УДК 66.01

АЛГОРИТМЫ РАСЧЕТА И РАСЧЕТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Ермолаева В.А.

Муромский институт Владимирского государственного университета имени А.Г. и Н.Г. Столетовых, Мумор, e-mail: ErmolaevaVA2013@mail.ru

В данной статье обсуждаются алгоритмы расчета материального и теплового баланса химико-технологических процессов. Расчеты представляют собой наиболее трудоемкую часть проектирования производств, позволяют определить наилучшие условия для проведения процесса, наметить пути сокращения потерь. Расчет материального баланса основывается на законе сохранения массы веществ в химических реакциях, расчет энергетического баланса – на законе сохранения энергии в процессе. Расчет материального и теплового баланса может быть составлен как для всего химико-технологического процесса, что представляет определенную сложность, так и для отдельных стадий или отдельного аппарата. Приведен пример расчета материального баланса химико-технологического процесса получения серной кислоты. Рассчитаны параметры использования серы, содержащейся в колчедане, потери серы, объемный состав обжигового газа. Расчеты проведены с учетом известной, заданной производительности печи. Используются известные данные расхода сухого колчедана, степени использования содержащейся в нем серы, содержания оксидов серы (IV) и (VI) в обжиговом газе, содержания кислорода, азота и паров воды в воздухе. Составлена сводная таблица материального баланса. Невязка баланса связана в основном с округлением цифр при расчетах и является допустимой.

Ключевые слова: материальный баланс, тепловой баланс, химико-технологический процесс

ALGORITHMS AND DESIGN CHARACTERISTICS OF CHEMICAL-TECHNOLOGICAL PROCESSES

Ermolaeva V.A.

Murom Institute (branch) Vladimir State University named A.G. and N.G. Stoletovs, Murom, e-mail: ErmolaevaVA2013@mail.ru

This article discusses the algorithms for calculating the material and thermal balance of chemical processes. Calculations represent the most labor-intensive part of production design, allow to define the best conditions for carrying out process, to outline ways of reduction of losses. The calculation of the material balance is based on the law of conservation of the mass of substances in chemical reactions, calculation of the energy balance – on the law of conservation of energy in the process.Calculation of material and heat balance can be made for the entire chemical process, which is a certain complexity, and for individual stages or individual apparatus. An example of calculating the material balance of the chemical process of obtaining sulfuric acid is given. Calculated parameters for the use of sulphur contained in the pyrites, the loss of sulfur, the bulk composition of the roasting gas. Calculations are carried out taking into account the known, given productivity of the furnace. Known data on the flow rate of dry pyrite, the degree of use of sulfur contained therein, the content of sulfur oxides (IV) and (VI) in the firing gas, the content of oxygen, nitrogen and water vapor in the air are used. The summary table of material balance is made. The unbalance is mainly related to the rounding of digits in calculations and is permissible.

Keywords: material balance, heat balance, chemical-technological process

Основной задачей химической технологии является обеспечение условий для протекания химических реакций на производстве с максимальным экономическим эффектом, т.е. оптимальных технологических условий. Основополагающими характеристиками любого химико-технологического процесса являются расчетные значения, полученные путем математического вычисления соответствующих параметров. Расчеты представляют собой наиболее трудоемкую часть проектирования производств, позволяют определить наилучшие условия для проведения процесса, наметить пути сокращения потерь [1, 2].

Алгоритмы расчетов

Основными расчетами химико-технологических процессов являются:

1. Расчет материального баланса, основанный на законе сохранения массы веществ в химических реакциях, открытом М.В. Ломоносовым ещё в 1748 году. При расчете материального баланса необходимо помнить, что суммарная масса веществ, вступающих в процесс, должна быть равна суммарной массе всех полученных продуктов, включая побочные реакции и потери. Чем чище проходит химическое взаимодействие, чем меньше побочных продуктов, и чем выше выход реакции, тем больше получается искомого, желаемого продукта. А это и является практической задачей, практическим результатом всего химико-технологического процесса. Материальный баланс может быть составлен как для всего химико-технологического процесса, что представляет определенную

сложность, так и для отдельных стадий или отдельного аппарата [3].

При расчете материального баланса необходимо учесть массы реагентов, поступающих в процесс, и массы готового, искомого продукта, результаты побочных процессов и неизбежные потери вещества. Здесь могут возникать некоторые сложности, так как химико-технологические процессы разнообразны и разноплановы, подчиняются разным стехиометрическим уравнениям, а химические вещества многочисленны, имеют свои особенные, индивидуальные физические и химические свойства. Из этого следует, что расчет материального баланса хотя и следует определенной логике, но не имеет алгоритма или клише, общего для всех химических процессов. Каждый расчет индивидуален.

2. Расчет теплового (энергетического) баланса, основанный на законе сохранения энергии. При расчете теплового баланса следует помнить, что суммарная энергия, поступающая в химический процесс, должна быть равна суммарной энергии, образовавшейся в ходе процесса. Энергетический расчет (так же как и материальный) может быть осуществлен как для всего химико-технологического процесса (что достаточно сложно и трудоемко), так и для отдельных стадий или аппаратов. Тепловой расчет строится на основе материального. Выполнение расчета теплового баланса более стандартно, так как имеются общие алгоритмы вычислений, применимые к большинству химико-технологических процессов. При расчете прихода энергии в процесс учитываются:

– энергетический запас поступающих веществ [4]. Каждое вещество является хранителем и источником энергии, обладает внутренней энергией. Количественно запас энергии, скрытый в веществах Q, можно оценить, зная величины удельной теплоемкости C, массы, объемы или количества веществ M, температуру t, по формуле

$$Q = MCt.$$

Здесь необходимо обращать внимание на единицы измерения, в которых выражается удельная теплоемкость: ккал или кДж, приходящиеся на кг, м^3 или моль;

– теплота, выделяющаяся в ходе экзотермических реакций. Необходимо также учитывать тепловые эффекты, происходящие при различных физических процессах, сопровождающих химические реакции, такие как испарение, конденсация, растворение, переходы из одного агрегатного состояния в другое;

– теплота, привнесенная извне путем нагрева аппарата. Значение имеет способ подогрева: горячими газами, путем сжигания различных видов топлива, электроподогревом. Величина зависит от типа и устройства аппарата и от конкретных, специфических условий проведения процесса;

При расчете расхода энергии необходимо учитывать:

– унос энергии с продуктами реакции, выполняющийся по тем же формулам, что и приход;

– теплоту, поглощаемую в ходе эндотермических реакций, а также сопутствующих физических процессах;

– неизбежные теплопотери, учет которых также представляет некоторую сложность.

Расчет материального баланса

В настоящей работе основное внимание уделяется расчету материального баланса на примере классического химико-технологического процесса получения серной кислоты на основе использования серного колчедана [3, 5]. Для примера приведем расчет материального баланса печи кипящего слоя, в которой происходит обжиг колчедана.

Примем для расчета следующие исходные данные: производительность печи G_{H2SO4} 25,10 т/ч, степень использования серы β 0,750, расход сухого колчедана (45 % S) 0,82 т, содержание серы в колчедане C_S 38 %, содержание влаги в колчедане $C_{ВЛ}$ 9 %, содержание серы в огарке $C_{S(ОГ)}$ 1,6 %, содержание SO_2 в сухом обжиговом газе C_{SO2} 13,4 %, содержание SO_3 в сухом обжиговом газе C_{SO3} 0,1 %, содержание в воздухе O_2 – 22 %, N_2 – 77 %, относительная влажность воздуха φ 53 %.

Выполнение расчета:

Общее содержание серы в колчедане:

$$G_S = \frac{M_S \cdot G_{H_2SO_4} \cdot 1000}{M_{H_2SO_4} \cdot \beta}, \qquad (1.1)$$

где M_S – молярная масса серы, г/моль;
G_{H2SO4} – производительность печи, кг/ч;
β – степень использования серы, т.

Подставляя известные данные в формулу (1.1), получаем

$$G_S = \frac{32,06 \cdot 25,1 \cdot 1000}{98,08 \cdot 0,75} = 10939,45 \text{ кг/ч.}$$

Количество сухого колчедана рассчитываем по формуле

$$G_{колч} = \frac{G_S \cdot 100}{C_S}, \qquad (1.2)$$

где C_S – содержание серы в колчедане, %.

Подставляя известные данные в формулу (1.2), получаем

$$G_{\text{колч}} = \frac{10939{,}45 \cdot 100}{38} = 28788{,}03 \text{ кг/ч.}$$

Количество влаги в колчедане:

$$G_{\text{вл}} = \frac{G_{\text{колч}} \cdot C_{\text{вл}}}{100 - C_{\text{вл}}}, \quad (1.3)$$

где $G_{\text{КОЛЧ}}$ – количество сухого колчедана, кг/ч;
$C_{\text{ВЛ}}$ – содержание влаги в колчедане, %.

Подставляя известные данные в формулу (1.3), получаем

$$G_{\text{ВЛ}} = \frac{28788{,}03 \cdot 9}{100 - 9} = 2847{,}17 \text{ кг/ч.}$$

Количество огарка:

$$G_{\text{ОГ}} = \frac{160 - C_S}{160 - C_{S(\text{ОГ})}} \cdot G_{\text{колч}}, \quad (1.4)$$

где $C_{S(\text{ОГ})}$ – содержание серы в огарке; %.

Подставляя известные данные в формулу (1.4), получаем

$$G_{\text{ОГ}} = \frac{160 - 38}{160 - 1{,}6} \cdot 28788{,}03 = 22172{,}59 \text{ кг/ч.}$$

Количество серы в огарке:

$$G_{S(\text{ОГ})} = \frac{G_{\text{ОГ}} \cdot C_{S(\text{ОГ})}}{100}, \quad (1.5)$$

где $G_{\text{ОГ}}$ – содержание серы в огарке, %.

Подставляя известные данные в формулу (1.5), получаем

$$G_{S(\text{ОГ})} = \frac{22172{,}59 \cdot 1{,}6}{100} = 354{,}76 \text{ кг/ч.}$$

Потеря серы с огарком:

$$\Pi_{S(\text{ОГ})} = \frac{G_{S(\text{ОГ})} \cdot 100}{G_S}, \quad (1.6)$$

где $G_{S(\text{ОГ})}$ – количество серы в огарке, кг/ч;
G_S – общее содержание серы в колчедане, кг/ч.

Подставляя известные данные в формулу (1.6), получаем

$$\Pi_{S(\text{ОГ})} = \frac{354{,}76 \cdot 100}{10939{,}45} = 3{,}24\%.$$

Количество выгоревшей серы:

$$G_{\text{ВЫГ}} = G_S - G_{S(\text{ОГ})}, \quad (1.7)$$

где $G_{S(\text{ОГ})}$ – количество серы в огарке, кг/ч;
G_S – общее содержание серы в колчедане, кг/ч.

Подставляя известные данные в формулу (1.7), получаем

$$G_{\text{ВЫГ}} = 10939{,}45 - 354{,}76 = 10584{,}69 \text{ кг/ч.}$$

Общий объем SO_2 и SO_3:

$$V_{(SO_2 + SO_3)} = \frac{(G_S - G_{S(\text{ОГ})}) \cdot 22{,}4}{M_S}, \quad (1.8)$$

где $G_{S(\text{ОГ})}$ – количество серы в огарке, кг/ч;
G_S – общее содержание серы в колчедане, кг/ч;
M_s – атомная масса серы, г/моль.

Подставляя известные данные в формулу (1.8), получаем

$$V_{(SO_2+SO_3)} = \frac{10584{,}69 \cdot 22{,}4}{32{,}06} = 7395{,}42 \text{ м}^3\text{/ч.}$$

Объем SO_2:

$$V_{SO_2} = \frac{V_{(SO_2+SO_3)} C_{SO_2}}{C_{SO_2} + C_{SO_3}}, \quad (1.9)$$

где $V_{SO2+SO3}$ – общий объем SO_2 и SO_3, кг/м^3;
C_{SO2} – содержание SO_2 в сухом обжиговом газе, %;
C_{SO3} – содержание SO_3 в сухом обжиговом газе, %.

Подставляя известные данные в формулу (1.9), получаем

$$V_{SO_2} = \frac{7395{,}42 \cdot 13{,}4}{13{,}4 + 0{,}1} = 7340{,}64 \text{ м}^3\text{/ч.}$$

Объем SO_3:

$$V_{SO_3} = V_{(SO_2+SO_3)} - V_{SO_2}, \quad (1.10)$$

где $V_{SO2}+S_{O3}$ – общий объем SO_2 и SO_3, кг/м$_3$;
V_{SO2} – объем SO_2, кг/м^3.

Подставляя известные данные в формулу (1.10), получаем

$$V_{SO_3} = 7395{,}42 - 7340{,}64 = 54{,}78 \text{ м}^3\text{/ч.}$$

Объем сухого обжигового газа:

$$V_{\text{Г}} = \frac{V_{SO_2} 100}{C_{SO_2}}, \quad (1.11)$$

где V_{SO2} – объем SO_2, кг/м^3;
C_{SO2} – содержание SO_2 в сухом обжиговом газе, %.

Подставляя известные данные в формулу (1.11), получаем:

$$V_{\text{Г}} = \frac{7340{,}64 \cdot 100}{13{,}4} = 54780{,}9 \text{ м}^3\text{/ч.}$$

Концентрация O_2:

$$C_{O_2} = n - \left[m - \frac{n \cdot (m-1)}{100} \right] C_{SO_2} - \left[m + 0{,}5 \frac{n \cdot (m - 0{,}5)}{100} \right] C_{SO_3}, \quad (1.12)$$

где n – содержание кислорода в воздухе (22 %);
m – стехиометрическое отношение числа молекул кислорода к числу молекул диоксида серы по балансовому уравнению

$$4FeS_2 + 11O_2 = 8SO_2 + 2Fe_2O_3$$

$m = 11/8 = 1{,}375$;
C_{SO2} – содержание SO_2 в сухом обжиговом газе, %;
C_{SO3} – содержание SO_3 в сухом обжиговом газе, %.

Сводная таблица материального баланса

Приход	Кол–во		Расход	Кол–во	
	кг	м^3		кг	м^3
Сухой колчедан	28788,03	–	Огарок	22172,59	–
Влага колчедана	2847,17	–	Обжиговый газ		
Сухой воздух	75499,4	58314,70	SO_2	20973,3	7340,64
Пары воды в воздухе	556,4	692,95	SO_3	195,6	54,78
			O_2	3545,1	2483,16
			N_2	56129,9	44902,32
			H_2O	3403,6	4236,09
Всего	107691	59007,65	Всего	107420,09	59016,99

Подставляя известные данные в формулу (1.12), получаем

$$C_{O_2} = 22 - \left[1,375 - \frac{22 \cdot (1,375 - 1)}{100}\right] \cdot 13,4 - \left[1,375 + 0,5\frac{22 \cdot (1,375 - 0,5)}{100}\right] \cdot 0,1 = 4,53\%.$$

Объем O_2 в обжиговом газе:

$$V_{O_2} = \frac{V_Г C_{O_2}}{100}. \quad (1.13)$$

Подставляя известные данные в формулу (1.13), получаем

$$V_{O_2} = \frac{54780,9 \cdot 4,53}{100} = 2483,16 \text{ м}^3/\text{ч}.$$

Объем N_2 в обжиговом газе:

$$V_{N_2} = V_Г - (V_{SO_2} + V_{SO_3} + V_{O_2}). \quad (1.14)$$

Подставляя известные данные в формулу (1.14), получаем

$$V_{N_2} = 54780,9 - (7340,64 + 54,78 + 2483,16) = 44902,32 \text{ м}^3/\text{ч}.$$

Объем сухого воздуха, поступающего на обжиг колчедана:

$$V_B = \frac{V_{N_2} 100}{C_{N_2}}. \quad (1.15)$$

Подставляя известные данные в формулу (1.15), получаем

$$V_B = \frac{44902,32 \cdot 100}{77} = 58314,7 \text{ м}^3/\text{ч}.$$

Объем паров воды в воздухе при 20 °С при относительной влажности воздуха 53 %:

$$V'_{H_2O} = \frac{V_B \cdot P_{H_2O}}{760 - P_{H_2O}}, \quad (1.16)$$

где P_{H2O} – парциальное давление паров воды при температуре 20 °С.

Подставляя известные данные в формулу (1.16), получаем

$$V'_{H_2O} = \frac{58314,7 \cdot 8,925}{760 - 8,925} = 692,95 \text{ м}^3/\text{ч}.$$

Общий объем паров H_2O в обжиговом газе:

$$V_{H_2O} = \frac{G_{вл} \cdot 22,4}{M_{H_2O}} + V'_{H_2O}. \quad (1.17)$$

Подставляя известные данные в формулу (1.17), получаем

$$V_{H_2O} = \frac{2847,17 \cdot 22,4}{18} + 692,95 = 4236,09 \text{ м}^3/\text{ч}.$$

По результатам расчета составляется сводная таблица, в которой проводится сравнение величин прихода и расхода химических веществ, масс (кг) или объемов (м^3). Сводим результаты расчета в таблицу.

Невязка баланса составляет 0,025 %, что связано в основном с округлением цифр при расчетах и является допустимым.

Заключение

Таким образом, в работе рассмотрены вопросы обеспечения оптимальных условий проведения химико-технологических процессов, обсуждены особенности расчетных характеристик, наличия алгоритмов расчета материального и теплового балансов производств. Приведен пример расчета химико-технологического процесса получения серной кислоты. Составлена сводная таблица, отражающая расчетные характеристики прихода и расхода химических веществ, выраженных в единицах массы и объема.

Список литературы

1. Решетников П.А., Логинов Н.Я. Сборник примеров и задач по основам химической технологии [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://search.rsl.ru/ru/record/01007202348 (дата обращения: 10.04.2018).

2. Основы химической технологии / Под ред. проф. И.П. Мухленова [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://bookre.org/reader?file=478191 (дата обращения: 10.04.2018).

3. Мухленов И.П. Расчеты химико-технологических процессов [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://freedocs.xyz/view-docs.php?pdf=442039732 (дата обращения: 10.04.2018).

4. Мухленов И.П. Общая химическая технология. Портал научно-технической информации [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://nglib.ru/annotation.jsp?book=014935 (дата обращения: 10.04.2018).

5. Амелин А.Г., Малахов А.И., Зубова И.Е., Зайцев И.Н. Общая химическая технология [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://booksee.org/book/630779 (дата обращения: 10.04.2018).