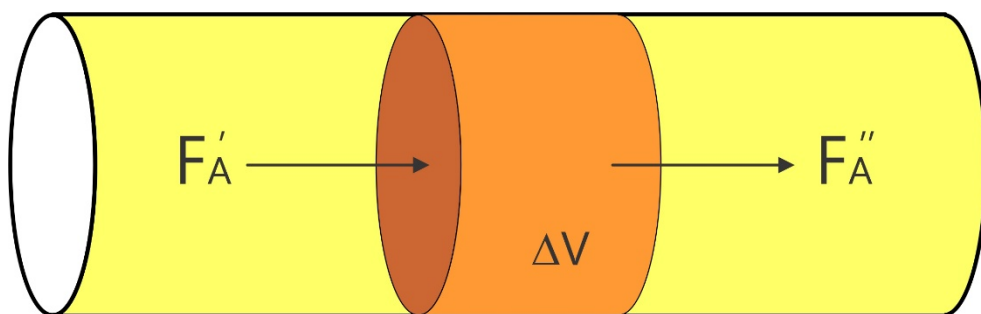
$$F_{A0} \frac{dX}{dV} = (-r_A)$$



$$\int_0^V dV = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{(-r_A)}$$

$$V = F_{A0} \cdot \int_0^X \frac{dX}{(-r_A)} \quad (3.3)$$

Равенката 3.3 претставува основен облик на дизајн равенка за идеален изотермен PFR при стационарни услови на работа. Оваа дизајн равенка е диференцијална со оглед на претпоставката за нула мешање (отсуство на мешање), па секој елементарен (диференцијален) сегмент од реакционата смеса има свој сопствен досег на реакција (како и степен на конверзија), кој е поголем од претходниот елементарен дел на смесата, а помал од следниот (слика 3.2).



Слика 3.2 Клипно протекување кај идеален PFR

Ваквиот модел на проточен реактор илустративно може да се претстави како вагонска композиција, каде секој од „вагоните“ има сопствен досег на реакција, независен од останатите. Но, во зависност од должината на реакторот, секој елементарен дел на смесата, на крајот, ќе постигне ист конечен степен на конверзија, без разлика што во секој момент на времето во реакторот имаме диференцијални делови на реакционата смеса со степени на конверзија од почетниот (на влез во реакторот) до крајниот (на излез од реакторот). Токму затоа, билансот е составен за **диференцијален дел на волуменот**, па потоа овој биланс го интегрираме по целата „должина“ на реакторот – од почетниот до крајниот степен на конверзија.

### 3.2.6 Идеален неизотермен PFR

Се поаѓа од равенката на енергетскиот биланс:

$$\left(\frac{dE}{dt}\right)_{\text{систем}} = \dot{Q} - \dot{W}_S + \sum_{i=1}^N F_{i0}H_{i0} - \sum_{i=1}^N F_iH_i$$

А бидејќи се работи за PFR,

$$\left(\frac{dE}{dt}\right)_{\text{систем}} = 0; \quad \dot{W}_S = 0$$

$$0 = \dot{Q} + \sum_{i=1}^N F_{i0}H_{i0} - \sum_{i=1}^N F_iH_i$$

Оваа равенка се применува на диференцијален волумен на реакторот.

$$0 = \Delta\dot{Q} + \sum_{i=1}^N F_{i0}H_{i0} \Big|_V - \sum_{i=1}^N F_iH_i \Big|_{V+\Delta V}$$

Притоа, членот  $\Delta\dot{Q} = q\Delta V = U \cdot a_v(T_a - T)\Delta V$

$$-U \cdot a_v(T_a - T)\Delta V = \sum_{i=1}^N F_{i0}H_{i0} \Big|_V - \sum_{i=1}^N F_iH_i \Big|_{V+\Delta V}$$

Равенката се дели со  $\Delta V$  и се зема лимес кога  $\Delta V \rightarrow 0$ :

$$U \cdot a_v(T_a - T) = \frac{d}{dt} \left( \sum_{i=1}^N F_iH_i \right)$$

Се расчленува изразот  $\frac{d}{dt} (\sum_{i=1}^N F_iH_i)$ :

$$\frac{d}{dt} \left( \sum_{i=1}^N F_iH_i \right) = \sum_{i=1}^N F_i \frac{dH_i}{dV} + \sum_{i=1}^N H_i \frac{dF_i}{dV}$$

Се зема за првиот член дека:

$$H_i(T) = H_i^0(T_R) + \int_{T_R}^T C_{p,i} dT$$

$$\frac{dH_i}{dV} = C_{p,i} \frac{dT}{dV}$$

А за вториот член од равенката:

$$\frac{dF_i}{dV} = r_i = \frac{\nu_i}{(-\nu_A)} (-r_A)$$

Со замена на овие две зависимости во билансот:

$$\frac{d}{dt} \left( \sum_{i=1}^N F_i H_i \right) = \sum_{i=1}^N F_i C_{p,i} \frac{dT}{dV} + \sum_{i=1}^N H_i r_i$$

$$\frac{d}{dt} \left( \sum_{i=1}^N F_i H_i \right) = \sum_{i=1}^N F_i C_{p,i} \frac{dT}{dV} + (-r_A) \frac{1}{(-\nu_A)} \sum_{i=1}^N \nu_i H_i$$

Од термодинамичката зависност на топлина на хемиска реакција како зависност од топлините на формирање на секој од учесниците:

$$\Delta H_r = \frac{1}{(-\nu_A)} \sum_{i=1}^N \nu_i H_i$$

И со замена во горното равенство:

$$\frac{d}{dt} \left( \sum_{i=1}^N F_i H_i \right) = \sum_{i=1}^N F_i C_{p,i} \frac{dT}{dV} + (\Delta H_r) (-r_A)$$

Со замена на оваа зависност во оригиналниот израз за енергетски биланс:

$$U \cdot a_v (T_a - T) = \sum_{i=1}^N F_i C_{p,i} \frac{dT}{dV} + (\Delta H_r) (-r_A)$$

$$\frac{dT}{dV} = \frac{U \cdot a_v(T_a - T) + (-\Delta H_r)(-r_A)}{\sum_{i=1}^N F_i C_{p,i}}$$

Оваа равенка се решава во систем со равенката за дизајн на PFR!

Доколку го изразиме енергетскиот биланс преку конверзијата:

$$F_i = F_{A0} \left( \theta_i + \frac{v_i}{-v_A} X \right) \quad \Delta C_p = \frac{1}{-v_A} \sum_{i=1}^N v_i C_{p,i}$$

$$\frac{dT}{dV} = \frac{U \cdot a_v(T_a - T) + (-\Delta H_r)(-r_A)}{F_{A0} (\sum_{i=1}^N \theta_i C_{p,i} + \Delta C_p X)}$$

$$F_{A0} \frac{dX}{dV} = (-r_A)$$

Енергетскиот биланс на PFR може да се изрази и преку средни вредности:

$$\frac{dT}{dV} = \frac{U \cdot a_v(T_a - T) + (-\Delta H_r)(-r_A)}{v \rho_{\text{смеса}} \bar{C}_{p,\text{смеса}}}$$

### 3.2.7 Адијабатска работа на неизотермен PFR

При адијабатска работа,  $\dot{Q} = 0$ ,

$$\frac{dT}{dV} = \frac{(-\Delta H_r)(-r_A)}{F_{A0} (\sum_{i=1}^N \theta_i C_{p,i} + \Delta C_p X)}$$

$$F_{A0} \left( \sum_{i=1}^N \theta_i C_{p,i} + \Delta C_p X \right) \frac{dT}{dV} = (-\Delta H_r)(-r_A)$$

+

$$F_{A0} \frac{dX}{dV} = (-r_A)$$

По замената:

$$F_{A0} \left( \sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} + \Delta \tilde{C}_p X \right) \frac{dT}{dV} = (-\Delta H_r) F_{A0} \frac{dX}{dV}$$

Ако се знае дека:

$$\Delta H_r(T) = \Delta H_r(T_R) + \Delta \tilde{C}_p(T - T_R)$$

$$\Delta H_r(T_0) = \Delta H_r(T_R) + \Delta \tilde{C}_p(T_0 - T_R)$$

$$\left( \sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} + \Delta \tilde{C}_p X \right) \frac{dT}{dV} = -[\Delta H_r(T_R) + \Delta \tilde{C}_p(T - T_R)] \frac{dX}{dV}$$

Односно, со средување на равенката преку делење со  $dV$  и групирање по променливи:

$$\frac{dT}{-[\Delta H_r(T_R) + \Delta \tilde{C}_p(T - T_R)]} = \frac{dX}{(\sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} + \Delta \tilde{C}_p X)}$$

Со интегрирање на двете страни, граници од  $T_0$  до  $T$  и од  $0$  до  $X$ , се добива:

$$-\frac{1}{\Delta \tilde{C}_p} \ln \left( \frac{\Delta H_r(T_R) + \Delta \tilde{C}_p(T - T_R)}{\Delta H_r(T_R) + \Delta \tilde{C}_p(T_0 - T_R)} \right) = \frac{1}{\Delta \tilde{C}_p} \ln \left( \frac{\sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} + \Delta \tilde{C}_p X}{\sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i}} \right)$$

$$\left( \frac{\Delta H_r(T_0)}{\Delta H_r(T)} \right) = \frac{\sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} + \Delta \tilde{C}_p X}{\sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i}}$$

За да добиеме експлицитно решение:

$$\Delta H_r(T_0) \sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} = \Delta H_r(T) \left( \sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} + \Delta \tilde{C}_p X \cdot \Delta H_r(T) \right)$$

Или поделено со  $\Delta H_r(T)$ :

$$\frac{\Delta H_r(T_0)}{\Delta H_r(T)} \sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} = \sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} + \Delta \tilde{C}_p X$$

$$\Delta \tilde{C}_p X = \sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} \left( \frac{\Delta H_r(T_0)}{\Delta H_r(T)} - 1 \right)$$

$$\Delta \tilde{C}_p X = \sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} \left( \frac{\Delta H_r(T_0) - \Delta H_r(T)}{\Delta H_r(T)} \right) = \sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} \left( \frac{-\Delta C_p(T - T_0)}{\Delta H_r(T)} \right)$$

По делење со  $\Delta \tilde{C}_p$  од двете страни:

$$X = \frac{\sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i}}{-\Delta H_r(T)} (T - T_0)$$

Доколку се изрази експлицитно температурата, тогаш:

$$(T - T_0) = \frac{-\Delta H_r(T)}{\sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i}} \cdot X$$

Или, доколку го имаме податокот  $\Delta H_r(T_0)$  наместо  $\Delta H_r(T)$

$$(T - T_0) = \frac{-\left(\Delta H_r(T_0) + \Delta \tilde{C}_p (T - T_0)\right)}{\sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i}} \cdot X$$

А по средување:

$$(T - T_0) = \frac{-\left(\Delta H_r(T_0)\right)}{\left(\sum_{i=1}^N \theta_i \tilde{C}_{p,i} + \Delta \tilde{C}_p X\right)} \cdot X$$

Овие две равенки го претставуваат енергетскиот биланс за адијабатски PFR!

Доколку се дадени средните вредности на реакционата смеса, тогаш:

$$(T - T_0) = \frac{C_{A0}(-\Delta H_r)}{\rho_{\text{смеса}} \tilde{C}_{p,\text{смеса}}} \cdot X$$

### 3.2.8 Каталитички реактори

Проблематиката на дизајн на каталитички реактори, кои се хетерогени, е тесно поврзана со дизајнот на идеалните реактори, со таа дистинкција

што дизајн равенката кај каталитичките реактори се однесува на количината (маса -  $W_C$  на катализатор), а не на волумен на реакциона смеса, па затоа и самиот кинетички израз за брзина на каталитичката реакција е даден во обликот:

$$(-r_{i,cat}) = \frac{\text{mol конвертирана } i}{(\text{време}) \cdot (\text{маса на катализатор})}$$

А дизајн равенката, на пример, кај реакторите со фиксен слој на катализатор – PBR, е со форма аналогна на дизајн равенката за PFR:

$$W_C = F_{i0} \cdot \int_0^X \frac{dX}{(-r_{i,cat})}$$

Дизајнот на каталитичките реактори предвидува детално студирање на кинетиката и формулирање соодветен брзински израз за дадена катализирана реакција, што често се вклопува во моделот на L-H-H-W кинетиката.

### 3.3 Реакционен пат

Како што веќе беше утврдено, имајќи предвид дека целта е да се произведе одреден производ, често постојат голем број алтернативни патеки за конечно добивање на тој производ. Треба да се претпочитаат патеки за реакција кои користат најевтини сировини и произведуваат најмали количини нуспроизводи. Особено треба да се избегнуваат патеките на реакција кои произведуваат значителни количини на несакани нуспроизводи, бидејќи тие можат да создадат значителни еколошки проблеми.

Сепак, има многу други фактори кои треба да се земат предвид при изборот на патеката на реакција. Некои се комерцијални, како што се ризиците во однос на идните цени на сировините и нуспроизводите. Другите се технички, како што се безбедноста и потрошувачката на енергија.

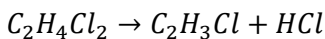
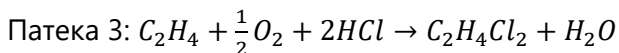
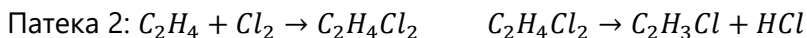
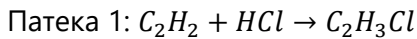
Недостигот на соодветни катализатори е најчеста причина што ја спречува експлоатацијата на нови патеки за реакција. Во првата фаза од дизајнот е невозможно да се предвидат сите последици од изборот на еден или друг пат на реакција, но некои работи се јасни дури и во оваа фаза. Ова е најдобро презентирано во следниот пример.

**Пример 1**

Производството на винил хлорид може да се изведе во согласност со неколку различни реакциони патеки, а конечниот избор на оптимално технолошко решение директно зависи од економските показатели на разгледуваните патеки. Основните податоци се прикажани во табела 3.1. Првата патека е директно производство на винил хлорид, додека кај втората и третата патека како меѓупродукт се јавува дихлоретанот, кој sukcesивно продуцира винил хлорид и хлороводород. При евалуацијата на економскиот потенцијал на предложените решенија цената на кислородот е занемарлива, бидејќи потекнува од атмосферата.

**Табела 3.1** Основни податоци за реакционите учесници

Супстанција	Молска [kg/kmol]	маса	Цена [\$/kg]
Ацетилен (C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> )	26		1,0
Хлороводород (HCl)	36		0,39
Етилен (C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> )	28		0,58
Хлор (Cl <sub>2</sub> )	71		0,23
Винил хлорид (C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> Cl)	62		0,46



Предложените решенија го имаат следниот елементарен економски потенцијал, базиран на цените на продуктите и реактантите:  $EP = (\text{цена на продукти}) - (\text{цена на реактанти})$

Патека 1:  $EP = (62 \cdot 0,46) - (26 \cdot 1 + 36 \cdot 0,39) = -11,52 \text{ \$/kmol}$

Патека 2:  $EP = (62 \cdot 0,46 + 36 \cdot 0,39) - (28 \cdot 0,58 + 71 \cdot 0,23) = 9,99 \text{ \$/ kmol}$  (под услов да се обезбеди пласман за HCl кој се јавува како нуспродукт во оваа

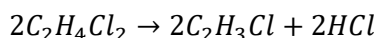
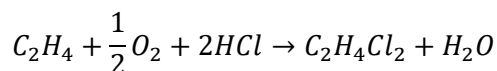
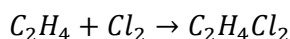


реакција). Доколку не се обезбеди пласман и за нуспродуктот на реакцијата, тогаш:

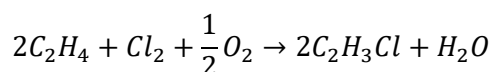
$$EP = (62 \cdot 0,46) - (28 \cdot 0,58 + 71 \cdot 0,23) = -4,05 \text{ \$/kmol}$$

$$\text{Патека 3: } EP = (62 \cdot 0,46) - (28 \cdot 0,58 + 2 \cdot 36 \cdot 0,39) = -15,8 \text{ \$/kmol}$$

Анализата на предложените реакциони патеки укажува на фактот дека единствена економски одржлива варијанта за производство на винил хлорид со позитивен економски потенцијал е патеката 2, но под услов за обезбеден пласман за нуспродуктот на реакцијата. Во спротивно, ни оваа патека нема економска исплатливост. Во суштина, дефинирањето на економскиот потенцијал на одреден производствен процес треба јасно да укажува на економска одржливост на предложениот процес и да не зависи од пласманот на споредните или нуспродуктите. Во таа насока, конечното инженерско согледување неизбежно ја наметнува потребата од дефинирање алтернативна, модифицирана реакциона патека. Алтернативната патека претставува комбинација на патеките 2 и 3.



Оттука, конечната реакциона патека се добива со сумирање на равенствата:



$$EP = (62 \cdot 0,46) - (28 \cdot 0,58 + 0,5 \cdot 71 \cdot 0,23) = 4,12 \text{ \$/kmol}$$

#### 3.4 Типови на реакциони системи

Откако ќе се дефинира оптималната реакциона патека се пристапува кон селекција на соодветен реактор или реакторски систем проследено со дефинирање на почетните услови.

Ова овозможува проценка на перформансите на реакторот за избраната патека на реакција со цел дизајнот да продолжи.

Пред да се продолжи со изборот на реакторот и условите за работа, мора да се направат некои општи класификации во однос на типовите реакциони системи кои најверојатно ќе се сретнат. Системите за реакција може да се класифицираат во шест широки типови:

1) Реакциони системи базирани на единечни реакции.

Повеќето реакциони системи се мултиреакциони, но во одредени случаи секундарните реакции се занемаруваат со што иницијалниот дизајн на реакторот се базира на примарната реакција. Овие реакции се од типот:

реактант → продукт

реактант → продукт + нуспроduct

реактант 1 + реактант 2 → продукт

2) Мултиреакциони системи со паралелни реакции.

Наспроти концептот на системи базирани на единечна реакција, најчесто реакционите системи се мултиреакциони и вклучуваат секундарни реакции кои продуцираат нуспроductи, паралелно со производството на посакуваниот продукт со примарната реакција. Овие реакции се од типот:

реактант → продукт

реактант → нуспроduct

или

реактант → продукт + нуспроduct 1

реактант → нуспроduct 2 + нуспроduct 3

или

реактант 1 + реактант 2 → продукт

реактант 1 + реактант 2 → нуспроduct

### 3. Дизајн на реакторски системи

Паралелното одвивање на повеќе реакции, покрај загубата во однос на производството на посакуваниот продукт во примарната реакција, често создава и нуспродукти кои го контаминираат и катализаторот во системот.

#### 3) Мултиреакциони системи со сериски реакции

Освен паралелното одвивање на споредните (непосакувани) реакции, кај мултиреакционите системи се јавуваат и сериски споредни реакции, од типот:

реактант → продукт

продукт → нуспродукт

или

реактант → продукт + нуспродукт 1

продукт → нуспродукт 2 + нуспродукт 3

или

реактант 1 + реактант 2 → продукт

продукт → нуспродукт 1 + нуспродукт 2

Како и кај претходниот тип на системи и кај сериските мултиреакциони системи покрај загубата во однос на производството на посакуваниот продукт во примарната реакција, често се создаваат и нуспродукти кои го контаминираат и катализаторот во системот.

#### 4) Комбинирани паралелни и сериски споредни реакции.

Кај комплексните реакциони системи се јавуваат и паралелни и сериски споредни реакции на примарната реакција, како, на пример:

реактант → продукт

реактант → нуспродукт

продукт → нуспродукт

или

реактант → продукт

реактант → нуспродукт 1

продукт → нуспродукт 2

или

реактант 1 + реактант 2 → продукт

реактант 1 + реактант 2 → нуспродукт 1

продукт → нуспродукт 2 + нуспродукт 3

#### 5) Биохемиски реакции (ферментации)

Биохемиските реакции може да се поделат во две групи на реакции, каде во првиот тип на биохемиски реакции реакцијата се одвива според метаболистичките процеси на одбрани микроорганизми (алги, квасци, бактерии...), при што се постигнува конверзија на напојната струја (супстрат) до посакуваниот продукт. Општиот облик на ваквите реакции е следен:

$$\text{напој} \xrightarrow{\text{микроорганизми}} \text{продукт} + \text{биомаса (раст на микроорганизми)}$$

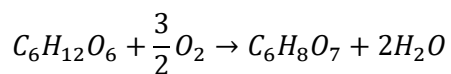
или

$$\text{напој 1} + \text{напој 2} \xrightarrow{\text{микроорганизми}} \text{продукт} + \text{биомаса (раст на микроорганизми)}$$

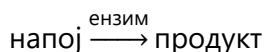
Во таквите реакции, микроорганизмите сами се репродуцираат. Покрај напојниот материјал (супстрат), веројатно е дека ќе треба да се додадат и нутриенти (на пр., мешавина што содржи фосфор, магнезиум, калиум итн.) за опстанок на микроорганизмите. Реакциите што вклучуваат микроорганизми вклучуваат:

- Хидролиза;
- Редокс реакции;
- Естерификации.

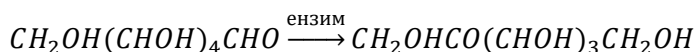
Како пример за редокс реакција е дадена реакцијата на производство на лимонска киселина од глюкоза:



Во втората група, реакцијата е промовирана од ензими. Ензимите се протеински биокатализатори на кои ги катализираат хемиските реакции кај микроорганизмите. Општата форма на ензимски катализираните реакции е следна:



За разлика од претходната група, кај ензимски катализираните реакции катализаторот (ензимот) не се репродуцира како микроорганизмите. Соодветен пример за ензимски катализирана реакција е изомеризацијата на глюкоза до фруктоза.

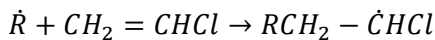


Иако природата обезбедува многу корисни ензими, тие, исто така, може да се синтетизираат во лабораториски услови за подобрени перформанси и нови апликации. Биохемиските реакции ја имаат предноста што се одвиваат при благи (амбиентални) оперативни услови на температура и притисок и обично се изведуваат во воден медиум наместо да се користи органски растворувач.

#### б) Реакции на полимеризација

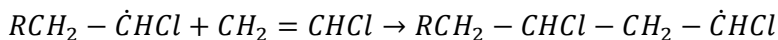
Во реакциите на полимеризација мономерните молекули реагираат заедно за да се добие полимер со висока моларна маса. Во зависност од механичките својства потребни на полимерот, мешавина од мономери може да се реагира заедно за да се добие кополимер со висока моларна маса. Постојат два широки типа на реакции на полимеризација, оние кои вклучуваат чекор на терминација и оние кои не содржат (Денбиг и Тарнер, 1984). Пример кој вклучува чекор на терминација е полимеризација со слободни радикали на молекула на алкен, позната како адициона полимеризација. Слободен радикал е слободен атом или фрагмент од стабилна молекула што содржи еден или повеќе неспарени електрони. Полимеризацијата бара слободен радикал од иницијаторско соединение како што е пероксид. Иницијаторот се распаѓа за да

формира слободен радикал (на пр., •CH<sub>3</sub> или •OH), кој се прикачува на молекула на алкен и со тоа генерира друг слободен радикал. Разгледуваме полимеризација на винил хлорид од иницијатор на слободни радикали •R. Прво се случува чекор за иницијација:

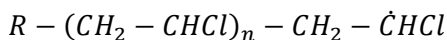


иницијатор + винил хлорид → слободен радикал  
на винил хлорид

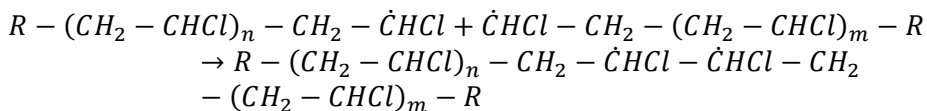
Потоа следува полимеризациски чекор на последователен раст околу активниот центар:



Па така се создаваат молекули на структурата:



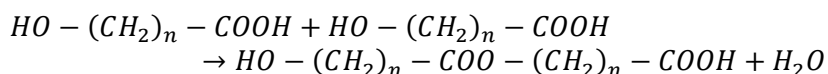
Конечно, синџирот се прекинува во чекор (терминација) при кој реагираат два радикали без да продуцираат нов радикал:



Овој терминациски чекор го запира последователниот раст на полимерниот синџир. Периодот во кој расте должината на синџирот, односно пред завршувањето е познат како активен животен век на полимерот. Можни се и други методи за прекинување на процесот на полимеризација.

Ориентацијата на групите долж јаглеродниот синџир, неговата стереохемија, е критична за својствата на производот. Стереохемијата на адитивна полимеризација може да се контролира со употреба на катализатори. Полимер каде што повторувачките единици имаат иста релативна ориентација се нарекува стереорегуларен.

Пример за полимеризација без терминациска фаза е поликондензацијата:



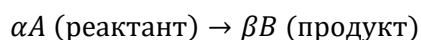
Во овој случај, полимерниот синџир расте преку сукцесивна естерификација со елиминација на вода и во отсуство на терминациски чекор. Полимерите кои се генерираат со поврзување мономери со карбоксилни групи и мономери со алкохолни групи се познати како полиестри. Овие полимери имаат широка примена во производството на вештачки влакна. На пример, естерификацијата на терафталната киселина со етилен гликол дава полиетилен терафталат.

#### 3.5 Избор на модел на идеален реакционен систем

Изборот на соодветен и адекватен модел на идеален реактор за даден случај зависи од повеќе фактори, кои се во директна корелација со феномените на пренос, реакционата стехиометрија и механизам на реакција, како и од реакционата кинетика. Воопштените заклучоци при изборот на модел на идеален реактор имаат свои специфичности за секој од разгледуваните 6 типа на реакции.

##### 1) Единечни реакции

Кај единечните реакции од типот:



$$r = kC_A^\alpha$$

каде:

$r$  – брзински израз

$k$  – брзинска константа

$C_A$  – молска концентрација на реактант

$\alpha$  – ред на реакција во однос на реактантот  $A$ .

Очигледно, најголема брзина на реакција се постигнува со највисока концентрација на реактант. Кај CSTR реакторот, влезната струја веднаш се дистрибуира низа целиот реакционен волумен заедно со веќе формиранитот производ. Оттука, брзината на реакција, при идентични реакциони услови, е помала кај идеалниот CSTR отколку кај идеалниот шаржен реактор и идеалниот PFR, бидејќи тој работи со ниска брзина на реакција и ниски вредности на степенот на конверзија, која одговара на излезната концентрација на неизреагираниот реактант. Оттука, идеалниот CSTR бара поголем волумен од идеален шаржен реактор и идеален PFR за постигнување зададена вредност на степен на конверзија. Следствено, за единечни реакции се претпочита идеален шаржен реактор или PFR.

2) Мултиреакциони системи со паралелни реакции

реактант → продукт

реактант → нуспродукт

$$r_1 = k_1 C_A^{\alpha_1}$$

$$r_2 = k_2 C_A^{\alpha_2}$$

каде:

$r_1, r_2$  – брзински изрази за примарната и секундарната реакција

$k_1, k_2$  – брзински константи за примарната и секундарната реакција

$C_A$  – молска концентрација на реактант (напој) во реакторот

$\alpha_1, \alpha_2$  – ред на реакција во однос на реактантот А, за примарната и секундарната реакција.

Соодносот на брзинските изрази за примарната и секундарната реакција дава:

$$\frac{r_2}{r_1} = \frac{k_2}{k_1} \cdot C_A^{\alpha_2 - \alpha_1}$$

За фаворизирање на посакуваната реакција, потребно е минимизирање на соодносот  $\frac{r_2}{r_1}$ . Доколку се разгледуваат моделите на идеални



изотермни реактори, изборот на адекватен модел на идеален реактор ќе зависи од редот на реакција во однос на избраниот реактант, за примарната и секундарната реакција:

- Во случај на  $\alpha_1 > \alpha_2$ , се одлучуваме за шаржен или PFR, бидејќи се стремиме кон поголема конверзија на реактантот, што би резултирало со голема производство на посакуваниот продукт, а мала загуба на реактант во секундарната реакција.

- Во случај на  $\alpha_1 < \alpha_2$ , се одлучуваме за идеален CSTR, кој обезбедува понизок степен на конверзија. Во тој случај, продуцираме помало количество на посакуван продукт (примарна реакција), но и помали загуби на реактант во спореден продукт. Дополнително, можноста за сервиско поврзување на повеќе CSTR единици, како и евентуално рециркулирање на реактантот во реакторот ќе резултира со зголемување на степенот на конверзија, во контролирани услови. Ваквиот концепт е одржлив доколку се предвиди сепарација на посакуваниот продукт од реакторскиот ефлуент, но не и нуспродуктот, пред рецикулација на ефлуентот на влез во реакторот или пред транспортот на ефлуентот во друг, сервиски поврзан CSTR. Во таква конфигурација, се инхибира споредната реакција (не се продуцираат нови количини нуспродукт), а се фаворизира генерирањето на посакуваниот продукт.

Ваквите согледувања се базираат на реакции од прв ред, а имаат за цел да се изведе основна анализа на применливоста на моделите на идеални реактори кај мултиреакциони системи со паралелни реакции. Кај реакциите со повеќе реактанти, анализата вклучува поголем број на параметри и е покомплексна. Ваквите системи се детално анализирани во предметот Хемиски реактори.

#### 3) Мултиреакциони системи со сервиски реакции

реактант → продукт

продукт → нуспродукт

$$r_1 = k_1 C_A^{\alpha_1}$$

$$r_2 = k_2 C_B^{\alpha_2}$$

каде:

$r_1, r_2$  – брзински изрази за примарната и секундарната реакција

$k_1, k_2$  – брзински константи за примарната и секундарната реакција

$C_A$  – молска концентрација на реактант (напој) во реакторот

$C_B$  – молска концентрација на продукт

$\alpha_1, \alpha_2$  – ред на реакција за примарната и секундарната реакција.

За одредена конверзија во реакторот, реактантите (напојот) треба да имаат соодветно време на задржување во реакторот. Кај моделот на идеален CSTR, напојот на реактанти може да го напушти реакторот по моментот кога ќе влезе или да остане подолг период од потребниот. Слично на тоа, и продуктот може да остане подолг период или веднаш да го напушти реакторот. Значителни делови од неизреагирани реактанти и продукти го напуштаат реакторот пред и по времето кое соодветствува на потребното време на задржување (време на реакција) за постигнување на проектираната вредност на степенот на конверзија. За разгледуваниот модел на мултиреакционен систем со сериски реакции, соодветен е избор на идеален PFR или идеален шаржен реактор.

### 3.5.1 Комбинирани паралелни и сериски споредни реакции

Анализата на мултиреакционите системи со комбинација на сериски и паралелни реакции претставува комплексна, мултиваријабилна проблематика. Со цел да се демонстрира анализа на еден ваков систем, претпоставуваме комбинација од типот:

напој → продукт

напој → нуспроduct

продукт → нуспроduct

$$r_1 = k_1 C_A^{\alpha_1}$$

$$r_2 = k_2 C_A^{\alpha_2}$$

$$r_3 = k_3 C_B^{\alpha_3}$$

Прво, ја разгледуваме паралелната реакција (реакција 2), а за зголемување на селективноста на системот кон посакуваната, примарна реакција:

- Во случај на  $\alpha_1 > \alpha_2$ , се одлучуваме за шаржен или PFR;
- Во случај на  $\alpha_1 < \alpha_2$ , се одлучуваме за CSTR.

Дополнително, сериската реакција каде се продуцира нуспродукт сугерира избор на PFR, па затоа во првиот случај, кога  $\alpha_1 > \alpha_2$ , се одлучуваме за идеален PFR или идеален шаржен реактор.

Но, во случај кога  $\alpha_1 < \alpha_2$ , паралелната реакција укажува на потреба од CSTR, но сериската реакција на создавање нуспродукт ја наметнува потребата од PFR. Токму ваквата ситуација ја наметнува потребата од соодветно конципирање реакторски систем од неколку единици, CSTR и PFR, со цел максимизирање на вкупната селективност. Архитектурата на реакторскиот систем кој за даден мултиреакционен систем ќе даде највисока селективност кон посакуваниот продукт може да се конфигурира низ детална анализа и оптимизација на предметниот реакционен систем.

#### 3.5.2 Реакции на полимеризација

Дијапазонот на дистрибуција на моларната маса зависи од тоа дали се користи шаржен или PFR или CSTR. Димензиите на полимерната молекула има важно влијание врз механичките и другите својства на полимерот, а тоа е важен фактор при изборот на реактор.

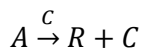
Во шаржен или PFR, сите молекули имаат исто време на задржување и без ефект на терминација сите ќе имаат приближно еднакви должини, создавајќи тесна дистрибуција на моларни маси. Спротивно на тоа, CSTR реактор ќе предизвика широка дистрибуција поради распределбата на времето на задржување во реакторот.

Кога полимеризацијата се одвива со механизми кои вклучуваат слободни радикали, животниот век на овие активно растечки центри може да биде исклучително краток поради процесите на терминација, како што е соединувањето на два слободни радикали. Овие процеси на завршување се под влијание на концентрацијата на слободните радикали, која, пак, е пропорционална со концентрацијата на мономерот. Во

шаржен или PFR, концентрациите на мономерот и слободните радикали се намалуваат. Ова создава зголемување на должината на синџирот со зголемување на времето на задржување и на тој начин широка дистрибуција на моларните маси. Моделот на идеален CSTR обезбедува униформа концентрација на мономер и на тој начин константна стапка на терминација на синџирот. Ова резултира со тесна дистрибуција на моларните маси. Бидејќи активниот век на полимерот е краток, варијацијата во времето на престој нема значаен ефект.

### 3.5.3 Биохемиски реакции

Како што беше дискутирано претходно, постојат две широки класи на биохемиски реакции: реакции кои ги искористуваат метаболичките процеси кај избраните микроорганизми и оние катализирани од ензими. Разгледуваме микробиолошки биохемиски реакции од типот:



каде  $A$  – напој,  $R$  – продукт и  $C$  – концентрација на микроорганизми. Кинетичкиот израз може да се дефинира со равенката по Монод (Monod):

$$(-r_A) = k \frac{C_C C_A}{C_A + C_M}$$

каде:

$(-r_A)$  – брзински израз

$k$  – брзинска константа на кинетичкиот израз

$C_C$  – концентрација на микроорганизми

$C_A$  – концентрација на реактант (напој)

$C_M$  – Michaeli's константа.

Брзинската константа може да зависи од многу фактори, како што се температурата, присуството на елементи во траги, витамини, токсични материи, интензитет на светлина итн. Брзината на реакција не зависи само од достапноста на реактантот (храна за микроорганизмите), туку и

од генерирањето на отпадот од микроорганизмите кои го попречуваат размножувањето на микроорганизмите. Доаѓа момент во кој нивниот отпад го спречува растот. Вишокот на напој или микроорганизми може да ја забави брзината на реакцијата. Во отсуство на инхибицијата поради акумулација на отпаден материјал равенката по Монод ја дава истата карактеристична крива како автокаталитичките реакции. Така, во зависност од опсегот на концентрација, модел на идеален CSTR, идеален PFR, комбинација од CSTR и PFR или CSTR со консеквентна сепарација и рециклирање се можните адекватни решенија за реакторски систем.

За ензимски катализираните реакции повторно се повикуваме на равенката по Монод:

$$(-r_A) = k \frac{C_E C_A}{C_A + C_M}$$

каде,  $C_E$  – концентрација на ензимот.

### 3.6 Перформанси на реакторски систем

Пред да се истражи како може да се изберат услови на реакторот, потребна е одредена мерка за евалуација на перформансите на реакторот.

За реакторите во кои се одвива полимеризација, главниот фокус се карактеристиките на производот во однос на механичките својства. Дистрибуцијата на моларните маси во полимерниот производ, ориентацијата на групите по должината на синџирот, вкрстеното поврзување на полимерните синџири, кополимеризацијата со мешавина од мономери и така натаму, се главните размислувања. На крајот на краиштата, главната грижа се механичките својства на полимерниот производ.

За биохемиските реакции, работата на реакторот вообичаено ќе биде диктирана од лабораториските резултати поради комплексноста на овие реакции и потешкотиите во предвидувањето на самиот тек и динамиката на реакцијата. Во овој случај се јавуваат ограничувања за перформансите на реакторот диктирани од биохемиските процеси. На пример, при производството на етанол со користење микроорганизми, како што се зголемува концентрацијата на етанол, микроорганизмите се размножуваат побавно, додека при концентрација на етанолот од околу 12 %

средината не стане токсична за микроорганизмите, со што самата реакција е автоинхибирана.

Во основа, три важни параметри се користат за дефинирање на перформансите на реактор или реакторски систем, а може да се дефинираат дескриптивно како:

$$\text{степен на конверзија} = \frac{\text{потрошен реактант во реакторот}}{\text{напој на реактант во реакторот}}$$

$$\text{селективност} = \frac{\text{продукција на посакуваниот продукт}}{\text{потрошен реактант во реакторот}} \cdot \text{стехиометриски коефициент}$$

$$\text{продуктивност} = \frac{\text{продукција на посакуваниот продукт}}{\text{напој на реактант во реакторот}} \cdot \text{стехиометриски коефициент}$$

каде стехиометриски коефициент се стехиометриските молови на реактантот потребни за добивање еден мол на продукт. Во случај кога имаме повеќе од еден реактант, горенаведените изрази може да се состават за секој од реактантите. При дизајнот на реактор или реакторски систем секогаш се селектира еден реактант како лимитирачки реактант, врз база на кој се димензионира опремата и се дефинираат реакторските перформанси. Тоа е најчесто реактантот кој има највисока комерцијална вредност и чија конверзија до посакуваниот продукт се стремиме да ја максимизираме, па затоа останатите реактанти често се додаваат „во вишок“ во однос на стехиометрскиот сооднос со лимитирачкиот реактант.

Максималниот степен на конверзија кај иреверзибилните реакции е 1 (односно 100 % конверзија), но во реални услови ваквата целосна конверзија (на лимитирачкиот реактант) тешко се постигнува. Додека кај реверзибилните реакции максималниот возможен степен на конверзија е степенот на конверзија постигнат при воспоставување динамичка рамнотежа на хемиската реакција, при што брзините на директната и повратната реакција се изедначуваат. Ваквиот максимален степен на конверзија, како и самата хемиска рамнотежа, е во директна функционална зависност од работните услови во реакторот, во прв ред – од работната температура. При константна температура, хемиската рамнотежа е константа, дефинирана со активитетите (или фугацитетите кај гасови) на учесниците во реакцијата, кои не се менуваат со времето, во

согласност со законот за дејство на масата дефиниран од Галдберг (Guldberg) и Вајџ (Waage).

Дополнително, кај реверзibilните реакции можната промена на концентрациите на учесниците (соодветна апроксимација на активитетите), при константна вредност на работната температура, ќе резултира со промена на вредноста на концентрацијата на другите учесници, бидејќи вредноста на рамнотежната константа останува непроменета. Ваквиот концепт се користи во насока на поместување на директната реакција кон поголемо производство на посакуваниот продукт, при што со извлекување на продуктот се намалува неговата концентрација во реакционата смеса. Со тоа се поттикнува дополнителна реакција меѓу реактантите за производството на нови количини на продукт и аналогно се зголемува степенот на конверзија на лимитирачкиот реактант.

Во опишувањето на перформансите на реакторот, селективноста е често позначаен параметар од продуктивноста на реакторот. Приносот на реакторот се заснова на реактантот што се внесува како напој во реакторот, а не на оној што се троши. Дел од воведениот реактант може да биде материјал што е рециркулиран а не е дел од „свежиот“ напој. Приносот на реакторот не ја зема предвид можноста за сепарација и рецикулација на неконвертираните реактанти, па продуктивноста на реакторот е само значаен параметар кога не е можно од една или друга причина да се изведе рецикулација на неконвертираната суровина до влезот на реакторот. Сепак, приносот на целокупниот процес е исклучително важен параметар кога се опишуваат перформансите на целокупната постројка.

Мора да се направи одредена појдовна претпоставка, како, на пример, за конверзијата на реакторот за да може дизајнот да продолжи. Ова најверојатно ќе се промени подоцна во дизајнот, бидејќи, како што ќе се види подоцна, постои силна интеракција помеѓу конверзијата на реакторот и останатите одлуки за дизајн на реактор или реакторски систем, а во согласност со алгоритмот за дизајн.

1) Единечни реакции. За единечни реакции разумна почетна претпоставка е 95 % конверзија за неповратни реакции и 95 % од рамнотежната конверзија за реверзibilни реакции.

2) Повеќекратни реакции. За повеќекратни реакции, каде нуспроизводот се формира паралелно, селективноста може да се зголеми или да се намали како што се зголемува конверзијата. Ако реакцијата на нуспроизводот е со повисок ред од примарната реакција, селективноста се зголемува за зголемување на конверзијата во реакторот. Во овој случај, треба да се користи истата почетна претпоставка како и единечните реакции. Ако реакцијата на нуспроизвод на паралелниот систем е од понизок ред од примарната реакција, се очекува да биде соодветна пониска конверзија од онаа за единечни реакции. Најдобар првичен предлог во оваа фаза е да се постави конверзијата на 50 % за неповратни реакции или на 50 % од рамнотежната конверзија за реверзибилни реакции.

За повеќекратни реакции, каде што споредниот производ се формира во серија, селективноста се намалува како што се зголемува конверзијата. Во овој случај, пониска конверзија од онаа за поединечни реакции се очекува да биде соодветна. Повторно, најдобриот предлог во оваа фаза е да се постави конверзијата на 50 % за неповратни реакции или на 50 % од рамнотежната конверзија за реверзибилни реакции.

Треба да се нагласи дека овие препораки за почетните поставки на конверзијата на реакторот речиси сигурно ќе се променат во подоцнежна фаза, бидејќи конверзијата на реакторот е исклучително важна оптимизациска променлива.

Кога се работи со повеќе реакции, селективноста или приносот на реакторот се максимизираат за избраната конверзија. Изборот на шемата за мешање во реакторот и политиката за додавање на напојот треба да се избере за таа цел.

### 3.7 Задачи

#### Задача 3.1

Елементарна реакција во гасна фаза, со стехиометрија  $2A + B \rightarrow C$ , се изведува изотермно и изобарно во CSTR, при работни услови од 500 K и 16,4 atm. Напојот е еквимоларна смеса од реактантите, при што  $F_{A0} = 5 \text{ mol/s}$  и  $k = 10 \text{ dm}^6/\text{mol}^2\text{s}$ . Да се дефинира:



### 3. Дизајн на реакторски системи

а)  $V = ?$  за степен на конверзија на реактантот А од 90 %.

б)  $V_1, V_2 = ?$  – серија од 2 каскадно поставени CSTR, ако степенот на конверзија на излез од првиот реактор е 40 %, а вкупниот степен на конверзија е 90 %.

**Решение:**

$$V = F_{A0} \frac{X}{(-r_A)} \quad \text{или} \quad \frac{V}{v_0} = \frac{F_{A0}}{v_0} \frac{X}{(-r_A)}, \quad \text{ОДНОСНО} \quad \tau = C_{A0} \frac{X}{(-r_A)}$$

$$T = T_0 \quad P = P_0$$

$$T_0 = 500 \text{ K} ; \quad P_0 = 16,4 \text{ atm} ; \quad y_{A0} = y_{B0} = 0,5 ; \quad F_{A0} = 5 \text{ mol/s} ; \quad k = 10 \text{ dm}^6/\text{mol}^2\text{s}$$

$$X = 0,9 ; \quad v = v_0 \cdot (1 + \varepsilon \cdot X) \cdot \frac{T}{T_0} \cdot \frac{P_0}{P} \quad v = v_0 \cdot (1 + \varepsilon \cdot X)$$

$$\varepsilon = y_{A0} \cdot \frac{\sum v_i}{-v_A} \quad \varepsilon_1 = -0,5 \quad v = v_0 \cdot (1 - 0,5 \cdot X)$$

$$C_{A0} = y_{A0} \cdot \frac{P_0}{R \cdot T_0} \quad C_{A0} = 0,2 \text{ mol/l}$$

Уч.	$F_{i0}$	$F_i(\xi)$	$F_i(X)$	$C_i(X) = F_i(X)/v$	$y_i$
A	$F_{A0}$	$F_{A0} - 2 \cdot \xi$	$F_{A0} \cdot (1 - X)$	$C_{A0} \cdot \frac{(1 - X)}{(1 - \frac{X}{2})}$	$\frac{(1 - X)}{(2 - X)}$
B	$F_{A0}$	$F_{A0} - \xi$	$F_{A0} \cdot (1 - \frac{X}{2})$	$C_{A0}$	$\frac{(1 - \frac{X}{2})}{(2 - X)}$
C	0	$\xi$	$F_{A0} \cdot \frac{X}{2}$	$C_{A0} \cdot \frac{\frac{X}{2}}{(1 - \frac{X}{2})}$	$\frac{\frac{X}{2}}{(2 - X)}$
$\Sigma$			$F_{A0} \cdot (2 - X)$		1

$$(-r_A) = k_1 \cdot C_A^2 \cdot C_B \quad (-r_A) = k_1 \cdot C_{A0}^3 \cdot \frac{(1-X)^2}{(1-\frac{X}{2})^2}$$

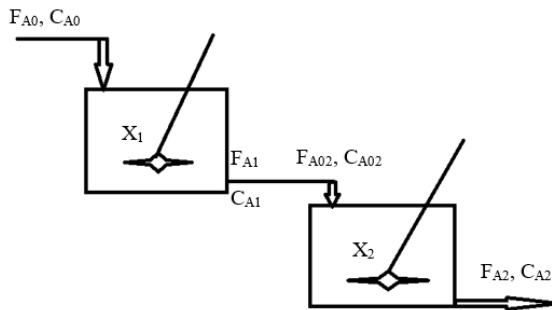
а) 1 CSTR со степен на конверзија од 90 %  $X = 0,9$

$$V = 5 \cdot \frac{0,9}{10 \cdot 0,2^3 \cdot \frac{(1-0,9)^2}{\left(1-\frac{0,9}{2}\right)^2}}$$

$$V = 1701 \text{ dm}^3$$

$$v_0 = \frac{F_{A0}}{C_{A0}} = \frac{5}{0,2} = 25 \text{ l/s}$$

б) Серија од 2 каскадно поставени реактори, при што  $X_1 = 0,4$   $X = 0,9$ :



$$V_1 = 5 \cdot \frac{0,4}{10 \cdot 0,2^3 \cdot \frac{(1-0,4)^2}{\left(1-\frac{0,4}{2}\right)^2}}$$

$$V_1 = 44,4 \text{ dm}^3$$

$$v_1 = v_0 \cdot (1 - 0,5 \cdot X_1) \quad v_1 = 20 \text{ l/s}$$

$$F_{A1} = F_{A0} \cdot (1 - X_1) = 3 \text{ mol/s} = F_{A02}$$

$$F_{B1} = F_{A0} \cdot \left(1 - \frac{X_1}{2}\right) = 4 \text{ mol/s} = F_{B02}$$

$$F_{C1} = F_{A0} \cdot \frac{X_1}{2} = 1 \text{ mol/s} = F_{C02}$$

$$\varepsilon_2 = y_{A1} \cdot \frac{\sum v_i}{-v_A} \quad y_{A1} = \frac{1-0,4}{2-0,4} \quad \varepsilon_2 = -0,375 \quad v_2 = v_1 \cdot (1 - 0,375 \cdot X_2)$$

$$(-r_A)_2 = k_1 \cdot C_{A2}^2 \cdot C_{B2}$$

### 3. Дизајн на реакторски системи

$$X = \frac{F_{A0} - F_{A2}}{F_{A0}}, \quad 0,9 = \frac{5 - F_{A2}}{5}, \quad F_{A2} = 0,5 \text{ mol/s}$$

$$X_2 = \frac{F_{A02} - F_{A2}}{F_{A02}}, \quad X_2 = \frac{3 - 0,5}{3}, \quad X_2 = 0,8333 \quad v_2 = 13,75 \text{ l/s}$$

Уч.	$F_{i02}$	$F_{i2}(\xi_2)$	$F_{i2}(X)$	$C_{i2}(X) = F_{i2}(X)/v_2$
A	$F_{A02}$	$F_{A02} - 2 \cdot \xi_2$	$F_{A02} \cdot (1 - X_2)$	$\frac{3 \cdot (1 - X_2)}{20 \cdot (1 - \varepsilon_2 \cdot X_2)}$
B	$F_{B02}$	$F_{B02} - \xi_2$	$F_{B02} - F_{A02} \cdot \frac{X_2}{2}$	$\frac{4 - 1,5 \cdot X_2}{20 \cdot (1 - \varepsilon_2 \cdot X_2)}$
C	$F_{C02}$	$F_{C02} + \xi_2$	$F_{C02} + F_{A02} \cdot \frac{X_2}{2}$	$\frac{1 + 1,5 \cdot X_2}{20 \cdot (1 - \varepsilon_2 \cdot X_2)}$

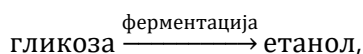
$$V_2 = 3 \cdot \frac{X_2}{10 \cdot \left(\frac{3 \cdot (1 - X_2)}{20 \cdot (1 - \varepsilon_2 \cdot X_2)}\right)^2 \cdot \left(\frac{4 - 1,5 \cdot X_2}{20 \cdot (1 - \varepsilon_2 \cdot X_2)}\right)}$$

$$V_2 = 945,3 \text{ dm}^3$$

$$V_{TOTAL} = V_1 + V_2 \approx 989,8 \text{ dm}^3 < V = 1701 \text{ dm}^3$$

#### Задача 3.2

Во лабораториски биореактор се одвива ферментација на гликоза до етанол, под влијание на лебен квасец (*Saccharomyces cerevisiae*):



при работна температура од 303 К. Оваа реакција е автоинхибирачка, каде етанолот ги уништува мембраните на микроорганизмите и ги убива. Во даден момент, концентрацијата на етанол достигнува гранична вредност, при која процесот целосно запира, односно се елиминирани сите микроорганизми. Оваа рамнотежна концентрација е позната како концентрација на максимална инхибиција,  $C_{EtOH}^*$ . Кинетиката на процесот е дадена со:

$$(-r_g) = k \cdot \left(1 - \frac{C_{EtOH}}{C_{EtOH}^*}\right)^{0,6} \cdot \frac{C_g \cdot C_{SC}}{C_g + C_M'}$$

## Стефан Кувенциев Анализа и синтеза на процеси

---

каде:  $(-r_g)$   $[kg/s]$  – брзина на трошење на супстратот (гликоза),  $k$   $[s^{-1}]$  – брзинска константа,  $C_{EtOH}$   $[kg/m^3]$  – концентрација на етанол,  $C_{EtOH}^*$   $[kg/m^3]$  – максимална концентрација на етанол,  $C_g$   $[kg/m^3]$  – концентрација на гликоза,  $C_{SC}$   $[kg/m^3]$  – концентрација на микроорганизмите,  $C_M$   $[kg/m^3]$  – Мајкелис-Ментен (Michaelis-Menten) константа, која ја претставува концентрацијата на супстратот, кога брзината на реакцијата е 1/2 од максималната.

$$k = 1,6 \cdot 10^{-3} s^{-1}, C_{EtOH}^* = 90 kg/m^3, C_M = 2 kg/m^3$$

Притоа, приносот на етанол и количина на микроорганизми се дефинирани како:

$$Y_{EtOH} = 0,47 \frac{kg EtOH}{kg \text{ гликоза}} \quad Y_{CELL} = 0,06 \frac{kg SC}{kg \text{ гликоза}}$$

Потребно е:

1) Да се дефинира потребното време на ферментација (реакција) за постигнување на 95 % конверзија на гликозата во шаржен реактор, при почетни услови:

$$C_{g,0} = 15 kg/m^3, C_{SC,0} = 0,015 kg/m^3,$$

$$V_{p-p} = 10 m^3 \text{ и } V_r = 0,75 \cdot 10 m^3 = 7,5 m^3.$$

2) Потребен проток во PFR за постигнување идентичен степен на конверзија како кај шаржниот реактор, со истиот ефективен волумен на реактор, при  $C_{SC,0} = 0,09 kg/m^3$ .

3)  $V_{p-p}$  за 1 CSTR при  $C_{SC,0} = 0,95 kg/m^3$  и константен проток на гликоза од  $3 m^3/h$ , и идентични вредности за  $C_{g,0}$  и  $X$ .

### Решение:

1) Шаржен реактор:  $\int_0^t dt = \int_{n_{i0}}^{n_{ie}} \frac{dn_i}{r_i V}$ ,

каде  $n_{ie}$  е рамнотежно количество на учесник  $[mol]$ .

Бидејќи се работи за систем во течна фаза, го користиме следниот облик на дизајн равенка:

$$\int_0^t dt = \int_{C_{g0}}^{C_{gK}} \frac{dC_g}{(-r_g)},$$

каде што  $C_{gK}$  е крајна концентрација на гликоза [ $kg/m^3$ ];

$$X = \frac{C_{g0} - C_{gK}}{C_{g0}}$$

А со оглед дека  $C_{g0} = 15 \text{ kg/m}^3$  и  $X = 0,95$ , тогаш  $C_{gK} = 0,75 \text{ kg/m}^3$ .

$$t = \int_{15}^{0,75} \frac{dC_g}{- \left[ k \cdot \left( 1 - \frac{C_{EtOH}}{C_{EtOH}^*} \right)^{0,6} \cdot \frac{C_g \cdot C_{SC}}{C_g + C_M} \right]},$$

$$t = \int_{15}^{0,75} \frac{dC_g}{- \left[ 1,6 \cdot 10^{-3} \cdot \left( 1 - \frac{C_{EtOH}}{90} \right)^{0,6} \cdot \frac{C_g \cdot C_{SC}}{C_g + 2} \right]}.$$

Концентрациите на етанол и микроорганизмите се функционално зависни од концентрацијата на гликозата:

$$C_{SC} = C_{SC0} - Y_{CELL} \cdot C_g, \text{ односно } C_{SC} = 0,015 - 0,06 \cdot C_g$$

$$C_{EtOH} = C_{EtOH,0} - Y_{EtOH} \cdot C_g, \text{ односно } C_{EtOH} = 0 - 0,47 \cdot C_g$$

Со овие замени во главниот израз, се добива:

$$t = \int_{15}^{0,75} \frac{dC_g}{- \left[ 1,6 \cdot 10^{-3} \cdot \left( 1 + \frac{0,47 \cdot C_g}{90} \right)^{0,6} \cdot \frac{C_g \cdot (0,015 - 0,06 \cdot C_g)}{C_g + 2} \right]}$$

Со примена на солвер за диференцијални равенки, се добива решение-то:

Differential Equations Solution #59

**POLYMATH Results**  
01-30-2024, Rev5.1.225

**Calculated values of the DEQ variables**

Variable	initial value	minimal value	maximal value	final value
t	0	0	6.696E+04	6.696E+04
C	15	0.7499043	15	0.7499043
X	0	0	0.9500064	0.9500064
R	0.0013072	1.312E-05	0.0013072	1.312E-05

**ODE Report (RKF45)**

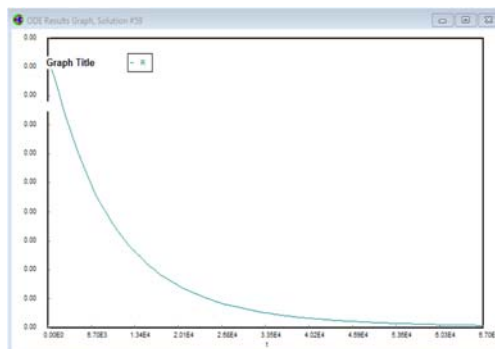
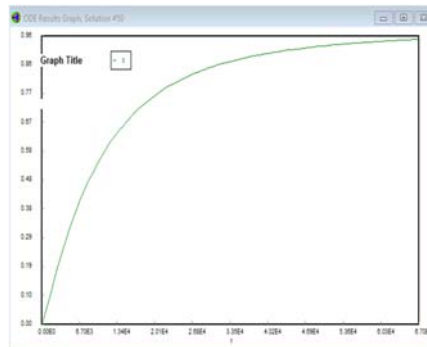
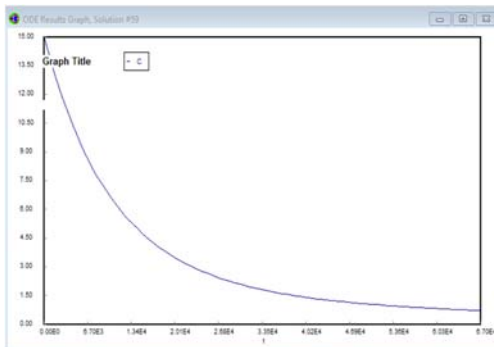
Differential equations as entered by the user  
[1]  $d(C)/d(t) = -R$

Explicit equations as entered by the user  
[1]  $X = (15-C)/15$   
[2]  $R = -(1.6 \cdot 10^{-3}) \cdot ((1 + (0.47 \cdot C/90))^{0.6}) \cdot (C \cdot (0.015 - 0.06 \cdot C) / (C + 2))$

Independent variable  
variable name : t  
initial value : 0  
final value : 66955

Precision  
Step size guess. h = 0.000001  
Truncation error tolerance. eps = 0.000001

General  
number of differential equations: 1  
number of explicit equations: 2



$$t = 66955 \text{ s} = 18,6 \text{ h}$$

### 3. Дизајн на реакторски системи

Условот на задачата сугерира 75 % искористување на волуменот на шар-жниот рекатор, па затоа реалното време на реакција е  $0,75 \cdot 18,6 \text{ h} = 13,95 \text{ h}$ .

2) Пресметка базирана на PFR модел на реактор

$$V = F_{g0} \int_{C_{g0}}^{C_{gK}} \frac{dC_g}{(-r_g)}$$

$$V = F_{g0} \int_{15}^{0,75} \frac{dC_g}{- \left[ 1,6 \cdot 10^{-3} \cdot \left( 1 + \frac{0,47 \cdot C_g}{90} \right)^{0,6} \cdot \frac{C_g \cdot (0,09 - 0,06 \cdot C_g)}{C_g + 2} \right]}$$

$$7,5 \text{ m}^3 = F_{g0} \cdot I$$

За определување на вредноста на интегралот, може да се искористи или Симсоновото правило за нумеричко интегрирање или некој софтвер за решавање на диференцијални равенки. За решавање на овој проблем е искористен софтвер за диференцијални равенки, следствено  $I = 2947 \text{ s}$ , односно  $I = 0,8186 \text{ h}$ . Со замена на оваа вредност,  $F_{g0} = 9,16 \text{ m}^3/\text{h}$ .

3) Пресметка базирана на CSTR модел на реактор

$$V = F_{g0} \frac{C_{gK} - C_{g0}}{(-r_g)}$$

При што  $C_{gK} = 0,75 \text{ kg/m}^3$

$$(-r_g) = 1,6 \cdot 10^{-3} \cdot \left( 1 + \frac{0,47 \cdot C_{gK}}{90} \right)^{0,6} \cdot \frac{C_g \cdot (0,95 - 0,06 \cdot C_{gK})}{C_g + 2}$$

$$(-r_g) = 1,6 \cdot 10^{-3} \cdot \left( 1 + \frac{0,47 \cdot 0,75}{90} \right)^{0,6} \cdot \frac{0,75 \cdot (0,95 - 0,06 \cdot 0,75)}{0,75 + 2}$$

Со замена на изразот во пресметката на волуменот на реакторот, се добива  $V \approx 30 \text{ m}^3$ .

### Задача 3.3

Синтеза на метанол се одвива во цевен проточен реактор со фиксен слој катализатор од типот PBR, според следниот механизам на реакција:  $CO + 2H_2 \rightleftharpoons CH_3OH$ . Други потребни податоци се:

$$\Delta H_r = -90 \text{ MJ/mol}$$

$$(-r_{CO}) = \frac{\overline{p_{CO}} \cdot \overline{p_{H_2}}^2 \cdot \frac{\overline{p_{CH_3OH}}}{K}}{(A + B \cdot \overline{p_{CO}} + C \cdot \overline{p_{H_2}})^2} \frac{\text{kmol CO}}{\text{kg}_{\text{катализатор}} \cdot \text{min}}$$

каде  $\overline{p_{CO}}$ ,  $\overline{p_{H_2}}$  и  $\overline{p_{CH_3OH}}$  се фугацитети на соодветните учесници во реакцијата. Коефициентите на фугацитет се земаат за  $\approx 1$ .

Работни услови:  $T = 500 \text{ K}$ ,  $P = 5000 \text{ kPa}$ . Реакционата кинетика е LHW (Lumber-Mitchell-Wood), што е евидентно од дадениот облик на брзинскиот израз за  $(-r_{CO})$ . При истражуваните работни услови, кинетичките параметри во изразот ги имаат следните вредности:

$$K = 3 \cdot 10^{-7} (\text{kPa})^{-2}$$

$$A = 23400 (\text{kPa})^{\frac{3}{2}} \left( \frac{\text{kmol}}{\text{kg}_{\text{кат}} \cdot \text{min}} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

$$B = 126 \sqrt{\text{kPa}} \left( \frac{\text{kmol}}{\text{kg}_{\text{кат}} \cdot \text{min}} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

$$C = 47 \sqrt{\text{kPa}} \left( \frac{\text{kmol}}{\text{kg}_{\text{кат}} \cdot \text{min}} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

Катализаторот има насипна густина, односно густина на пакување, од  $700 \text{ kg/m}^3_{\text{реакционен волумен}}$ . Реакторот има надворешно ладење, кое обезбедува изотермна работа на реакторот на  $500 \text{ K}$ . Напојот во реакторот е стехиометриска смеса на реактанти, при што со цел поедноставување на пресметките, ги занемаруваме потенцијалните споредни реакции.

Потребно е да се дефинираат:

- 1) Рамнотежната конверзија на  $CO$ ,  $X_{CO}^*$



### 3. Дизајн на реакторски системи

2) За степен на конверзија од 95 % од рамнотежниот, да се најде соодносот катализатор/напој во  $\left[ \frac{\text{kg}_{\text{катализатор}} \cdot \text{min}}{\text{kmol CO}} \right]$ .

3) За степен на конверзија од 90 % од рамнотежниот и производност на реакторот од 50 Mt/h метанол, да се дефинира капацитетот и цената на соодветен реактор. Да се земат предвид следните вредности за  $\Delta T_{ln,min} = 50 \text{ }^\circ\text{C}$  и  $U = 250 \text{ W/m}^2\text{K}$ .

#### Решение:

1) Во рамнотежа,  $(-r_{CO}) = 0$ , а тоа е валидно доколку броителот во брзинскиот израз е 0:

$$\overline{p_{CO}} \cdot \overline{p_{H_2}}^2 - \frac{\overline{p_{CH_3OH}}}{K} = 0$$

$$K = \frac{\overline{p_{CH_3OH}}}{\overline{p_{CO}} \cdot \overline{p_{H_2}}^2} \text{ или } K = \frac{y_{CH_3OH} P}{y_{CO} y_{H_2}^2 P^3}$$

$$K = \frac{y_{CH_3OH}}{y_{CO} y_{H_2}^2 P^2}$$

За изразување на уделите на продуктот и реактантите на излез од реакторот, неопходно е да се конструира стехиометриска таблица за системот. Притоа, степенот на конверзија и досегот на реакцијата се дадени со  $X = \frac{F_{CO,0} - F_{CO}}{F_{CO,0}}$  и  $\xi = F_{CO,0} - F_{CO}$ , па со замена се добива релацијата  $\xi - X$ , односно  $\xi = F_{CO,0} X$ .

Учесник	$F_{i0}$	$F_i(\xi)$	$F_i(X)$	$y_i(X)$
CO	$F_{CO,0}$	$F_{CO,0} - \xi$	$F_{CO,0}(1 - X)$	$\frac{1 - X}{3 - 2X}$
H <sub>2</sub>	$F_{H_2,0} = 2F_{CO,0}$	$2(F_{CO,0} - \xi)$	$2F_{CO,0}(1 - X)$	$\frac{2(1 - X)}{3 - 2X}$
CH <sub>3</sub> OH	0	$\xi$	$F_{CO,0} X$	$\frac{X}{3 - 2X}$
Σ		$3F_{CO,0} - 2\xi$	$F_{CO,0}(3 - 2X)$	1

Со инкорпорирање на изразите за удел на учесниците во реакцијата изразени преку степенот на конверзија ( $X$ ), во изразот за рамнотежната константа:

$$K = \frac{\frac{X}{3-2X}}{\frac{1-X}{3-2X} \cdot \left[ \frac{2(1-X)}{3-2X} \right]^2 P^2}$$

Со средување на горниот израз се добива:

$$K = \frac{1}{4P^2} \cdot \frac{X \cdot (3-2X)^2}{(1-X)^3}$$

А со замена на познатите вредности за  $K$  и  $P$  од условот на задачата:

$$3 \cdot 10^{-7} = \frac{1}{4 \cdot 5000^2} \cdot \frac{X \cdot (3-2X)^2}{(1-X)^3}$$

Средувањето на равенството се сведува на полиномот:

$$34X^3 - 102X^2 + 99X - 30 = 0$$

Со оглед на фактот што овој полином од 3 степен има 3 решенија, од кои 2 се конјугирано комплексни броеви, преостанатото реално решение ( $X = \mathbf{0,5982}$ ) го сметаме за конечно. Оваа вредност, добиена при нето брзина на реакција (директната и повратната се одвиваат со иста брзина), односно при воспоставена динамичка рамнотежа во системот, ја сметаме за конечно решение во однос на рамнотежната конверзија во реакторот,  $X_{CO}^* = 0,5982$ .

2) Дизајн равенката, соодветна за поставениот модел на PBR, е:

$$W_C = F_{CO,0} \int_0^{X_K} \frac{dX}{(-r_{CO})}$$

Во согласност со почетниот услов крајниот степен на конверзија да е 95 % од максималниот,  $X_K = 0,95X_{CO}^*$  или  $X_K = 0,568$ . За да се дефинира бараниот сооднос  $W_C/F_{CO,0}$ , потребно е да се среди и брзинскиот израз, односно да се изрази преку степенот на конверзија:

$$(-r_{CO}) = \frac{4P^3 \frac{(1-X)^3}{(3-2X)^3} - \frac{P}{K} \frac{X}{(3-2X)}}{\left( 23400 + 126P \cdot \frac{(1-X)}{(3-2X)} + 47P \cdot \frac{2(1-X)}{(3-2X)} \right)^2}$$

### 3. Дизајн на реакторски системи

Со замена на вредностите за  $K$  и  $P$  од условот на задачата, како и дефинираната горна граница на интегрирање (крајниот степен на конверзија) и внесување на брзинскиот израз во дизајн равенката:

$$\frac{W_C}{F_{CO,0}} = \int_0^{0,568} \frac{\left(23400 + 220 \cdot 5000 \cdot \frac{(1-X)^2}{(3-2X)}\right)}{4 \cdot 5000^3 \frac{(1-X)^3}{(3-2X)^3} - \frac{5000}{3 \cdot 10^{-7}} \frac{X}{(3-2X)}} dX$$

Решавањето на определениот интеграл со примена на Симпсоновото правило, како резултат го дава бараниот сооднос:

$$\frac{W_C}{F_{CO,0}} = 8,606 \left[ \frac{kg_{\text{катализатор}}}{kmol CO/min} \right]$$

3) Како база за дополнителните пресметки се зема производноста на метанол  $P_{CH_3OH} = 50 \frac{t}{h}$ , која, всушност, го претставува излезниот проток на метанол од реакторот:

$$F_{CH_3OH} = 50000 \cdot \frac{kg}{h} \cdot \frac{h}{60 min} \cdot \frac{1 kmol}{32 kg} = 26,04 kmol/min$$

Во согласност со претходно дефинираната стехиометриска таблица  $F_{CH_3OH} = F_{CO,0}X$ , а степенот на конверзија е дефиниран како 90 % од максималниот,  $X = 0,9 \cdot X_{CO}^*$ , односно  $X = 0,538$

$$F_{CO,0} = 48,4 kmol/min$$

Пресметката на волуменот на реакторот се темели на количината на катализатор  $W_C$  и насипната густина  $\rho_B$ :

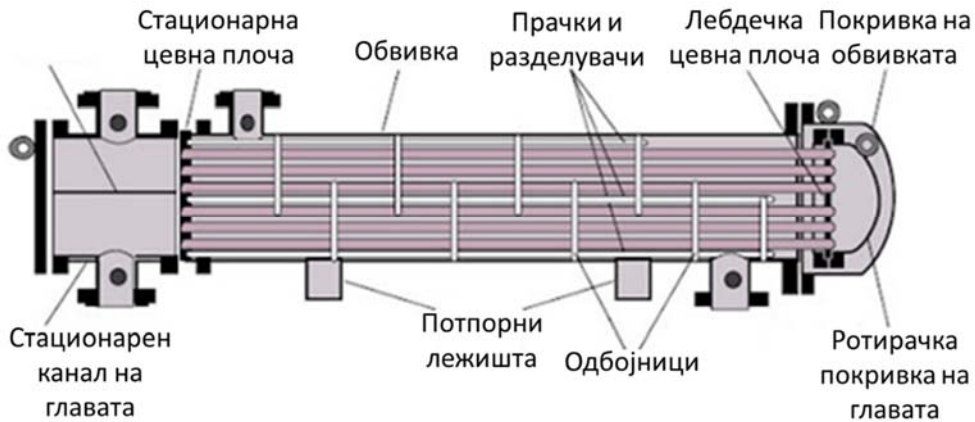
$$V_r = \frac{W_C}{\rho_B}$$

$$V_r = \frac{8,606 \cdot \frac{kg_{\text{катализатор}}}{kmol CO/min} \cdot 48,4 \frac{kmol CO}{min}}{700 \frac{kg_{\text{катализатор}}}{m^3_{\text{реактор}}}} = 0,59 m^3$$

Конечно, дефинираниот PBR е со работен волумен од  $V_r = 0,59 m^3$ .

Со цел да се дефинираат капиталните трошоци, како и самата изведба на дефинираниот реакторски капацитет, неопходно е да се земат

предвид и енергетските (топлинските) потреби на реакциониот систем. Со оглед на тоа што  $\Delta H_r$  е доста висока вредност, а реакцијата е егзотермна, самиот реактор е од типот реактор-топлински изменувач, па првата претпоставка е модел на FHHE (*Floating Head Heat Exchanger*) топлински изменувач. Ваквиот избор е поткрепен и од самата природа на каталитичката реакција, која укажува на потребата од континуирано отстранување и регенерирање на катализаторот.



Слика. Приказ на систем реактор – топлински изменувач од типот FHHE (систем со „пловечка глава“)

Количината на топлина која се генерира со хемиската реакција во единица време е еднаква на количеството топлина кое треба да се одведува од реакторскиот систем, со цел да се исполни предусловот за изотермно водење на процесот.

$$Q = (-\Delta H_r)F_{CO,0}$$

$$Q_r = 90000 \frac{kJ}{kmol CO} \cdot 48,4 \frac{kmol CO}{min} \cdot \frac{min}{60 s} = 72600 \frac{kJ}{s} = 72600 kW$$

Техничките карактеристики кои се однесуваат на овој систем се: должина на единечна цевка од 6,09 m и дијаметар од 5,08 cm. Волуменот на ваква цевка е  $V_{t1} = 0,0123 m^3$ , а според дефинираниот (потребен) реакционен волумен неопходниот број на цевки е:

$$N_c = \frac{V_r}{V_{t1}} = \frac{0,59 m^3}{0,0123 m^3} = 48$$

### 3. Дизајн на реакторски системи

Ваквата изведба има површина за топлинска размена за 1 цевка од  $A_{t1} = \pi dh = 0,972 \text{ m}^2$ , односно вкупната површина во тој случај е:  $A = N_c \cdot A_{t1} = 48 \cdot 0,972 \text{ m}^2 = 46,65 \text{ m}^2$ . Добиената вредност за вкупна површина, во комбинација со почетните услови, каде минималното логаритамско температурно приближување  $\Delta T_{ln,min} = 50 \text{ }^\circ\text{C}$  и вкупниот коефициент на пренос на топлина е  $U = 250 \text{ W/m}^2\text{K}$ :

$$Q = UA\Delta T_{ln,min} = 583,1 \text{ kW}, \text{ односно } Q \ll Q_r!$$

Ваквата изведба не ги задоволува енергетските потреби на предвидениот реакторски систем, па затоа сме упатени на алтернативно решение, при што за основа на пресметките се зема S&T модел (Shell & Tube).

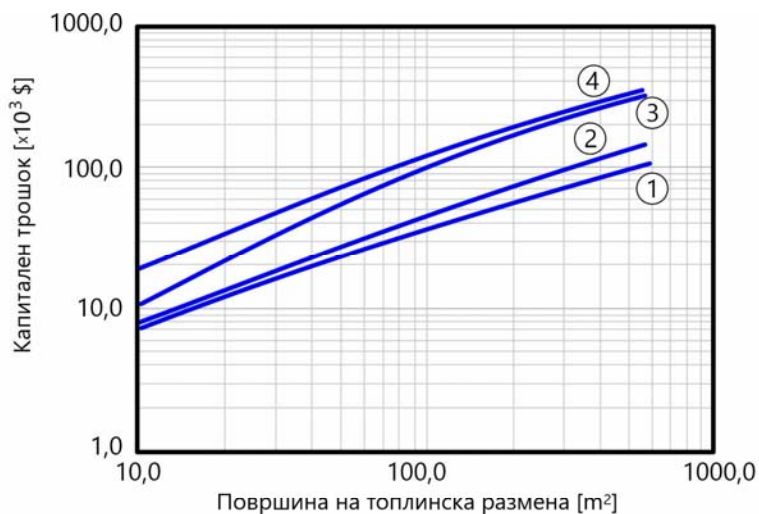
$$A = \frac{Q_r}{U\Delta T_{ln,min}} = \frac{72600 \text{ kW}}{0,25 \frac{\text{kW}}{\text{m}^2\text{K}} \cdot 50 \text{ K}} = 5808 \text{ m}^2$$

$$N_c = \frac{A}{A_{t1}} = \frac{5808 \text{ m}^2}{0,972 \text{ m}^2} = 5975$$

Разумна горна граница на површина на топлинска размена во 1 S&T HE изнесува  $900 - 1000 \text{ m}^2$ . Ако ја земеме долната граница како основа за пресметка на бројот на неопходни паралелно поврзани реактори,  $N_R$ :

$$N_R = \frac{5808 \text{ m}^2}{900 \text{ m}^2} = 7$$

Цената на ваквиот тип на реактори е варијабилна и се определува од дијаграм:



Материјал		
	Надворешна обвивка	Внатрешни цевки
①	Јагленороден челик	Јагленороден челик
②	Јагленороден челик	Месинг
③	Јагленороден челик	Нергосувачки челик
④	Нергосувачки челик	Нергосувачки челик

Фактор тип на изменувач	
со пловечка глава	x 1.0
со фиксен цевен систем	x 0.8
со U цевен систем	x 0.85
со kettle цевен систем	x 1.3

Фактор на работен притисок	
1-10 bar	x 1.0
10-20 bar	x 1.1
20-30 bar	x 1.25
30-50 bar	x 1.3
50-70 bar	x 1.5

Слика. Дијаграм на капитален трошок за топлински изменувач во функција од површина на топлинска размена

# 4. Дизајн на сепарациски системи

---

## Содржина:

**4.1** Сепарациски процеси

**4.2** Правила за дизајн на сепарациски систем

**4.3** Задачи

## 4.1 Сепарациски процеси

Со оглед на фактот што во најголемиот број случаи на индустриски процеси и примери од процесното инженерство реакторскиот ефлуент е мултикомпонентна смеса, неопходна е имплементација на адекватен систем за сепарација и пурификација на продуктите. Мултикомпонентната смеса на реакторскиот ефлуент, покрај посакуваните продукти, содржи и нуспродукти, интермедиери, неизреагирани реагенти, во една или повеќе фази (агрегатни состојби). Најчесто, сепарацијата не се одвива спонтано и се постигнува „на сметка“ на механички и енергетски трошоци.

Хомогените, еднофазни, мултикомпонентни смеси се сепарираат на составните соединенија со примена на различни сепарациски техники, кои се базираат на создавање или додавање втора фаза, која не се меша со фазата на ефлуентот, која пројавува селективен афинитет за изолација на една или група на компоненти. Оваа фаза се генерира преку воведување материјална струја, како додавање растворувач, или енергетска интервенција во процесот, на пример, загревање и консеквентно креирање втора фаза – парна фаза.

Најчесто користени сепарациски процеси за сепарација и пречистување (пурификација) на мултикомпонентни смеси во индустриски пос-

тројки се апсорпција и дестилација, а покрај наведените често се присутни и азеотропна и екстрактивна дестилација, *stripping*, екстракција, кристализација и други сепарациски постапки. Во последно време, сè поактуелна станува примената на мембранските процеси, поради широкиот спектар на апликација на ултра, мирко и нанофилтрацијата, реверсна осмоза, гасна сепарација и первапорација, а во оваа насока постои континуиран прогрес за осовременување на производството на полупропустливи (семипермеабилни) мембрани. Ваквиот пристап кон сепарацијата на мултикомпонентни смеси нуди технолошки решенија со значително намалена енергетска потрошувачка, со што се вклопува во современите трендови на зеленото процесно инженерство, одржливите технологии и примената на начелата на циркуларната економија во процесното и контролно инженерство. Во случајот на апсорпцијата, самата постапка иницијално не претставува енергетско оптоварување на процесот, но предвидува значителна енергетска потрошувачка за сепарација на апсорбатот од апсорбентот низ процес на дестилација и последователна рециркулација на апсорбентот во апсорберот.

Покрај наведените, се користат и други сепарациски процеси со различна намена: атсорпција, јонска измена, хроматографија и др.

Техниките кои се базираат на примена на механичка (или електрична) сила наоѓаат примена кај сепарацијата на хетерогените системи, на пример, за таложење честички, кои или не се таложат или се таложат многу бавно: центрифугирање, електролиза, електрофореза, електродијализа, таложење, флотација, сушење, филтрација.

Евалуацијата и селекцијата на соодветна сепарациска техника се базираат на:

- Економичност на избраната постапка,
- Ефикасност на изолација на клучниот продукт и
- Степен на чистота на продуктот.

Изборот на соодветна сепарациска постапка за конкретен случај секогаш има неколку можни алтернативи, а битни фактори при изборот се:

- Физичка или хемиска сепарација,
- Состојба на струјата (количина, фази) и
- Карактеристики на самиот сепарациски процес.



Кај поразредени раствори, односно струи во кои уделот на клучната компонента е релативно мал, сепарацијата е вообичаено скапа. Дополнително, значаен фактор е применливоста на избраниот сепарациски систем за дадениот процес, имајќи предвид дека продукти со висок степен на чистота се добиваат или преку големи разлики во својствата на компонентите (како, на пример, точката на вриење) или преку воведување неколку сепарациски единици. Конечната цел на изучувањето на сепарациските процеси е дефинирање адекватен математички модел за избраниот процес, со што се овозможува оптимизација на системот и последователно проектирање до индустриски размери.

Применливоста на различните сепарациски техники се дефинира врз база на одредена разлика во својство во однос на кое се реализира сепарацијата т.н. *Exploitable Property Difference*. Даден е преглед на сепарациски процеси според природата на движечката сила (разлика во вредностите на одредено својство):

- Напон на пари – сепарациски процеси: дестилација, апсорпција, *stripping*, сушење, испарување;
- Растворливост – сепарациски процеси: растворање, кристализација;
- Коефициент на дистрибуција – сепарациски процеси: екстракција, атсорпција;
- Меѓуфазна рамнотежа – сепарациски процеси: јонска измена, хроматографија;
- Површинска активност – сепарациски процеси: флотација, пененење;
- Геометрија на молекули – сепарациски процеси: мембранска сепарација;
- Електрично поле – сепарациски процеси: преципитација (таложенење);
- Големина на честички – сепарациски процеси: филтрација, таложенење и

- Големина и густина на честички – сепарациски процеси: центрифугирање, бистрење, згуснување, *scrubbing* (елиминација на цврсти честички од гасови со примена на течен растворувач).

Принципите и начелата за избор на сепарациски систем се темелат на општите карактеристики и евалуација на предностите и недостатоците на секој од разгледуваните процеси:

### 4.1.1 Дестилација

#### Општи карактеристики:

- Напојот е во течна и/или парна фаза;
- Масениот удел на главната компонента во смесата е во опсег од 10 до 95 %;
- Сепарациски агент – сепарација иницирана од пренос на топлина и
- Вообичаен капацитет на напој: 1 – 100 kg/s.

#### Предности:

- Солидно етаблирана постапка во индустриски размери;
- Едноставен дијаграм;
- Ниски инвестициски трошоци;
- Релативно едноставна за проектирање (*scale up*) и
- Флексибилна во однос на чистота на излезни струи.

#### Недостатоци:

- Неопходна соодветна испарливост и термичка стабилност на компонентите;
- Ниска енергетска ефикасност на процесот и
- Работна температура: од -40 °C до 250 °C.

### 4.1.2 Азеотропна дестилација

Азеотропна дестилација претставува дестилација на азеотропни смеси, на пр., 87 % mol етанол и вода.

Општи карактеристики:

- Напојот е течна или парна азеотропна смеса;
- Сепарациски агенс – модификатор и топлински спроводник;
- Кај оваа техника се воведува модификатор, кој гради комплекс со една од компонентите на азеотропната смеса, со што таа се разбива, по што продолжува дестилацијата под стандардни работни услови и
- Вообичаен капацитет на напој: 1 – 60 kg/s.

Предности:

- Аналоги на стандардна дестилација.

Недостатоци:

- Посложен дизајн и
- Неопходна сепарација на течниот модификатор (*entrainer*), а со тоа се зголемуваат и капиталните трошоци.

### 4.1.3 Апсорпција

Апсорпцијата е широко распространета постапка, при која се врши сепарација на една или повеќе компоненти од гасни струи со примена на течен апсорбент (растворувач). Еден од основните дизајн параметри е факторот на апсорпција:

$$\left(\frac{F_L}{m \cdot g}\right) \text{ или } \left(\frac{L}{m \cdot G}\right), \quad (4.1)$$

каде што:

$F_L$  или  $L$  – молски проток на растворувач [ $\text{mol} \cdot \text{s}^{-1}$ ];

$m$  – наклон на рамнотежна линија и

$G$  или  $\dot{g}$  – молски проток на гас [ $mol \cdot s^{-1}$ ].

Оптималната вредност на факторот на апсорпција е 1,4.

Главен недостаток кај апсорпцијата е неопходноста за консеквентна сепарација на апсорбатот од апсорбентот.

### 4.1.4 Stripping

Постапка за сепарација на растворени компоненти од растворувач (или апсорбат од апсорбент). Така добиениот апсорбент се рециркулира назад во колона. Факторот на осиромашување (*stripping*) претставува реципрочна вредност на факторот на апсорпција и може да се изрази како  $\frac{m \cdot G}{L}$ . Стрипинг може да се постигне и со суперзагреана пареа, која би ги „повлекла“ испарливите компоненти, по што следува кондензација на струјата, но само под услов компонентите од интерес да се растворливи во пареата. Во овој случај, со кондензацијата се постигнува едноставна сепарација на стрипинг агенсот од компонентите од интерес.

### 4.1.5 Екстракција

Екстракцијата е често применувана сепарациска постапка, на пример, кај азеотропни смеси и предвидува употреба на растворувач (течен, суперкритичен) со кој се постигнува бараната селективност кон одредена компонента или група на компоненти. Покрај селективноста, дефинирани се и други битни карактеристики при изборот на растворувач, но главниот недостаток на оваа сепарациска постапка е потребата од дополнителна сепарација на екстрахираните компоненти од користениот растворувач (дестилација или друга техника).

### 4.1.6 Кристализација

Оваа сепарациска постапка претставува добивање компоненти од раствор по пат на преципитација со ладење, отстранување растворувач или додавање преципитациски агенси. Се базира на фазна рамнотежа при дадени работни услови, променлива растворливост, како и брзина на формирање кристали. Основен работен параметар при утврдување на работните услови е температурата, која има директно влијание на растворливоста на компонентите во дадената смеса. Оваа техника има значителна примена особено кај комплексни системи, како, на пример,

смеса од орто, мета и параксилени, за кои поради малите разлики во точките на вриење дестилацијата е доста скапо решение. Но, разликите во точките на мрзнење за истите компоненти се значително поголеми и токму кристализацијата е оптимално решение.

### 4.1.7 Мембранска сепарација

Мембранската сепарација се темели на специфично дизајнирани семи-пермеабилни мембрани, со помош на кои се постигнува сепарација на анализираниот систем на пермеат и ретентат, при што движечка сила за посакуваната сепарација е трансмембранскиот пад на притисокот ( $\Delta P_{TMP}$ ). Во зависност од димензиите на порите на мембраните со кои се врши сепарацијата, разликуваме:

- Микрофилтрација – сепарација врз база на димензии на честички (*size exclusion*), применлива за честички со димензии од  $5 \cdot 10^{-8}$  до  $5 \cdot 10^{-6}$  m.
- Ултрафилтрација – сепарација врз база на димензии на честички (*size exclusion*), применлива за честички со димензии од  $2 \cdot 10^{-9}$  до  $5 \cdot 10^{-9}$  m.
- Нанофилтрација – сепарација врз база на димензии на честички (*size exclusion*), применлива за честички со димензии помали од  $2 \cdot 10^{-9}$  m.
- Реверсна осмоза – сепарација преку механизам растворање/дифузија (*solution/diffusion*), каде една од компонентите селективно се раствора во мембраната на едниот крај и дифундира од едната граница помеѓу фазите до другиот крај, по што се десорбира, применлива за честички помали од  $1 \cdot 10^{-9}$  m.
- Первапорација (пермеација и евапорација) – сепарационска постапка при која одредени компоненти се раствораат во течен солвент, како такви поминуваат низ мембраната, по што користениот растворувач испарува. Механизмот е повеќестепен и вклучува растворање/дифузија/испарување, а постапката е применлива за честички помали од  $1 \cdot 10^{-9}$  m.

Недостатоците на мембранската сепарација се следни:

- помала чистота на конечниот продукт во споредба со дестилацијата;
- ограничување за високи работни температури, при што може да дојде до оштетување или декомпозиција на некои мембрани и
- ограничувања во однос на присуството на цврсти честички (во голем број случаи концентрацијата на цврсти честички е потребно да се сведе на ррб единици) во течноста која се третира, поради можноста за оштетување на некои мембрани.

### 4.1.8 Атсорпција и јонска измена

Атсорпцијата се темели на афинитетот на одредени цврсти атсорбенти кон селективна атсорпција на присутните аналити (компоненти од интерес). Оваа постапка е добро етаблирана во процесното инженерство, но е проследена со потребата од периодична регенерација на користениот атсорбент.

„Сестринска“ техника на атсорпцијата е јонската измена, кај која со примена на соодветно избрани јонски изменувачи по хемиски пат се постигнува изолација на присутните јони (анјони или катјони) и нивна измена со различни јони со ист полнеж. Јонската измена наоѓа широка примена во третманот на водени ресурси, пред сè, во насока на омекнување на водата пред нејзина употреба во процес или евентуално генерирање пара.

### 4.1.9 Флотација

Оваа сепарациска постапка претставува цврсто-цврста сепарација со гасни меури во растворот, кои се врзуваат за одредени цврсти честички (компоненти), а кои потоа механички се отстрануваат од површината.

### 4.1.10 Центрифугирање

Центрифугирањето претставува механичка сепарациска постапка, при која со генерирање соодветно дефинирано центрифугално поле (според претходно дефиниран број на вртежи) се постигнува сепарација на цврсти честички од течни системи. Оваа постапка има широка примена кај системи кај кои цврстите честички или не се таложат или процесот на таложение е нецелосен и многу бавен.

### 4.1.11 Филтрација

Филтрацијата е уште една широко применувана сепарациска техника. Тоа е механичка или физичка операција за сепарација на цврсти честички од флуиди, со примена на филтер медиум кој е пермеабилен само за флуидниот дел од системот (филтрат), додека цврстиот материјал се задржува на самиот медиум (филтер погача).

Пример – HDA процес:

- Реакторот го напушта ефлуент со 5 компоненти:  $H_2$ ,  $CH_4$ ,  $C_7H_8$  (толуен),  $C_6H_6$  (бензен),  $C_{12}H_{10}$  (дифенил), при што сите компоненти, при работните услови во реакторот и на излез од него ( $T = 700\text{ }^\circ\text{C}$ ,  $P = 35\text{ bar}$ ) се во гасна/парна фаза.

- Првата сепарација на оваа мултикомпонентна смеса се изведува со ладење во HEN интегрирана мрежа и експанзија во флеш сепаратор. Со тоа се постигнува кондензација на толуенот, бензенот и дифенилот, а  $H_2$ ,  $CH_4$  остануваат во гасна фаза.

- За течните компоненти се потребни две дестилациони колони.

- За гасните компоненти, еден дел од гасната струја се рециркулира во процесот, но поради опасноста од акумулација на  $CH_4$  во системот, дел од струјата се испушта (purge). Во скоро време, примената на соодветно модулирани системи базирани на мембрански процеси адекватни за сепарација на гасни компоненти, овозможува сепарација на  $H_2$  од  $CH_4$ . Притоа, метанот се отстранува од рециркулацискиот круг, а водородот се рециркулира во реакторот.

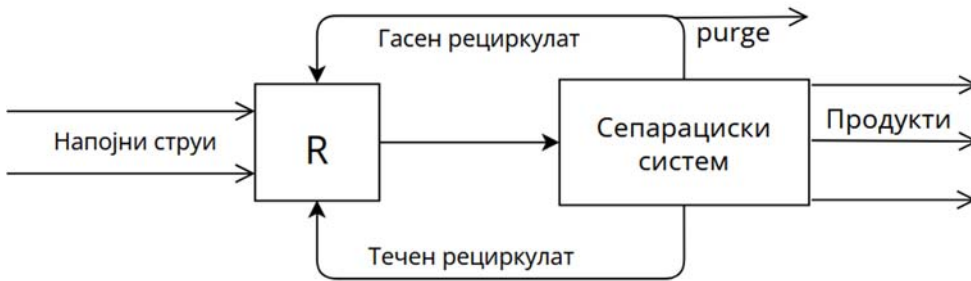
## 4.2 Правила за дизајн на сепарациски систем

Реакторските ефлуенти кои содржат течни и гасни компоненти предвидуваат дизајн на комплексен сепарациски систем, дефиниран со:

1. Генерална структура на сепарациски систем;
2. VRS (Vapor Recovery System – систем за сепарација на гасна струја);
3. TCC (Систем за сепарација на течна струја).

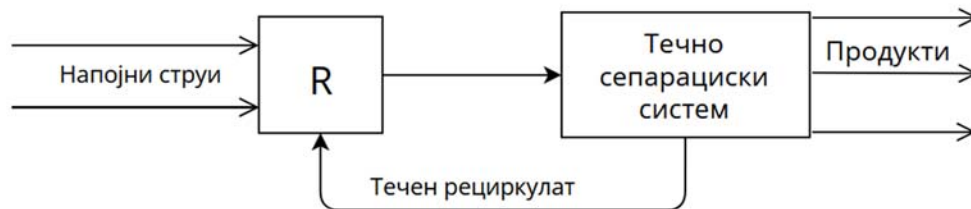
### 4.2.1 Генерална структура на сепарациски систем

Генералната структура на сепарациски систем може графички да се претстави со проточен блок-дијаграм (слика 4.1).



**Слика 4.1** Генерална (општа) структура на сепарациски систем

Доколку реакторскиот ефлуент е во течна фаза, применливи се само сепарациски техники за течни системи – дестилациони колони, екстракциони единици, но без системи за адсорпција или апсорпција. Сепарациски систем од овој тип е претставен со проточен блок-дијаграм на слика 4.2.



**Слика 4.2** Сепарациски систем за еднофазен течен реакторски ефлуент

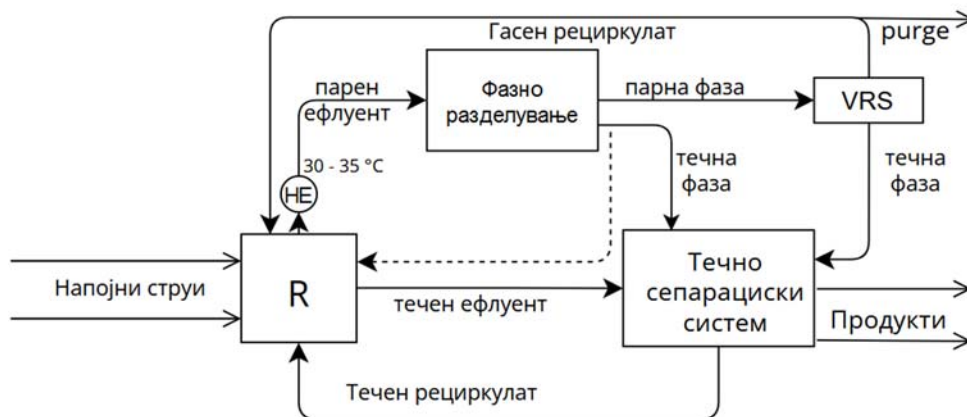
Кај двофазен реакторски ефлуент, или самиот реактор е димензиониран како фазен сепаратор (*Phase Splitter*) или на излез од реакторот е лоциран флеш сепаратор, при што течната струја се транспортира во ТСС. Систем од овој тип е прикажан на слика 4.3.

Доколку втечетата струја содржи неизреагирани реактанти (во најголем дел) се рециркулира назад во реакторот (еквивалент на рефлукс кондензатор).

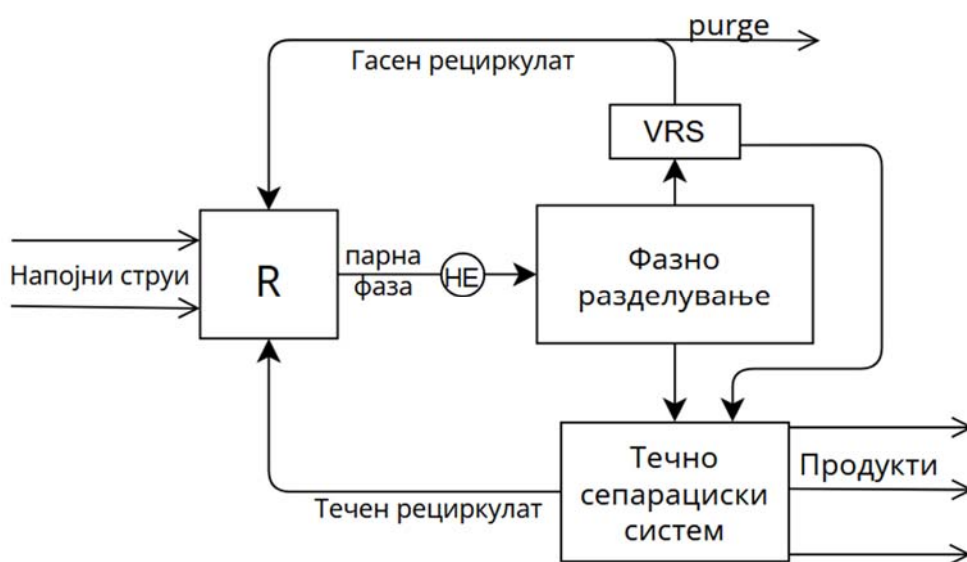


#### 4. Дизајн на сепарациски системи

Во случај кога во оваа струја најголем удел имаат продуктите, струјата се транспортира во ТСС, со цел конечна изолација и/или пурификација на продуктите.



Слика 4.3 Сепарациски систем за двофазен реакторски ефлуент



Слика 4.4 Сепарациски систем за еднофазен реакторски ефлуент (гасна фаза)

Кога најголемиот дел од ефлуентот е во гасна фаза, прво се предвидува ладење на смесата (ако има потреба и до 30 °C) за да се постигне раздвојување на фази или, пак, целосна кондензација на струјата. Втечената струја се воведува во ТСС, а гасната во VRS. Кога ладењето не е доволно за да се постигне раздвојување на фазите, тогаш се модифицира и притисокот (компресија), а кај одредени ефлуенти е неопходно драстично ладење и компресија на струјата. Доколку и на овој начин не се постигне раздвојување на фази, целата струја се транспортира во VRS. Основен приказ за дефинираниот сепарациски систем е даден на слика 4.4.

Основно хеуристичко правило при дизајн на систем за сепарација е имплементација на фазна сепарација на ефлуентот (раздвојување на фази) под претпоставка дека е возможна последователна дестилациска сепарација на течните компоненти.

### 4.2.2 Дизајн на VRS (Сепарациски систем за парна фаза)

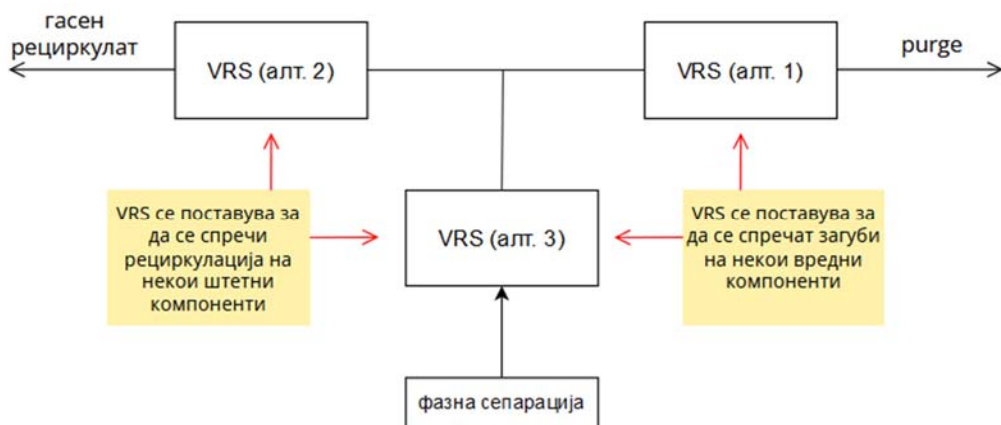
Синтеза на соодветен систем за рекуперација на парната фаза или сепарациски систем за парна фаза започнува со утврдување на 2 клучни аспекти:

- 1) Најдобра локација на VRS
- 2) Тип на VRS

**Најдобра локација на VRS** претставува избор на една од 4 можни варијанти:

- *purge* систем (VRS е лоциран во *purge* струјата)
- Гасен рециркулат (VRS е лоциран во струјата на гасниот рециркулат)
- *Flash-vapor* систем (VRS е лоциран во струјата на парната фаза на излез од флеш сепараторот)
- Неприменлив (неисплатлив)

Изборот на една од дефинираните варијанти зависи од неколку фактори (слика 4.5.):



**Слика 4.5** Избор на локација за VRS единица

1) Ако голем дел од вреден материјал се губи со испуштање на *purge* струјата, тогаш VRS се позиционира во линијата на *purge* струјата. Дополнително, ваквото решение има и најмали капитални трошоци поради фактот што оваа струја има најмал проток од наведените алтернативи, па следствено и VRS единица со најмал капацитет (пример, најмал апсорбер).

2) Доколку во гасниот рециркулат има компоненти кои се штетни за работата на реакторот (пример, каталитички „отров“), или компоненти со чија акумулација во системот би се зголемил ризикот по постројката (пример, акумулација на експлозивни гасови), тогаш VRS единицата би била лоцирана во струјата на гасниот рециркулат. Оваа струја има втор најмал проток на гасна фаза.

3) Единицата на VRS се лоцира во струјата која го претставува излезот од флеш сепараторот кога треба да се задоволат условите од точките 1 и 2. Оваа варијанта има најголем проток на гасна фаза, па затоа и има потреба од единица со најголем капацитет во споредба со претходните алтернативи, но во голем број случаи ваквиот пристап е најсоодветен и единствено одржливо решение за даден процес.

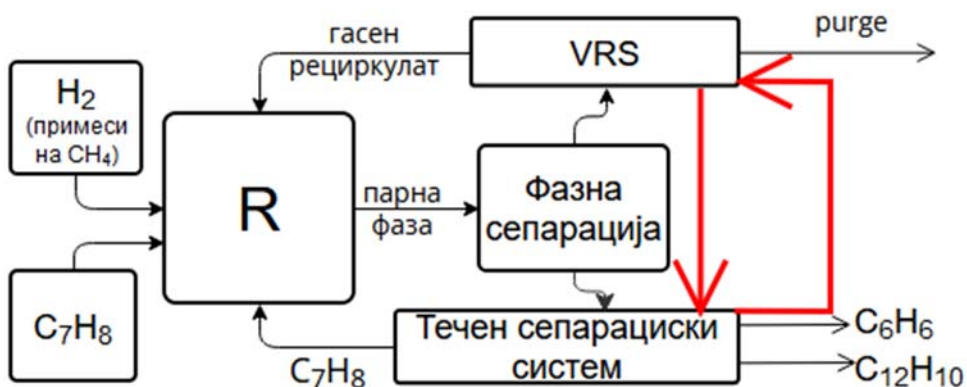
4) Во случај кога не постои потреба за исполнување на условите специфицирани во алтернативите 1) и 2), тогаш нема конкретна потреба од инсталација на VRS единица.

Воведувањето на единица за VRS претставува дополнителна задача за дефинирање парцијален материјален биланс, како во однос на протоците на струите во оваа единица, така и од аспект на нивниот квалитативен состав.

**Типови на VRS**, односно најчести решенија за процеси врз база на кои се имплементираат VRS единици се:

1. Кондензација со компресија и/или ладење
2. Апсорпција
3. Атсорпција
4. Мембранска сепарација
5. Реактивна сепарација

Изборот зависи од физичко-хемиските карактеристики на системот во директна корелација со економската исплатливост на конкретното решение. Во суштина, стратегијата за имплементација на VRS во технолошките процеси може да се сублимира во следното: VRS единицата продуцира течна струја, која претставува дополнително оптоварување за течниот сепарациски систем, па токму затоа при дизајнот на сепарацискиот систем најчесто се поаѓа од димензионирање на VRS, а потоа и на TCC.



**Слика 4.6** Дополнителен рециркулирачки круг кај HDA процесот

Доколку VRS единицата е апсорбер, во кој се додава течен апсорбент, се воведува нов рециркулациски круг помеѓу сепарациските системи (пример, сепарациски систем за HDA процесот претставен на слика 4.6). На крајот, потребно е да се пресметаат капацитетите на единицата и нејзината исплатливост, а конечната одлука за оптимално решение се донесува врз основа на економските показатели.

Со употребата на парцијален кондензатор и флеш сепаратор за фазна сепарација на реакторскиот ефлуент некои од полесните течни компоненти ќе „избеаат“ со парната струја, бидејќи не постои идеална сепарација, па таа количина на лесни компоненти нема да се појави во ТСС.

Доколку количината на пареа во ефлуентот од реакторот е мала, тогаш наједноставно решение е воведување на целиот ефлуент во дестилациона колона. Во тој случај, при димензионирањето на колоната ќе се зголеми дијаметарот на колоната, но овој трошок е многу помал во споредба со инсталација на VRS систем. Сепак, не постојат хеуристички правила за вакви одлуки и ваквиот избор ќе даде уште една алтернатива во процесниот дизајн.

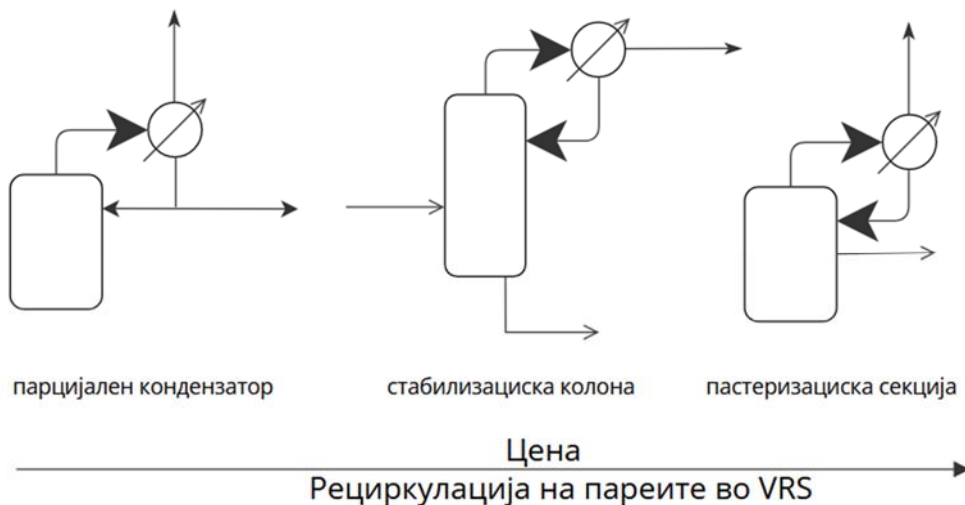
#### 4.2.3 Дизајн на течен сепарациски систем (ТСС)

Постојат низа на одлуки кои се во функција на успешна синтеза на ТСС:

- 1) Како ќе се отстранат лесно испарливите компоненти (C1 – C4 light-ends) и дали нивното присуство претставува контаминација на продуктот?
- 2) Која е дестинацијата на лесните компоненти?
- 3) Можни азеотропни смеси – дали да се рециклираат компонентите кои создаваат азеотропни смеси или да се сепарираат?
- 4) Каква сепарација се постигнува со примена на дестилациони колони?
- 5) Утврдување на оптимална секвенција на т.н. „дестилациски воз“.
- 6) Избор на алтернативни сепарациски постапки, во случај каде дестилацијата е неприменлива или несоодветна.

**Лесните компоненти** (*light-ends*) ќе бидат растворени во течната струја на излез од фазниот сепаратор и во течните струи на излез од VRS; доколку го контаминираат конечниот продукт, неопходно е да се отстранат. Има неколку алтернативи за отстранување на лесните компоненти (слика 4.7):

- 1) Редукција на притисокот или зголемување на температурата на струјата за елиминација на лесните компоненти во фазниот сепаратор.
- 2) Примена на парцијален кондензатор на колоната со продукти.
- 3) Пастеризациска секција во колоната со продукти (со странична струја).
- 4) Стабилизациска колона позиционирана пред колоната со продукти, каде се загрева течната смеса до вриење со цел да се ослободи од растворливите лесни компоненти.



**Слика 4.7** Шема на алтернативи за отстранување лесни компоненти

Можни решенија за **конечната дестинација на лесните компоненти** се:

- Вентилирање (т.н. *flare* систем) – горилник;
- Како гориво во процес;

- Со зголемување на „незаситеноста“ на молекулата, расте и реактивноста на молекулата, па оттука: метан, етан, пропан, бутан – горива, додека етилен, пропилен се напојни суровини во петрохемијата.

Кај **азеотропните смеси** кои содржат реактанти се разгледуваат две алтернативи: целосно рециклирање во реактор или сепарација на компонентите. Во случај кога е непожелно рециклирање на азеотропната смеса во реакторскиот систем, најчесто се применува модификатор за раздвојување на една од компонентите од азеотропната смеса. Но, примената на модификатор предвидува инсталација на 2 колони – едната за азеотропна дестилација, а втората за регенерација на модификаторот.

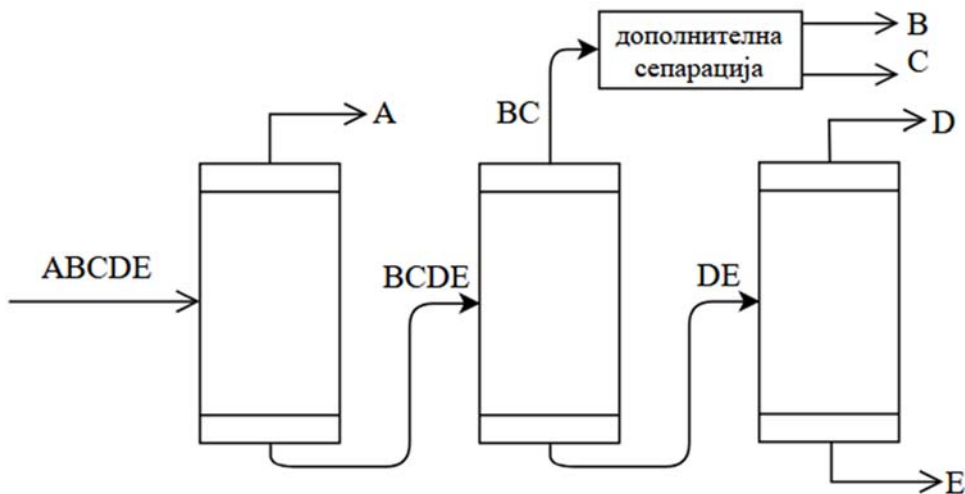
**Дестилацијата** претставува сепарациска постапка која енергетски многу побарува, но успешното топлинско интегрирање во HEN на процесот ја прави дестилацијата најприфатливо решение. Генерално, ова е најисплатливото решение за сепарација на течни смеси. Во случај кога се изведува сепарација на компоненти со мала релативна испарливост, индицирана и преку малата разлика меѓу  $T_{\text{вриење}}$  на компонентите, оваа техника станува помалку исплатлива поради потребата од поголеми капитални трошоци, односно поголем број подови и/или поголем пречник на колоната, поголем рабојлер и кондензатор, поголеми количества на сервисни медиуми за ладење и загревање и други трошоци.

Базично хеуристичко правило кое се однесува на сепарација на компоненти со релативна испарливост,  $\alpha < 1,1$ , е пристапот тие компоненти да не се сепарираат во дестилациона колона, но да се групираат и третираат како една компонента во системот. Ваков пример е прикажан табеларно (табела 4.1) и графички за следниот мултикомпонентен систем (слика 4.8).

**Табела 4.1** Пример за петкомпонентна смеса, со специфицирани вредности за  $\alpha$

Компонента	Релативна испарливост ( $\alpha$ )
A	3,2
B	1,7
C	1,6
D (база за $\alpha$ )	1,0
E	0,4

Во случај на неопходност за сепарација на групата компоненти, за што е неприменлива (неисплатлива) дестилацијата, се воведува дополнителна единица за сепарација на предметните компоненти, што во суштина може да биде азеотропна дестилација (со примена на модификатор за азеотропни смеси), екстракција или други конвенционални или современи сепарациони процеси.



**Слика 4.8** Дестилациона секвенција за дадената петкомпонентна смеша

Дизајнот на соодветно решение за **дестилациона секвенција** за сепарација на мултикомпонентни смеси претставува сериско поврзување на дестилациони колони за консекутивна сепарација на поединечните компоненти или групи на компоненти со слични физичко-хемиски карактеристики т.н. дестилациони воз. Притоа, секогаш како примарно решение се разгледува применливоста на т.н. едноставни колони, кај кои:

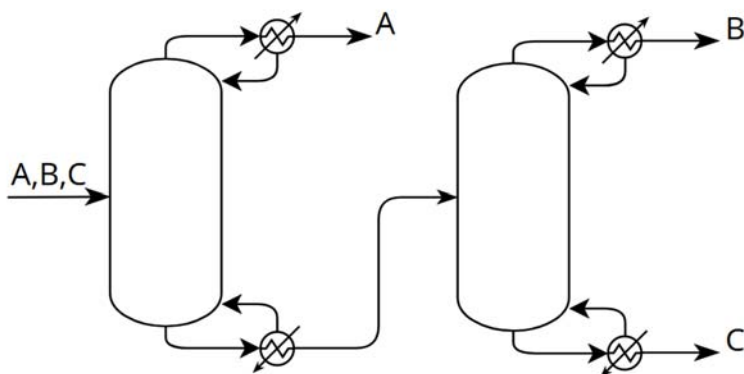
1. Напојната струја се разделува во 2 продуктни струи;
2. Клучните компоненти имаат последователно – соседна вредност на испарливост;
3. Содржат ребојлер и кондензатор.

Доколку како пример анализираме трикомпонентна смеша, а притоа се определиме за решение со две дестилациони колони, тогаш можни се

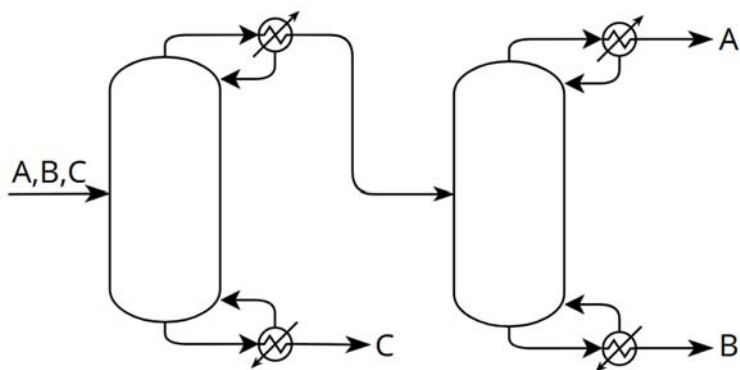


#### 4. Дизајн на сепарациони системи

две алтернативни решенија за дестилацискиот воз, односно две дестилациони секвенции (слики 4.9 и 4.10):



Слика 4.9 Директна секвенција



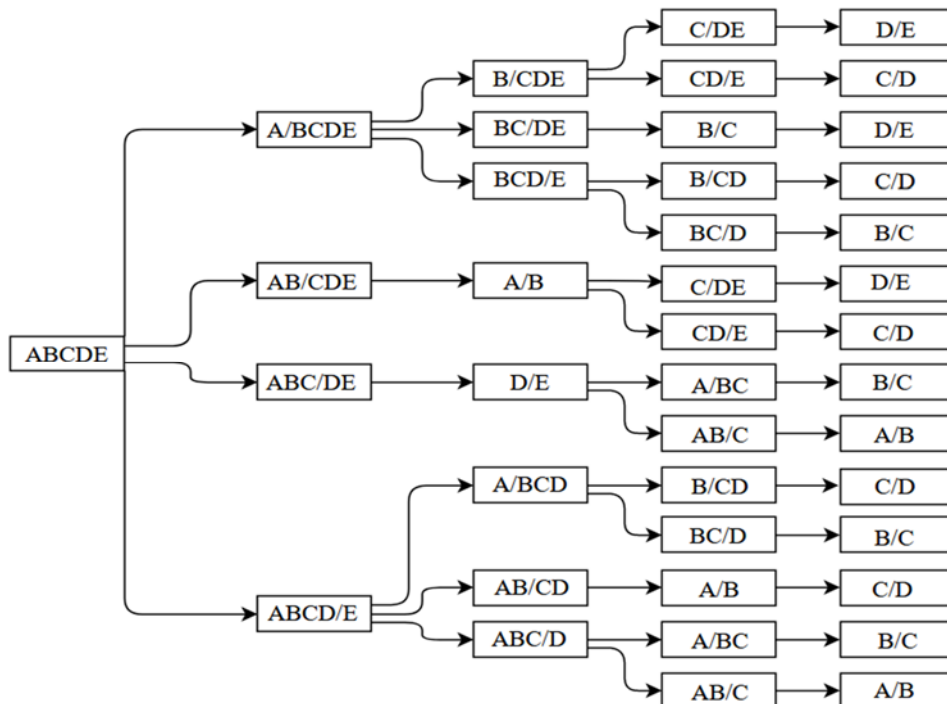
Слика 4.10 Индиректна секвенција

Дестилацискиот воз на директна секвенција предвидува архитектура на течен сепарациони систем кој претпоставува последователна – етапна сепарација на најлесната компонента (или хемиски сродна група на компоненти) во секоја консекутивна дестилациона колона. Додека втората дестилациона секвенција (индиректна) предвидува сепарација на најтешката компонента во секоја наредна дестилациона колона, до постигнување на проектираната сепарација на анализираната мултикомпонентна смеса.

Предложените варијанти на дестилацискиот воз, односно дестилационите секвенции, покрај техничко-технолошките имаат и

значителни разлики во поглед на капиталните и оперативните трошоци кај секоја од варијантите.

Зголемувањето на бројот на компоненти кои се сепарираат несомнено го зголемува и бројот на можни дестилациони секвенции, па така за 5-компонентна смеса се неопходни 4 дестилациони колони, за кои има 14 можни дестилациони секвенции (слика 4.11).



**Слика 4.11** *Можни дестилациони секвенции за сепарација на 5-компонентна смеса*

Изборот на оптимално решение за димензионирање на течниот сепарационски систем во однос на изборот на најадекватна дестилациона секвенција се темели на неколку одлуки:

1) **Можност за топлинска интеграција** – директно влијае на оперативните трошоци на системот за сепарација, а со тоа и на вкупните трошоци на процесот. Силно егзотермните реакции продуцираат реакторски ефлуент со големо количество топлина и оваа процесна струја може да се вмрежи со рабојлерот на некоја од дестилационите колони, со што

драстично се намалуваат оперативните трошоци. На пример, реакторскиот ефлуент од анализираниот HDA процес има доволно топлина за загревање на сите ребојлери од дестилационите колони.

#### 2) Практични (процесни) ограничувања:

- Безбедносни ограничувања: присутните опасни хемикалии први се сепарираат, односно се отстрануваат во првата можна дестилациона колона (најбрзо).

- Хемиски и термички нестабилни компоненти: се сепарираат што поскоро, за да се избегне можноста за загуби во процесот.

- Корозивни компоненти: се сепарираат што поскоро со цел да се избегнат оштетувања на процесната опрема.

- Доколку се одвива декомпозиција на некои од компонентите во ребојлерот на колоната, тогаш не се извлекува продуктна струја од дното на колоната.

- Кај компонентите со потенцијал да полимеризираат, при дестилација се додаваат инхибитори, кои се неиспарливи, со високи  $T_{вр}$  (пример – хидрокинон) и тие завршуваат на дното на колоната, па затоа не се извлекува продуктна струја од дното на колоната.

- Доколку има компоненти кои тешко кондензираат, потребно е дополнително ладење (т.н. *refrigeration*) и/или зголемен притисок за целосна кондензација. Тогаш, лесните компоненти се извлекуваат од врвот на првата колона, за минимизирање на потребата од обезбедување на вакви работни услови, а со тоа и минимизирање на оперативните трошоци.

Практичните инженерски сознанија базирани на искусвени, воопштени правила за изнаоѓање прифатливи и издржани решенија (хеуристички правила), а кои се однесуваат на димензионирањето адекватни дестилациони секвенции на неинтегрирани (од топлински аспект) колони, може да се презентираат како:

- X1 (хеуритичко правило 1) – сепарацијата на клучни компоненти со релативна испарливост  $\alpha \cong 1$ , или азеотропни смеси, се изведува во отсуство на останатите компоненти (најтешката сепарација – последна);

## Стефан Кувенциев Анализа и синтеза на процеси

- X2 (хеуристичко правило 2) – фаворизирање на директна секвенција, односно последователно сепарирање на лесните компоненти;
- X3 (хеуристичко правило 3) – прво се отстрануваат компонентите со најголем удел;
- X4 (хеуристичко правило 4) – фаворизирање на приближно еднакви количини (молски протоци) на врвот и дното на колоната.

Имплементацијата на хеуристичките правила кај дестилациската сепарација на мултикомпонентни системи најчесто продуцира несогласување на овие искусствени правила, од причина што е речиси невозможно сите да бидат задоволени во даден случај. Претходно анализираниот случај на петкомпонентна смеса може да се анализира низ призмата на специфицираните хеуристички правила.

**Табела 4.2** Пример за петкомпонентна смеса, со специфицирани вредности за  $\alpha$

Компонента	Проток [kmol/h]	Релативна испарливост ( $\alpha$ )	Релативна испарливост на соседни компоненти ( $\alpha$ )
A	45	8	2
B	135	4	1,33
C	225	3	2
D	175	1,5	1,5
E (база за $\alpha$ )	325	1	

Анализата на табеларните вредности со цел димензионирање на адекватна дестилациона секвенција следејќи ги хеуристичките правила, укажува на следните заклучоци:

#### 4. Дизајн на сепарациски системи

---

- Според X1 – сепарацијата B/C треба да биде последна поради најмалата вредност на соседна релативна испарливост.
- Според X2 – фаворизирање на директната секвенција (A/BCDE, B/CDE, C/DE, D/E).
- Според X3 – прво се сепарира компонентата со најголем проток (ABCD/E).
- Според X4 – прва сепарација би требало да биде (ABC/DE) поради еквимоларна дистрибуција на напојот до врвот и дното на колоната.

Евидентно е постоењето конфликт при воведувањето на споменатите хеуристички правила за определување оптимална дестилациона секвенција во анализираниот случај. Ваквата состојба е дополнително потенцирана доколку се појави конфликт со останатите процесни ограничувања. Ваквата состојба се надминува со одлука за следење на едно од правилата за првата колона, како, на пример, X2 – фаворизирање на директна секвенција (A/BCDE), па понатаму повторно се анализира применливоста на хеуристичките правила за смесата BCDE.

Покрај можноста за топлинска интеграција, процесните ограничувања и хеуристичките правила, постојат и други параметри и правила за евалуација на можните решенија за архитектура на дестилацискиот воз. Во таа насока, протокот на парна фаза во колоните е соодветна мерка за капиталните и оперативните трошоци на дадената секвенција, поради директната поврзаност на енергетските (топлинските) потреби и протокот на пареи, како и поради фактот што поголемиот проток на пареи резултира во поголеми димензии на колоната, поголем ребојлер и кондензатор. Затоа, минимизацијата на протокот на пареи во синтетизираната дестилациона секвенција претставува оптимално решение за сепарација на дадена мултикомпонентна смеса.

Примената на Андервудовата (*Underwood*) равенка кај мултикомпонентните системи ни овозможува пресметка на протокот на пареи при минимален рефлукс, во секоја колона од секвенцијата.

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^{NC} \frac{\alpha_i \cdot x_{F,i}}{\alpha_i - \theta} = 1 - q \quad (1) \\ R_{min} + 1 = \sum_{i=1}^{NC} \frac{\alpha_i \cdot x_{D,i}}{\alpha_i - \theta} \quad (2) \end{array} \right.$$

каде:

$x_{F,i}$  – молски удел на  $i$  во напојот;

$x_{D,i}$  – молски удел на  $i$  во дестилатот;

$\alpha_i$  – релативна испарливост на компонентата  $i$ ;

$\theta$  – Андервудова константа;

$V_{min}$  – проток на пареи при минимален рефлукс ( $R_{min}$ );

$D$  – проток на дестилат;

$R$  – рефлукс;

$q$  – напојна линија;

$NC$  – број на компонента.

Примената на Андервудовата равенка се состои во:

1) Се претпоставува фиксна вредност на  $q$  (пример,  $q = 1$  за напој од заситена течност при  $T_{вр}$ );

2) Равенката (1) се дефинира за секоја од компонентите ( $NC - 1$  равенки) и се решава за вредност на  $\theta$ , при што реални, позитивни вредности на  $\theta$  се земаат оние кои се меѓу вредностите на релативните испарливости на клучните компоненти;

3) Од сите вредности на  $\theta$  се зема вредноста која е меѓу вредностите на релативните испарливости на лесната и тешката клучна компонента на сепарацијата (пример, ако сепарацијата се врши така што В е лесната компонента, а D тешката клучна компонента, тогаш за пресметка на  $\theta$  се користи  $\alpha_{BE}/\alpha_{DE}$ );

4) За определената вредност на  $\theta$  се решава равенката (2), за дадени вредности за  $R_{min}$  и предодредена вредност за  $x_{D,i}$  (пр.  $\alpha_{BC} = \frac{\alpha_{BE}}{\alpha_{CE}}$  и  $\alpha_{BE} < \theta < \alpha_{CE}$ );

5) Со пресметан  $V_{min}$  реалниот напој на парната фаза може да се пресмета од материјалниот биланс за врвот на колоната:

$$V = D(1 + R)$$

Оптимална вредност за рефлуксниот однос се зема  $R = 1,2 \cdot R_{min}$ .

#### 4.2.4 Метод на Porter&Momoh

$$V = D(1 + R)$$

а за рефлуксниот однос

$$R_F = \frac{R}{R_{min}}$$

Со преуредување, се добива:

$$V = D(1 + R_F \cdot R_{min})$$

Вредноста за  $R_{min}$  се определува од Андервудовата равенка за клучната компонента:

$$R_{min} = \frac{1}{\alpha - 1} \left( \frac{x_{D,ЛК}}{x_{F,ЛК}} - \alpha \cdot \frac{x_{D,ТК}}{x_{F,ТК}} \right)$$

каде:

ЛК – лесна клучна компонента;

ТК – тешка клучна компонента;

$x$  – молски удел.

Во случај на максимално раздвојување на мултикомпонентната смеса, на пример, АВ/СDE, каде што компонентите А и В се целосно во кондензаторот, а компонентите С, D и Е целосно во ребојлерот на

колоната, тогаш станува збор за граничен случај на т.н. *sharp separation*, изразена со:

$$F \cdot x_{F,ЛК} = D \cdot x_{D,ЛК}$$

$$\frac{F}{D} = \frac{x_{D,ЛК}}{x_{F,ЛК}}$$

Притоа,  $x_{D,ТК} = x_{F,ТК} = 0$ .

Оттука,

$$R_{min} = \frac{1}{\alpha - 1} \left( \frac{x_{D,ЛК}}{x_{F,ЛК}} \right) = R_{min} = \frac{1}{\alpha - 1} \left( \frac{F}{D} \right)$$

Доколку оваа зависност се замени во равенството за проток на пареи,

$$V = D \left( 1 + R_F \cdot \frac{1}{\alpha - 1} \frac{F}{D} \right)$$

Со експанзија:

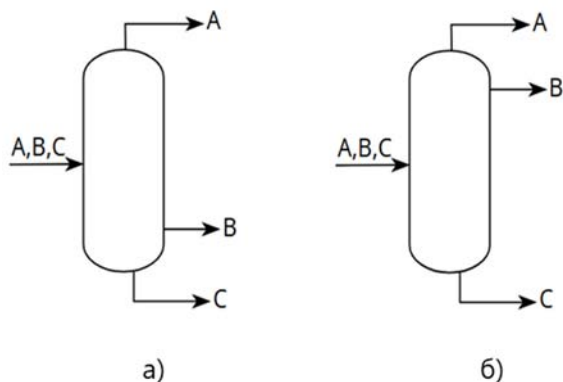
$$V = (F_A + F_B + \dots + F_{ЛК}) + \frac{R_F}{\alpha - 1} (F_A + F_B + \dots + F_{ЛК} + F_{ТК} + \dots + F_{НС})$$

Вредноста на релативната испарливост,  $\alpha$ , се дефинира за секоја од дестилационите колони во зависност од изборот на лесна и тешка клучна компонента од напојната струја. На пример, при сепарацијата A/BCDE, се работи за  $\alpha_{AB}$ , или во случајот на BC/DE тогаш имаме  $\alpha_{CD}$ .

#### 4.2.5 Колони со повеќе од два продукти

Конфигурацијата на дестилацискиот воз во еден течен сепарациски систем, доколку се претпостави употребата на едноставни дестилациони колони, за трикомпонентна смеса, се состои од две дестилациони колони и две алтернативи за дестилациони секвенции, во директна или индиректна секвенција. Но, постои и алтернативно решение, кое се базира на димензионирање дестилациони колони со повеќе продуктни струи, како што е прикажано на слика 4.12.





Слика 4.12 Дестилациона колона со странична струја

Првата варијанта (варијанта а) претставува соодветно решение за дестилациона колона адекватна за сепарација на 3-компонентна смеса, каде средната компонента (според  $T_{вр}$ ) учествува со повеќе од 50 % во напојната струја, а тешката компонента со помалку од 5 %. Додека кај втората варијанта (б), средната компонента (според  $T_{вр}$ ) учествува со повеќе од 50 % во напојната струја, а лесната компонента со помалку од 5 %.

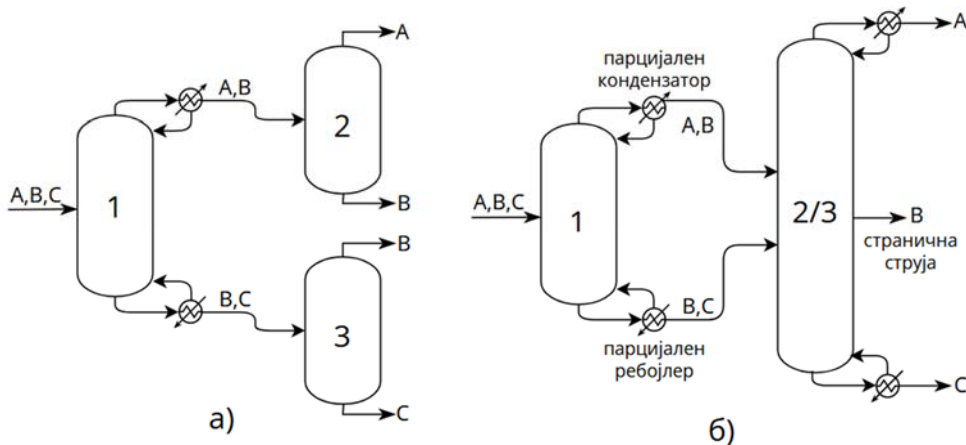
Во првиот случај, освен доколку протокот на тешката клучна компонента не е многу мал, а на средната многу висок, не се добива доволно чиста странична струја во однос на квалитативниот состав, па затоа оваа струја се извлекува во парна фаза и се предвидува нејзино дополнително прочистување (пурификација). Додека во вториот случај, доколку средната компонента е во голема количина, а лесната компонента е со мал проток, страничната струја се извлекува во течна фаза.

#### 4.2.6 Префракциониращка конфигурација на дестилациона секвенција

Во случај кога најлесната и најтешката компонента се избираат за клучни компоненти за сепарација во првата дестилациона колона, неопходна е префракциониращка конфигурација на сепарацискиот систем (слика 4.13).

Првата варијанта на оваа конфигурација содржи три дестилациони колони, од кои кај првата се генерираат две продуктни струи, на врвот на колоната се компонентите А и В (дел), додека на дното се компонентите В (остатокот) и С. Оваа колона нема голем број на теоретски подови,

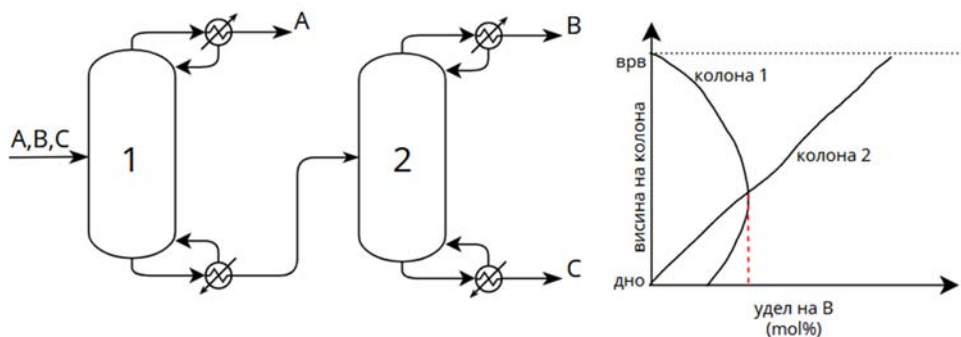
бидејќи нема за цел целосна сепарација на компонентите, туку е димензионирана да постигне соодветна сепарација на лесната и тешката компонента во горната и долната продуктна струја и соодветна дистрибуција на средната компонента во двете струи. Дополнително, во колоните 2 и 3 се постигнува конечна сепарација на сите три компоненти, при што компонентата В се јавува и на дното на колона 2 (како тешка) и на врвот од колона 3 (како лесна компонента), додека компонентите А и С се добиваат на врвот од колона 2 и дното на колона 3, соодветно. Ваквата конфигурација има своја оптимизирана варијанта (варијанта 2), презентирани со интегрирање на колоните 2 и 3 во една колона, каде употребата на мала префракциониращка колона (колона 1) овозможува доволна дистрибуција на средната компонента во горната и долната струја, со што се овозможува ефикасно отстранување на компонентата В како странична струја во следната интегрална колона (2/3).



**Слика 4.13** *Префракциониращка конфигурација на течно сепарацискиот систем*

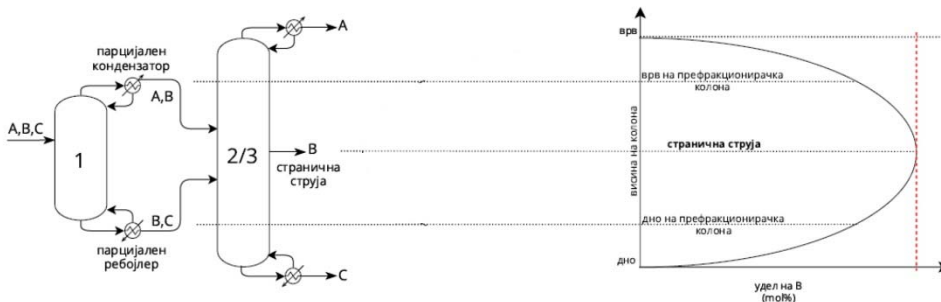
Употребата на префракциониращки колони во најголемиот број случаи резултира со значителни енергетски заштеди, дури до 30 %. Овој факт се должи на тоа што оваа конфигурација е термодинамички поефикасна од класичните секвенции на едноставни дестилациони колони, со две продуктни струи.

#### 4. Дизајн на сепарациони системи



Слика 4.14 Директна дестилациона секвенција за 3-компонентна смеса

Концентрацискиот профил во однос на содржината на компонентата В, презентирани на слика 4.14, дава основен преглед на содржината на оваа компонента по висина на колоната. Во однос на колоната 1, од врвот кон дното на колоната, содржината на В расте како резултат на намалувањето на уделот на компонентата А. Но, како се приближуваме кон дното на колоната, уделот на компонентата В почнува да опаѓа (црвената линија на графикот), затоа што уделот на компонентата С почнува да расте (потешката компонента). Оттука, профилот на компонентата В има максимум, но повторно почнува да опаѓа поради мешањето со компонентата С (ремикс на компонентите), што ја претставува суштината на неефикасноста на ваквата конфигурација.



Слика 4.15. Префракциониращка конфигурација на ТСС за 3-компонентна смеса

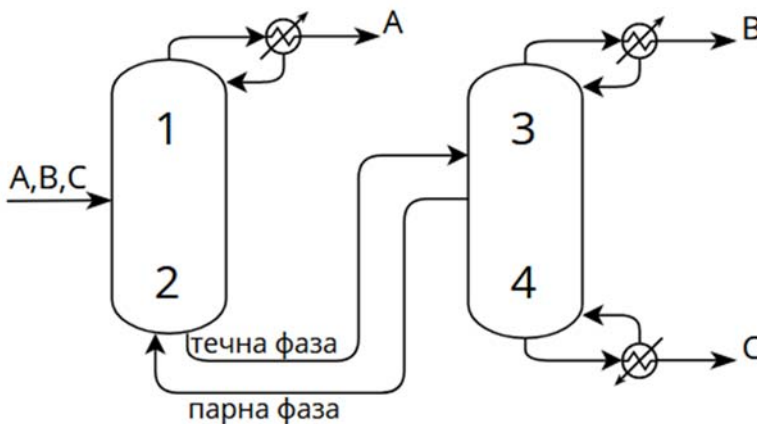
Квалитативниот профил на средната компонента е префракциониращки, а уделот на компонентата В во страничната струја претставува максимум

на оваа крива, па токму во оваа зона на колоната 2/3 се извлекува страничната струја за дадениот систем. Степенот на чистота на страничната струја (уделот на средната компонента во струјата) често не ги задоволува барањата за да биде класифициран како конечен продукт, но најчесто страничната струја е рецикулат во реакторскиот систем, па токму затоа и недоволната чистота на струјата не претставува значително ограничување. Но, со извлекувањето на странична струја, која го содржи најголемиот дел на компонентата В, се избегнува појавата на повторно мешање (*remixing*) со тешката компонента, С.

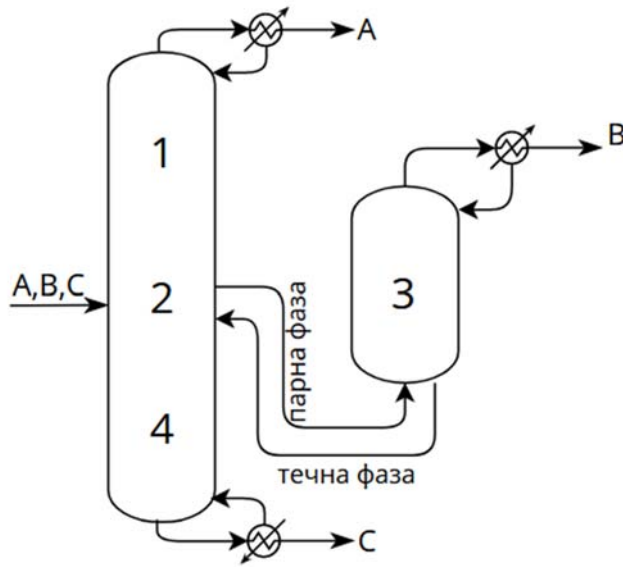
Дополнителна предност на оваа конфигурација е фактот што пореметувањето во напојната струја во однос на соодносот парно/течно (*q*-линија) ќе предизвика и нарушување во напојниот под, бидејќи струите на гасната и течната фаза кои егзистираат во тој под имаат различен состав. Префракционирачката конфигурација претставува робустно решение во овој поглед, со што се избегнува овој проблем.

#### 4.2.7 Топлинско интегрирање на дестилационите колони

Еден од значајните фактори при дизајнот на соодветна дестилациска композиција е можноста за директно термичко спарување на колоните. Основен теоретски концепт за термичко спарување е кондензирање на пареите од една дестилациона колона во ребојлерот на друга колона.



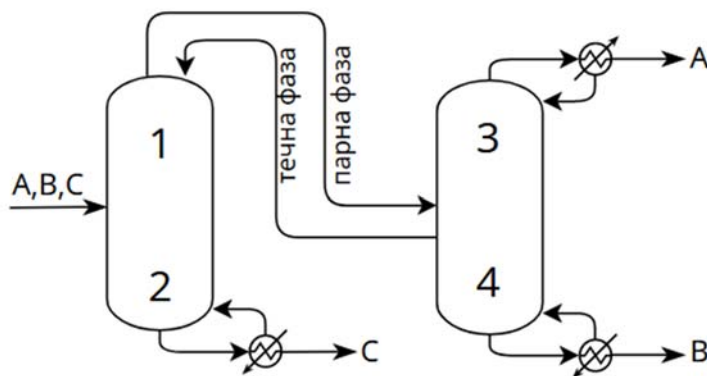
**Слика 4.16** Термичко спарување на колони во директна секвенција



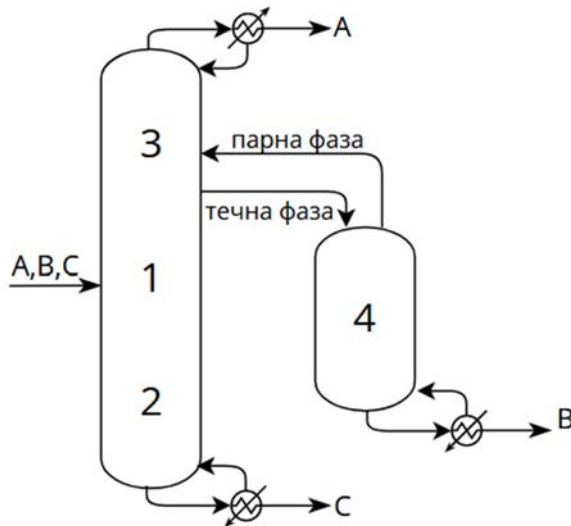
**Слика 4.17** Термичко спарување на колони во директна секвенција со страничен ректификатор

Ваквиот пристап се базира на една колона со ребојлер и тотален кондензатор и втора колона, која е поврзана со претходната во директна секвенција (прикажано на слика 4.16).

Топлинската интеграција на колоните во директна секвенција е можно да се реализира со инсталација на страничен ректификатор (*side rectifier*), што е дадено на слика 4.17.



**Слика 4.18** Термичко спарување на колони во индиректна секвенција



**Слика 4.19** Термичко спарување на колони во индиректна секвенција со страничен стрипинг

Аналогно на презентираните концепти за термичко спарување на колони во директна секвенција, сликите 4.18 и 4.19 ги демонстрираат можните варијанти за термичко спарување колони во индиректна секвенција.

Од презентираните конфигурации на термички интегрирани колони, варијантата со страничен стрипинг наоѓа честа примена во петрохемиската индустрија.

Имплементацијата на термичко спарување на дестилациските композиции има свои предности и недостатоци, како од техничко-технолошки, така и од економски аспект. Целосно термички спарени дестилациони колони најчесто се избегнуваат во процесното инженерство, поради фактот што со термичкото спарување се намалува енергетската потрошувачка во течниот сепарациски систем, но со тоа се лимитираат можностите за топлинска интеграција на колоната со останатите процесни елементи.

Топлинската интеграција на дестилационите секвенции укажува на фактот дека секвенциите со поголем топлински потенцијал (содржина на топлина) се појавуваат кај колони со поголеми температурни градиенти

помеѓу врвот и дното на колоната. Притоа, конвенционалните дестилациски секвенции нудат можност за манипулација со процесните услови од аспект на модификација на работниот притисок кај колоните, независно една од друга, а тоа директно влијае на капацитетите на кондензаторот и ребојлерот. Ваквата можност ја нема кај термички спарените колони, па иако демонстрираат помала топлинска побарувачка од конвенционалните, преносот на топлина се реализира при поголема погонска сила ( $\Delta T$ ). Редуцираната потреба на топлина е посакувана кај топлинската интеграција, но зголемената температурна разлика меѓу кондензаторот и ребојлерот на колоната го поништува овој позитивен ефект.

Повисоката температура на пареите на врвот на дестилационата колона и пониската температура на течната фаза на дното на колоната ја прават изводлива топлинската интеграција. Термичкото спарување на дестилационите колони се разгледува само кога е претходно дефиниран концептот на топлинска интеграција.

### 4.2.8 Димензионирање дестилациони колони

Димензионирањето дестилациони колони за сепарација на двокомпонентни смеси е дел од потребните апсолвирани познавања на колегите инженери, па оттука сепарацијата на мултикомпонентни смеси претставува своевидна надградба на стекнатите знаења, што во суштина се базира на ист принцип на сепарација, но и различен пристап при димензионирањето на ваква колона. Генерално, постојат два основни пристапи:

- 1) Дизајн на нова колона и
- 2) Редизајн или „ретрофит“ на постоечка колона.

Кај вториот пристап, димензиите на колоната, висината и дијаметарот се фиксни големини, но променливи се протоците на струите и степенот на сепарација.

### 4.2.9 Колони со подови

Димензионирањето на најчестиот тип на дестилациони колони – колони со подови, може да се анализира во неколку чекори:

1) Дефинирање на составот и физичките карактеристики на напојната струја и продуктите – поставување материјален биланс. Утврдување дополнителни, специфични ограничувања – максимален пад на притисок и/или температура, присуство на корозивни материји и др.

2) Избор на иницијална дизајн варијабла – прво се разгледува вредноста на оперативниот притисок ( $P_{OP}$ ). Зголемениот работен притисок ( $P_{OP} \uparrow$ ) резултира со зголемен предзвик за сепарација на мултикомпонентната смеса, поради намалување на релативната испарливост на компонентите ( $\alpha \downarrow$ ), зголемена работна температура ( $T_{OP} \uparrow$ ) на ребојлерот и кондензаторот, зголемување на густината на пареите и намалување на латентната топлина на испарување. Долна граница за работниот притисок е избегнување вакуум или надворешно ладење – refrigeration, поради зголемените оперативни трошоци. Доколку постои техничка изводливост, работниот притисок ( $P_{OPT}$ ) се нагодува со цел постигнување термодинамички услови во кондензаторот на колоната, при што како ладен сервисен медиум може да се користи вода за ладење или ладен воздух.

3) Дефинирање на рефлуксниот сооднос – избор на оптимална вредност на рефлуксниот сооднос за анализираниот процес на сепарација, кој се специфицира преку ануализација на инвестициските (капиталните) и оперативните трошоци. Имено, зголемувањето на рефлуксниот сооднос резултира во намалување на капиталните трошоци (помал број на подови), но и во зголемени оперативни трошоци (поради зголемените потреби од ладење во кондензаторот и загревање во ребојлерот).

4) Дефинирање на фазниот состав на напојната струја ( $q = 0$  за заситена пареа до  $q = 1$  за заситена течност), односно парно/течниот состав на напојот. Кога напојот е во *sub cooled* состојба ( $q = 1$ ), односно напојната струја е течност на температура пониска од точката на кондензација, а со тоа и под работната температура на пареите на напојниот под, тогаш има дополнително оптоварување на зоната на осиромашување (стрипинг) поради тоа што најголемиот дел од напојот оди во оваа зона. Дополнително, расте и топлинската потреба во ребојлерот за загревање. Од друга страна, во овој случај имаме намалување на бројот на подови во зоната на збогатување (ректификација).



5) Дефинирање на рамнотежните податоци – со консултирање на достапната литература или обезбедување соодветни експериментални податоци. Литературните податоци во голема мера се однесуваат за сепарација на бинарни смеси, па затоа е неопходно нивно рекомбинирање со модели за мултикомпонентни системи – модели на *Wilson*, *NRTL*, *Uniquack (Universal Quasi Chemical model)* или *Unifac* моделот (примена врз основа на функционалните групи на компонентите).

6) Дефинирање на бројот на рамнотежни подови – постојат *short-cut* методи за определување на бројот на теоретски подови, од кои најпознати се:

- *FUG (Fenske Unnderwood Gilliland)* методот
- *Smoker* методот

#### 4.2.10 FUG метод

Примената на овој метод за определување на бројот на теоретски подови како предуслов ги има дефинираните вредности за минималниот број на подови и  $R_{min}$ .

Минималниот број на подови се пресметува од релацијата на Фенске (Fenske):

$$N_{min} = \frac{\ln \left[ \left( \frac{x_{LK}}{x_{TK}} \right)_D \cdot \left( \frac{x_{TK}}{x_{LK}} \right)_B \right]}{\ln(\alpha_{LK/TK})_{AV}}$$

каде:

$(\alpha_{LK/TK})_{AV}$  – геометриска средна вредност од релативната испарливост меѓу лесната и тешката клучна компонента при температура на ребојлер и кондензатор;

$$(\alpha_{LK/TK})_{AV} = \sqrt{(\alpha_{LK/TK})_D \cdot (\alpha_{LK/TK})_B}$$

$D$  – дестилат;

$B$  – остаток (дно);

$x_{ЛК}$  – молски удел на лесната клучна компонента;

$x_{ТК}$  – молски удел на тешката клучна компонента.

Минималниот рефлуксен однос се пресметува од равенките на Андервуд:

Равенка 1

$$\sum_{i=1}^n \frac{\alpha_i \cdot x_{F,i}}{\alpha_i - \theta} = 1 - q$$

Равенка 2

$$R_{min} + 1 = \sum \frac{\alpha_i \cdot x_{D,i}}{\alpha_i - \theta}$$

каде:

$\alpha_i$  – средна геометриска вредност на  $\alpha$  на компонентата  $i$  во смесата во однос на тешката компонента;

$x_{F,i}$  – молски удел на компонентата  $i$  во напојот;

$\theta$  – параметар кој итеративно (со проба и грешка) се определува во опсегот помеѓу релативните испарливости на клучните компоненти (ЛК и ТК).

Равенката 1 се користи за определување на вредноста на  $\theta$ , и замена во равенката 2, со цел определување на минималниот рефлуксен однос,  $R_{min}$ . Оптималната вредност на рефлуксниот сооднос е 1,2, односно  $R = 1,2R_{min}$ .

Пресметка на теоретскиот број на рамнотежни подови – равенка на Гилиленд (Gilliland).

Конечниот број на теоретски подови,  $N$ , се пресметува со замена на вредностите на  $N_{min}$  и  $R_{min}$  (и  $R$ ) во равенката на Гилиленд:

$$\frac{N - N_{min}}{N + 1} = 0,75 \left[ 1 - \left( \frac{R - R_{min}}{R + 1} \right)^{0,566} \right]$$

Дополнително, дистрибуцијата на неклучните компоненти од напојот во дестилатот и остатокот се дефинира со примена на вредноста за  $N_{min}$ .

$$\frac{x_{D,i}}{x_{B,i}} = (\alpha_i)_{av}^{N_{min}} \cdot \frac{(x_{TK})_D}{(x_{TK})_B}$$

##### 4.2.11 Смокеров метод

Смокеровиот метод за определување на бројот на подови во зоните на збогатување и осиромашување на една дестилациона колона во суштина претставува аналитичко решение на графичкиот метод Меккејб-Тиле (*McCabe-Thiele*) за определување на број на подови.

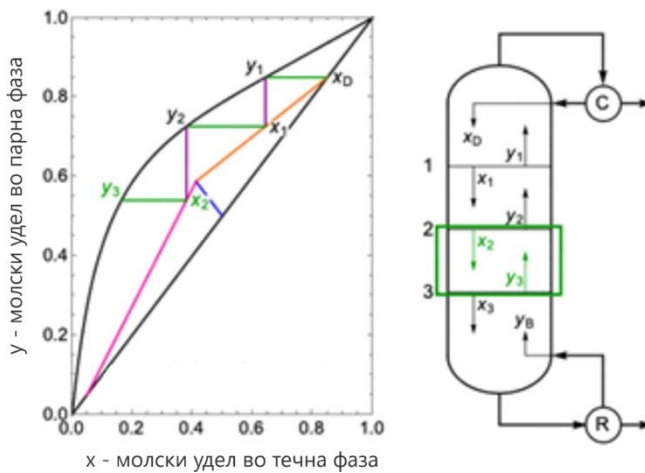
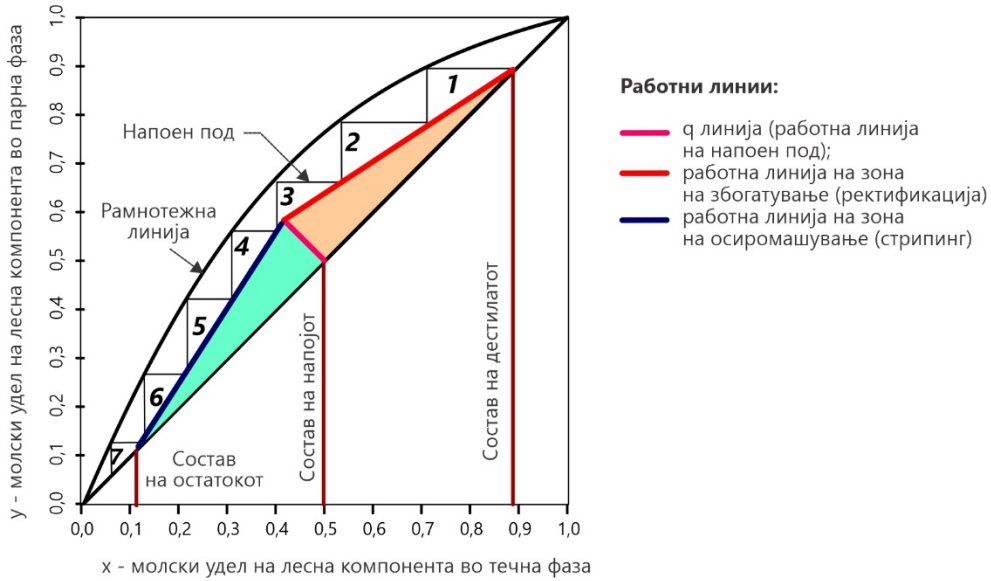
Кај идеалните, а во реални услови – скоро идеални смеси, рамнотежниот состав на парната и течната фаза (V/L) во системот е дефиниран со Рауловиот (*Raoult*) закон:

$$\alpha = \frac{\frac{y}{1-y}}{\frac{x}{1-x}}$$

односно

$$y = \frac{\alpha x}{1+(\alpha-1)x} \quad (4.1)$$

Притоа, се занемарува варијацијата на  $\alpha$  со промената на температурата, под претпоставка дека бинарната смеса содржи типични јаглеводороди со блиски вредности за точките на вриење,  $T_{вр}$ .



Слика 4.20 Концептуален приказ на McCabe Thiele дијаграм

Рамнотежната линија е дефинирана со изведената верзија на Раоултовиот закон, додека работните линии на зоните на збогатување и осиромашување со лесната компонента, во однос на која се дефинирани и составите на парната и течната фаза, се математички дефинирани со равенки на права. Аналитичкото (и графичкото) определување на бројот на теоретски подови е поедноставно доколку ги разгледуваме двете зони одделно.

#### 4. Дизајн на сепарациски системи

Пресметките се базираат на уделот на лесната клучна компонента во течната фаза, бидејќи определувањето на удел на некоја компонента во парна фаза е релативно тешко, додека определувањето на содржината на некоја компонента во течен систем е лесно мерлив параметар, дури и со рефрактометриска метода (определување на индекс на рефракција).

Во однос на зоната на збогатување, работната линија е дефинирана со:

$$y = mx + b \quad (4.2)$$

А пресекот на рамнотежната и работната линија се пресметува со изедначување на двете равенства:

$$\frac{\alpha x}{1 + (\alpha - 1)x} = mx + b$$

Со средување на полиномот, се добива:

$$m(\alpha - 1)x^2 + [m + b(\alpha - 1) - \alpha]x + b = 0 \quad (4.3)$$

Решението во однос на вредностите на уделот на лесната компонента во течната фаза,  $x$ , продуцира само еден корен кој ќе биде во регионот помеѓу 0 и 1, што е основен граничен услов за вредноста на кој било удел. Доколку таа реална вредност ја обележиме со  $k$ , тогаш координатите на таа пресечна точка на рамнотежната и работната линија ги дефинираме како  $(x, y) = (k, mk + b)$ :

$$x = k \quad (4.4)$$

$$y = mk + b \quad (4.5)$$

Графичкото поместување на координатниот почеток на дијаграмот во оваа точка би ни дало дестилациона колона во која имаме само зона на збогатување (ректификација), односно имаме само рамнотежна линија и работна линија на ректификација:

$$x' = x - k \quad (4.6)$$

$$y' = y - (mk + b) \quad (4.7)$$

Модифицираните изрази за работната и рамнотежната линија се соодветно:

$$y' = mx' \quad (4.8)$$

$$y' + (mk + b) = \frac{\alpha(x' + k)}{1 + (\alpha - 1)(x' + k)} \quad (4.9)$$

За  $x' = y' = 0$  и замена во равенството (9):

$$mk + b = \frac{k\alpha}{1 + (\alpha - 1)k} \quad (4.10)$$

Со елиминација на  $b$  во равенките (4.9) и (4.10), се добива:

$$y' = \frac{\alpha x'}{[1 + (\alpha - 1)k]^2 + (\alpha - 1)[1 + (\alpha - 1)k]x'} \quad (4.11)$$

Воведуваме замена:

$$C = 1 + (\alpha - 1)k \quad (4.12)$$

$$y' = \frac{\alpha x'}{C^2 + C(\alpha - 1)x'} \quad (4.13)$$

Равенката (4.13) претставува модифициран облик на Раоултовиот закон во координати дефинирани со пресекот на оригиналниот облик на Раоултов закон и работната линија. За  $x'$ :

$$x' = \frac{C^2 y'}{\alpha - C(\alpha - 1)y'} \quad (4.14)$$

Појдовна точка при конструкција на дијаграмот е уделот на лесната компонента во течната фаза,  $x'_D$  (може да се користи и ознака  $x'_0$ , бидејќи е нултата точка од која започнуваат пресметките и конструкцијата на дијаграмот), од каде се пресметува  $y'_0$  во согласност со равенката (4.8):

$$y'_0 = m \cdot x'_D, \quad (4.15)$$

со што се дефинираат координатите на почетната точка на работната линија ( $x'_D, y'_0$ ), а следната координата на дијаграмот се добива со хоризонтална проекција до рамнотежната линија, дефинирана со  $x'$  од равенката (4.14) и последователно  $y'$  од равенката (4.8):

$$x'_1 = \frac{c^2 y'_0}{\alpha - c(\alpha - 1)y'_0} \quad (4.16)$$

$$y'_1 = m \cdot x'_1 \quad (4.17)$$

Следниот под во оваа зона е дефиниран со аналогна хоризонтална и вертикална проекција на координатите од претходниот под,  $x'$  од равенката (4.14) и последователно  $y'$  од равенката (4.8):

$$x'_2 = \frac{c^2 y'_1}{\alpha - c(\alpha - 1)y'_1} = \frac{m c^2 x'_1}{\alpha - m c(\alpha - 1)x'_1} \quad (4.18)$$

Оттука и сите точки на работната линија се со дадените координати:  $(x'_D, y'_0), (x'_1, y'_1), (x'_2, y'_2), \dots, (x'_n, y'_n)$ , а координатите на точките кои лежат на рамнотежната линија се:

$(x'_1, y'_0), (x'_2, y'_1), (x'_3, y'_2), \dots, (x'_n, y'_{n-1})$ . Редоследно, пресметките на координатите се определуваат:

$$x'_D \rightarrow y'_0 \rightarrow x'_1 \rightarrow y'_1 \rightarrow x'_2 \rightarrow y'_2 \rightarrow \dots \rightarrow x'_{n-1} \rightarrow y'_{n-1} \rightarrow x'_n \rightarrow y'_n$$

Воспоставување математичка корелација помеѓу уделите на лесната компонента во течната фаза во различни сегменти (подови) од дестилационата колона може да се демонстрира со елиминација на  $y'_0$  во равенките (4.15) и (4.16):

$$x'_1 = \frac{m c^2 \cdot x'_0}{\alpha - m c(\alpha - 1) \cdot x'_0} \quad (4.19)$$

При замена за  $x'_1$  во равенствата (4.18) и (4.19):

$$x'_2 = \frac{m^2 c^4 \cdot x'_0}{\alpha^2 - m c(\alpha - 1)(\alpha + m c^2) \cdot x'_0} \quad (4.20)$$

Аналогно на дадените пресметки:

$$x'_3 = \frac{m^3 c^6 \cdot x'_0}{\alpha^3 - m c(\alpha - 1)(\alpha^2 + \alpha \cdot m c^2 + m^2 c^4) \cdot x'_0} \quad (4.21)$$

Конечно, може да го дефинираме воопштениот облик за пресметка на уделот на лесната компонента во  $n$  – тиот под:

$$x'_n = \frac{m^n c^{2n} \cdot x'_0}{\alpha^n - m c(\alpha - 1) \cdot \left( \frac{\alpha^n - m^n c^{2n}}{\alpha - m c^2} \right) \cdot x'_0} \quad (4.22)$$

Решавањето на равенката (4.22) за  $n$ , дава:

$$n = \frac{\log \left( \frac{x'_0 \left[ 1 - \frac{mC(\alpha-1)}{(\alpha-mC^2)} x'_n \right]}{x'_n \left[ 1 - \frac{mC(\alpha-1)}{(\alpha-mC^2)} x'_0 \right]} \right)}{\log \left( \frac{\alpha}{mC^2} \right)} \quad (4.23)$$

Изразот (4.23) е прецизен аналитички израз за определување на бројот на теоретски подови со цел постигнување ефективна сепарација, даден преку уделите  $x'_0$  и  $x'_n$ , оперативната (работна) линија  $y' = mx'$  и парно-течната рамнотежа, опишана со Раоултовиот закон и карактеризирана со  $\alpha$ , под претпоставка дека испарливоста е константна. При анализата на зоната на збогатување,  $x'_0 \rightarrow x_D$  и  $x'_n \rightarrow x_F$ .

Елаборираниот метод за пресметка на теоретскиот број на подови се однесува на зоната на збогатување, но истиот биланс аналогно се поставува и во стрипинг зоната (зона на осиромашување), каде пресметките ги дефинираат координатите на точките кои лежат на работната линија на зоната на осиромашување и рамнотежната линија. Вака добиените аналитички изрази се подготвени за адекватна примена во софтверски пакети специјализирани за дизајн и оптимизација на технолошки процеси и процесна опрема. Притоа, реалниот број на подови е во директна корелација со теоретскиот број на подови, коригиран за ефикасноста на инсталираните подови.

$$\text{реален број на подови} = \frac{\text{теоретски број на подови}}{\text{ефикасност на под}}$$

#### **4.2.12 Избор на тип на колона според основни технички карактеристики**

Изборот на соодветен тип на дестилациона колона се базира на перформансите и пресметаниот трошок за инсталација на дадената колона, а најзастапени решенија се:

- 1) Колона со подови (сито, своно, ...);
- 2) Слободно пакување – Рашигови прстени, седла (метални или керамички);
- 3) Структурно пакување.



Колоните со подови се применливи кај сепарациски системи кои работат при повисоки вредности на притисокот ( $P$ ) и проток, како и голем дијаметар на колона (поголем капацитет). Вообичаено ефикасноста на сепарација е 60 – 80 %.

Колоните со слободно пакување се прифатливи решенија за колони со мал дијаметар, каде постои опасност од корозивни процеси или појава на пенливост, како и при шаржни услови на работа. Слободните пакувања се карактеризираат со порозност (удел на празнините во работниот материјал), специфична површина и НЕТР (*Height Equivalent to Theoretical Plate*), еквивалентна висина на под.

Колони со структурно пакување се користат при ниски  $P$  (и вакуум услови), како и за сепарации каде релативната испарливост на клучните компоненти е блиску до 1. Кај овие колони има мал пад на притисокот низ колоната и мало време на задржување ( $\tau_{zad}$ ). Структурните пакувања обезбедуваат подобар пренос на маса, односно поголема ефикасност и капацитет отколку колоните со подови. Затоа, димензиите на колона од овој тип, за сепарација на идентичен напој, се со значително помали димензии од колона со подови.

Постојат серија на ограничувања и во однос на материјалот за пакување, како, на пример:

- Камените материјали се осетливи на алкални средини и HF;
- Металите се осетливи на корозија;
- Пластичните маси се неприменливи при високи работни температури.

Генерално, применливи се следните начела за избор на адекватен тип на дестилациона колона (со подови или пакување):

1) Единечната ефикасност на колоната со пакување многу зависи од типот и димензиите на пакувањето, работните протоци, својствата на флуидите во системот,  $d_{\text{колона}}$  и работниот  $P$ .

2) Ако соодносот на масените протоци  $L/G$  е мал, колоните со подови имаат подобри перформанси поради подобрата дисперзија на течната фаза.

3) Колоните со подови може да се дизајнираат да работат при голем опсег на протоци, без опасност од поплавување на системот, а можно е извлекување и на странични струи, што не е возможно кај колоните со пакување.

4) Ако течноста содржи диспергирани цврсти честички, колоните со подови се подобро решение поради поедноставното чистење и одржување.

5) Колоните со подови се пожелни каде што има потреба од меѓу-етапно ладење, за евентуално одведување топлина од реакција или растворување, поради едноставноста на инсталацијата на ладилни навои на работните подови.

6) Кај големи разлики во точките на вриење подобри резултати покажуваат колоните со подови поради евентуална термичка експанзија, која може да го оштети пакувањето.

7) Димензиите на колони со слободно пакување не надминуваат  $d = 1,5 \text{ m}$ , додека оние со подови  $d \geq 0,67 \text{ m}$ .

#### **4.2.13 Определување висина и дијаметар на колона со сито подови (Sieve-Tray Column)**

Димензионирањето на колона со сито подови е насочено кон определување на дијаметарот и висината на предложената сепарациска единица.

##### Дефинирање дијаметар на колоната

Прв чекор кон пресметувањето на дијаметарот на колоната е определувањето на нето брзината на пареи ( $V_{nf}$ ) при услови на поплавување (flooding):

$$V_{nf} = C_{SB} \left( \frac{\sigma}{20} \right)^{0,2} \left( \frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_V} \right)^{0,5}$$

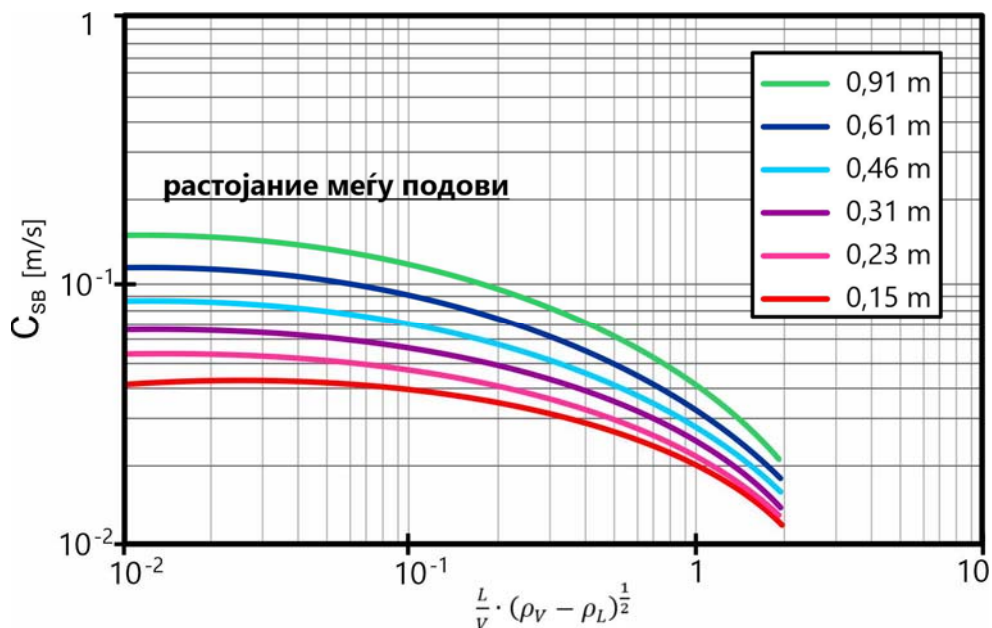
при што:

$C_{SB}$  – Saunders&Brown фактор при *flood* услови [m/s];

$\sigma$  – површински напон [dyn/cm];

$\rho_L, \rho_V$  – густини на течната и парната фаза во колоната;

$C_{SB}$  се определува графички – од дијаграм ( $\log\text{-}\log$ )  $C_{SB} = f\left(\frac{L}{V} \cdot (\rho_L, \rho_V)^{\frac{1}{2}}\right)$ .



**Слика 4.21** Saunders&Brown фактор при "flood" услови  $C_{SB} = f\left(\frac{L}{V} \cdot (\rho_V - \rho_L)^{\frac{1}{2}}\right)$  [m/s]

Вообичаено растојание меѓу подови со голем дијаметар е 0,46 – 0,61 m. Во одредени специфични случаи, растојанието е во опсегот 0,3 – 0,91 m. Локалната брзина на пареи се зема дека е 50 – 90 % од брзината на пареите при *flood* услови, а дијаметарот на колоната се пресметува од нето површината на подот:

$$A_n = \frac{Q_V}{V_n / 0,8}$$

Факторот 0,8 е воведен поради реално намалената достапност на површината на подот за пареи при *flood* услови, а  $Q_V$  [m<sup>3</sup>/s] – волуменски проток на пареи.

$$d_K = \left( \frac{A \cdot A_n}{\pi} \right)^{1/2} m$$

Дефинирање висина на колоната

Преодот од теоретски подови во дефиниран број на реални подови се базира на пресметка на вкупната ефикасност на подот (Марфри (*Murfree*) ефикасност). Но, вообичаено, ефикасноста на подот е различна локална вредност која варира во различни сегменти на подот, но, сепак, соодветно применлив е изразот на Локет (*Lockett*):

$$E_0 = 0,492 \cdot \left[ \mu_L (\alpha_{\text{ЛК/ТК}})_{\text{ав}} \right]^{-0,245}$$

$\mu_L$  – вискозитет на течноста (смесата);

$(\alpha_{\text{ЛК/ТК}})_{\text{ав}}$  – средна релативна испарливост ЛК-ТК.

$$N_{\text{реални}} = \frac{N_{\text{теоретски}}}{E_0}$$

Бидејќи растојанието меѓу подовите ( $H_S$ ) веќе го знаеме, од  $C_{SB}$  дијаграмот, вкупната висина на колоната е:

$$H = (N_{\text{реални}} - 1)H_S$$

Во реални услови, истото растојание (меѓу подовите) треба да се обезбеди и за врвот и дното на секоја колона (за кондензатор и ребојлер), вообичаено околу 15 % од висината на подот на врвот и дното (*margin space*), па затоа конечната висина на колоната може да се пресмета како:

$$H = (N_{\text{реални}} - 1)H_S + \Delta H$$

$$\Delta H = 0,3H_S$$

$$H = \frac{(N_{\text{реални}} - 1)H_S}{0,7}$$

## 4.3 Задачи

## Задача 4.1

Дизајн на систем за отстранување на  $SO_2$  од гасен испуст (смеса од воздух и  $SO_2$ ) предвидува инсталација на апсорпциона колона со пакување, при што уделот на  $SO_2$  на влез во колоната е 10 % (mol), а степенот на отстранување на  $SO_2$  е 99 %. Влезниот проток на гас со средна молска маса  $29,1 \text{ kg/kmol}$ , изнесува  $33 \text{ m}^3/\text{s}$ . Температурата на гасната струја е  $400 \text{ K}$ , а работниот притисок е  $111 \text{ kPa}$ . Останати податоци:

- Број на единици за пренос е дефиниран со  $N_{TU} = G_S^{0,5}$ , каде  $G_S$  – површинска брзина на гасот низ напречен пресек на празна колона [ $\text{kg}/\text{m}^2\text{s}$ ];
- Висина на преносна единица  $H_{TU} = 4,5 \text{ m}$ ;
- Капиталните трошоци (Installed Cost - IC) на колоната се функција од волуменот ( $60 \text{ €/m}^3$ );
- Годишните фиксни трошоци (со амортизација) се 20 % од капиталните трошоци;
- Оперативните трошоци на колоната се функција од површинската брзина:  $0,001G_S^2 + \frac{0,1}{G_S}$ ;
- Годишни работни часови на постројката:  $8000 \text{ h}$ .

При минимална вредност на вкупни ануализирани трошоци TAC, да се одреди:

- 1) Оптималниот дијаметар на колоната  $D_{opt} [\text{m}]$
- 2) Оптимална висина на колоната  $H_{opt} [\text{m}]$
- 3) Оптимална површинска брзина на гасот,  $G_{S,opt} [\text{kg}/\text{m}^2\text{s}]$
- 4) Вкупни ануализирани трошоци TAC [€/y]
- 5) Вкупни оперативни трошоци TOC [€/y]

### Решение:

• Појдовна точка во димензионирањето на колоната е определување на вредноста на месениот проток на гасна смеса на влез во колоната, при што се земаат предвид влијанијата на работните параметри:

$$Q_m = Q_v \frac{M_m}{22,4} \frac{P}{P_0} \frac{T_0}{T} = 33 \text{ m}^3/\text{s} \cdot \frac{29,1 \text{ kg/kmol}}{22,4 \text{ m}^3/\text{kmol}} \cdot \frac{111 \text{ kPa}}{101,3 \text{ kPa}} \cdot \frac{273 \text{ K}}{400 \text{ K}}$$

$$Q_m = 32,06 \text{ kg/s}$$

Површинската брзина на гасот низ напречен пресек на празна колона (A) е функционално зависна од дијаметарот на колоната:

$$A = \frac{\pi}{4} D^2$$

$$G_S = \frac{Q_m}{A} = \frac{40,744}{D^2} \text{ kg/m}^2\text{s}$$

Висината на колоната може да се изрази како  $H = H_{TU} \cdot N_{TU} = 4,5 \cdot G_S^{0,5} = 4,5 \cdot \left(\frac{40,744}{D^2}\right)^{0,5}$ :

$$H = \frac{28,75}{D} \text{ m}$$

Волуменот на колоната, исто така, може да се претстави преку дијаметарот:

$$V = H \cdot A = \frac{28,75}{D} \cdot \frac{\pi}{4} D^2$$

$$V = 22,58 \cdot D \text{ m}^3$$

Земајќи го предвид условот на задачата, каде капиталните трошоци (IC) се дефинирани како функционално зависна големина од волуменот на колоната:

$$IC = V \cdot 60 \text{ €/m}^3$$

$$IC = 22,58 \cdot D \cdot 60 = 1354,8 \cdot D \text{ €/m}^3$$

#### 4. Дизајн на сепарациски системи

Во однос на дефинирање на економските параметри, а во насока на економска оптимизација на студираниот процес преку минимизација на  $TAC$ , што како резултат ќе го продуцира оптималниот дијаметар на колоната и сходно на тоа, конечното димензионирање на колоната, се дефинираат:

$$TAC = ACC + AFC + AOC$$

$$ACC = CRF \cdot IC$$

$$AFC = 0,2 \cdot IC$$

$$AOC = 0,001G_S^2 + \frac{0,1}{G_S}$$

Каде,  $ACC$  – ануализирани капитални трошоци,  $AFC$  – ануализирани фиксни трошоци,  $AOC$  – ануализирани оперативни трошоци,  $CRF$  – т.н. *Capital Recovery Factor* (фактор за ануализација на капиталните трошоци).

$$ACC = \frac{1}{3} 1354,8 \cdot D = 451,6 \cdot D$$

$$AFC = 0,2 \cdot IC = 0,2 \cdot 1354,8 \cdot D = 270,96 \cdot D$$

$$AOC = \left( 0,001 \cdot \frac{40,744^2}{D^4} + \frac{0,1 \cdot D^2}{40,744} \right) \cdot \frac{8000 \text{ h}}{\text{y}} \cdot \frac{3600 \text{ s}}{\text{h}} \cdot \frac{0,012 \text{ den}}{\text{€}}$$

$$TAC = 451,6 \cdot D + 270,96 \cdot D + \frac{573721,4}{D^4} + 848,22 \cdot D^2 \text{ [€/y]}$$

$$TAC = 722,56 \cdot D + \frac{573721,4}{D^4} + 848,22 \cdot D^2 \text{ [€/y]}$$

Минимизацијата на вкупните ануализирани трошоци може да се дефинира како  $\frac{\partial TAC}{\partial D} = 0$

$$\frac{\partial TAC}{\partial D} = 722,56 + \frac{4}{D^5} 573721,4 + 2 \cdot 848,22 \cdot D = 0$$

За средување на изразот, следува:

$$1696,45 \cdot D^6 + 722,56 \cdot D^5 + 2294886 = 0$$

За решавање на овој полином, применет е нумеричкиот метод на Њутн-Равсон (*Newton-Raphson*):

$$D_{opt} = 3,2582 \text{ m}$$

По дефинирањето на оптималниот дијаметар на колоната, може да се дефинираат и останатите параметри:

$$G_{s,opt} = 3,838 \text{ kg/m}^2\text{s}; H_{opt} = 8,824 \text{ m};$$

$$TAC = 16450 \text{ €/y}; TOC = 13650 \text{ €/y}.$$

### Задача 4.2

Сепарацијата на бинарна смеса од компоненти А и В, каде А е лесно испарливата компонента, се одвива во дестилациона колона, при следните работни услови:

- Напојна струја,  $F = 150 \text{ mol/h}$ , во која уделот на А е  $x_{F,A} = 0,6$ ;
- Уделот на компонентата А во дестилатот е 99,5 %
- Релативната испарливост е 1,5
- Рефлуксниот однос е  $R = 1,2 \cdot R_{min}$ , а  $R_{min}$  да се определи според равенката на Андервуд
- Да се пресмета бројот на подови во двете работни зони со примена на целосната форма на равенката на Смокер (*Smoker*).

### Решение:

Почетни услови:

$$F = 150 \text{ mol/h}; x_F = 0,6; x_D = 0,995; \alpha = 1,5$$

Во зоната на збогатување:

$$A: F_{A,D} = (F \cdot x_F) \cdot 0,995 = 89,55 \text{ mol/h}$$

$$B: F_{B,D} = 89,55 \cdot \frac{0,005}{0,995} = 0,45 \text{ mol/h}$$



Во зоната на осиромашување:

$$A: F_{A,W} = (F \cdot x_F) - 89,55 = 0,45 \text{ mol/h}$$

$$B: F_{B,W} = (F \cdot (1 - x_F)) - 0,45 = 59,55 \text{ mol/h}$$

Уделот на лесно испарливата компонента А на дното на колоната е:

$$x_W = \frac{0,45}{59,55 + 0,45} = 0,0075$$

Вредноста на  $R_{min}$  според равенката на Андервуд е:

$$R_{min} = \frac{1}{\alpha - 1} \left[ \frac{x_D}{x_F} - \frac{\alpha(1 - x_D)}{(1 - x_F)} \right]$$

$$R_{min} = \frac{1}{1,5 - 1} \left[ \frac{0,995}{0,6} - \frac{1,5(1 - 0,995)}{(1 - 0,6)} \right]$$

$$R_{min} = 3,28$$

$R = 1,2 \cdot R_{min}$ , па оттука рефлуксниот однос е  $R = 3,935$ .

- Зона на збогатување

$$m(\alpha - 1)k^2 + [m + b(\alpha - 1) - \alpha]k + b = 0$$

$$m = \frac{R}{R+1} = 0,797 ; b = \frac{x_D}{R+1} = 0,202 ; \alpha = 1,5$$

$$0,4k^2 - 0,6k + 0,202 = 0$$

$$k_1 = 0,5102$$

$$k_2 = 0,9898$$

Вредноста на  $k_1$  претставува реална вредност за  $k$ , па во понатамошните пресметки ја земаме оваа вредност ( $k = 0,5102$ ).

Ја применуваме равенката на Смокер за определување на бројот на подови во зоната на збогатување:

$$n = \frac{\log \left\{ \frac{x'_0}{x'_n} \cdot \left[ \frac{1 - \frac{x'_n \cdot mC(\alpha-1)}{(\alpha-mC^2)}}{1 - \frac{x'_0 \cdot mC(\alpha-1)}{(\alpha-mC^2)}} \right] \right\}}{\log \left( \frac{\alpha}{mC^2} \right)}$$

$$x'_0 = x'_D = x_D - k = 0,995 - 0,502 = 0,493$$

$$x'_n = x'_F = x_F - k = 0,6 - 0,502 = 0,098$$

$$C = 1 + (\alpha - 1)k = 1,251$$

$$n = \frac{\log \left\{ \frac{0,493}{0,098} \cdot \left[ \frac{1 - \frac{0,098 \cdot 0,797 \cdot 1,251(1,5-1)}{(1,5-0,797 \cdot 1,251^2)}}{1 - \frac{0,493 \cdot 0,797 \cdot 1,251(1,5-1)}{(1,5-0,797 \cdot 1,251^2)}} \right] \right\}}{\log \left( \frac{1,5}{0,797 \cdot 1,251^2} \right)}$$

$$n = 27,094$$

Во согласност со добиената вредност, бројот на подови во зоната на збогатување е првиот цел број кој го содржи решението на проблемот,  $n = 28$ .

- Во зоната на осиромашување

$$m = \frac{R \cdot x_F + x_D - (R + 1)x_W}{(R + 1)(x_F - x_W)} = \frac{3,935 \cdot 0,6 + 0,995 - 4,935 \cdot 7,5 \cdot 10^{-3}}{4,935 \cdot (0,6 - 7,5 \cdot 10^{-3})}$$

$$m = 1,1365$$

$$b = \frac{(x_F - x_D)x_W}{(R + 1)(x_F - x_W)} = \frac{(0,6 - 0,995) \cdot 7,5 \cdot 10^{-3}}{4,935 \cdot (0,6 - 7,5 \cdot 10^{-3})}$$

$$b = -1,013 \cdot 10^{-3}$$

Пресметката на вредноста на  $k$  во зоната на осиромашување се базира на истото равенство како кај зоната на збогатување, со различни вредности за константите, кои во вториот случај се  $m$  и  $b$ .

$$m(\alpha - 1)k^2 + [m + b(\alpha - 1) - \alpha]k + b = 0$$

$$1,1365(1,5 - 1)k^2 + [1,1365 - 1,013 \cdot 10^{-3}(1,5 - 1) - 1,5]k - 1,013 \cdot 10^{-3} = 0$$

$$0,568k^2 - 0,364k - 1,013 \cdot 10^{-3} = 0$$

Овој израз има само едно позитивно решение, па тоа решение е конечната вредност за  $k$ .

$$k = 0,644$$

Сега, познати се сите неопходни параметри за дефинирање на бројот на подови во зоната на осиромашување:

$$n = \frac{\log \left\{ \frac{x'_o}{x'_n} \cdot \frac{\left[ 1 - \frac{x'_n \cdot mC(\alpha-1)}{(\alpha-mC^2)} \right]}{\left[ 1 - \frac{x'_o \cdot mC(\alpha-1)}{(\alpha-mC^2)} \right]} \right\}}{\log \left( \frac{\alpha}{mC^2} \right)}$$

$$x'_o = x'_F = x_F - k = 0,6 - 0,644 = -0,044$$

$$x'_n = x'_W = x_W - k = 0,0075 - 0,644 = -0,6365$$

$$C = 1 + (\alpha - 1)k = 1,322$$

$$n = \frac{\log \left\{ \frac{(-0,044)}{(-0,6365)} \cdot \frac{\left[ 1 - \frac{(-0,6365) \cdot 1,1365 \cdot 1,322 \cdot (1,5-1)}{(1,5-1,1365 \cdot 1,322^2)} \right]}{\left[ 1 - \frac{(-0,044) \cdot 1,1365 \cdot 1,322 \cdot (1,5-1)}{(1,5-1,1365 \cdot 1,322^2)} \right]} \right\}}{\log \left( \frac{1,5}{1,1365 \cdot 1,322^2} \right)} = 23,78$$

Во согласност на добиената вредност, бројот на подови во зоната на осиромашување е  $n = 24$ .

Конечната пресметка на бројот на подови во дефинираната дестилациона колона:

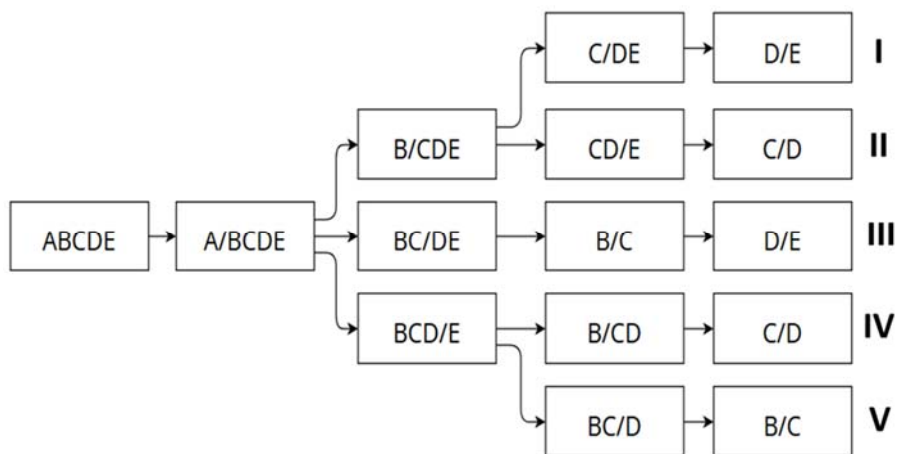
- Број на подови во зоната на збогатување,  $n = 28$
- Број на подови во зоната на осиромашување,  $n = 24$ .

### Задача 4.3

Сепарацијата на 5-компонентна смеса треба да се изведе низ соодветно димензионирана секвенција на дестилациони колони. Основните податоци за смесата се дадени табеларно:

Компонента	Проток [kmol/h]	Релативна испарливост ( $\alpha$ )	
A	269	6,24	$\alpha_{AE}$
B	282	3,28	$\alpha_{BE}$
C	57	1,86	$\alpha_{CE}$
D	215	1,76	$\alpha_{DE}$
E	42	1,00	$\alpha_{EE}$

Компонентата E се зема за база за изразување на релативната испарливост. Напојот во системот за сепарација е заситена течност, а во секоја од дестилационите колони  $R = 1,2R_{min}$ , каде  $R_{min}$  е дефиниран во согласност со зависноста на Андервуд. Предложени за разгледување се 5 алтернативи на дестилациски секвенции:



За секоја од предложените секвенции е потребно да се пресмета вкупниот проток на пара според методата на Портер и Момо (Porter&Momo), па во согласност на тоа да се одреди оптималната секвенција на дестилациони колони.

**Решение:**

Изразот на Портер и Момо гласи:

$$V = (F_A + F_B + \dots + F_{LC}) + \frac{R_F}{\alpha - 1} (F_A + F_B + \dots + F_{LC} + F_{HC} + \dots + F_N)$$

каде:  $R_F = \frac{R}{R_{min}} = 1,2$ ;  $F_{LC}$  – проток на лесната компонента [kmol/h];  $F_{HC}$  – проток на тешката компонента [kmol/h].

Останатите неопходни вредности за релативната испарливост се пресметуваат:

$$\alpha_{AB} = \frac{\alpha_{AE}}{\alpha_{BE}} = \frac{6,24}{3,28} = 1,9$$

$$\alpha_{BC} = \frac{\alpha_{BE}}{\alpha_{CE}} = \frac{3,28}{1,86} = 1,76$$

$$\alpha_{CD} = \frac{\alpha_{CE}}{\alpha_{DE}} = \frac{1,86}{1,76} = 1,06$$

$$\alpha_{DE} = \frac{\alpha_{DE}}{\alpha_{EE}} = \frac{1,76}{1} = 1,76$$

1) Секвенција I:



$$V_1 = \left[ F_A + \frac{1,2}{\alpha_{AB} - 1} (F_A + F_B + F_C + F_D + F_E) \right] + \left[ F_B + \frac{1,2}{\alpha_{BC} - 1} (F_B + F_C + F_D + F_E) \right] + \left[ F_C + \frac{1,2}{\alpha_{CD} - 1} (F_C + F_D + F_E) \right] + \left[ F_D + \frac{1,2}{\alpha_{DE} - 1} (F_D + F_E) \right]$$

Како што е евидентно од графичкиот приказ, но и од математичкиот израз за вкупниот проток на пари, во овој систем, како и во останатите дестилациони секвенции, има 4 дестилациони колони. Со замена на бараните вредности на параметрите од равенството се одредува бараниот проток:

$$V_1 = \left[ 269 + \frac{1,2}{1,9 - 1} (269 + 282 + 57 + 215 + 42) \right] \\ + \left[ 282 + \frac{1,2}{1,76 - 1} (282 + 57 + 215 + 42) \right] \\ + \left[ 57 + \frac{1,2}{1,06 - 1} (57 + 215 + 42) \right] \\ + \left[ 215 + \frac{1,2}{1,76 - 1} (215 + 42) \right]$$

$$V_1 = 9603 \text{ kmol/h}$$

2) Секвенција II:



$$V_2 = \left[ F_A + \frac{1,2}{\alpha_{AB} - 1} (F_A + F_B + F_C + F_D + F_E) \right] \\ + \left[ F_B + \frac{1,2}{\alpha_{BC} - 1} (F_B + F_C + F_D + F_E) \right] \\ + \left[ (F_C + F_D) + \frac{1,2}{\alpha_{DE} - 1} (F_C + F_D + F_E) \right] \\ + \left[ F_C + \frac{1,2}{\alpha_{CD} - 1} (F_C + F_D) \right]$$

$$V_2 = \left[ 269 + \frac{1,2}{1,9 - 1} (269 + 282 + 57 + 215 + 42) \right] \\ + \left[ 282 + \frac{1,2}{1,76 - 1} (282 + 57 + 215 + 42) \right] \\ + \left[ (57 + 215) + \frac{1,2}{1,76 - 1} (57 + 215 + 42) \right] \\ + \left[ 57 + \frac{1,2}{1,06 - 1} (57 + 215) \right]$$

$$V_2 = 8910 \text{ kmol/h}$$

3) Секвенција III:



$$V_3 = \left[ F_A + \frac{1,2}{\alpha_{AB} - 1} (F_A + F_B + F_C + F_D + F_E) \right] \\ + \left[ (F_B + F_C) + \frac{1,2}{\alpha_{CD} - 1} (F_B + F_C + F_D + F_E) \right] \\ + \left[ F_B + \frac{1,2}{\alpha_{BC} - 1} (F_B + F_C) \right] + \left[ F_D + \frac{1,2}{\alpha_{DE} - 1} (F_D + F_E) \right]$$

$$V_3 = \left[ 269 + \frac{1,2}{1,9 - 1} (269 + 282 + 57 + 215 + 42) \right] \\ + \left[ (282 + 57) + \frac{1,2}{1,06 - 1} (282 + 57 + 215 + 42) \right] \\ + \left[ 282 + \frac{1,2}{1,76 - 1} (282 + 57) \right] \\ + \left[ 215 + \frac{1,2}{1,76 - 1} (215 + 42) \right]$$

$$V_3 = 15119 \text{ kmol/h}$$

4) Секвенција IV:



$$V_4 = \left[ F_A + \frac{1,2}{\alpha_{AB} - 1} (F_A + F_B + F_C + F_D + F_E) \right] \\ + \left[ (F_B + F_C + F_D) + \frac{1,2}{\alpha_{DE} - 1} (F_B + F_C + F_D + F_E) \right] \\ + \left[ F_B + \frac{1,2}{\alpha_{BC} - 1} (F_B + F_C + F_D) \right] \\ + \left[ F_C + \frac{1,2}{\alpha_{CD} - 1} (F_C + F_D) \right]$$

$$V_4 = \left[ 269 + \frac{1,2}{1,9 - 1} (269 + 282 + 57 + 215 + 42) \right] \\ + \left[ (282 + 57 + 215) + \frac{1,2}{1,76 - 1} (282 + 57 + 215 + 42) \right] \\ + \left[ 282 + \frac{1,2}{1,76 - 1} (282 + 57 + 215) \right] \\ + \left[ 57 + \frac{1,2}{1,06 - 1} (57 + 215) \right]$$

$$V_4 = 9571 \text{ kmol/h}$$

5) Секвенција V:



$$\begin{aligned}
 V_5 = & \left[ F_A + \frac{1,2}{\alpha_{AB} - 1} (F_A + F_B + F_C + F_D + F_E) \right] \\
 & + \left[ (F_B + F_C + F_D) + \frac{1,2}{\alpha_{DE} - 1} (F_B + F_C + F_D + F_E) \right] \\
 & + \left[ (F_B + F_C) + \frac{1,2}{\alpha_{CD} - 1} (F_B + F_C + F_D) \right] \\
 & + \left[ F_B + \frac{1,2}{\alpha_{BC} - 1} (F_B + F_C) \right] \\
 V_5 = & \left[ 269 + \frac{1,2}{1,9 - 1} (269 + 282 + 57 + 215 + 42) \right] \\
 & + \left[ (282 + 57 + 215) + \frac{1,2}{1,76 - 1} (282 + 57 + 215 + 42) \right] \\
 & + \left[ (282 + 57) + \frac{1,2}{1,06 - 1} (282 + 57 + 215) \right] \\
 & + \left[ 282 + \frac{1,2}{\alpha_{BC} - 1} (282 + 57) \right]
 \end{aligned}$$

$$V_5 = 15153 \text{ kmol/h}$$

Од добиените резултати за сите 5 секвенции од дестилациони колони, 2-та секвенција покажува оптимална (минимална) вредност за протокот на пари во колоната ( $V_2 = 8910 \text{ kmol/h}$ ), што е во директна корелација и со економската оптимизација на студираниот систем.

Секвенција II:



#### Задача 4.4

Да се докажат следните претпоставки за температурната дистрибуција во дестилационата колона:

a. Температурната разлика меѓу кои било две точки се изразува со:

$$\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} = \frac{R}{\Delta H_V} \ln \frac{\sigma_2}{\sigma_1}$$



#### 4. Дизајн на сепарациски системи

каде што:  $\Delta H_V$  – топлина на испарување (латентна);  $\sigma_k = \sum \alpha_i x_{i,k}$  и  $k$  – струјата во дадена точка;  $i$  – компонента;  $\alpha$  – релативна испарливост на компонентата во однос на НС – тешката компонента;  $x$  – молски удел.

б. Со даденото равенство, да се докаже дека падот на температурата низ дестилационата колона (разликата меѓу точката на вриење на дното и точката на кондензација на дестилатот) може да дефинира како:

$$\Delta T = \frac{R \cdot T_F}{\Delta H} \ln \frac{\sigma_D}{\sigma_W'}$$

каде:  $T_F$  – температура на напојна струја;  $D$  – дестилат;  $W$  – остаток.

Да се претпостави дека условите во колоната се такви што важи Клаузиус–Клајпероновата равенка, односно дека се работи за релативно идеална смеса и атмосферска дестилација, т.е. дестилација при атмосферски притисок.

#### Решение:

а. Верификацијата на точноста на предложениот израз започнува со воведување на претпоставката дека кај двете точки е постигната рамнотежа меѓу парната и течната фаза на струјата, па затоа за компонентата  $i$  важи:

$$P_i^0 x_i = P_T y_i$$

каде:  $P_i^0$  – напон на пареи [Pa];  $P_T$  – вкупен притисок [Pa];  $x_i$  – молски удел на компонентата  $i$  во течната фаза;  $y_i$  – молски удел на компонентата  $i$  во парната фаза;

$$y_i = \frac{P_i^0}{P_T} x_i$$

$$y_i = K_i x_i$$

каде  $K_i$  е рамнотежна константа.

За смеса од јаглеводороди, каде може да се занемари постоење на водородни врски, целосно се поткрепени изразите  $\sum y_i = \sum K_i x_i$  и  $\sum y_i = 1$ . Оттука, се модифицира горниот израз:

$$y_i = \frac{K_i x_i}{\sum K_i x_i}$$

Притоа,

$$\alpha_i = \frac{K_i}{K_{НС}}$$

Со делење на изразот за молски удел на компонентата  $i$  со  $K_{НС}$  и во броителот и именителот:

$$y_i = \frac{\frac{K_i}{K_{НС}} x_i}{\sum \frac{K_i}{K_{НС}} x_i} = \frac{\alpha_i x_i}{\sum \alpha_i x_i}$$

$$\frac{y_i}{x_i} = \frac{\alpha_i}{\sum \alpha_i x_i} = K_i$$

За зоната  $K$  во дестилационата колона, за компонентата  $j$  важи:

$$\frac{p_{j,K}^0}{P_T} = \frac{y_{i,K}}{x_{i,K}} = K_j = \frac{\alpha_i}{\sum \alpha_j x_{j,K}} = \frac{\alpha_i}{\sigma_k}$$

За две локации во колоната може да се дефинираат зависностите:

$$K_{j,1} = \frac{p_{j,1}^0}{P_T} = \frac{\alpha_j}{\sigma_1}$$

$$K_{j,2} = \frac{p_{j,2}^0}{P_T} = \frac{\alpha_j}{\sigma_2}$$

Со меѓусебно делење на равенките се добива:

$$\frac{p_{j,1}^0}{p_{j,2}^0} = \frac{\sigma_2}{\sigma_1}$$

А доколку се воведе и зависноста на напонот на пареи од температурата, во согласност со Вант Хофовиот (*Van't Hoff*) израз:

$$\frac{p_{j,1}^0}{p_{j,2}^0} = \exp \left[ -\frac{\Delta H}{R} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \right] = \frac{\sigma_2}{\sigma_1}$$

Со средување се добива изразот:

$$\ln \frac{\sigma_2}{\sigma_1} = \frac{\Delta H}{R} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

Со тоа се докажува бараната зависност. Ваквиот резултат, сепак, има ограничувања на важност во зони на ниски и средни притисоци, што се должи на претходно воведената претпоставка за постоење на рамнотежа меѓу парната и течната фаза, како и ограничувањата на Вант Хофовиот израз.

б. Количеството топлина кое се предава во ребојлерот и е потребно за испарување на течната струја се акумулира парцијално во секој од подовите и конечно, преостанатото количество топлина – во кондензаторот на врвот на колоната. Овие промени се физички (испарување – кондензација) и се резултат на акумулација/ослободување на количество топлина, еквивалентно на латентната топлина на испарување/кондензација на струјата во колоната, при што целото количество топлина се троши на фазната промена.

Претходно дефинираниот израз го применуваме на три локации во колоната – напој, кондензатор и ребојлер ( $T_F$ ,  $T_D$  и  $T_W$ ). Прво, поставуваме биланс за делот напој – дестилат:

$$\left( \frac{1}{T_F} - \frac{1}{T_D} \right) = \frac{R}{\Delta H} \cdot \ln \frac{\sigma_F}{\sigma_D}$$

$$T_D = \left( \frac{-R}{\Delta H} \ln \frac{\sigma_F}{\sigma_D} + \frac{1}{T_F} \right)^{-1}$$

Потоа, биланс за делот ребојлер – напој:

$$\left( \frac{1}{T_W} - \frac{1}{T_F} \right) = \frac{R}{\Delta H} \cdot \ln \frac{\sigma_W}{\sigma_F}$$

$$T_W = \left( \frac{R}{\Delta H} \ln \frac{\sigma_W}{\sigma_F} + \frac{1}{T_F} \right)^{-1}$$

Вкупниот пад на температурата во колоната  $T_W - T_D$  може да се изрази како:

$$T_W - T_D = \frac{1}{\frac{1}{T_F} + \frac{R}{\Delta H} \ln \frac{\sigma_W}{\sigma_F}} - \frac{1}{\frac{1}{T_F} - \frac{R}{\Delta H} \ln \frac{\sigma_F}{\sigma_D}}$$

$$T_W - T_D = \frac{-\frac{R}{\Delta H} \left( \ln \frac{\sigma_W}{\sigma_F} + \ln \frac{\sigma_F}{\sigma_D} \right)}{\frac{1}{T_F^2} - \left( \frac{R}{\Delta H} \right)^2 \ln \frac{\sigma_W}{\sigma_F} \cdot \ln \frac{\sigma_F}{\sigma_D}}$$

Во именителот, делот на изразот  $\left( \frac{R}{\Delta H} \right)^2 \ln \frac{\sigma_W}{\sigma_F} \cdot \ln \frac{\sigma_F}{\sigma_D}$  може да се занемари во услови кога  $\Delta H \gg T_F$ :

$$\Delta T = T_W - T_D = -\frac{R \cdot T_F^2}{\Delta H} \left( \ln \frac{\sigma_W}{\sigma_F} + \ln \frac{\sigma_F}{\sigma_D} \right) = -\frac{R \cdot T_F^2}{\Delta H} \left( \ln \frac{\sigma_W}{\sigma_D} \right)$$

$$\Delta T = \frac{R \cdot T_F^2}{\Delta H} \left( \ln \frac{\sigma_D}{\sigma_W} \right)$$

Конечниот израз ја потврдува точноста на поставената хипотеза.

#### Задача 4.5

Да се дефинира условот при кој промената на релативната испарливост нема влијание врз бројот на подови во колоната ( $< 10\%$ ).

#### Решение:

Како појдовна точка во решавањето на овој проблем се дефинира релацијата на Гилиленд (*Gilliland*) за реален број на подови за одредена сепарација ( $N$ ):

$$N = 2 \cdot N_{MIN} = 2 \cdot [\text{број на подови при } R_{min}]$$

$$N = 2 \cdot \frac{\ln \left( \frac{x_D}{1-x_D} \cdot \frac{1-x_W}{x_W} \right)}{\ln \alpha} = 2 \frac{\ln SF}{\ln \alpha} ,$$

каде  $SF$  – сепарациски фактор.

Промената на  $\alpha$  со  $T$  е дефинирана со  $\alpha = \alpha_{AV}(1 + \Phi)$ :

$$\alpha_{AV} = \frac{\alpha_T + \alpha_B}{2}$$

#### 4. Дизајн на сепарациски системи

Каде:  $\alpha_T$  – релативна испарливост на врвот на колоната,  $\alpha_B$  – релативна испарливост на дното.

$$N = 2 \frac{\ln SF}{\ln \alpha} = 2 \frac{\ln SF}{\ln \alpha_{AV}(1 + \Phi)} = \frac{2 \ln SF}{\ln \alpha_{AV} + \ln(1 + \Phi)}$$

Добиеното равенство го делиме со  $\ln \alpha_{AV}$  и во броителот и во именителот:

$$N = \frac{2 \ln \frac{SF}{\alpha_{AV}}}{1 + \frac{\ln(1+\Phi)}{\ln \alpha_{AV}}} = \frac{2 \cdot N_{MIN}}{1 + \frac{\ln(1+\Phi)}{\ln \alpha_{AV}}}$$

Со оглед на фактот што промените во вредноста на  $\alpha$  се мали до средни, па може да се претпостави следното:

$$\ln(1 + \Phi) = \Phi$$
$$\frac{1}{1 + \frac{\Phi}{\ln \alpha_{AV}}} = 1 - \frac{\Phi}{\ln \alpha_{AV}}$$

Оттука, изразот ја добива својата редуцирана форма:

$$N = 2 \cdot N_{MIN} \left( 1 - \frac{\Phi}{\ln \alpha_{AV}} \right)$$

Ако промената за  $\alpha_{AV}$  е помала од 10 %, тогаш:

$$1 - \frac{\Phi}{\ln \alpha_{AV}} \ll 0,1$$

Така што  $N = 2 \cdot N_{MIN}$ . Во таков случај, констатираме дека предвидената промена на релативната испарливост нема влијание врз реалниот број на подови во колоната.

# 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

---

## Содржина:

- 5.1 Енергетска/топлинска интеграција
- 5.2 Специјални проблеми
- 5.3 Табличен алгоритам за идентификација на енергетските таргети
- 5.4 Идентификација на површина и цена на топлински изменувачи
- 5.5 PINCH технологија за дизајн на HEN
- 5.6 Задачи

## 5.1 Енергетска/топлинска интеграција

Досега разгледуваните аспекти на процесниот дизајн ги сублимираа одлуките кои се однесуваат на дефинирање на конкретните сегменти од синтезата на процеси, односно донесување одлуки за шаржно или континуирано водење на процесот, утврдување на влезно-излезната и рециркулирачката структура на процесот, дизајн на реакторски систем и дизајн на сепарациски систем. Последната фаза на процесниот дизајн е топлинската интеграција на процесот, со која се димензионира мрежа на топлински изменувачи (*HEN – Heat Exchanger Network*) за ефикасно искористување на топлинските извори во процесот и се определуваат енергетските потреби (загревање и ладење) на сите струи во процесот.

Конечната цел на топлинската интеграција е минимизација на потребите од загревање и ладење на процесните струи, што се постигнува со искористување на вишокот топлина во еден дел од процесот за задоволување на потребите од топлина во друг дел на процесот. Појдовна точка при суштинското конципирање на топлинската интеграција е идентификација на топлинските „таргети“, па следствено – димензионирање на термодинамички издржана HEN. Енергетските „таргети“ се дефинирани со минималната потреба на топли сервисни медиуми (*Minimum hot*

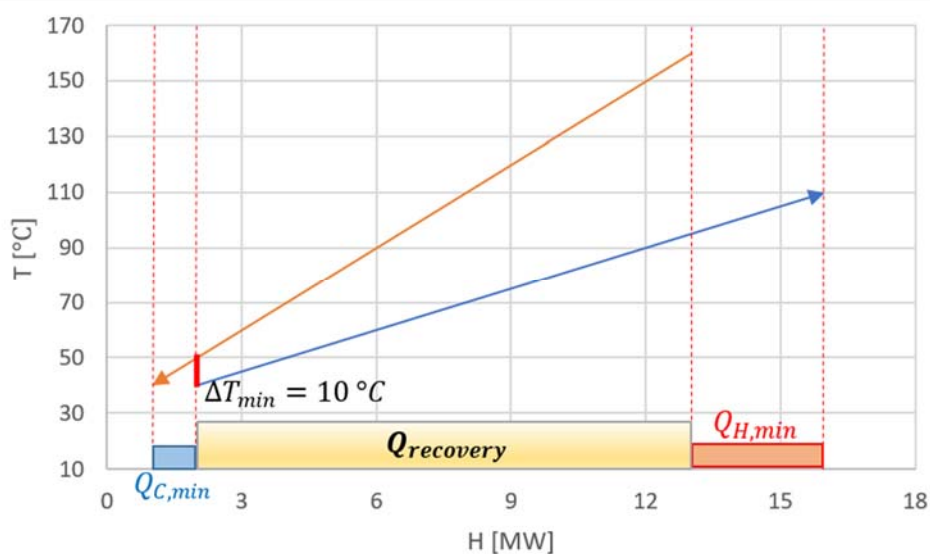
## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

*utility requirement*) и минималната потреба на ладни сервисни медиуми (*Minimum cold utility requirement*). Идентификацијата на топлинските извори (топлите процесните струи – вишок на топлина) и топлинските потрошувачи (ладните процесни струи – недостиг на топлина) предвидува поставување материјален и енергетски биланс на процесот и конструкција на композитните криви – топла и ладна композитна крива.

Со цел демонстрирање на принципот на идентификација на енергетските потреби во процесот, разгледуваме пример со 1 топла и 1 ладна струја и следните карактеристики:

**Табела 5.1** Карактеристики на разгледуваните процесни струи

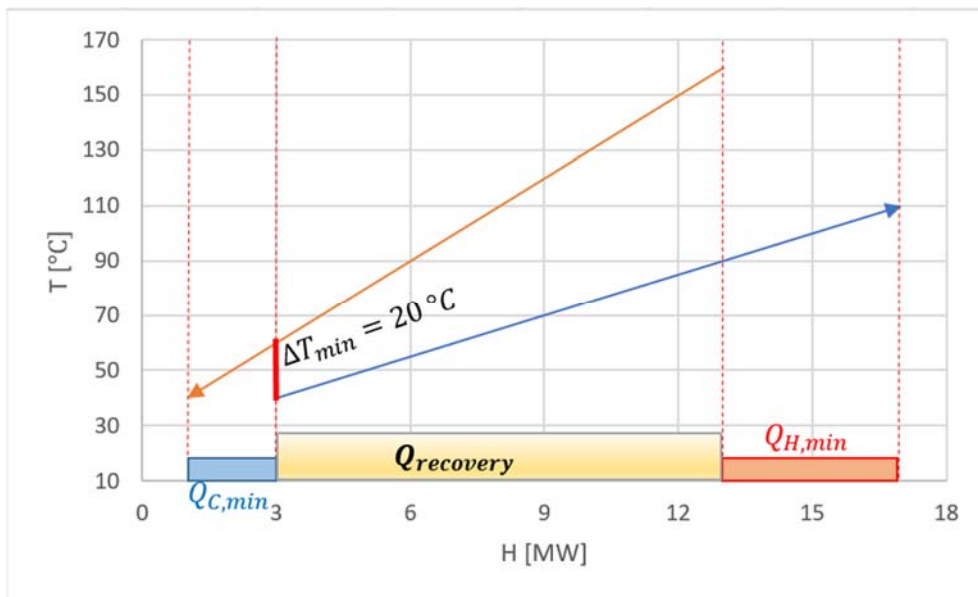
Струја	Тип	$T_{in}$ [°C]	$T_{out}$ [°C]	$\Delta H$ [MW]
1	Л	40	110	14
2	Т	160	40	-12



**Слика 5.1**  $T = f(\Delta H)$  дијаграм за  $\Delta T_{min} = 10\text{ }^{\circ}\text{C}$

Дијаграмот  $T = f(\Delta H)$  за наведениот пример, при вредност на  $\Delta T_{min} = 10\text{ }^{\circ}\text{C}$  е даден на слика 5.1. Оваа вредност е вообичаено појдовна точка во пресметките на системот за топлинска интеграција, додека намалувањето или зголемувањето на  $\Delta T_{min} = 10\text{ }^{\circ}\text{C}$  мора да биде проследено со

соодветно инженерско образложение. Влијанието на вредноста на најголемото температурно приближување на ладна и топла струја (или во понатамошниот дел – ладната и топлата КК) графички се манифестира со поместување на ладната струја хоризонтално на дијаграмот  $T = f(\Delta H)$ . Пример за зголемена вредност од  $\Delta T_{min} = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$  е графички претставен на слика 5.2. Овие два графика јасно ја отсликуваат можната рекуперација на топлина ( $Q_{recovery}$ ) и енергетските таргети ( $Q_{C,min}$  и  $Q_{H,min}$ ). Топлинска интеграција во облик на пренос на топлина од топла кон ладна струја (или КК) е возможна исклучиво во регионот на дијаграмот  $T = f(\Delta H)$ , каде топлата струја ја „препокрива“ ладната струја (топлата е над ладната). Зоната „лево“ од делот на препокривање ја претпоставува минималната потреба од ладење ( $Q_{C,min}$ ), додека зоната десно од делот на препокривање ја дава минималната потреба од загревање ( $Q_{H,min}$ ), со што се дефинираат и потребите од ладен сервисен медиум за ладење и топол сервисен медиум за загревање (ЛСМ и ТСМ). Во конкретниот пример, ЛСМ е вода за ладење на  $20\text{ }^{\circ}\text{C}$  и ТСМ е пара на  $180\text{ }^{\circ}\text{C}$ .



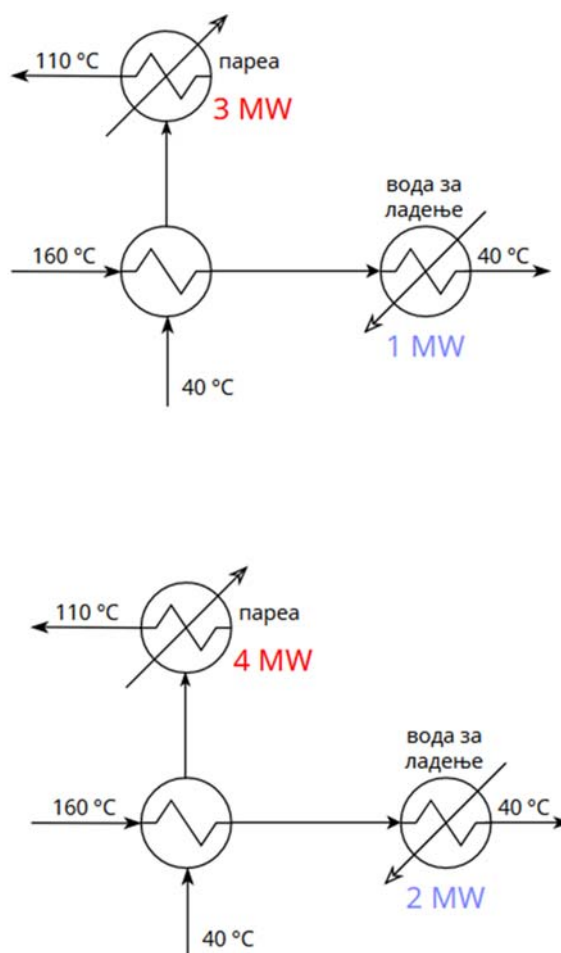
Слика 5.2  $T = f(\Delta H)$  дијаграм за  $\Delta T_{min} = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$

Во првиот случај, анализата на регионот на преклопување на топлата и ладната струја сугерира можна енергетска рекуперација од  $Q_{recovery} = 11\text{ MW}$ , а потребите од дополнително ладење и загревање со ЛСМ и



## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

ТСМ, соодветно, се:  $Q_{C,min} = 1 \text{ MW}$  и  $Q_{H,min} = 3 \text{ MW}$ . Во вториот случај, регионот на преклопување продуцира можна енергетска рекулпација од  $Q_{recovery} = 10 \text{ MW}$ , а потребите од дополнително ладење и загревање со ЛСМ и ТСМ, соодветно, се:  $Q_{C,min} = 2 \text{ MW}$  и  $Q_{H,min} = 4 \text{ MW}$ . Топлинските изменувачи неопходни за предложената енергетска интеграција во првиот и вториот случај се дадени на слика 5.3.

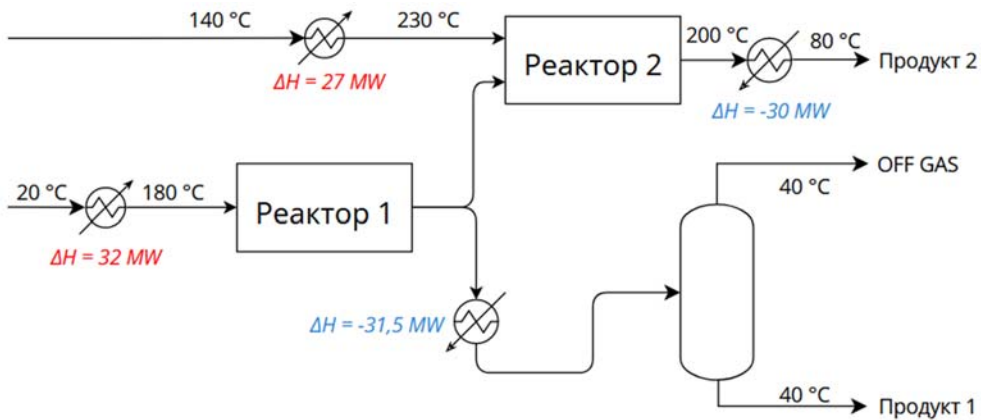


**Слика 5.3** Топлински изменувачи за анализираниот пример при различни вредности за  $\Delta T_{min}$

Со оглед на фактот што вредностите на температурата и енталпијата на процесните струи се константни вредности, единствена опција за интервенција во делот на димензионирање на системот за топлинска интегра-

ција е промената на  $\Delta T_{min}$ . Графичката интерпретација на ваквата интервенција се манифестира со поместување на струите хоризонтално во  $T-H$  дијаграмот. Ваквата можност е резултат на фактот што референтните вредности на енталпијата на топлите струи не се зависни од референтните енталпии на ладните струи. Соодветното „позиционирање“ на ладната и топлата композитна крива со промена на  $\Delta T_{min}$  има големо влијание врз потребата од површина за топлинска измена, со оглед на зависноста  $Q_{rec} = UA \cdot \Delta T$ . Оттука, намалувањето на  $\Delta T_{min}$  резултира во зголемување на потребната површина за топлинска измена, а со тоа и на висината на капиталните трошоци и покрај тоа што со зголемувањето на  $Q_{rec}$  се намалуваат оперативните трошоци (намалена потреба од загревање и ладење со ЛСМ и ТСМ).

Следниот пример за димензионарање на систем за топлинска интеграција на процес, кој има 2 топли и 2 ладни струи, е претставен графички (слика 5.4) и табеларно (табела 5.2).



**Слика 5.4** Проточен дијаграм на процес со реакторски систем од два реактори

Реакторскиот систем претставен со проточниот дијаграм на слика 5.4 содржи два реактори, каде се одвива двостепена конверзија на напојните струи до конечни продукти, а анализата на специфицираните вредности за работните температури на процесните струи укажува на потребата од значителни енергетски потрошувачки во насока на загревање и ладење. Ваквата анализа ја потенцира неопходноста за ефикасно искористување

## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

на топлината во процесот, односно димензионирање на соодветна мрежа на топлински изменувачи за ефикасна топлинска размена низ вмрежување на топлите и ладните процесни струи.

**Табела 5.2** Податоци за струите од дијаграмот на слика 5.4

Струја	Тип	$T_{in}$ [°C]	$T_{out}$ [°C]	$C_p = \check{c}_p \cdot Q_m$ [MW/°C]	$\Delta H$ [MW]
Напој P1	Л	20	180	0,2	32
Продукт P1	Т	250	40	0,15	-31,5
Напој P2	Л	140	230	0,3	27
Продукт P2	Т	200	80	0,25	-30

Во понатамошните пресметки, топлинскиот капацитет на процесната струја е дефиниран како производ на специфичниот топлински капацитет и масениот проток на струјата:

$$C_p = \check{c}_p \cdot \dot{m} \left[ \frac{MW}{^\circ C} \right]$$

$$\Delta H = \check{c}_p \cdot \dot{m} \cdot \Delta T = C_p \cdot \Delta T \text{ [MW]}$$

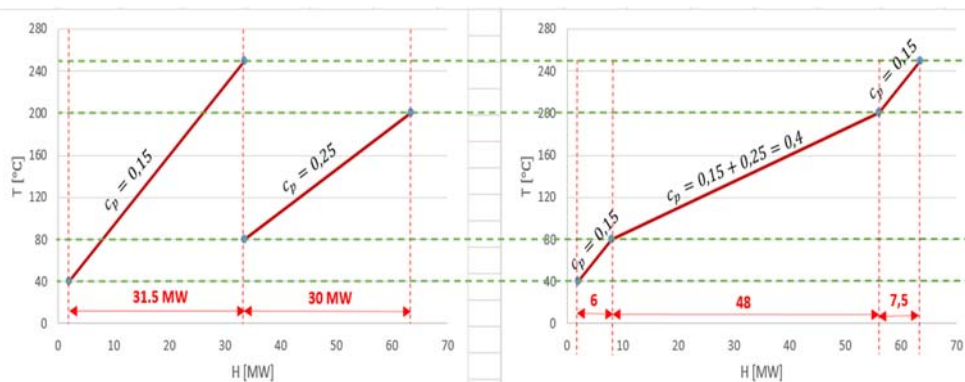
каде:

$\check{c}_p$  – специфичен топлински капацитет  $\left[ \frac{MJ}{kg^\circ C} \right]$ ;

$\dot{m}$  – масен проток на струјата  $\left[ \frac{kg}{s} \right]$ ;

$\Delta H$  – вкупна енталпија [MW].

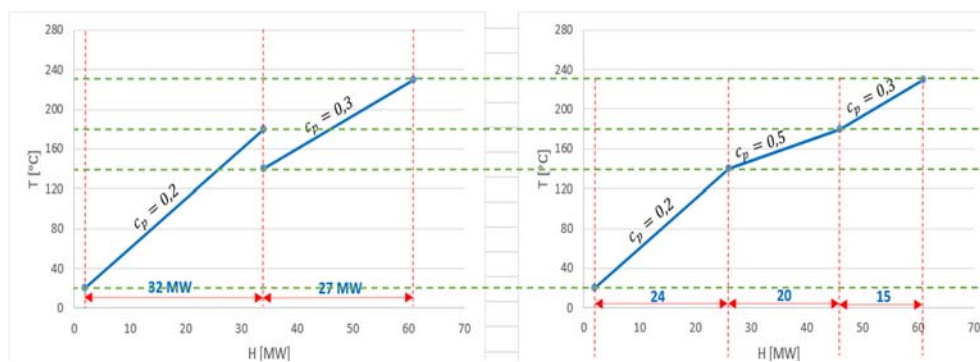
Топлинската интеграција на процеси кои содржат повеќе топли и ладни процесни струи започнува со конструкција на композитни криви на топлите и ладните процесни струи. За конкретниот пример на процес со специфицираните 2 топли и 2 ладни струи, конструкцијата на топлата композитна крива е дадена на слика 5.5.



Слика 5.5 Композитна крива на топлие струи (ТКК)

Дијаграмот на конструираната ТКК претставува графичко сумирање на Т-Н проекциите на топлие струи во секој температурен интервал, од најниската до највисоката температура. Вертикалната проекција на секоја од зоните на композитната крива (Т-Н) на х-оската го претставува топлинскиот потенцијал во дадениот температурен интервал.

Конструкцијата на ладната композитна крива (ЛКК) е дадена на слика 5.6.



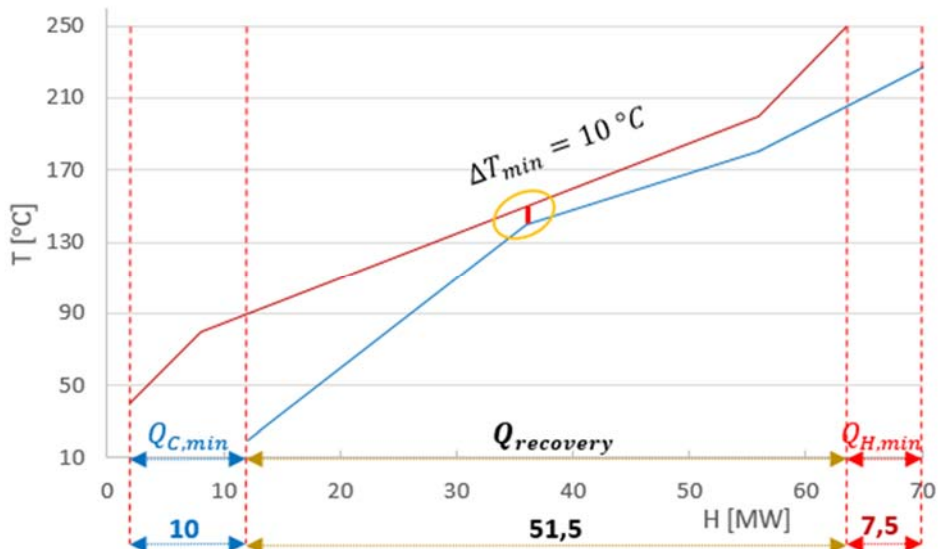
Слика 5.6 Композитна крива на ладните струи (ЛКК)

Аналогно на претходно анализираната ТКК, конструкцијата на композитната крива на ладните струи претставува графичко сумирање на Т-Н проекциите во секој температурен интервал, од најниската до највисоката температура. Вертикалната проекција на секоја од зоните на композитната крива (Т-Н) на х-оската ја претставува топлинската потрошувачка (потреба) во дадениот температурен интервал. Вака претставените дијаграми на ТКК и ЛКК даваат целосен преглед на топлинските карактеристики на анализираниот процес. Синтезата на мрежа за ефикасна

## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

топлинска интеграција започнува од дефинирање на минималното температурно приближување на ТКК и ЛКК (*pinch* точката) во Т-Н дијаграмот. Освен во специфични случаи, најчеста појдовна вредност за  $\Delta T_{min}$  е  $10\text{ }^\circ\text{C}$ . Композитниот Т-Н дијаграм за разгледуваниот пример, за  $\Delta T_{min} = 10\text{ }^\circ\text{C}$ , е претставен на слика 5.7.

Во регионите каде ЛКК се протега по крајот на ТКК и каде ТКК се протега пред почетокот на ЛКК, не е возможна топлинска интеграција на процесните струи и се неопходни сервисни медиуми. Тоа се зоните на минималната потреба од ладење со ЛСМ ( $Q_{C,min}$ ) и минималната потреба од загревање со ТСМ ( $Q_{H,min}$ ), соодветно.



**Слика 5.7** Композитен Т-Н дијаграм за примерот со две ладни и две топли струи

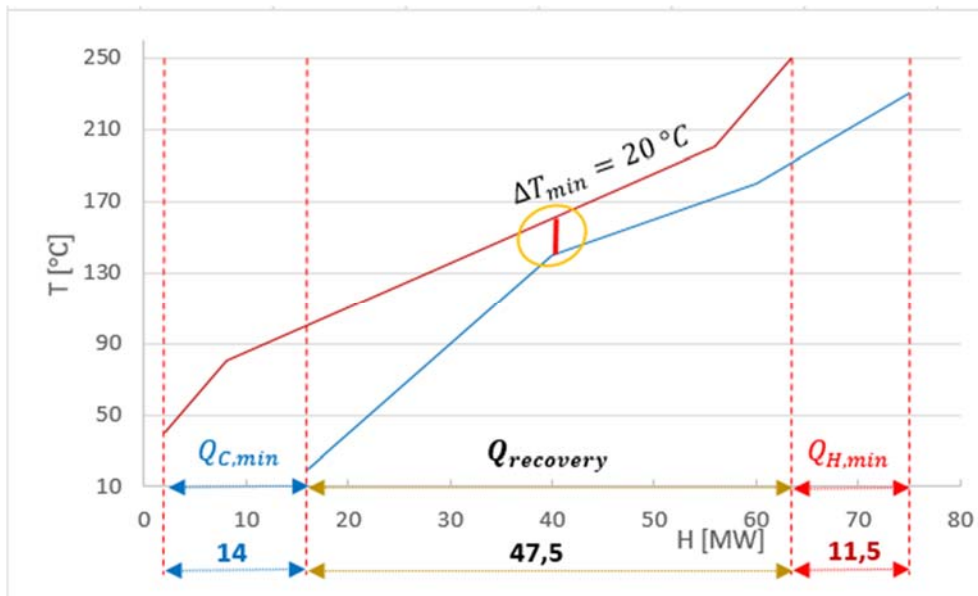
Вака дефинираното минимално температурно приближување ( $\Delta T_{min} = 10\text{ }^\circ\text{C}$ ) на ТКК и ЛКК (*pinch* точката) ги продуцира следните топлински карактеристики:

- Зона на рекуперација на топлина (зона на препокривање на ТКК и ЛКК), со можно искористување на топлина од  $Q_{rec} = 51,5\text{ MW}$  преку топлинска интеграција на топлиите и ладните процесни струи;
- Минималната потреба од ладење,  $Q_{C,min} = 10\text{ MW}$ ;

- Минималната потреба од загревање  $Q_{H,min} = 7,5 \text{ MW}$ .

Со модифицирање на вредноста на  $\Delta T_{min}$  како основен дизајн параметар при синтезата на HEN директно се влијае на останатите дизајн параметри -  $Q_{rec}$ ,  $Q_{C,min}$ ,  $Q_{H,min}$ , како и на потребната вкупна површина на топлинска размена,  $A$ . Затоа, самата вредност на минималното температурно приближување претставува степен на слобода при дизајн на мрежата на топлински изменувачи, па со промена на овој параметар, всушност, се прави хоризонтално поместување на КК во Т-Н дијаграмот.

Преносот на топлина од топлите кон ладните струи евозможен само доколку топлата КК е над ладната КК, а зголемувањето на вредноста на  $\Delta T_{min}$  резултира во намалување на зоната на препокривање на ТКК и ЛКК, односно се намалува  $Q_{rec}$ , и следствено, потребната површина за топлинска измена,  $A$ , но затоа се зголемуваат потребите за ладни и топли сервисни медиуми, поради зголемувањето на  $Q_{C,min}$  и  $Q_{H,min}$ . Анализата на ваквиот ефект укажува на фактот дека зголемувањето на  $\Delta T_{min}$  резултира со намалување на капиталните (инвестициските) трошоци – помала површина на топлинските изменувачи, но се зголемуваат оперативните трошоци – зголемена потреба од ТСМ и ЛСМ.



Слика 5.8 Композитен Т-Н дијаграм за примерот со 2 ладни и топли струи ( $\Delta T_{min} = 20^\circ\text{C}$ )

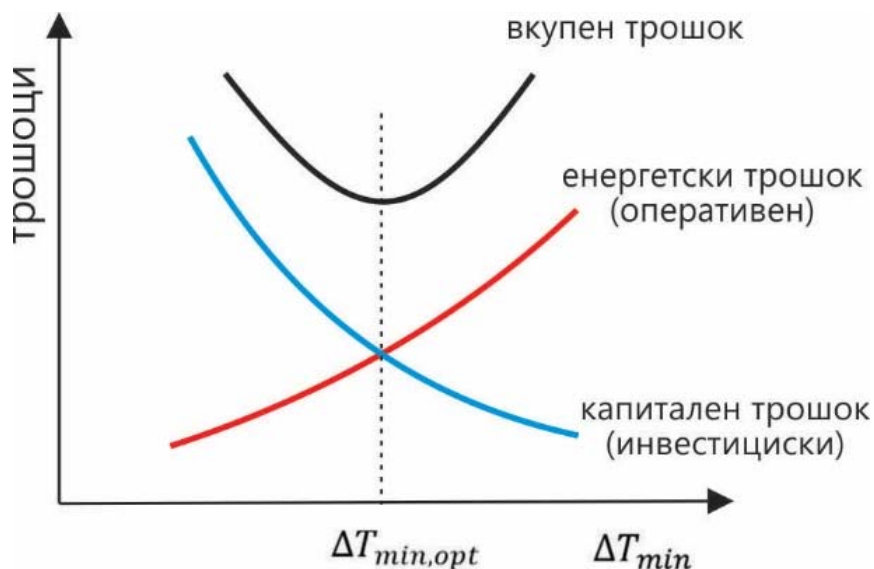
## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

Со цел демонстрација на изведениот заклучок, на слика 5.8 е даден Т-Н дијаграмот за истиот пример со две топли и две ладни процесни струи, но со нова вредност за минимално температурно приближување,  $\Delta T_{min} = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$ .

Резултантното поместување на КК во Т-Н дијаграмот продуцира нови вредности за топлинските карактеристики:

- Зона на рекуперација на топлина  $Q_{rec} = 47,5\text{ MW}$ ;
- Минималната потреба од ладење,  $Q_{C,min} = 14\text{ MW}$ ;
- Минималната потреба од загревање  $Q_{H,min} = 11,5\text{ MW}$ .

Ваквите резултати го потврдуваат претходно изнесениот заклучок, односно зголемувањето на  $\Delta T_{min}$  продуцира намалување на  $Q_{rec}$ , и следствено, потребната површина за топлинска измена,  $A$ , но затоа се зголемуваат  $Q_{C,min}$  и  $Q_{H,min}$ . Затоа, дефинирањето на оптимална вредност за минималното температурно приближување на КК претставува минимизација на функционалната зависност на вкупните трошоци од  $\Delta T_{min}$ , што е претставено на слика 5.9.



Слика 5.9 Графички приказ на дефинирањето на  $\Delta T_{min,opt}$

Гранична вредност на функцијата  $COST = f(\Delta T_{min})$  е  $\Delta T_{min} = 0$ , односно точка на контакт на ТКК и ЛКК. Во таа точка на „допирање“ на ТКК и ЛКК, движечката сила на топлинската размена е 0, а потребната површина за топлинска размена е бесконечна.

Најчесто, првата, а најчесто и оптимална, претпоставка за минимално температурно приближување во *pinch* точката е  $\Delta T_{min} = 10\text{ }^\circ\text{C}$ . Постојат низа практични ограничувања при идентификацијата на енергетските таргети на технолошки процес, кои може да се претстават сумарно:

- За постигнување мала проектирана вредност на  $\Delta T_{min}$ , неопходно е проектирање топлински изменувач (HE) со речиси идеално противструјно движење на струите.

- Најчесто применуваните HE, како оние од типот *Shell&Tube* немаат чисто противструјно движење, па затоа се намалува можноста за работа при ниски вредности за  $\Delta T_{min}$ .

- $\Delta T_{min} < 10\text{ }^\circ\text{C}$  се вредности кои се имплементираат само во специјални случаи, а во спротивно не се препорачливи.

- Кај плочестите HE, можно е успешно функционирање и при пониски вредности, на пример,  $\Delta T_{min} = 5\text{ }^\circ\text{C}$ . Современите дизајн-решенија за Plate-Fin топлински изменувачи овозможуваат функционална топлинска размена и при дизајн вредности за  $\Delta T_{min} = 1\text{ }^\circ\text{C}$ .

- Наведените практични ограничувања важат за HE дизајнирани околу *pinch* точката.

- Дополнителни ограничувања се применуваат доколку има фазна промена (испарување или кондензација) во *pinch* зоната.

Анализата на исплатливост на HE сугерира дека оптимална вредност за  $\Delta T_{min} \geq 10\text{ }^\circ\text{C}$ , што е појдовна точка за димензионирање на мрежа на топлински изменувачи (HEN). Фиксирањето на вредноста на  $\Delta T_{min}$  дава најмалку една точка помеѓу 2-те КК и се нарекува *Heat Recovery Pinch* и токму *pinch* точката е од централно значење за синтезата на HEN.

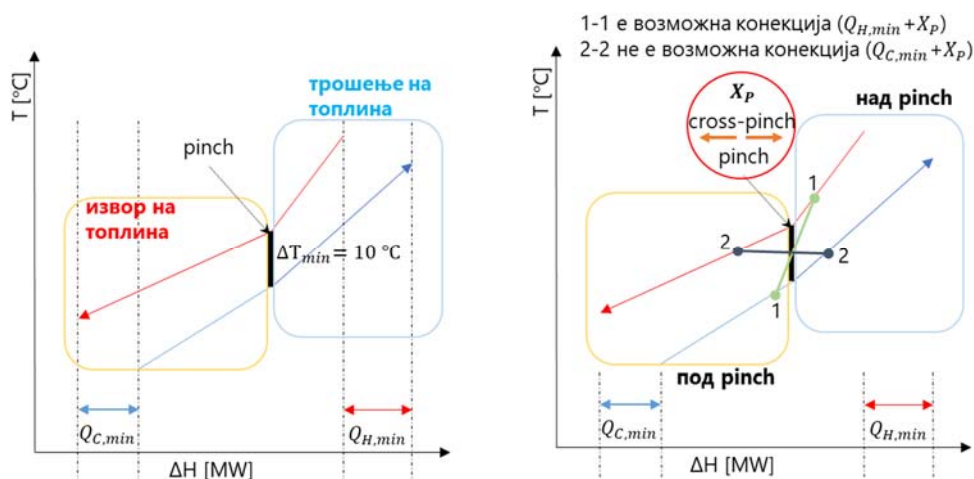
Во зоната над *pinch*, процесот е во рамнотежа со топлиот сервисен медиум ( $Q_{H,min}$ ), а во оваа зона топлината „се прима“ од топлиот медиум,



## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

па самата зона претставува т.н. *heat sink* или зона на трошење на топлина (слика 5.10).

Зоната под *pinch*, процесот е во рамнотежа со ладниот сервисен медиум ( $Q_{C,min}$ ), топлината се насочува кон ладниот медиум, а самата зона е т.н. *heat source* или зона на извор на топлина (слика 5.10).



**Слика 5.10** Зони на извор и трошење на топлина (*heat source – heat sink*)

Притоа, од особена важност е ограничувањето во однос на топлинска измена низ *pinch* точката (*cross pinch – X<sub>p</sub>*). Во суштина:

1) Возможен е пренос на топлина низ *pinch* зоната, од топлиите струи над *pinch* зоната кон ладните струи под *pinch* зоната;

2) Не евозможен пренос на топлина од топлиите струи под *pinch* зоната кон ладните струи над *pinch* зоната (во спротивност со ограничувањето на  $\Delta T_{min}$ ).

Со преносот на топлина  $X_p$  од топлиите струи над *pinch* кон ладните струи под *pinch*, ќе се појави дефицит на топлина во делот над *pinch*. За надминување на ваквата состојба, решение е донесување топлина во вишок, односно минималната потреба од TCM над *pinch* ќе биде дефинирана како  $Q_{H,min} + X_p$ .

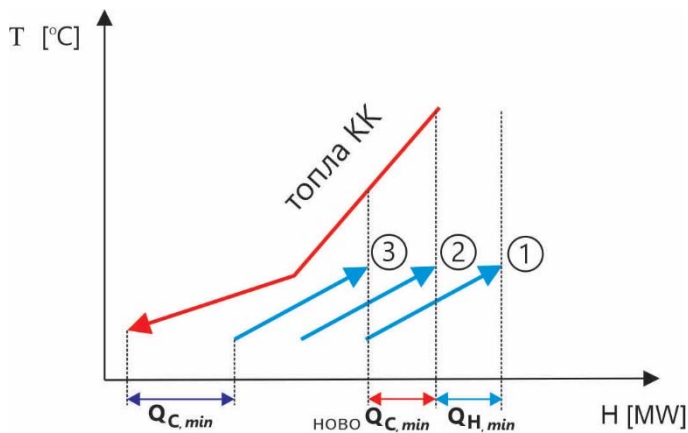
Исто така, вишокот на топлина кој ќе се појави под *pinch* зоната како резултат на  $X_P$  преносот, ќе треба да биде одведен со дополнително количество на ЛСМ, па минималната потреба за ладење ќе биде дефинирана како  $Q_{C,min} + X_P$ .

Успешна топлинска интеграција врз база на идентификувани енергетски таргети, дефинирани со дијаграмот на композитни криви, не смее да содржи  $X_P$  пренос од типот:

- Топлинска размена меѓу две процесни струи низ *pinch* зоната.
- Без ТСМ под *pinch* и ЛСМ над *pinch* (нема загревање со ТСМ под *pinch* и ладење со ЛСМ над *pinch* зоната).

### 5.2 Специјални проблеми

Не сите процеси продуцираат композитни криви со *pinch* точка, која ќе го подели процесот на делови – *Heat Source* и *Heat Sink*. Пример за ваков процес е даден на слика 5.11.

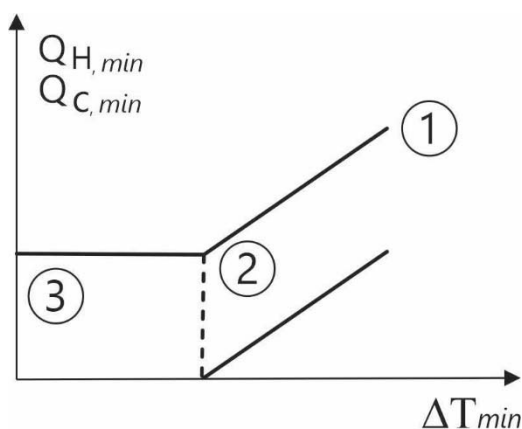


**Слика 5.11** Процес без зона на трошење на топлина – различни положби на ЛКК

Анализата на презентираниот график (слика 5.11) укажува на следното:

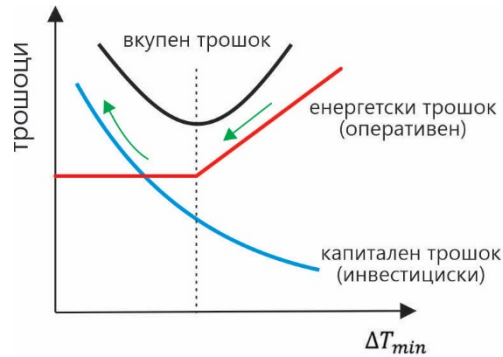
## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

- Доколку позицијата на ЛКК е во положба 1, тогаш ќе имаме  $Q_{H,min}$  во процесот;
- Доколку ЛКК е во позиција 2, се работи за целосно преклопување на енталпите и нема  $Q_{H,min}$  (се елиминира потребата од ТСМ);
- Дополнителното хоризонтално поместување на ЛКК кон лево, ќе резултира со отсуство на  $Q_{H,min}$ , но ќе се појави нов  $Q_{C,min}$  на другиот крај на процесот, со што ќе имаме  $Q_{C,min}$  и под *pinch* и над *pinch* (слика 5.12).



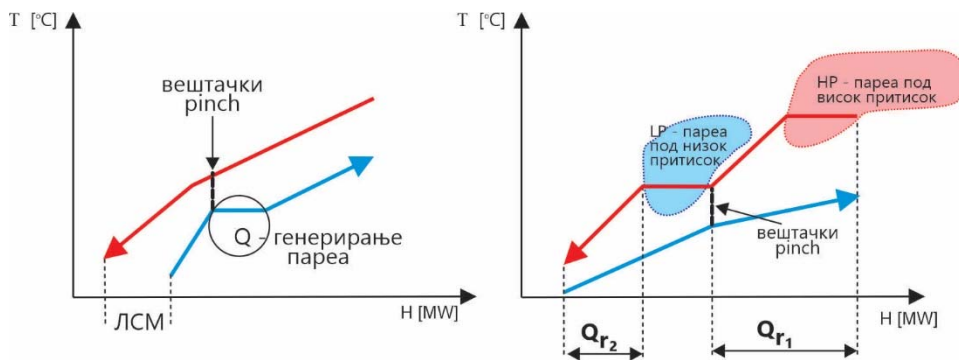
Слика 5.12 Карактеристичен дијаграм на *threshold* проблем

Проблемот од поставеноста на композитните криви проектирана во позиција 2 претставува граничен проблем т.н. *Threshold Problem*, бидејќи понатамошно поместување ќе резултира со директно нарушување на основните термодинамички принципи – без ТСМ под *pinch* и без ЛСМ над *pinch*. Во согласност со тоа, не е возможно „второ“  $Q_{C,min}$  над *pinch*. Кај одредени проблеми од овој тип доаѓа до исчезнување на потребата за ТСМ, кај други – за ЛСМ. Ваквите проблеми сугерираат димензионирање на систем за енергетска интеграција на процесот со елиминација на потребата од еден од сервисните медиуми, со што се постигнува и економска оптимизација на дизајнираната мрежа (слика 5.13).



**Слика 5.13** Економска оптимизација на HEN системот (во отсуство на ЛСМ или TCM)

Дополнително, кај овие гранични проблеми е возможно отсуство на *pinch* точка, но постои опција за генерирање на „вештачка“ *pinch* точка со примена на TCM или ЛСМ (слика 5.14).



**Слика 5.14** Создавање вештачки *pinch* со сервисен медиум (utility pinch)

### 5.3 Табличен алгоритам за идентификација на енергетските таргети

Табличниот алгоритам за определување на топлинските карактеристики на процесните струи претставува метод за дефинирање на енергетските потреби  $Q_{C,min}$  и  $Q_{H,min}$  без графичка презентација на КК.

Прво, процесот се дели на температурни интервали, слично како кај конструирањето на композитните криви. Притоа, важно е да се има предвид дека не е возможно да се пренесе целата топлина во секој

## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

температурен интервал, зашто температурната разлика која е движечка сила на преносот на топлина не е одржлива низ целиот интервал.

Ваквиот проблем се надминува ако се претпостави дека ТКК е за  $\frac{\Delta T_{min}}{2}$  поладна отколку што е реално и дека ЛКК е за  $\frac{\Delta T_{min}}{2}$  потопла отколку што е реално. Поместените КК се допираат во *pinch* точката. Топлинскиот биланс на модифицираните температурни интервали овозможува одржлив пренос на топлина низ целиот температурен интервал.

Ваквото вертикално поместување на композитните криви не го менува хоризонталното „препокривање“ и не влијае на  $Q_{C,min}$  и  $Q_{H,min}$ . Затоа, ваквото вертикално поместување не влијае на количината на рекуперирана топлина, туку само обезбедува изводливост (погонска сила) на преносот на топлина во дадениот температурен интервал. Техниките на поместување помагаат во утврдување на енергетските потреби (таргети) без графичко скицирање на КК.

Табличниот алгоритам за идентификација на енергетските потреби се креира низ неколку чекори:

- 1) Нагудување на поместените температурни интервали за  $\frac{\Delta T_{min}}{2}$ ;
- 2) За секој поместен интервал:

$$\Delta H_i = \left( \sum C_{p,C} - \sum C_{p,H} \right) \cdot \Delta T_i$$

каде:

$\Delta H_i$  – топлински биланс на поместениот интервал  $i$ ;

$\Delta T_i$  – температурен интервал;

$C_{p,C}$  – топлински капацитет на ладна струја;

$C_{p,H}$  – топлински капацитет на топла струја.

Демонстрација на примената на табличниот алгоритам може да се имплементира на претходниот пример за  $\Delta T_{min} = 10 \text{ }^\circ\text{C}$ . Топлинските карактеристики се дадени во табела 5.2.

## Стефан Кувенциев Анализа и синтеза на процеси

Прв чекор е поместување на температурните интервали, односно намалување на температурните вредности кај топлиите струи за  $\frac{\Delta T_{min}}{2}$  и зголемување на температурните вредности кај ладните струи за  $\frac{\Delta T_{min}}{2}$ . Во таа насока се додаваат две колони, како што е прикажано во табела 5.3.

**Табела 5.3** Податоци за струите и поместените температурни вредности

Струја	Тип	$T_{in}$ [°C]	$T_{out}$ [°C]	$T_{in}^*$ [°C]	$T_{out}^*$ [°C]
Напој P1	Л	20	180	<b>25</b>	<b>185</b>
Продукт P1	Т	250	40	<b>245</b>	<b>35</b>
Напој P2	Л	140	230	<b>145</b>	<b>235</b>
Продукт P2	Т	200	80	<b>195</b>	<b>75</b>

Втор чекор е мапирање на процесните струи во температурните интервали. Ги имаме неопходните податоци за конструкција на дијаграмот на популација на струи:

$T_i$		$\Delta T_i$	$\sum c_{p,c} - \sum c_{p,h}$	$\Delta H_i$	$\Delta H_{cumul} = 0 - \Delta H_i$	+ TCM $+7.5 Q_{H,min}$
245	2					9
235		10	-0,15	-1,5	1,5	3
195	4					4
185		10	-0,1	-1	-3,5	0 (PINCH)
145	3					14
75		70	-0,2	-14	6,5	12
35		40	0,05	2	4,5	10 $Q_{c,min}$
25	1					
		10	0,2	2	2,5	

Во согласност со поставениот услов на задачата, дефинирани се основните топлински карактеристики на анализираниот процес. Притоа, најмалата потреба од загревање со топол сервисен медиум (пареа на 240 °C) – TCM ( $Q_{H,min}$ ) е најголемата негативна вредност на табличниот алгоритам на топлинскиот проток (-7,5 MW), која се постигнува при

## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

145 °C (*pinch* точка). Преостанатото количество топлина од конечниот кумулативен приказ на топлинскиот биланс по обезбедувањето на ТСМ, претставува минимална потреба од ладење ( $Q_{C,min}$ ) со ЛСМ (вода за ладење), а тоа е 10 MW.

Од конечната табела може да се утврдат основните енергетски таргети на анализираните процесни струи:

$$Q_{H,min} = 7,5 \text{ MW}$$

$$Q_{C,min} = 10 \text{ MW}$$

Реалните вредности за *pinch* точката се:  $T_{\text{топли струи}} = 150 \text{ }^{\circ}\text{C}$  и  $T_{\text{ладни струи}} = 140 \text{ }^{\circ}\text{C}$ .

Процесни ограничувања за имплементација на табличниот алгоритам:

- Основното начело за вмрежување на топла и ладна струја е постоењето доволна температурна разлика за ефикасна топлинска размена.

Исклучоци:

- При спарување струи во топлински изменувач (HE), доколку евентуалното протекување има експлозивен потенцијал, тогаш се избегнува ваквото решение.

- Локациски ограничувања – неприфатливи се долги цевководи.

- Можни ограничувања – проблеми при *startup* и контрола на работата на HE.

- Постоењето индустриски (секторски) целини, дефинирани како реакциона зона, сепарациска зона, кои се меѓусебно одделени поради неопходноста за изведување помошни операции.

Кај овие зони вообичаено има и меѓускладови за процесните материјали, па затоа претставуваат ИНТЕГРАЛНИ целини, кои по својата природа претставуваат ограничување на можностите за целосна топлинска интеграција на процесот и непречено воведување на HE. За

задржување на вообичаената зонска „независност“ кои било две зони не смеат да бидат меѓузависни од потребите за ладење и/или загревање.

Главен ефект на дефинираните ограничувања е неможноста за директна примена на табличниот алгоритам за идентификација на енергетските таргети на процесот. При последното од наведените ограничувања, неопходно е процесот да се подели на оперативно и енергетски независни зони.

Со цел да се демонстрира ефектот од делењето на еден процес во две или повеќе независни оперативни зони, анализиран е пример за кој податоците за процесните струи се дадени табеларно (табела 5.4). Процесот треба да се подели во 2 зони со  $\Delta T_{min} = 20\text{ }^\circ\text{C}$

**Табела 5.4** Процес со две независни оперативни зони

Струја	$T_{in},\text{ }^\circ\text{C}$	$T_{out},\text{ }^\circ\text{C}$	$C_p, \text{ kW}/^\circ\text{C}$	$T_{in}^*,\text{ }^\circ\text{C}$	$T_{out}^*,\text{ }^\circ\text{C}$	
1 Н	190	110	2,5	180	100	ЗОНА 1
2 С	90	170	20	100	180	
3 Н	140	50	20	130	40	ЗОНА 2
4 С	30	120	5	40	130	

Прво, ќе се пресмета потребата од сервисни медиуми при водење на процесот во две посебни зони – 1 и 2. Во овој случај:

**Зона 1:** Во оваа зона има НЕ на двете процесни струи (1Н и 2С), но количината на топлина која топлата струја ја предава на ладната струја не е доволна за потребното загревање на ладната струја, која има значително поголем топлински капацитет. Како резултат на тоа ќе биде неопходно дозагревање на ладната струја (2С) со ТСМ:

$$Q_{H,min} = \left( \sum C_{p,C} - \sum C_{p,H} \right) \cdot \Delta T = 17,5 \cdot 80 = 1400 \text{ kW}$$

**Зона 2:** Во оваа зона има НЕ на двете процесни струи (3Н и 4С), но количината на топлина која топлата струја ја предава на ладната струја не е доволна за потребното ладење на топлата струја, која има значително поголем топлински капацитет. Како резултат на тоа ќе биде неопходно предавање на преостанатото количество топлина кон ЛСМ:



## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

$$Q_{C,min} = \left( \sum C_{p,H} - \sum C_{p,C} \right) \cdot \Delta T = 15 \cdot 90 = 1350 \text{ kW}$$

Конечно, енергетските таргети на анализираниот процес, кој е поделен во две независни зони (сегменти) се:

$$Q_{H,min} = 1400 \text{ kW}$$

$$Q_{C,min} = 1350 \text{ kW}$$

Дефинирањето на енергетските потреби за истиот процес, но сега во топлински интегриран концепт е претставено табеларно:

$T_i$		$\Delta T_i$	$\sum C_{p,C} - \sum C_{p,H}$	$\Delta H_i$	$\Delta H_{cumul} = 0 - \Delta H_i$	+ TCM
180	1	50	17,5	875	-875	+950 ( $Q_{H,min}$ )
130	3	30	2,5	75	-950	0
100	2	60	-15	-900	-50	900 ( $Q_{C,min}$ )
40	4					

Анализата на потенцијалниот топлински интегриран концепт на студираниот процес укажува на значително редуцирани вредности на енергетските потреби во споредба со неинтегрираната варијанта:

$$Q_{H,min} = 950 \text{ kW}$$

$$Q_{C,min} = 900 \text{ kW}$$

Топлинските загуби кои се резултат на зонската конфигурација на процесот може да се претстават како:

$$\Delta Q_{H,min} = 450 \text{ kW} \text{ и } \Delta Q_{C,min} = 450 \text{ kW}$$

Ваквиот резултат целосно ја потврдува инженерската значајност и неопходност на енергетска интеграција на технолошките процеси, со што се поставува основата за процесна оптимизација и зголемување на ефикасноста на искористување на енергетските ресурси. Само при добро

втемелени и технички оправдани ограничувања, синтезата на технолошките процеси се реализира во рамките на топлински дезинтегрирани зони.

Сепак, доколку понатамошната анализа укажува на економска неоправданост и неодржливост на ваквите процеси, постојат 2 опции:

- Дезинтеграција на зоните и водење на процесот како еден енергетски интегриран систем;
- Дефинирање на модалитети за зачувување на зоните на интегритет, но и надминување на ограничувањата за енергетска интеграција на процесот, како, на пример: користење посебен систем од сервисни медиуми како систем за амортизација на топлинските загуби при транспортот на флуиди од една во друга зона (интегрирање сервисен медиум кој циркулира помеѓу спарените процесни струи).

Значаен аспект на оптималното димензионирање на систем за топлинска интеграција е соодветен избор на сервисни медиуми за задоволување на енергетските таргети на процесот. Овие флуиди го надополнуваат потребното количество топлина која не се обезбедува во топлинските изменувачи на спарените процесни струи.

Постојат неколку често применувани опции на топли сервисни медиуми:

- Пареа (под висок, среден и низок притисок – HP, MP, LP струја);
- Издувни гасови;
- Загреано масло и
- *Dowtherm* течности.

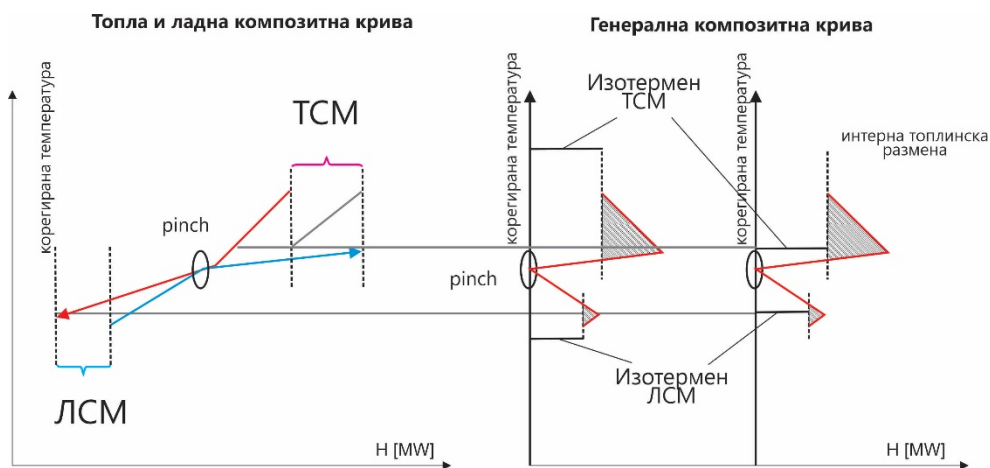
При изборот на соодветен флуид за ТСМ, основна цел е да се избегнат можните фазни промени во топлинскиот изменувач.

Често користени флуиди како ЛСМ се:

- Вода (од 20 °C до 50 °C);
- Воздушно ладење;
- Вода при ниски температури (*sub-cooled water*, од 4 °C до 15 °C) и
- *BFW – boiler fed water* – за генерирање на пареа.

## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

Основна алатка за дефинирање на интеракциите помеѓу процесните струи и сервисните медиуми, од аспект на топлинска интеграција, е генералната композитна крива (*Grand Composite Curve*). Профилот на оваа композитна крива ја претставува потребата за загревање и ладење после преносот на топлина во регионот на поместениот температурен интервал ( $\Delta T^*$ ), како и потребната работна температура и/или притисок на сервисните медиуми за проектираниот пренос. Тоа е графички приказ на топлинската каскада и може директно да се одреди според нумеричкиот метод; директно добивајќи ги координатите од табеларниот приказ на популацијата на струи. Можно е и графички да се определат координатите на ГКК од Т-Н дијаграмот на топлата и ладната композитна крива – ТКК и ЛКК. Притоа, за секоја температура од дијаграмот на композитните криви можеме да ја одредиме нето топлинската моќност како разлика во апсцисата помеѓу топла и ладна КК. На ГКК, можеме да идентификуваме две зони – зона над *pinch* точката, која е ендотермна зона со топлински дефицит, и зона под *pinch* точката, односно егзотермна зона каде што е потребно ладење. Пример за ГКК е дадена на слика 5.15.



Слика 5.15 Генерална композитна крива на процес

### 5.4 Идентификација на површина и цена на топлински изменувачи

Дефинирањето на економските аспекти на дизајнот на систем на топлински изменувачи за топлинска интеграција на процес започнува со

утврдувањето на капиталните трошоци. Основни елементи на капиталните трошоци се:

- Број на единици (HE);
- Дефинирана површина за размена (A);
- Број на обвивки (*shells*);
- Материјал на изведба;
- Тип на топлински изменувачи и
- Р услови.

### 5.4.1 Број на единици – графичка теорија

Слика 5.16 дава графички приказ на примената на графичката теорија за определување на бројот на HE. Притоа, „круговите“ ги претставуваат единиците, а „линиите“ помеѓу нив – спарувањето на процесните струи.

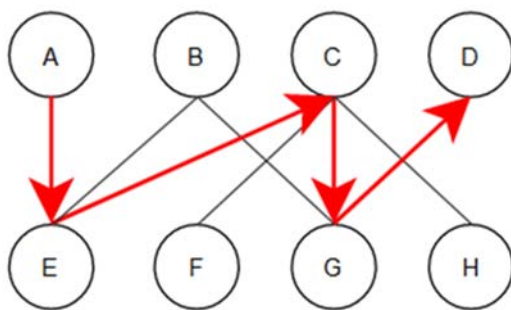


График 1

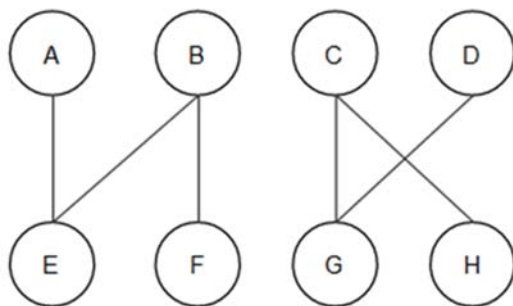


График 2

**Слика 5.16** Графички метод за определување број на единици – HE

## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

Основни карактеристики на графичкиот метод за определување на бројот на единици во системот за топлинска интеграција:

- Патека – секвенција на определени јасни линии кои меѓусебно се поврзани (пример, график 1 – патека А – Е – С – G – D).
- Компонента – една интегрална компонента (единица) е графички приказ на дефинирана патека со сите точки кои лежат на патеката (пример: график 1 – целиот е една компонента, график 2 – содржи две компоненти).
- Циклус – патека која започнува и завршува во иста точка (график 1 – В-G-C-E и график 2 – С-G-D-H). Доколку се отстрани спарувањето С-G, тогаш добиваме нов циклус на график 1 – В-G-D-H-C-E-В.

Со графичката метода бројот на единици е, всушност, бројот на индивидуални циклуси:

$$N_{\text{единици}} = S + L - C,$$

каде:

$N_{\text{единици}}$  – број на спарувања;

$S$  – број на струи (процесни и сервисни);

$L$  – број на индивидуални циклуси;

$C$  – број на компоненти.

Конечниот дизајн на мрежата претставува дефинирање на оптималниот број на единици, односно минимизација на наведената функција -  $N_{min}$  ( $L \rightarrow 0$  и  $C \rightarrow max$ ).

Претпоставката дека е реално  $L = 0$ , е издржана со оглед на тенденцијата сите струи да бидат интегрирани во еден систем. Дополнително, самиот пристап кон топлинската интеграција укажува на најпрецизна претпоставка за вредноста на  $C = 1$  (целиот процес е 1 компонента). Тогаш:

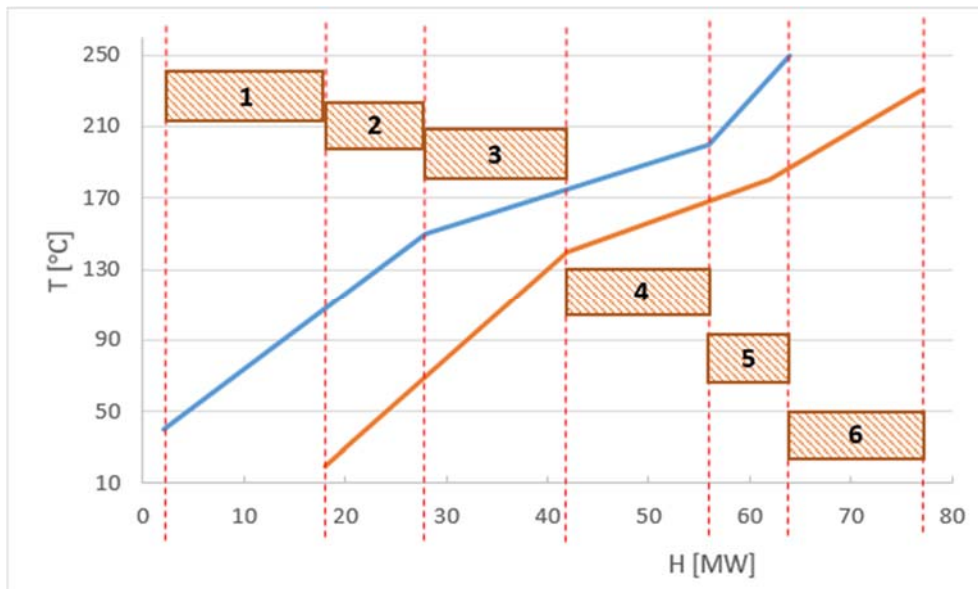
$$N_{min} = S - 1$$

Овој израз е применлив доколку нема *pinch* точка. Постојењето *pinch* точка во HEN ја дели мрежата во региони – над и под *pinch*, па тогаш определувањето на бројот на единици се пресметува за секој од регионите, посебно:

$$N_{min} = (S_{над\ pinch} - 1) + (S_{под\ pinch} - 1)$$

### 5.4.2 Површина за топлинска измена

Вкупната површина неопходна за постигнување на утврдената топлинска измена се определува во согласност со Т-Н дијаграмот на композитните криви (ТКК и ЛКК), заедно со сервисните медиуми, што во суштина се балансирани КК. Во основа, Т-Н дијаграмот се дели на енталписки подинтервали и се определува површината за топлинска измена за секој од подинтервалите. Пример за поделба на дијаграмите на КК е даден на слика 5.17.



Слика 5.17 Балансирани КК (со сервисни медиуми) поделени на подинтервали

Под претпоставка дека вкупниот коефициент на пренос на топлина е константен,  $U = const$  и дека движењето на флуидите низ HE е противструјно, површината на топлинска размена за секој енталписки подинтервал,  $A_k$ , се пресметува:

## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

$$A_k = \frac{\Delta H_k}{U \cdot \Delta T_{ln,k}}$$

За целата мрежа на топлински изменувачи, изразот за вкупната површина на топлинска измена,  $A_T$ , претставува сумирање на поединечните површини:

$$A_T = \frac{1}{U} \sum_{i=1}^6 \frac{\Delta H_k}{\Delta T_{ln,k}}$$

Доколку  $U \neq const$ , тогаш е неопходно пресметување на вкупниот коефициент според зависноста:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_0} + \frac{1}{h_i} + \frac{l}{\lambda}$$

каде:

$\lambda$  – коефициент на кондуктивен пренос на топлина (топлинска спроводливост на материјалот на HE) [ $W/m \cdot K$ ].

$h_0, h_i$  – коефициенти на конвективен пренос на топлина во ладна/топла струја [ $W/m^2 \cdot K$ ].

Во тој случај, вкупната површина на топлинска размена е:

$$A_T = \sum_{i=1}^k \frac{1}{\Delta T_{ln,k}} \left( \sum \frac{q_i}{h_i} + \sum \frac{q_j}{h_j} \right)$$

каде:

$q_i$  – топлина на топла струја  $i$ ;

$q_j$  – потреба од топлина на ладната струја  $j$ ;

$i, j$  – број на топли и ладни струи во интервал;

$k$  – број на енталписки интервали.

Пресметаните површини за топлинска измена се од особено значење за понатамошните анализи на технолошкиот процес, особено во делот на оптимизација на енергетските и инвестициските биланси во конечниот дизајн.

## 5.5 PINCH технологија за дизајн на HEN

Досегашната анализа на топлинската интеграција на процесите беше насочена кон идентификација на енергетските потреби на еден процес, како и дефинирање на основните пресметки, неопходни за успешна синтеза на мрежа на топлински изменувачи (*Heat Exchanger Network – HEN*) за ефикасно искористување на топлинскиот потенцијал на процесните струи.

Главен параметар, со чие дефинирање започнува дизајнот на HEN и кој има централно значење во понатамошните пресметки за утврдување на капиталните и оперативните трошоци, е минималното температурно приближување на топлите и ладните струи,  $\Delta T_{min}$ .

Главни процесни ограничувања кај *pinch* технологијата се:

- Определување на оптимална вредност  $\Delta T_{min,opt}$ , при што ниту еден од HE нема да има работна температурна разлика помала од  $\Delta T_{min,opt}$ ;
- Да нема пренос на топлина низ *pinch* зоната ( $X_p$ ) и
- Да нема TCM-и под *pinch* и ЛСМ-и над *pinch* зоната.

**Табела 5.5** Податоци за струите

			Над <i>pinch</i>	Под <i>pinch</i>		
Струја	$T_{in}$ [°C]	$T_{out}$ [°C]			$C_p$ [MW/°C]	$\Delta H_i$ [MW]
H1 (2)	250	40	250 °C	40 °C	0,15	-31,5
H2 (4)	200	80	200 °C	80 °C	0,25	-30
C1 (1)	20	180	180 °C	20 °C	0,2	32
C2 (3)	140	230	230 °C	140 °C	0,3	27



## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

Критериумите за дизајн на HEN се темелат на добра иницијализација на системот, како предуслов за дизајн на ефикасна мрежа. Во согласност со наведените ограничувања, процесот е поделен кај *pinch* зоната – над *pinch* и под *pinch*, што се рефлектира и во конструкцијата на мрежниот дијаграм. За демонстрација ќе биде искористен примерот со две ладни и две топли струи (пример 1), каде со примена на табличниот алгоритам беа идентификувани  $T_{pinch}$ ,  $Q_{C,min}$  и  $Q_{H,min}$ .

Притоа, минималните потреби од ладење и загревање на процесните струи со примена на сервисни медиуми се:

$Q_{H,min} = 7,5 \text{ MW}$  (над *pinch*) со пареа како TCM;

$Q_{C,min} = 10 \text{ MW}$  (под *pinch*) со вода за ладење како ЛСМ.

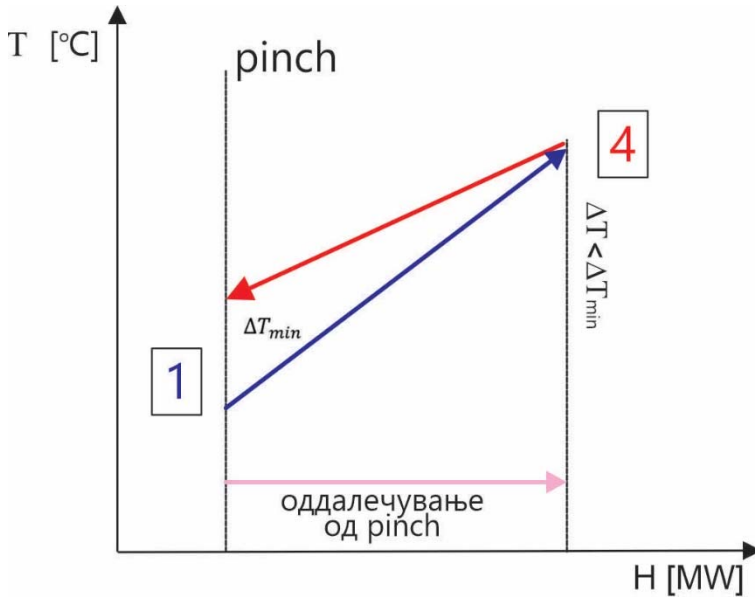
### 1) Основната конструкција на HEN започнува околу *pinch* точката

- Во оваа зона, најголем е бројот на ограничувања;
- Во оваа зона, движечката сила е со вредност од  $\Delta T_{min}$  помеѓу сите топли и ладни струи;
- Како резултат на ваквите работни услови, бројот на остварливи спарувања на струите е намален;
- Дел од овие ограничувања се надминуваат со оддалечувањето од *pinch* зоната.

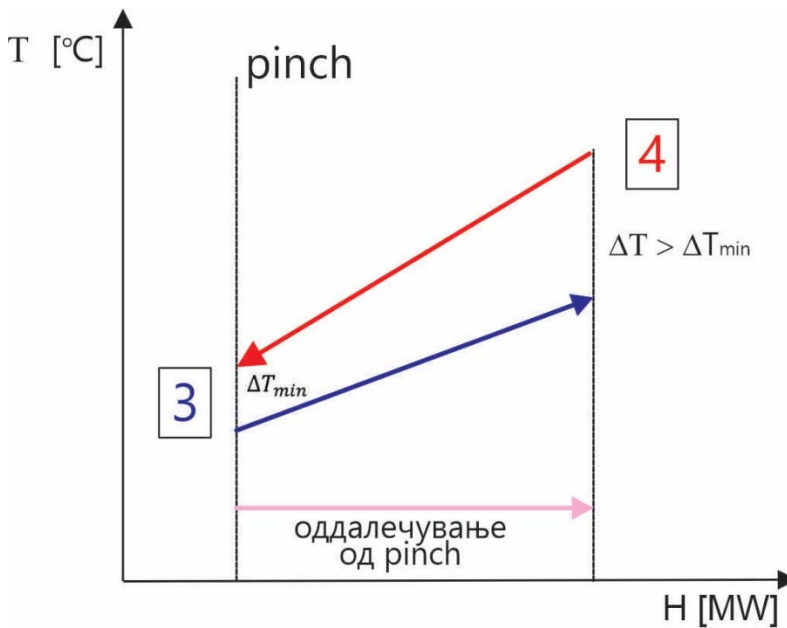
### 2) Ограничување во однос на нееднаквост на вредностите на $C_p$

Пример: спарување на струите (1) и (4) во посебен HE (над *pinch*). Во овој случај, бидејќи топлата струја има поголема вредност на  $C_p$  од ладната струја, температурниот профил на топлата струја во Т-Н дијаграмот ќе има помал наклон од ладната струја, со што вредноста на погонската сила ( $\Delta T$ ) константно ќе се намалува (ќе се смалува растојанието помеѓу двете струи) со оддалечувањето од *pinch* зоната. Ваквата состојба, претставена на слика 5.18, е неодржлива.

Од друга страна, доколку ги спариме струите (3) и (4), тогаш наклонот на топлата струја ќе биде поголем од наклонот на ладната струја, со што погонската сила ќе се зголемува (слика 5.19).



Слика 5.18 Температурен профил на вмрежувањето на струја (1) и (4)



Слика 5.19 Температурен профил на вмрежувањето на струја (3) и (4)

Во согласност со презентираното ограничување, при спарувањето на топлие и ладните струи во HE треба да се задоволат и ограничувањата наметнати од вредностите на  $C_p$ . Ваквото ограничување е математички

## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

формулирано за зоните над и под *pinch* точката, но ограничувањето е идентично и кај двете зони -  $\Delta T \geq \Delta T_{min}$ .

- **Над *pinch***,  $C_{p,H} \leq C_{p,C}$  (топлинскиот капацитет на топлата струја треба да е помал или еднаков на топлинскиот капацитет на ладната струја, со што  $\Delta T \geq \Delta T_{min}$ ).

- **Под *pinch***,  $C_{p,H} \geq C_{p,C}$  (топлинскиот капацитет на топлата струја треба да е поголем или еднаков на топлинскиот капацитет на ладната струја, со што  $\Delta T \geq \Delta T_{min}$ ).

Ваквото ограничување има најголемо значење во регионот блиску до *pinch* зоната, додека подалеку од оваа зона ваквото ограничување може да се занемари – само под услов во работниот температурен опсег да не се наруши  $\Delta T \geq \Delta T_{min}$ . Подалеку од *pinch* зоната можно е вакво занемарување на  $C_p$  ограничувањето, бидејќи расте почетната температурна разлика помеѓу топлата и ладната струја, па крајната разлика на излез од НЕ повторно е поголема од  $\Delta T_{min}$ .

**3) ЛСМ не смее да се користи над *pinch* зоната**, топлиите струи мора да се оладат до  $T_{pinch}$  со топлинска размена во HEN. Иако се избегнува како неекономично решение, употребата на TCM под *pinch* зоната е дозволено (за загревање на ладните струи). Основно правило при спарувањето на струите во НЕ е соодветно вмрежување на топли и ладни струи во студираниот зона (пример, над *pinch*), односно доколку топлата струја е на  $T_{pinch}$ , тогаш и ладната струја треба да е на  $T_{pinch}$ . Во спротивно, ќе се наруши правилото на  $\Delta T_{min}$  ограничувањето.

Возможни дизајн конфигурации за зоната над *pinch* кај разгледуваниот пример се:

Струја (4) ( $C_p = 0,25$ )  $\Leftrightarrow$  Струја (3) ( $C_p = 0,3$ )

Струја (2) ( $C_p = 0,15$ )  $\Leftrightarrow$  Струја (1) ( $C_p = 0,2$ )

Дизајн концепт за зоната под *pinch* кај истиот пример:

Струја (4) ( $C_p = 0,25$ )  $\Leftrightarrow$  Струја (1) ( $C_p = 0,2$ )

**4) Примена на *tick-off* хеуристичкото правило.** Ова е правило на „штиклирање“ на процесните струи во НЕ како основни градбени

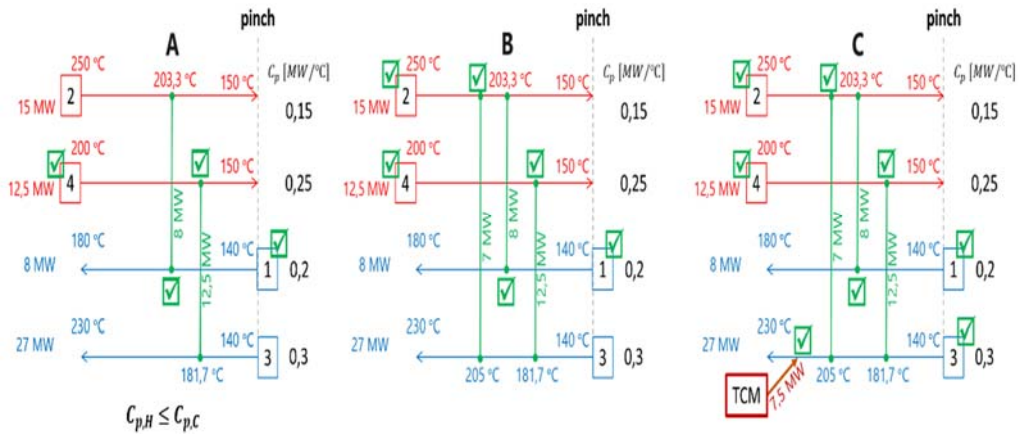
единици на HEN. Во суштина, ова правило претставува концепт на минимизирање на бројот на HE и стремез кон постигнување максимална топлинска размена низ најмал можен број на HE. Односно, при спарување на процесните струи во HE, истиот се димензионира за топлинска размена до целосно постигнување на енергетскиот таргет на онаа од струите која има помала вредност за истиот (до задоволување на потребите од топлина на една од струите).

За „штиклирање“ (отпишување) на една од струите, HE треба да обезбеди топлинска размена еднаква на помалата енергетска вредност (таргет) од двете струи.

Примената на ова правило кај разгледуваниот пример ни го дава минималниот број на топлински изменувачи во двата региони – над *pinch* и под *pinch*.

### Над *pinch* зона

Графичката презентација на примената на ова правило во зоната над *pinch* е дадена на слика 5.20.



Слика 5.20 Примена на *tick-off* правилото кај разгледуваниот пример (над *pinch*)

- Во првата фаза (A), реализирани се две спарувања: струја (2) и струја (1); струја (4) и струја (3). Со овие HE се постигнуваат таргетите на струите (1) и (4) и со тоа овие две струи се „штиклираат“, при што струјата (2) предава само дел од топлината (**8 MW**) на струјата (1), додека струјата

## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

(4) ја предава целата топлина (**12,5 MW**) на струјата (3). Со ваквото спарување остануваат дел од топлината на струјата (2) и дел од потребата за топлина на струјата (3).

- Во втората фаза (Б), со оглед дека сме веќе значително оддалечени од *pinch* зоната, при спарувањето на струите може да го занемариме правилото  $C_{p,H} \leq C_{p,C}$ . Но, и покрај тоа, спарувањето на струјата (2) со (3) го задоволува и овој критериум. Со овој НЕ (**7 MW**) целосно се задоволува таргетот на струјата (2).

- Во третата фаза, преостанува единствено струјата (3) во зоната над *pinch*, чиј енергетски таргет треба да се задоволи. Бидејќи немаме на располагање топли струи, за оваа цел се предвидува НЕ каде се вмрежува ТСМ (пареа) со струјата (3), за обезбедување на преостанатите **7,5 MW** за дозагревање на струјата од 205 до 230°C.

Конечно, синтезата на мрежа од топлински изменувачи во зоната над *pinch* за студираниот пример со 2 топли и 2 ладни струи, резултира со минимален број на 4 НЕ, од кои 3 НЕ се спарувања меѓу процесните струи, а 1 НЕ е спарување на ТСМ со ладна струја. Впрочем и резултатната вредност на количината на потребна топлина за дозагревање на струјата (3) од **7,5 MW** се совпаѓа со претходно утврдената вредност за  $Q_{C,min}$  добиена од табличниот алгоритам за истиот пример.

### Под *pinch* зона

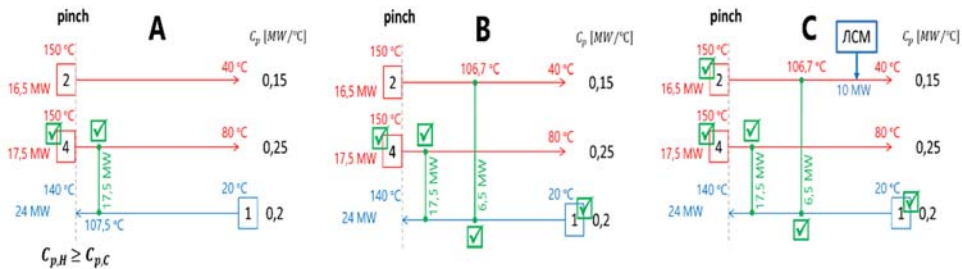
Графичката презентација на примената на ова правило во зоната над *pinch* е дадена на слика 5.21.

Во оваа зона има 2 топли и 1 ладна струја.

- Во првата фаза, единствено можно спарување на процесни струи е НЕ со струја (4) и струја (1), бидејќи сме во *pinch* регионот, а само оваа опција го задоволува правилото  $C_{p,H} \geq C_{p,C}$ . Со овој НЕ (**17,5 MW**) се „штиклира“ струјата (4).

- Во втората фаза, со оглед дека новата температурна вредност на струјата (1) е оддалечена од *pinch* регионот, може да се занемари правилото  $C_{p,H} \geq C_{p,C}$  и да се постави НЕ помеѓу струите (2) и (1), со што (**6,5 MW**) се „штиклира“ и струјата (1).

- Во третата фаза, преостанатото количество на топлина од струјата (2), во отсуство на расположиви ладни струи, може само да се предаде на ЛСМ, за што е потребен уште еден НЕ (10 MW).



Слика 5.21 Примена на *tick-off* правилото кај разгледуваниот пример (под *pinch*)

Повторно, добиената вредност за преостанатото количество топлина, кое се предава на ЛСМ (10 MW) со последниот НЕ, е потврда на претходно добиената вредност за  $Q_{H,min}$  од примената на табличниот алгоритам за идентификација на основните енергетски таргети. Конечно, во зоната под *pinch*, имаме вкупно 3 НЕ, од кои 2 НЕ се помеѓу процесни струи, а 1 НЕ е помеѓу топла струја и ЛСМ.

За целиот разгледуван процес, дизајнираната мрежа на топлински изменувачи се состои од 7 НЕ (4 НЕ над *pinch* и 3 НЕ под *pinch* зоната). Тоа е минималниот број на потребни изменувачи во HEN.

Деталната анализа на дизајнираната HEN, која е во согласност со хеуристичкото *tick-off* правило на „штиклирање“ на процесните струи, го наметнува заклучокот дека примената на ова правило го дава минималниот потребен број на НЕ во согласност со:

$$N_{min} = S - 1$$

- Над *pinch*: има 4 струи и 1 ТСМ, вкупно 5 струи и 4 НЕ;
- Под *pinch*: има 3 струи и 1 ЛСМ, вкупно 4 струи и 3 НЕ.

Основниот преглед на интегралната примена на *pinch* методот за топлинска интеграција на технолошките процеси, може да се дефинира во 5 чекори:

## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

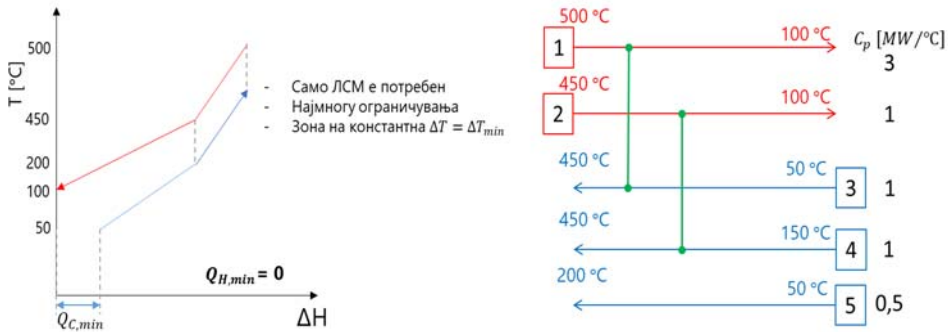
1. Се дели процесот кај *pinch* точката – над *pinch* и под *pinch* зони;
2. Дизајнот на HEN во секоја од зоните почнува од *pinch* точката, па се оддалечуваме (во однос на температурните вредности);
3. Температурното ограничување бара запазување на  $C_p$  вредностите во *pinch* зоната.
4. Количеството на разменета топлина (*heat load*) во секој HE се определува со штиклирање на една од струите;
5. Температурното оддалечување од *pinch* зоната обезбедува поголема слобода на спарување на процесните струи ( $C_p$  ограничувањата не важат).

### 5) Специјални (*Threshold*) проблеми при дизајнот на HEN

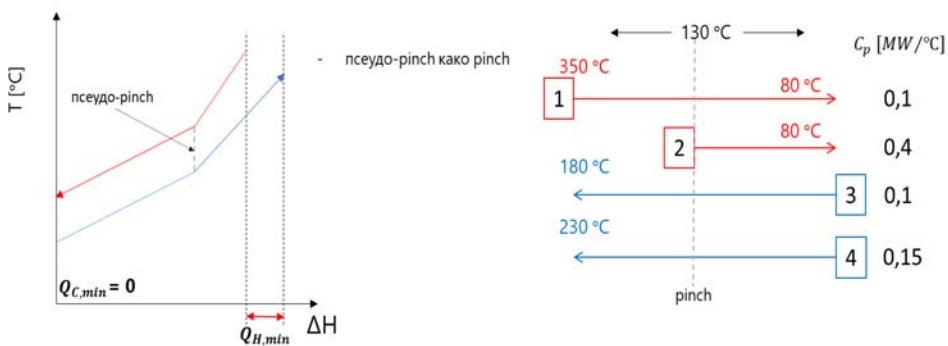
Во случаи каде е така дизајнирана HEN да е потребен само еден сервисен медиум, и нема *pinch* точка кај тие проблеми. Бидејќи кај вообичаените системи се јавува *pinch* точка, кај овие специјални проблеми се наметнува прашањето – од каде започнува дизајнот на потребната HEN во отсуство на *pinch*? Ваков проблем е скициран на слика 5.22.

Примерот од скицата (слика 5.22) презентира проекција на топлински профил на топли и ладни струи, каде нема *pinch* точка и нема потреба од загревање на ладни струи со TCM, односно  $Q_{H,min} = 0$ . Ваквите системи имаат најмногу ограничувања од аспект на димензионирање на HE за обезбедување топлинска размена при константна вредност на  $\Delta T_{min}$ . Популацијата на струи со предложените спарувања на топли и ладни струи за студираниот проблем е претставена на десната половина од слика 5.22.

Друг пример на специјални случаи при дизајнот на ефикасна HEN е примерот од слика 5.23, на кој графички е претставен систем без потреба од ЛСМ, односно  $Q_{C,min} = 0$ . Кај овој случај, имаме псевдо-*pinch* точка, која од аспект на имплементација на правилата и ограничувањата за димензионирање на HE во *pinch* регионот ја разгледуваме како стандардна *pinch* точка.



Слика 5.22 Систем без *pinch* точка и без потреба од TCM



Слика 5.23 Систем без потреба од ЛСМ и псевдо-*pinch* точка

Методологијата на пристапот кон успешен дизајн на HEN кај вакви проблеми е разгледување на псевдо-*pinch* точката како *pinch* точка.

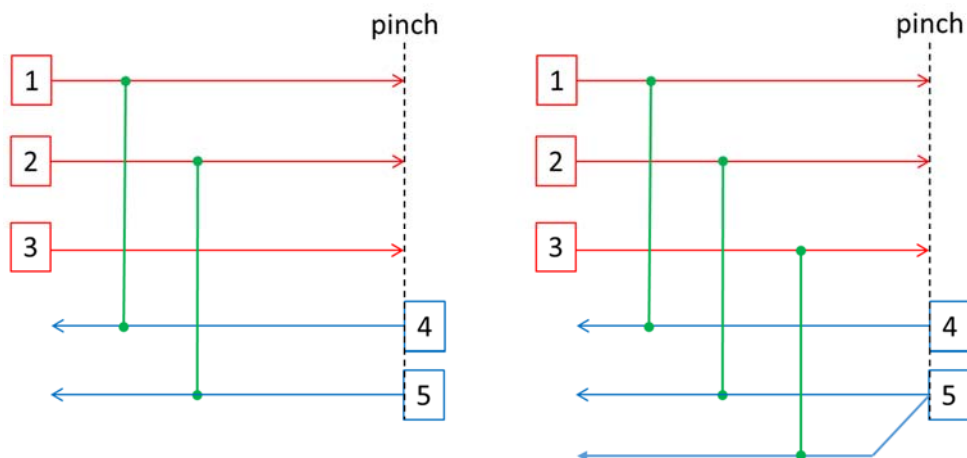
## 6) Разделување на процесните струи

Во некои случаи карактеристиките на топлиите и ладните процесни струи не дозволуваат едноставно нивно спарување во поединечни топлински изменувачи, поради нарушувањето на некој од основните, веќе апсолвирани, критериуми за дизајн на HE во и вон *pinch* зоната. Кај ваквите случаи, неопходно е воведување на модифицираниот пристап за дизајн – *Split Stream Design*. Овој концепт се базира на можноста за физичко разделување на токот на одредена процесна струја во две или повеќе „гранки“, имајќи ја предвид и константната вредност на термодинамичките карактеристики на струите и гранките кои произлегуваат од нив. Притоа, не постојат ограничувања во однос на природата на струите кои се разделуваат (топли или ладни струи), како и регионот



## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

во однос на *pinch* точката (над или под *pinch*). Таков пример, кој ја демонстрира неопходноста на примената на *Split Stream Design* концептот, е скициран на слика 5.24.



**Слика 5.24** Популација на струи кај систем со 5 струи (лево) и разделување на ладна струја (5) во 2 гранки (десно)

Прикажаниот пример на пет процесни струи продуцира сериозни недостатоци во однос на можноста за едноставна примена на правилата и ограничувањата за димензионирање на HEN. Се работи за нарушување барем на едно од основните правила за топлинска интеграција на технолошки системи, односно кај основниот приказ (лево) имаме нарушување на правилото според кое секоја топла струја треба да биде редуцирана до под *pinch* вредноста на температурниот профил за да може да се воведат ЛСМ (или не смее да се примени ЛСМ над *pinch* точката). Доколку не постои спарување на која било од топлите струи (струја 3 во случајот) со ладна струја, не евозможен дизајн на HEN и нејзина интеграција. За надминување на ваквата состојба се разгледува можноста за разделување на некоја од ладните струи на две резултантни гранки, со што и струјата 3 би била спарена со една од гранките во HE. Предложениот решение е прикажано на слика 5.24 (десно).

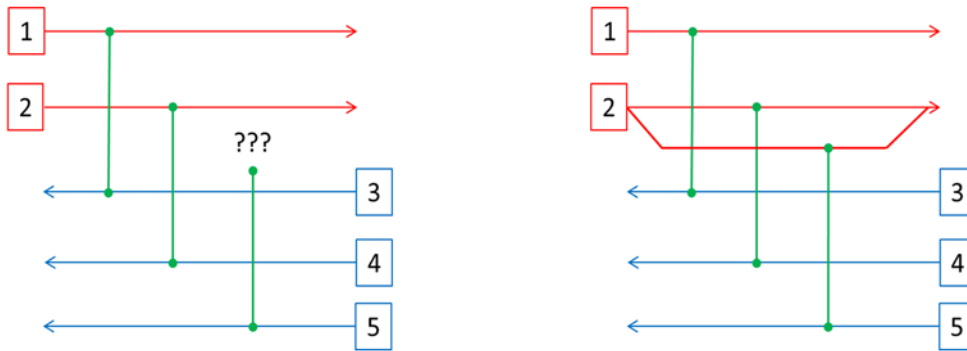
Ваквата состојба, со наметнување на потребата од *Split Stream Design* пристапот, укажува на дополнително правило, односно **критериум за дизајн на HEN**:

$$S_H \leq S_C \text{ (над } pinch)$$

$$S_C \leq S_H \text{ (под } pinch)$$

Интерпретацијата на овој критериум е дека за успешна топлинска интеграција на процес, бројот на топли струи,  $S_H$ , (заедно со можни гранки) треба да е помал или еднаков на бројот на ладни струи,  $S_C$  (заедно со можни гранки) за над *pinch* зоната. Од друга страна, за под *pinch* зоната важи спротивниот критериум: бројот на ладни струи,  $S_C$ , треба да е помал или еднаков на бројот на топли струи,  $S_H$ .

Со цел анализа на случај од под *pinch* зоната, каде е неопходно разделување на некоја од топлите струи е даден графички пример на слика 5.25.



**Слика 5.25** Популација на струи кај систем со 5 струи (лево) и разделување на топла струја (2) во 2 гранки (десно)

Кај примерот од слика 5.25 е даден систем со 5 струи, од кои 2 топли и 3 ладни. Евидентно е дека не е возможно спарување на сите топли и ладни струи без нарушување на  $\Delta T_{min}$  критериумот. Единствено прифатливо решение, во согласност со можноста за *Split Stream Design* пристапот, е разделување на струјата (2) во две резултантни гранки, со што ќе се добие систем од 3 HE за секоја од ладните и топлите струи, а во согласност со ограничувањето за број на струи во регионите над и под *pinch*.

Разделување на струи поради нееднаквост на потребните вредности на  $C_p$

## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

Разделувањето на процесните струи, односно примената на *Split Stream Design* концептот произлегува од две различни нарушувања на основните принципи за дизајн на ефикасна HEN:

- Нееднаквост во бројот на струите и
- Нееднаквост во вредностите на топлинските капацитети.

Првиот случај беше анализиран и елабориран во претходниот дел од ова поглавје. Вториот тип на ограничувања кои се надминуваат со разделување на процесните струи се базира на можната неодржливост на спарувањето на процесните струи поради несогласување со ограничувањата во топлинските капацитети над и под *pinch* точката, особено во регионот околу *pinch* зоната. Ваквиот тип на проблеми, во суштина, продуцира дополнителен степен на слобода при дизајнот на систем за топлинска интеграција, бидејќи разделувањето на струите во однос на вкупниот топлински капацитет се постигнува со определување на масениот проток на секоја од гранките, додека специфичниот топлински капацитет на секоја струја и на резултантните гранки е константна вредност. Затоа, се потсетуваме на зависноста која се однесува на топлинските карактеристики на секоја од струите:

$$C_p = \dot{m} \cdot \tilde{c}_p$$

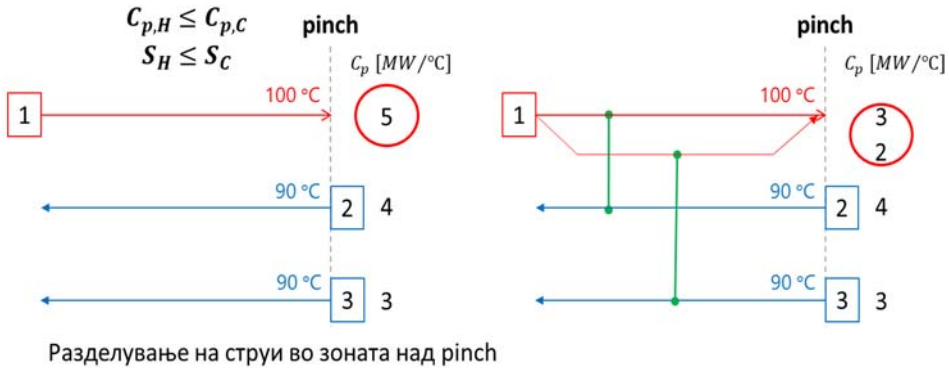
каде:

$C_p$  – топлински капацитет на струјата [ $W/^\circ C$ ];

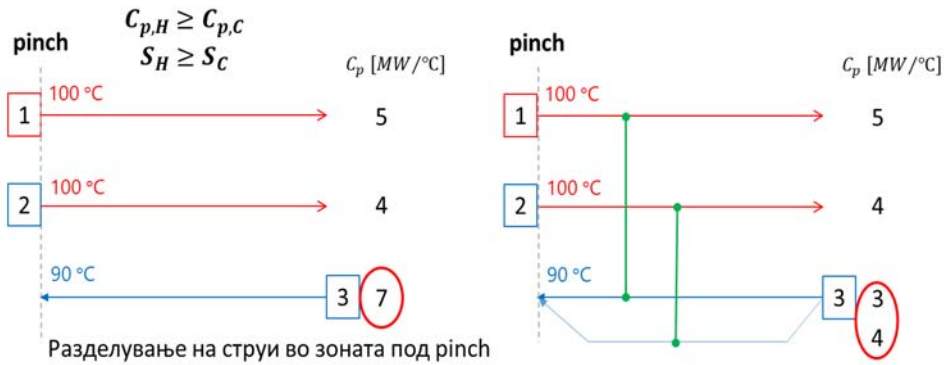
$\dot{m}$  – масен проток на струјата [ $kg/s$ ];

$\tilde{c}_p$  – специфичен топлински капацитет на струјата [ $J/kg\ ^\circ C$ ].

Евидентно е дека  $\dot{m}$  – масен проток на струјата е параметарот кој можеме да го менуваме како дополнителен степен на слобода во димензионирањето на HEN преку негово разделување на две или повеќе струи, додека  $\tilde{c}_p$  е термодинамички параметар со константна вредност, кој зависи единствено од карактеристиките на струјата, а не и од нејзиниот проток. Во таа насока, со разделувањето на  $\dot{m}$  во гранки се постигнува и „разделување“ на  $C_p$  во гранки. Таков пример е даден на сликите 5.26 и 5.27.



**Слика 5.26** Синтеза на HEN со разделување на процесни струи – Split Stream Design (разделување на топли струи)



**Слика 5.27** Синтеза на HEN со разделување на процесни струи – Split Stream Design (разделување на ладни струи)

Можноста за разделување на процесните струи при топлинската интеграција на анализираниите процеси дава дополнителен степен на слобода во пресметките на бројот на топлински изменувачи и целокупниот дизајн на ефикасна мрежа од топлински изменувачи (HEN). Примената на *Split Stream Design* концептот се базира на фиксирање на количеството топлина за размена во двата HE (кај секоја гранка), како и средната логаритамска вредност на температурната разлика (погонската сила), па со модифицирање на протоците во двете гранки ( $\dot{m}_1$  и  $\dot{m}_2$ ) се дефинира оптималниот дизајн на HE, во однос на конечната површина за топлинска размена. Од тој аспект, димензионирањето на поединечните HE е проследено со консекутивна, паралелна економска евалуација на единиците во мрежата, HEN, за различни протоци во секоја од гранките.

## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

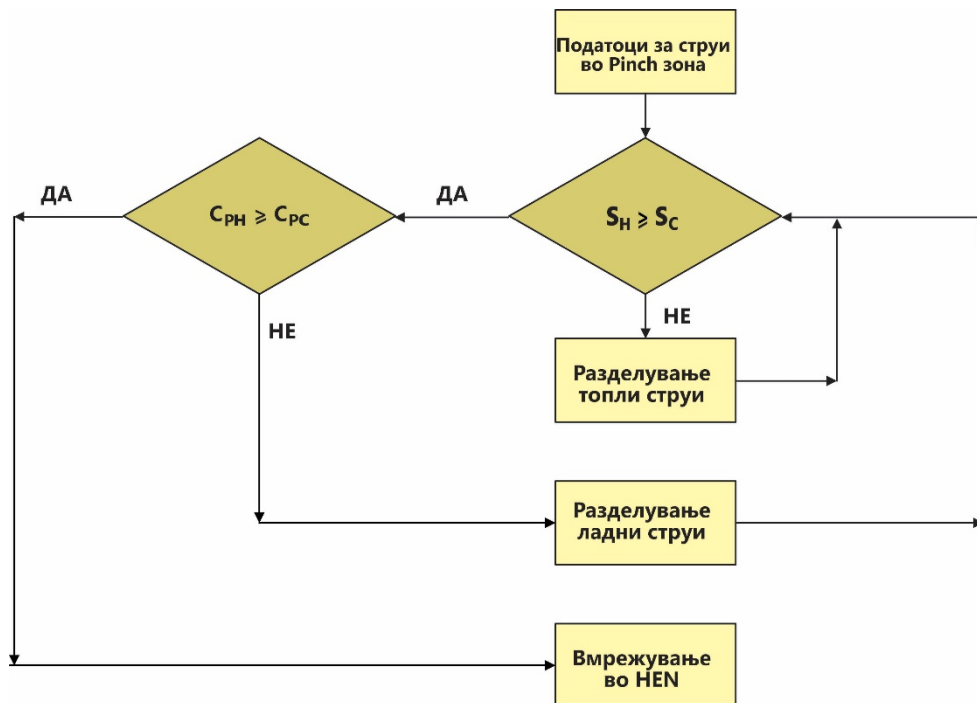
Сумарниот преглед на имплементацијата на концептот на *Split Stream Design* е резултат на нарушување на некое од правилата за регионите под и над *pinch*:

- Над *pinch*:  $C_{p,H} \leq C_{p,C}$  и  $S_H \leq S_C$ ;
- Под *pinch*:  $C_{p,C} \leq C_{p,H}$  и  $S_C \leq S_H$ .



Слика 5.28 Алгоритам за *Split Stream Design* во над *pinch* регионот

Принципиелното следење на правилата и ограничувањата при решавањето на проблемите на топлинска интеграција на технолошки процеси ги претпоставува основните принципи на *pinch* методот, како и ограничувањата утврдени за презентираниите специјални проблеми за успешен дизајн на ефикасна HEN. Со таа цел е развиен алгоритам за примена на *pinch* методот во над *pinch* и под *pinch* зоната (дадени на сликите 5.28 и 5.29).



Слика 5.29 Алгоритам за Split Stream Design во под pinch регионот

## 5.6 Задачи

Податоците за струите во еден процес (тип, влезна и излезна температура, специфичен топлински капацитет и коефициент на пренос на топлина) се дадени табеларно:

Струја	Тип	$T_{in}$ [K]	$T_{out}$ [K]	$C_p$ $\left[\frac{MW}{^\circ C}\right]$	$h$ $\left[\frac{W}{m^2 \cdot ^\circ C}\right]$
1	Н	400	60	0,3	600
2	Н	210	40	0,5	1000
3	С	20	160	0,4	800
4	С	100	300	0,6	800
5 – TCM	Пареа	240	239	-	3000
6 – ЛСМ	Вода	20	30	-	1000

## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

Потребно е со примена на табличен алгоритам за топлинска интеграција да се определат:

1) Енергетските таргети (потреби) на процесот за ладење/загревање ( $Q_{C,min}, Q_{H,min}$ ) за  $\Delta T_{min} = 10\text{ }^\circ\text{C}$ . Дополнително, за дадена влезна и излезна температура на ТСМ и ЛСМ да се дефинираат вредностите на  $C_p$ .

2) Да се дефинираат вредностите на истите параметри ( $Q_{C,min}, Q_{H,min}, C_{p,ТСМ}, C_{p,ЛСМ}$ ) како во претходниот дел, со нова вредност за  $\Delta T_{min} = 20\text{ }^\circ\text{C}$ .

3) Да се скицираат композитните криви (КК) за топлите и ладните струи во Т-Н дијаграмот и да се одреди  $T_{PINCH}$  за  $\Delta T_{min} = 20\text{ }^\circ\text{C}$ .

### Решение:

1) Прв чекор во решавање на поставениот проблем е поместување на температурните вредности за  $\Delta T_{min}/2$ , при што во согласност со правилата за интеграција, температурните вредности на топлите струи се намалуваат, а на ладните се зголемуваат за истата вредност:

Табличен алгоритам и популација на струи за  $\Delta T_{min} = 10\text{ }^\circ\text{C}$

Струја	Тип	$T_{in}$ [K]	$T_{out}$ [K]	$C_p$ [ $\frac{MW}{^\circ C}$ ]	$h$ [ $\frac{MW}{m^2 \cdot ^\circ C}$ ]	$T_{in}^*$ [K]	$T_{out}^*$ [K]
1	Н	400	60	0,3	0,0006	395	55
2	Н	210	40	0,5	0,001	205	35
3	С	20	160	0,4	0,0008	25	165
4	С	100	300	0,6	0,0008	105	305
5 ТСМ	Пареа	240	239	-	0,003		
6 ЛСМ	Вода	20	30	-	0,001		

Ги имаме неопходните податоци за конструкција на дијаграмот на популација на струи:

## Стефан Кувенциев Анализа и синтеза на процеси

$T_i$		$\Delta T_i$	$\sum C_{p,c} - \sum C_{p,h}$	$\Delta H_i$	$\Delta H_{cumul} = 0 - \Delta H_i$	+ TCM $+7Q_{H,min}$
395	1	90	-0,3	-27	27	34
305	2	100	0,3	30	-3	4
205		40	-0,2	-8	5	12
165		60	0,2	12	-7	0 (PINCH)
105	4	50	-0,4	-20	13	20
55		20	-0,1	-2	15	22
35		10	0,4	4	11	18 $Q_{C,min}$
25	3					

Во согласност со димензионираната популација на струи, дефинирани се минималните потреби за загревање на ладните струи и ладење на топлите струи, кои се реализираат со сервисни медиуми.

$$Q_{H,min} = 7 \text{ MW} \text{ и } Q_{C,min} = 18 \text{ MW}$$

Како дел од пресметките, треба да се определат специфичните топлински капацитети на сервисните медиуми,  $C_{p,TCM}$ ,  $C_{p,ЛСМ}$ .

За TCM ( $240^\circ\text{C} \rightarrow 239^\circ\text{C}$ ):

$$Q_{H,min} = C_{p,TCM} \cdot \Delta T$$

$$C_{p,TCM} = \frac{7 \text{ MW}}{1^\circ\text{C}} = 7 \text{ MW}/^\circ\text{C}$$

За ЛСМ ( $30^\circ\text{C} \rightarrow 20^\circ\text{C}$ ):

$$Q_{C,min} = C_{p,ЛСМ} \cdot \Delta T$$

$$C_{p,ЛСМ} = \frac{18 \text{ MW}}{10^\circ\text{C}} = 1,8 \text{ MW}/^\circ\text{C}$$

2) Дефинирањето на енергетските потреби на процесот во согласност со претходниот дел од задачата, го повторуваме за зголемена вредност на  $\Delta T_{min}$ .



## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

Табличен алгоритам и популација на струи за  $\Delta T_{min} = 20\text{ }^\circ\text{C}$

Струја	Тип	$T_{in}$ [K]	$T_{out}$ [K]	$C_p$ [ $\frac{MW}{^\circ C}$ ]	$h$ [ $\frac{MW}{m^2^\circ C}$ ]	$T_{in}^*$ [K]	$T_{out}^*$ [K]
1	H	400	60	0,3	0,0006	390	50
2	H	210	40	0,5	0,001	200	30
3	C	20	160	0,4	0,0008	30	170
4	C	100	300	0,6	0,0008	110	310
5 TCM	Пареа	240	239	-	0,003		
6 ЛСМ	Вода	20	30	-	0,001		

Ги имаме неопходните податоци за конструкција на дијаграмот на популација на струи:

$T_i$		$\Delta T_i$	$\sum C_{p,C} - \sum C_{p,H}$	$\Delta H_i$	$\Delta H_{cumul} = 0 - \Delta H_i$	+ TCM <b>+ 15 <math>Q_{H,min}</math></b>
390	1	80	-0,3	-24	24	39
310	2	110	0,3	33	-9	6
200	3	30	-0,2	-6	-3	12
170	4	60	0,2	12	<b>- 15</b>	<b>0 (PINCH)</b>
110		60	-0,4	-24	9	24
50		20	-0,1	-2	11	<b>26 <math>Q_{C,min}</math></b>
30						

Во согласност со новиот услов на задачата, дефинирани се минималните потреби за загревање на ладните струи и ладење на топлите струи, кои се реализираат со сервисни медиуми, како и нивните специфични топлински капацитети.

## Стефан Кувенциев Анализа и синтеза на процеси

$$Q_{H,min} = 15 \text{ MW} \text{ и } Q_{C,min} = 26 \text{ MW} ;$$

$$C_{p,TСМ} = \frac{15 \text{ MW}}{1^\circ\text{C}} = 15 \text{ MW}/^\circ\text{C} ; C_{p,ЛСМ} = \frac{26 \text{ MW}}{10^\circ\text{C}} = 2,6 \text{ MW}/^\circ\text{C}$$

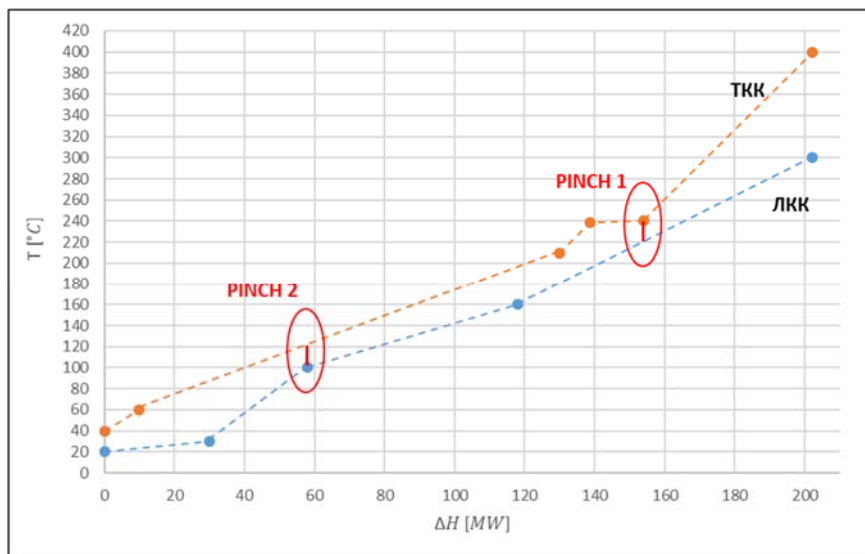
3) Скицирање на ЛКК (ладна композитна крива) и ТКК (топла композитна крива) за процесот во кој имаме 3 топли и 3 ладни струи (заедно со ТСМ и ЛСМ), при  $\Delta T_{min} = 20^\circ\text{C}$ .

Конструкцијата на ладната композитна крива и топлата композитна крива во Т – Н дијаграмот се базира на претходно мапирање на популацијата на топли и ладни струи, вклучувајќи ги и топлиите и ладните сервисни медиуми. Како појдовен податок ги користиме вредностите на специфичниот топлински капацитет на ладниот и топлиот сервисен медиум, определени за случајот  $\Delta T_{min} = 20^\circ\text{C}$ ,  $C_{p,TСМ} = 15 \text{ MW}/^\circ\text{C}$  и  $C_{p,ЛСМ} = 2,6 \text{ MW}/^\circ\text{C}$ .

	Популација на струи	$\Delta H_C$	Популација на струи	$\Delta H_H$
400			1	$154 + 0,3 \cdot 160 = 202$
300		$118 + (0,6 \cdot 140) = 202$		
240			0,3 TСМ	$138,7 + (0,3 + 15)1 = 154$
239				$130 + (0,3 \cdot 29) = 138,7$
210			2	$10 + (0,5 + 0,3) \cdot 150 = 130$
160				
100		$58 + (0,4 + 0,6) \cdot 60 = 118$		
60	4	$30 + (0,4 \cdot 70) = 58$		$20 \cdot 0,5 = 10$
40				0
30	0,4	$(2,6 + 0,4) \cdot 10 = 30$		
20	3 ЛСМ	0		

Популацијата на ладни и топли струи ни овозможува да ги конструираме ладната и топлата КК.

## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси



**Слика 5.30** T-H дијаграм на композитните криви на процесот за  $\Delta T_{min} = 20 \text{ }^\circ\text{C}$

Од презентираниот T-H дијаграм на композитните криви е евидентно постоење на 2 PINCH точки:

PINCH 1

$$T_H = 120 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$T_C = 100 \text{ }^\circ\text{C}$$

PINCH 2

$$T_H = 240 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$T_C = 220 \text{ }^\circ\text{C}$$

### Задача 4.2

За проблемот од претходниот пример, поставен за  $\Delta T_{min} = 10 \text{ }^\circ\text{C}$ , да се определи потребната површина за топлинска размена, во согласност со формулата за пресметка:

$$A_K = \frac{1}{\Delta T_{lm}} \left( \sum_i^{Hot} \frac{q_i}{h_i} + \sum_j^{Cold} \frac{q_j}{h_j} \right),$$

каде што:

$q_i$  – топлина на топлата струја  $i$  во енталпискиот интервал  $K$ ;

$q_j$  – топлинска потреба на ладна струја  $j$  во енталпискиот интервал  $K$ ;

## Стефан Кувенциев Анализа и синтеза на процеси

$h_i, h_j$  – коефициенти на конвективен пренос за топла и ладна струја.

Дополнително, да се дефинира:

- 1) скица на енталписки интервали кај топли и ладни струи (КК – балансирани) и
- 2) развој на табела за површини на пренос на топлина за топлите и ладните струи базирана на  $\Delta T_{ln}$ , како и соодветната површина на топлинските изменувачи (HE).

Решение:

Кај овие пресметки поврзани со популацијата на струи ги користиме претходно дефинираните вредности определени за случајот  $\Delta T_{min} = 10\text{ }^\circ\text{C}$ ,  $C_{p,TCM} = 7\text{ MW}/^\circ\text{C}$  и  $C_{p,ЛСМ} = 1,8\text{ MW}/^\circ\text{C}$ .

	Популација на струи	$\Delta H_C$	Популација на струи	$\Delta H_H$
			1	$146 + 0,3 \cdot 160 = 194$
400				
300		$110 + (0,6 \cdot 140) = 194$		
240			0,3 TCM	$138,7 + (0,3 + 7)1 = 146$
239				$130 + (0,3 \cdot 29) = 138,7$
210			2	$10 + (0,5 + 0,3) \cdot 150 = 130$
160				
100		$50 + (0,4 + 0,6) \cdot 60 = 110$	0,5	
60	4	$22 + (0,4 \cdot 70) = 50$		$20 \cdot 0,5 = 10$
40				0
30	0,4	$(1,8 + 0,4) \cdot 10 = 22$		
20		0		
	3 ЛСМ			



## Стефан Кувенциев Анализа и синтеза на процеси

се примени зависноста наведена во условот на задачата за секој од подинтервалите.

	Топли струи ( $\sum \frac{q_i}{h_i}$ )	Ладни струи ( $\sum \frac{q_j}{h_j}$ )	$\Delta T_{lm}$	$A_K [m^2]$
1	$\frac{160 \cdot 0,3}{0,0006} = 80000$	$\frac{80 \cdot 0,6}{0,0008} = 60000$	$\frac{(400-300)-(240-220)}{\ln \frac{(400-300)}{(240-220)}} = 49,7$	2817
2	$\frac{1 \cdot 0,3}{0,0006} + \frac{1 \cdot 7}{0,003} = 2833$	$\frac{12 \cdot 0,6}{0,0008} = 9000$	$\frac{(240-220)-(239-208)}{\ln \frac{(240-220)}{(239-208)}} = 25,1$	471,4
3	$\frac{29 \cdot 0,3}{0,0006} = 14500$	$\frac{16 \cdot 0,6}{0,0008} = 12000$	$\frac{(239-208)-(210-192)}{\ln \frac{(239-208)}{(210-192)}} = 23,9$	1108
4	$\frac{30 \cdot 0,3}{0,0006} + \frac{30 \cdot 0,5}{0,001} = 30000$	$\frac{32 \cdot 0,6}{0,0008} = 24000$	$\frac{(210-192)-(180-160)}{\ln \frac{(210-192)}{(180-160)}} = 18,98$	2844,7
5	$\frac{70 \cdot 0,3}{0,0006} + \frac{70 \cdot 0,5}{0,001} = 70000$	$\frac{60 \cdot 0,4}{0,0008} + \frac{60 \cdot 0,6}{0,0008} = 75000$	$\frac{(180-160)-(110-100)}{\ln \frac{(180-160)}{(110-100)}} = 14,4$	10050,6
6	$\frac{34 \cdot 0,3}{0,0006} + \frac{34 \cdot 0,5}{0,001} = 34000$	$\frac{70 \cdot 0,4}{0,0008} = 35000$	$\frac{(110-100)-(76-30)}{\ln \frac{(110-100)}{(76-30)}} = 23,6$	2924,9
7	$\frac{16 \cdot 0,3}{0,0006} + \frac{16 \cdot 0,5}{0,001} = 16000$	$\frac{6 \cdot 0,4}{0,0008} + \frac{6 \cdot 1,8}{0,001} = 13800$	$\frac{(76-30)-(60-24)}{\ln \frac{(76-30)}{(60-24)}} = 40,8$	730,5
8	$\frac{20 \cdot 0,5}{0,001} = 10000$	$\frac{4 \cdot 0,4}{0,0008} + \frac{60 \cdot 1,8}{0,001} = 9200$	$\frac{(60-24)-(40-20)}{\ln \frac{(60-24)}{(40-20)}} = 27,22$	705,3

Вкупната површина за топлинска размена се дефинира како сума од пресметаните поединечни површини за топлинска размена на енталписките подинтервали.

$$A = \sum A_K = 21652,4 \text{ m}^2$$

### Задача 4.3

Да се димензионира HEN (мрежа од топлински изменувачи) за процесни струи, чии топлински карактеристики се дадени табеларно. Да се определат  $T_{pinch}$ ,  $Q_{H,min}$ ,  $Q_{C,min}$  за  $\Delta T_{min} = 20\text{ }^\circ\text{C}$ . Дизајнираната HEN да биде со  $N_{min}$  во согласност со *tick-off* правилото, да се дефинира топлинската размена кај секој од HE, како и работните температури. Дополнително, да се презентира количината на  $Q_{размена}$ ,  $\Delta T_{lm}$ ,  $U$ ,  $A$  – за секој HE.

	$T_{in}$ [ $^\circ\text{C}$ ]	$T_{out}$ [ $^\circ\text{C}$ ]	$C_p$ [ $\text{MW}/^\circ\text{C}$ ]	$h$ [ $\text{W}/\text{m}^2\text{ }^\circ\text{C}$ ]	$T_{in}^*$ [ $^\circ\text{C}$ ]	$T_{out}^*$ [ $^\circ\text{C}$ ]
H1	720	320	0,045	2000	710	310
H2	520	220	0,04	1500	510	210
H3	600	320	0,05	1000	590	310
H4	520	353	0,02	1200	510	343
C1	300	900	0,043	1200	310	910
C2	200	550	0,02	1000	210	560
C3	300	560	0,0667	500	310	570
TSM	1200	1000	-	3000		
ЛСМ	100	200	-	1000		

#### Решение:

Пристапот кон решавање на поставениот проблем се базира на воведување неколку искусвени претпоставки, кои се однесуваат на понатамошните пресметки.

## Стефан Кувенциев Анализа и синтеза на процеси

- 1 претпоставка: количеството топлина пренесено по пат на кондукција е значително помало од количеството топлина разменето по пат на конвекција,  $\frac{1}{U} = \frac{1}{h_{in}} + \frac{1}{h_{out}}$ .

- 2 претпоставка: коефициентот на конвективен пренос на топлина на струите има константна вредност при разделување на струите – секоја од гранките има ист коефициент како и оригиналната струја.

Поместувањето на вредностите на влезна излезна температура изнесува  $\frac{\Delta T_{min}}{2} = 10\text{ }^\circ\text{C}$ , што веќе е презентирano како модифицирани вредности за температурите во последните 2 колони од табеларниот приказ од условот на задачата. Потребно е да се мапира популацијата на струи, а оваа постапка се изведува графички:

$T_i$	$\Delta T_i$	$\frac{\sum C_{p,C} - \sum C_{p,H}}{\sum C_{p,H}}$	$\Delta H_i$	$\Delta H_{cumul} = 0 - \Delta H_i$	+ TCM
910					<b>+9,2</b>
710	200	0,043	8,6	-8,6	0,6
590	120	-0,002	-0,24	-8,24	0,84
570	20	-0,052	-1,04	-7,32	1,88
560	10	0,0147	0,147	-7,47	1,73
510	50	0,0347	1,735	-9,2	<b>0 (PINCH)</b>
343	167	-0,0253	-4,2251	-4,98	4,22
310	33	-0,0053	-0,1749	-4,8	4,4
210	100	-0,02	-2	-2,8	<b>6,4</b>

Во согласност со конструираниот дијаграм на популација на струи се дефинирани основните параметри во однос на димензионирањето на HEN:  $T_{pinch}^* = 510\text{ }^\circ\text{C}$  ( $T_{pinch}^H = 520\text{ }^\circ\text{C}$ ,  $T_{pinch}^C = 500\text{ }^\circ\text{C}$ ), и минималните енергетски потреби обезбедени од сервисни медиуми:  $Q_{H,min} = 9,2\text{ MW}$  и  $Q_{C,min} = 6,4\text{ MW}$ .



## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

### Дизајн на мрежа на топлински изменувачи - HEN

Мрежата на топлински изменувачи над и под *pinch* зоната е презентирани графички, но имплементацијата на правилата за вмрежување на процесните струи, како и воведувањето на сервисни медиуми за задоволување на енергетските (топлинските) потреби на процесот, е изведена за зоните над и под *pinch* зоната.

Над *pinch* зоната: во оваа зона имаме 2 топли и 3 ладни струи

	Вишок на топлина ( $\Delta H$ )			Недостиг на топлина ( $\Delta H$ )			
	$C_p$ [MW/°C]	$\Delta T$ [°C]	$\Delta H$ [MW]	$C_p$ [MW/°C]	$\Delta T$ [°C]	$\Delta H$ [MW]	
H1	0,045	200	9	C1	0,043	400	17,2
H3	0,05	80	4	C2	0,02	50	1
				C3	0,0667	60	4

Во оваа зона, основни ограничувања за спарување на топлите и ладните струи во топлински изменувачи се:

- $C_{p,H} \leq C_{p,C}$  (вкупниот топлински проток на топлата струја да е помал или еднаков на топлинскиот проток на ладната струја), каде што:  $\dot{c}_{p,Hi}$  – специфичен топлински капацитет на струја  $i$  и  $Q_{m,i}$  – масен проток на струјата  $i$ .

$$C_{p,H} = \dot{c}_{p,Hi} \cdot Q_{m,i}$$

- $S_H \leq S_C$  – бројот на топли струи над *pinch* зоната треба да е помал или еднаков на бројот на ладни струи.

Вмрежувањето на струите во топлински изменувачи над *pinch* зоната, кое се изведува во согласност со наведените ограничувања, е следно:

- Струјата H3 се спарува (вмрежува) со струјата C3, при што топлината од H3 целосно ја задоволува потребата од топлина на C3 (двете струи се штиклираат – топлински изменувач HE1) .

- Струјата H1 не може да се вмрежи со C1 или C2 поради првото ограничување, но не може да се вмрежи ни со струјата C3, бидејќи

$\Delta H_{H1} > \Delta H_{C3}$ . Затоа, струјата H1 треба да се раздели (манипулација со масениот проток на двете гранки на струјата), а двете гранки ќе ги поврземе со C1 и C2. Едната од гранките е со  $C_{p,H1'} = 0,005$  и  $\Delta H_{H1'} = 1 MW$ , и ја вмрежуваме со C2 (H1' и C2, се штиклираат – топлински изменувач HE2), додека втората е со  $C_{p,H1''} = 0,04$  и  $\Delta H_{H1''} = 8 MW$ , и ја вмрежуваме со C1 (H1'' и C1, каде H1'' се штиклира – топлински изменувач HE3). Но, при второто спарување, потребата од топлина кај струјата C1 е поголема од количината на топлина која ќе ја предаде струјата H1, па неопходно е воведување TCM за целосна топлинска интеграција во оваа зона (топлински изменувач HE4).

- Излезната температура на струјата C1 од HE3 се пресметува врз база на разменетото количество топлина со топлата струја H1''.

$$\Delta H = C_{p,H1''}(T_{C2,из} - 500)$$

$$8 = 0,043 \cdot (T_{C2,из} - 500)$$

$$T_{C2,из} = 686 \text{ } ^\circ\text{C}$$

- Струјата C1 треба да се загрее од  $686 \text{ } ^\circ\text{C}$  до  $900 \text{ } ^\circ\text{C}$  со TCM (топол сервисен медиум) кој ќе обезбеди  $\Delta H = 9,2 MW$ .

Во согласност со изведеното вмрежување на струите над *pinch* зоната имаме вкупно 4 HE (топлински изменувачи), од кои 3 се меѓу процесните струи, а 1 е меѓу процесна струја и TCM.

Под *pinch* зоната: во оваа зона имаме 4 топли и 3 ладни струи

	Вишок на топлина ( $\Delta H$ )			Недостиг на топлина ( $\Delta H$ )			
	Cp [MW/°C]	$\Delta T$ [°C]	$\Delta H$ [MW]	Cp [MW/°C]	$\Delta T$ [°C]	$\Delta H$ MW]	
H1	0,045	200	9	C1	0,043	200	8,6
H2	0,04	300	12	C2	0,02	300	6
H3	0,05	200	10	C3	0,0667	200	13,34
H4	0,02	167	3,34				

## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси

Во оваа зона основни ограничувања за спарување на топлите и ладните струи во топлински изменувачи се:

- $C_{P,C} \leq C_{P,H_i}$
- $S_C \leq S_H$ .

Вмрежувањето на струите во топлински изменувачи под *pinch* зоната, кое се изведува во согласност со наведените ограничувања, е следно:

- Н1 се спарува со С1 (топлински изменувач HE8). Излезната температура на струјата Н1 од HE5 се пресметува:

$$\Delta H = C_{P,H1}(520 - T_{H1,из})$$

$$8,6 = 0,045 \cdot (520 - T_{H1,из})$$

$$T_{H1,из} = 329 \text{ }^\circ\text{C}$$

- кај струјата Н1 остануваат за измена уште  $0,4 \text{ MW}$ , за што е неопходен ЛСМ (ладен сервисен медиум - топлински изменувач HE10).

- Струите Н3 и Н4 имаат заедно  $13,34 \text{ MW}$ , што кореспондира со потребата од топлина на струјата С3. Но, струјата С3 има повисока вредност за  $C_{P,C3}$ , па потребно е да се подели на две гранки, но така што:  $C_{P,C3'} = 0,05 \text{ MW}/^\circ\text{C}$  и  $C_{P,C3''} = 0,0167 \text{ MW}/^\circ\text{C}$ . Со ваквото решение се овозможува вмрежување на Н3 со С3' (топлински изменувач HE5) и Н4 со С3'' (топлински изменувач HE7). Со тоа се задоволуваат целосно енергетските потреби на струите С3 (двете гранки) и Н3 и Н4 (се штиклираат сите три струи).

- Последното вмрежување во оваа зона (под *pinch*) е помеѓу струите Н2 и С2 (топлински изменувач HE6). Со оглед дека струјата Н2 има  $12 \text{ MW}$ , додека струјата С2 има потреба од само  $6 \text{ MW}$ , излезната температура на струјата Н2 од HE9 се пресметува:

$$\Delta H = C_{P,H2}(520 - T_{H2,из})$$

$$6 = 0,045 \cdot (520 - T_{H2,из})$$

$$T_{H2,из} = 370 \text{ }^\circ\text{C}$$

## Стефан Кувенциев Анализа и синтеза на процеси

- Евидентно е дека е неопходно воведување на уште еден топлински изменувач со ЛСМ (струја Н2 со ЛСМ – топлински изменувач НЕ9).

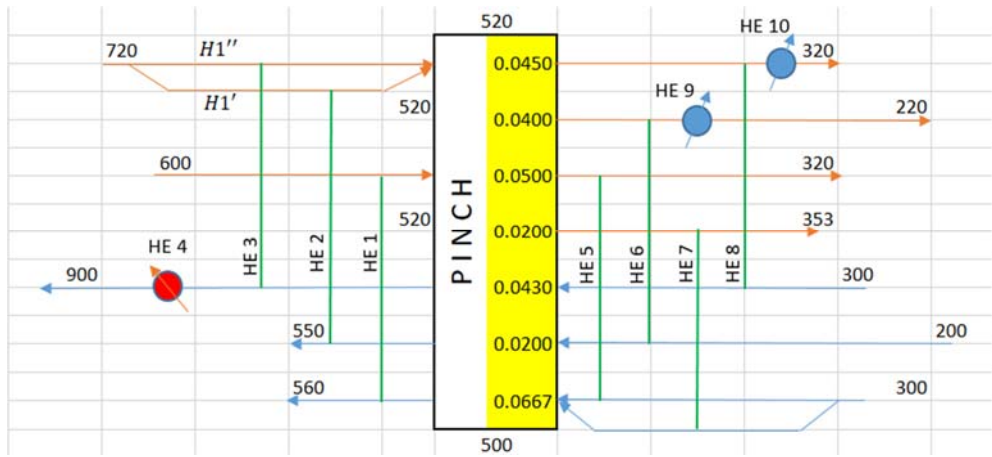
Во следната табела се дадени дизајн карактеристиките на димензионираната HEN.

HE	$T_{in}$	$T_{out}$	$T_{in}$	$T_{out}$	$\Delta T_{lm}$	$U^*$	$Q$	$A$
	H1	H1	C2	C2			[MW]	[m <sup>2</sup> ]
1	600	520	500	560	28,85	375	4	370
2	720	520	500	550	70,1	667	1	21,4
3	720	520	500	686	26,38	750	8	404,3
4	1200	1000	686	900	306,95	857	9,2	34,97
5	520	320	300	500	199,33	333,3	10	150,5
6	520	220	200	500	299,56	600	6	33,4
7	520	353	300	500	181,05	352,94	3,34	52,3
8	520	329	300	500	194,47	750	8,6	59
9	370	220	100	200	143,55	600	6	69,7
10	329	320	100	200	170,47	667	0,4	3,5

$$* \frac{1}{U} = \frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_o}$$

Вака димензионираната HEN со вкупно 10 HE, од кои 4 HE се над *pinch* зоната, а 6 HE се под *Pinch* зоната, претставува соодветен модел за поставениот процес/проблем.

## 5. Енергетска интеграција на технолошки процеси



Слика 5.32 Конечна архитектура на дизајнираната HEN

# Литература

1. R. Smith, *Chemical Process: Design and Integration*, Second Edition, Wiley, 2016.
2. M. M. El-Halwagi, *Process Integration*, Elsevier, Academic Press, 2006.
3. G. Towler, R. Sinnott, *Chemical Engineering Design: Principles, Practice and Economics of Plant and Process Design*, Second Edition, Elsevier, 2013.
4. M. M. El-Halwagi, *Sustainable Design Through Process Integration*, Elsevier, Academic Press, 2017.
5. G. Blokdyk, *Process Integration*, Third Edition, CreateSpace Independent Publishing Platform, 2018.
6. D. C. Y. Foo, M. M. El-Halwagi (Eds.), *Process Intensification and Integration for Sustainable Design*, Wiley, 2021.
7. I. C. Kemp, *Pinch Analysis and Process Integration*, Second Edition, Elsevier, 2007.
8. R. Turton, J. Shaeiwitz, D. Bhattacharyya, W. Whiting, *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*, United Kingdom: Prentice Hall, 2018.
9. K. Hartmann, K. Kaplick, *Analysis and Synthesis of Chemical Process Systems*, Elsevier, 2016.
10. R. M. Murphy, *Introduction to Chemical Processes: Principles, Analysis, Synthesis*, McGraw-Hill Education, 2007.
11. R. Torres (Ed.), *Chemical Processes: Design, Synthesis and Analysis*, United States: NY Research Press, 2022.
12. W. D. Seider, D. R. Lewin, J. D. Seader, S. Widagdo, R. Gani, K. M. Ng, *Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis, and Evaluation*, United States: John Wiley & Sons Incorporated, 2017.

13. V. M. d. F. Bezerra, *Chemical Process Synthesis: Connecting Chemical with Systems Engineering Procedures*. Germany, Walter de Gruyter GmbH, 2024.
14. G. Ruiz-Mercado, H. Cabezas (Eds.), *Sustainability in the Design, Synthesis and Analysis of Chemical Engineering Processes*, Elsevier, 2016.
15. P. Anastas, A. Lapkin (Eds.), *Green Chemical Engineering, Volume 12*, Wiley, 2018.
16. M. M. Martín, *Industrial Chemical Process Analysis and Design*, Elsevier, 2016.
17. A. C. Dimian, C. S. Bildea, A. A. Kiss, *Integrated Design and Simulation of Chemical Processes*, Elsevier, 2014.
18. W. L. McCabe, *Unit Operations of Chemical Engineering*, McGraw-Hill Education (India) Private Limited, 2014.
19. W. L. McCabe, J. Smith, P. Harriott, *Unit Operations of Chemical Engineering*, McGraw-Hill Education, 2005.
20. T. L. Bergman, A. S. Lavine, F. P. Incropera, D. P. DeWitt, *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*, Wiley, 2020.
21. F. B. Petlyuk, *Distillation Theory and Its Application to Optimal Design of Separation Units*, Cambridge University Press, 2011.
22. C. J. King, *Separation Processes, Second Edition*, Dover Publications, 2013.
23. A. B. de Haan, H. B. Eral, B. Schuur, *Industrial Separation Processes: Fundamentals*, De Gruyter, 2020.
24. C. A. M. Afonso, J. P. Crespo (Eds.), *Green Separation Processes: Fundamentals and Applications*, Wiley, 2006.
25. Klaus Sattler, Hans Jacob Feindt, *Thermal Separation Processes: Principles and Design*, Wiley, 2008.
26. A. M. Lane, *Separation Process Essentials*, CRC Press, 2019.

27. G. F. Froment, J. De Wilde, K. B. Bischoff, *Chemical Reactor Analysis and Design*, Wiley, 2011.
28. O. Levenspiel, *The Chemical Reactor Omnibook*, Lulu Press, Incorporated, 2013.
29. J. J. Carberry, *Chemical and Catalytic Reaction Engineering*, Dover Publications, 2001.
30. O. Levenspiel, *Chemical Reaction Engineering*, Third Edition, Wiley India Pvt. Limited, 2006.
31. X. W. Ng, *Concise Guide to Heat Exchanger Network Design: A Problem-based Test Prep for Students*, Springer International Publishing, 2020.
32. E. Heinzle, A. P. Biwer, C. L. Cooney, *Development of Sustainable Bioprocesses: Modeling and Assessment*, Wiley, 2007.
33. H. S. Fogler, *Essentials of Chemical Reaction Engineering*, Prentice Hall, 2011.
34. H. Fogler, *Elements of Chemical Reaction Engineering*, Global Edition, Pearson Education, 2022.



