

Primjer 4. PKR

Prijenos topline kroz plašt

Reakcija polimerizacije stirena želi se voditi kontinuirano u idealnom PKR reaktoru uz početnu koncentraciju stirena od 2 mol/dm^3 . Reakcija je prvog reda,

$$r_A = kC_A = 0.0387C_A$$

Reakcija se želi voditi izotermno na $20 \text{ }^\circ\text{C}$ i uz to postići konverziju od 80% . Voda za hlađenje plašta ima ulaznu temperaturu od 15°C a volumen reaktora je $0,4 \text{ dm}^3$. Potrebno je naći:

- protok monomera (stirena) da se postigne konverzija od 80% i
- protok rashladne vode za izotermni rad i odgovarajuću konverziju.

Rješenje

Iz osnovne jed. PKR-a

$$\frac{V}{v_0} = \frac{C_{A_0} X_A}{r_A}$$

dolazi se do

$$v_0 = \frac{Vr_A}{C_{A_0} X_A} = \frac{Vk(1 - X_A)}{X_A}$$

ili

$$v_0 = \frac{0.4 \cdot 0.0387(1 - 0.8)}{0.1} = 3.87 \cdot 10^{-3} \text{ dm}^3 \text{ min}^{-1}$$

- Ako se reakcija vodi izotermno to znači da su temperature na ulazu i izlazu iz reaktora iste, pa osnovna bilanca topline ima sljedeći oblik

$$r_A V (-\Delta H_r) = UA_s (T_p - T_r)$$

Lijeva strana jedn. predočuje reakcijsku entalpiju. Ako se umnožak $r_A V$ izrazi kao

$$r_A V = v_0 C_{A_0} X_A$$

iz bilance količine tvari, tada je ta toplina,

$$Q_r = v_0 C_{A_0} X_A (-\Delta H_r) = 3.87 \cdot 10^{-3} \cdot 2 \cdot 0.8 \cdot 69.39 = 0.429 \text{ kJ min}^{-1}$$

Temperatura vode u plaštu tada se može izračunati iz bilance

$$Q_r = UA_p (T_p - T_r)$$

odnosno

$$T_p = T_r + \frac{Q_r}{UA_p}$$

Umnožak UA_p izračunat je u ranijem primjeru (izotermni rad kotlastog reaktora) i iznosi $0.276 \text{ kJ min}^{-1} \text{ K}^{-1}$.

Prema tome je temperatura u plaštu

$$T_p = 20 + \frac{-0.429}{0.276} = 18.4 \text{ }^\circ\text{C}$$

Protok vode, Q_{m_v} nalazi se iz bilance topline za vodu u plaštu,

$$Q_{m_v} c_{p_v} (T_u - T_p) = Q_r$$

tj.,

$$Q_{m_v} = \frac{Q_r}{c_{p_v} (T_u - T_p)} = \frac{-0.429}{4.18(15 - 18.4)} = 3 \cdot 10^{-2} \text{ dm}^3 \text{ min}^{-1}$$

Primjer 5. PKR

Adijabatski rad PKR-a

Pretpostavimo da se u PKR reaktoru istog volumena kao u prethodnom primjeru, $V = 0.4 \text{ dm}^3$ reakcija polimerizacije stirena vodi adijabatski. Reakcijska smjesa sastoji se od 7 % stirena, 92.9 % otapala i 0.1 % inicijatora (u vol. %). Ulazna temperatura je $25 \text{ }^\circ\text{C}$. Kinetički model je isti kao ranije,

$$r_A = kC_A$$

uz

$$k = 1.72 \cdot 10^{13} \exp\left[\frac{78.5}{R_g T}\right] \text{ min}^{-1}$$

Prema tome, energija aktivacije iznosi 78.5 kJ mol^{-1} . Srednja molekulska masa ulazne smjese iznosi 85.4, srednji toplinski specifični kapacitet smjese je $1.75 \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$, a gustoća iznosi 9.23 mol dm^{-3} .

Potrebno je izračunati izlaznu temperaturu reakcijske smjese te volumni protok uz uvjet da se postigne 80 % konverzija.

Rješenje

- U adijabatskom radu ne postoji izmjena topline s okolinom, pa je u tom slučaju, za idealni PKR reaktor, bilanca topline dana

$$T = T_u - \frac{(-\Delta H_r)}{Q_{m_0} c_p} V r_A$$

Iz bilance za množinu tvari za PKR reaktor može se dobiti

$$Vr_A = F_{A_0} X_A$$

Isto tako,

$$v_0 = \frac{F_0 M_s}{\rho_s}$$

gdje je F_0 ukupni molni protok smjese na ulazu, a ρ_s je srednja molna gustoća smjese. Tada se može pisati sljedeće

$$T = T_u - \frac{Y_A X_A (-\Delta H_r)}{M_s c_p}$$

gdje je $Y_A = \frac{F_{A_0}}{F_0}$. Slijedi da je

$$T = 25 - \frac{0.07 \cdot 0.8 \cdot (-69.38)}{85.4 \cdot 1.75} = 51.1 \text{ } ^\circ\text{C}$$

- Volumni protok računa se iz bilance količine tvari, odnosno

$$v_0 = V k \frac{1 - X_A}{X_A}$$

Specifična brzina je dana izrazom

$$k_s = k C^{\frac{1}{2}} = 1.72 \cdot 10^{13} \cdot 0.01^2 \exp\left[\frac{78.49}{8.13 \cdot 324.1}\right] = 0.374$$

gdje je C koncentracija inicijatora pa je prema tome

$$v_0 = 0.4 \cdot 0.374 \frac{1 - 0.8}{0.8} = 3.74 \cdot 10^{-2} \text{ dm}^3 \text{ min}^{-1}$$