

КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ПРОИЗВОДСТВА КАРБАМИДА

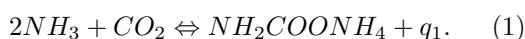
Рассматривается кинетическая модель процесса производства карбамида, используя баланс массы, из протекающих реакции в реактор.

ВВЕДЕНИЕ

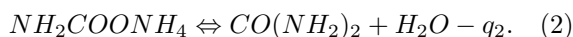
В процессе производства карбамида математическая модель играет очень важную роль для его моделирования. Кинетическая модель химических реакций, протекающих в реакторе синтеза, определяет поведение реагентов и продуктов во время эксплуатации реактора.

I. ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

Карбамид ($CO(NH_2)_2$) может быть получен на несколько видов, но в настоящее время он в промышленности производится более экономичным синтетическим путём — из аммиака NH_3 и двуокиси углерода CO_2 . Синтез карбамида из аммиака и двуокиси углерода протекает в две стадии. В первой стадии в результате взаимодействия образуется карбамат аммония [1]:



Во второй стадии карбамат аммония отщепляет воду превращается в мочевины:



В общем виде производства карбамида из двуокиси углерода и аммиака осуществляется следующим уравнением:

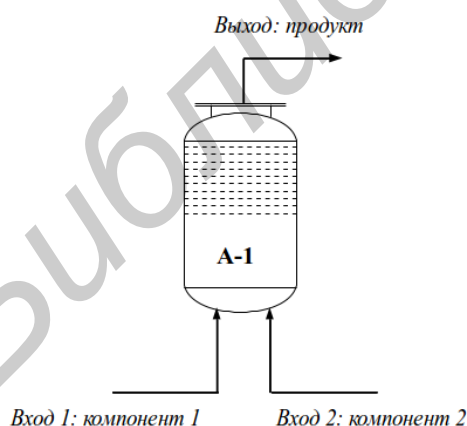


Рис. 1 – Реактор синтеза карбамида

Синтез карбамида основан на скорости реакции уравнения образования карбамида, карбамата аммония и двуокиси углерода вдоль длины

реактора. Превращение реакций (1) и (2) будут даны как x_1 и x_2 для общего уравнения (3) будет дано превращение x [2]:

$$x_1 = \frac{F_{[C]} + F_{[D]}}{F_{[B]} + F_{[C]} + F_{[D]}}, \quad (4)$$

$$x_2 = \frac{F_{[D]}}{F_{[C]} + F_{[D]}}, \quad (5)$$

$$x = x_1 x_2 = \frac{F_{[D]}}{F_{[B]} + F_{[C]} + F_{[D]}}, \quad (6)$$

где, $A - NH_3$, $B - CO_2$, $C - NH_2COONH_4$, $D - CO(NH_2)_2$, $E - H_2O$, $F_{0[i]}$ - начальный поток ($kgmol/h$), $F_{[i]}$ - конечный поток ($kgmol/h$). Возможно выразить отношение питания аммиака и воды как:

$$a = \frac{F_{0[A]}}{F_{0[B]} + F_{0[C]} + F_{0[D]}}, \quad (7)$$

$$b = \frac{F_{0[E]}}{F_{0[B]} + F_{0[C]} + F_{0[D]}}. \quad (8)$$

Для потоков компонентов для любой точки в реакторе используются следующие уравнения

$$F_B = (1 - x_1)(F_{0[B]} + F_{0[C]} + F_{0[D]}), \quad (9)$$

$$F_C = (x - x_1)(F_{0[B]} + F_{0[C]} + F_{0[D]}), \quad (10)$$

$$F_D = x(F_{0[B]} + F_{0[C]} + F_{0[D]}). \quad (11)$$

Затем устанавливаются уравнения скорости реакции для наиболее значимых компонентов. Скорость исчезновения двуокиси углерода представлена выражена [3][4]:

$$r_{[B]} = k_{1F}(C_{[A]}^2 C_{[B]} - \frac{C_{[C]}}{K_1}) - \dots \quad (12)$$

Образование карбамата (NH_2COONH_2) и карбамида ($CO(NH_2)_2$) дано следующим:

$$r_{[C]} = k_{1F}(C_{[A]}^2 C_{[B]} - \frac{C_{[C]}}{K_1}) - \dots - k_{2F}(C_{[C]} - \frac{C_{[D]} C_E}{K_2}) - \dots, \quad (13)$$

$$r_{[D]} = k_{2F}(C_{[C]} - \frac{C_{[D]} C_E}{K_2}), \quad (14)$$

$$k_i = k_{0i} e^{-E_a/RT}, \quad (15)$$

где $K_i = k_{iF}/k_{iR}$. K_i - констант равновесия k_{iF} и k_{iR} - константы скорости прямой и обратной реакции. k_{0i} - пред-экспоненциальный множитель реакции (c^{-1}/m^3), E_a - энергия активации (J/mol), R - универсальный констант газов

8, $3143JK^{-1}mol^{-1}$, T - абсолютная температура (K), C_A , C_B , C_C , C_D и C_E - концентрация реагирующих веществ ($kgmol/h$) при равновесии. Напоследок применяется баланс масса для двуокиси углерода, карбамата и карбамида, используя уравнений (13) - (15) для скоростей уравнений:

$$\frac{d[B]}{dz} = Ar[B], \quad (16)$$

$$\frac{d[C]}{dz} = Ar[C], \quad (17)$$

$$\frac{d[D]}{dz} = Ar[D], \quad (18)$$

где A - площадь реактора.

Системы уравнения решаются (16) - (18) с использованием уравнений (4)-(15) и с помощью программы MATLAB.

II. Вывод

Таким образом, были разработаны модель реактора синтеза карбамида и обработка урав-

нения исчезновения двуокиси углерода, образования карбамата и карбамида. Рассматриваемый процесс производства карбамида в реакторе синтеза, позволяет создать кинетическую модель, определяющую поведение реагентов во время эксплуатации реактора все это выгодно для моделирования характеристик реактора синтеза.

Список литературы

1. Б. П. Мельников. Производство мочевины / Б. П. Мельников, И. А. Кудряцева // Уч - М.: Химия, 1965. - 165 с.
2. Эмануэль, Н. М. Курс химической кинетики / Н. М. Эмануэль, Д. Г. Кнорре // Уч. - Высшая Школ, 1967. - 54 с.
3. Isla, M. A. Simulation of urea synthesis reactor 1. / M. A. Isla, H. A. Irazoqui // paper. Thermodynamic framework. Ind. Eng. Chem. Res. 32, 1993. 2662-2670 pp.
4. Isla, M. A. Simulation of urea synthesis reactor 2. / M. A. Isla, H. A. Irazoqui // paper. Reactor model. Ind. Eng. Chem. Res. 32, 1993. 2671-2680 pp.

Карраскель Матос Ильдемаро Рамон, аспирант кафедры систем управления Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники, hildemaro1980@gmail.com

Научный руководитель: Кузьмицкий Иосиф Фелицианович, доцент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники Белорусского государственного технологического университета, кандидат технических наук, доцент, kuzmizki@mail.ru.