**Лекция № 2**

**Химико-технологические системы. Их структура. Элементы ХТС.
Типовые структуры ХТС. Исследование ХТС.**

Производственные процессы в химической промышленности и сходных ей областях характеризуются большим разнообразием выпускаемой продукции и большой сложностью. Условия протекания отдельных стадий могут быть весьма различными: от высоких температур (1500 0С) в случае электрокрекинга углеводородов до очень низких температур при разделении воздуха, от высоких давлений при производстве аммиака  и метанола до низких в процессах вакуумной перегонки. Одни процессы проводят в водной фазе, в других даже следовые количества воды могут полностью дезорганизовать процесс. Технологические схемы получения того или иного продукта могут быть более или менее компактными.

Несмотря на существенные качественные и количественные различия отдельных технологических процессов, разнообразие комбинаций аппаратов, используемых для их реализации, различные мощности и условия протекания, все они имеют общие свойства.

Каждое производство в соответствии с общей теорией систем является сложной системой, которая называется *химико-технологической системой*.

Химико-технологические системы (ХТС) представляют собой совокупность физико-химических процессов и средств их осуществления с целью получения продукта заданного количества и в требуемом количестве.

ХТС состоит из элементов, т.е. из отдельных аппаратов, в которых протекают технологические операции, необходимые для достижения цели, поставленной перед ХТС.

Элементы, составляющие ХТС, являются функционально взаимосвязанными. Например, в системе, представленной на рисунке, исходный поток сырья нагревается за счет теплоты реакционной смеси, причем количество теплоты, выделившейся в реакторе, зависит от температуры потока на входе в реактор. Аналогично существует связь между абсорбером и ректификационной колонной в системе разделения продуктов. Более интенсивно работающий абсорбер определяет меньшие требования к ректификации. Более того, система может приобретать новые свойства, которые отличаются от свойств отдельных элементов. Так, изображенная на рисунке система может работать в неустойчивом режиме, если уровень тепловыделений в реакторе достигнет определенного значения.

Наиболее часто под элементами ХТС подразумевают аппарат, в котором протекает химико-технологический процесс, качественно и (или) количественно преобразующий физические переменные входных материальных и энергетических потоков x1, x2,… xm в физические переменные выходных материальных и энергетических потоков y1, y2, … yn. Например, в реакторе синтеза аммиака протекает качественное (на выходе реактора присутствует новый компонент – аммиак) и количественные (изменяются концентрации реагентов, температура) преобразования физических параметров потока. Кроме входных и выходных переменных различают конструктивные и технологические параметры. *Конструктивными параметрами* являются геометрические характеристики аппарата, объем катализатора в реакторе, число тарелок в ректификационной колонке, площадь теплообменной поверхности и расположение труб в теплообменнике. *Технологические параметры* – это константы скоростей химических реакций, флегмовое число, место ввода питающей жидкости в ректификационной колонке, плотность орошения в абсорбере, время реакции и т.д.

Таким образом, каждый элемент ХТС осуществляет преобразование, которое может быть представлено функциональной зависимостью

Y=F(X, U) ( )

где X и Y – векторы параметров состояния входных и выходных потоков, U – вектор конструктивных и технологических переменных. Вид зависимости ( ) определяется физико-химической природой процессов, протекающих в данном аппарате.

Процессы, протекающие в аппаратах, представляют на схемах в виде типовых технологических операторов (ТО), которые подразделяют на основные и вспомогательные. С помощью таких операторов можно строить различные структуры ХТС, соединяя операторы различными технологическими связями. На приведенной ниже схеме дана классификация типовых технологических операторов и их обозначения.

Отдельные аппараты, входящие в состав ХТС, могут выполнять функции нескольких типов ТО. Например, химический реактор может одновременно выполнять функции химического превращения и массообмена. Поэтому на схеме такой реактор может быть представлен в виде совокупности двух ТО, как показано ниже на рисунке.



Хотя конкретные ХТС отличаются большой сложностью и разнообразием структур, практически все конкретные структуры могут быть при помощи декомпозиции и агрегации элементов (объединения нескольких элементов в так называемый суперэлемент) сведены к небольшому числу типовых структур с характерным соотношением направлений соединяющих их потоков.

К таким типовым структурам относятся

1.  *Последовательная технологическая связь* – это такая связь, когда поток, выходящий из одного элемента, является входящим для следующего и все технологические потоки проходят через каждый элемент системы не более одного раза (а). Последовательное соединение элементов – основной прием в химической технологии, т.к. оно соответствует многочисленному принципу переработки сырья в качественно различных элементах.

а)

2.  *Параллельная технологическая связь*– это такая связь, когда выходящий из i-того элемента ХТС поток разбивается на несколько параллельных подпотоков (б). Параллельная технологическая связь используется для повышения мощности, надежности, гибкости ХТС, а также при параллельном получении на базе одного исходного вещества двух или нескольких продуктов

б)

3.  *Последовательно-обводная технологическая связь (байпас, by-pass)* – это такая технологическая связь, при реализации которой часть выходного потока из одного элемента минует элементы ХТС в последовательной цепи аппаратов, а затем снова объединяется с основным потоком. Примером такой связи является цепь аппаратов: делитель потоков – теплообменник – смеситель потоков (в) для регулирования температуры на выходе теплообменного узла



Кроме того, байпас широко применяется в системах переработки с последующим смещением, где для обеспечения заданного состава и качества продукта необходимо перерабатывать не весь поток, а лишь часть его. Потоки спешиваются в таком соотношении, чтобы получился продукт заданного качества.

**Обратная технологическая связь.**

Характеризуется наличием рециркуляционного потока, связывающего выходной поток последующего элемента ХТС с входным потоком предыдущего элемента (г)



Обратная технологическая связь предусматривает многократное возвращение потоков в один и тот же элемент системы. Типичными примерами ХТС с обратной связью является ХТС синтеза метанола, аммиака и др., где большая часть непрореагировавших газов рециркулируется в процесс.

Для характеристики обратных связей используют коэффициент отношения рециркуляции



или коэффициент рециркуляции



**Исследование химико-технологических систем.**

Исследование сложных химико-технологических производств с использованием методов и средств теории систем получило название системного анализа.

*Системный анализ*–результат успешного применения к исследованию и разработке ХТС опыта изучения, создания и эксплуатации химических производств с привлечением методов, используемых в химических, физических и математических науках, моделировании, вычислительной математике, автоматическом управлении и других разделах науки, практикуемых в инженерно-химических исследованиях и разработках.

Обобщая опыт использования системного анализа, можно установить примерную последовательность этапов исследования и анализа ХТС в рамках системного анализа.

1.    Выделение элементов, которые определяют свойства ХТС.

2.    Установление зависимостей показателей выходных потоков от входных для каждого элемента, т.е. получение математического описания работы элемента и определение его свойств и особенностей. Поскольку в элементах ХТС происходит превращение потоков, то их описание основывается, главным образом, на физико-химических и физических закономерностях протекающих в них процессов.

3.    Выделение связей между элементами , ответственными за проявление интересующих свойств ХТС.

Таким образом, определяется *структура ХТС* – совокупность элементов и связей между ними. Математическое описание элементов создает основу количественных расчетов при исследовании системы. Эти этапы требуют знаний о процессах и практического опыта.

4.    Исследование ХТС – расчет показателей определения свойств, изучение эволюции (развития, изменения) ХТС для улучшения ее показателей и свойств. Здесь используются принципы и методы различных областей науки – кибернетики, топологии, теорий информатики, игр, решений, катастроф, факторного анализа.

Большое значение в исследовании сложных систем имеет накопленный опыт исследования химических производств – так называемые "эвристические исследования".

Описание системы, состоящей из сотен элементов и связей, представляет собой совокупность алгебраических, дифференциальных и интегральных уравнений. Поэтому основное средство системного анализа – компьютеры и суперкомпьютеры.

**Химические реакторы.**

Химические реактора для проведения различных процессов отличаются друг от друга конструктивными особенностями, размерами, внешним видом. Однако, несмотря на существующие различия, можно видеть общие признаки классификации реакторов, облегчающие систематизацию сведений о них, составление математического описания и выбор математического расчета.

Наиболее употребимы следующие признаки классификации химических реакторов и режимов их работы: 1) режим движения реакционной среды (гидродинамическая обстановка в реакторе); 2) условия теплообмена в реакторе; 3) фазовый состав реакционной смеси; 4) способ организации процесса; 5) характер изменения параметров процесса во времени; 6) конструктивные характеристики.

*1. Классификация химических реакторов по гидродинамической обстановке.*

По гидродинамической обстановке реакторы подразделяют на реакторы смешения и вытеснения.

Реакторы смешения – это емкостные аппараты с перемешиванием механической мешалкой или циркуляционным насосом. Иногда в качестве способа перемешивания используется барботаж газообразного реагента через слой жидкой реакционной массы.

Реакторы вытеснения – трубчатые аппараты, достаточно большой длины по сравнению с диаметром. В таких аппаратах течение реакционного потока имеет поршнеобразный характер. Перемешивание в таких реакторах имеет локальный характер и вызывается неравномерностью распределения скорости потока и его флуктуациями, а также завихрениями.

В теории реакторов обычно рассматривают идеальные варианты этих аппаратов – реактор идеального или полного смешения и реактор идеального или полного вытеснения.

Для идеального смешения характерно абсолютно полное выравнивание всех характеризующих реакцию параметров по объёму реактора.

Идеальное вытеснение предполагает равенство по сечению реактора скоростей потока. Перемещение реакционной массы по длине реактора носит строго поршнеобразный характер. В то же время по длине реактора в соответствии с закономерностями протекания реакции устанавливается определённое распределение концентраций участников реакции, температуры и других параметров.

*2. Классификация химических реакторов по условиям теплообмена.*

При отсутствии теплообмена между реактором и окружающей средой химический реактор является адиабатическим. Вся теплота, выделяющаяся или поглощающаяся в результате химических реакций, расходуется на внутренний теплообмен, т.е. на нагрев или охлаждение реакционной смеси.

Если теплообмен с окружающей средой протекает гораздо быстрее, чем тепловыделение или теплопоглощение, то во всех точках реакционной зоны обеспечивается постоянство температуры и такой реактор называется изотермическим.

Реакторы, в которых скорости тепловыделения или теплопоглощения соизмеримы со скоростями теплообмена с окружающей средой, температурный режим представляет собой результат баланса между этими процессами и в общем случае это обусловливает неравномерность распределения температуры в реакционной зоне. Такие реакторы называются политермическими.

Особо следует выделить автотермические реакторы, в которых поддержание необходимой температуры процесса осуществляется исключительно за счёт теплоты химического процесса без использования внешних источников энергии. В практике химической технологии стремятся к тому, чтобы химические реакторы, особенно в крупнотоннажных производствах, были автотермическими.

*3. Классификация химических реакторов по фазовому составу реакционной массы.*

Реакторы для проведения гомогенных процессов подразделяют на аппараты для газофазных и жидкофазных реакций. Аппараты для проведения реакций с двухфазными системами подразделяют на газо-жидкостные, реакции для систем газ – твёрдое тело, жидкость твёрдое тело и др. Особо выделяют реакторы для гетерогенно-каталитических процессов.

*4. Классификация по способу организации процесса.*

По способу организации процесса (способу подачи реагентов и отвода продуктов) реакторы подразделяют на периодические, непрерывные и полунепрерывные (поулпериодические).

В реакторе *периодического* действия все реагенты вводят в реактор до начала реакции, смесь выдерживают в реакторе необходимое время, после чего производится выгрузка продуктов. Продолжительность операции от момента загрузки до момента выгрузки соответствует времени реакции. Обычно параметры технологического процесса в периодическом реакторе изменяются во времени. Недостатки периодических реакторов – цикличность работы, низкая производительность, большие затраты ручного труда. Такие реакторы выгодны при организации малотоннажных производств, т.к. в ходе операции можно строго следить за параметрами, поддерживая их на оптимальном уровне.

В реакторе *непрерывного*действия (*проточном*) производится непрерывная подача реагентов в реакционную зону и непрерывный отвод продуктов. Эти реакторы обеспечивают высокую производительность и их применение особенно выгодно при организации крупнотоннажных производств.

Реактор *полунепрерывного (полупериодического)* действия характеризуется тем, что один из реагентов поступает в него непрерывно, а другой – периодически. Возможны варианты, когда реагенты поступают в реактор периодически, а продукты реакции выводятся непрерывно, или наоборот.

*5. Классификация по характеру изменения параметров процесса во времени.*

Согласно этой классификации различают реакторы, работающие в стационарном и нестационарном режиме.

Режим работы реактора называют *стационарным*, если протекание химической реакции в произвольно выбранной точке реактора характеризуется постоянством концентраций реагентов и продуктов, скорости и других показателей во времени. В стационарном режиме показатели потока на выходе из реактора не зависят от времени. Это постоянство показателей определяется двумя факторами: стационарностью режима и постоянством состава параметров потока на входе в реактор.

Если в произвольно выбранной точке происходит изменение параметров химического процесса во времени, режим работы реактора называется *нестационарным.*

Стационарный режим обычно выдерживается в непрерывно действующих проточных реакторах. Но даже эти реакторы работают в нестационарном режиме в период пуска и установки. В ряде случаев имеет место дрейф показателей непрерывных процессов, например, когда катализатор во времени меняет свою активность.

Нестационарными являются все периодические процессы. Это можно проиллюстрировать рядом примеров. Так, если в реактор единовременно загрузить реагенты А и В, а затем выдерживать реакционную массу во времени, то в связи с расходом А и В и накоплением продуктов реакции во времени их концентрация будет меняться по мере проведения процесса.

В другом варианте к загруженному единовременно реагенту А добавляется равномерно во времени другой реагент В. В этом случае А будет расходоваться во времени и его концентрация будет снижаться. Концентрация В будет постоянной, поскольку расход его в реакции будет компенсироваться прибылью его новых порций за счет подачи. В то же время количество продуктов реакции будет нарастать во времени.

Нестационарные реакторы характеризуются положительным или отрицательным накоплением вещества или энергии в реакторе, например, для периодических ректоров характерно положительное накопление продуктов и отрицательное накопление (убыль) реагентов. При протекании в таком реакторе экзотермической реакции в отсутствие теплообмена с окружающей средой будет иметь место накопление тепла, что приведет к росту температуры.

Стационарные проточные реакторы проще для моделирования, т.к. их работа описывается более простыми уравнениями. Например, скорость реакции в проточных реакторах смешения характеризуется алгебраическими уравнениями. Стационарные процессы легче автоматизировать.

Нестационарность процесса в реакторе вносит определенное усложнение в описание реактора и в управление его работой, однако во многих случаях нестационарные режимы технологических процессов, протекающих в химических реакторах, легче приблизить к оптимальным.

*6. Классификация по конструктивным характеристикам.*

Химические реакторы отличаются друг от друга по ряду конструктивных характеристик, оказывающих влияние на расчет и изготовление аппаратуры.

Конкретная конструкция реактора определяется рядом факторов: фазовым составом реакционной массы, режимом процесса, физическими свойствами реакционной смеси и др. Различают реакторы для гомогенных, гетерогенных и гетерофазных процессов.