

Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України

Національний технічний університет України

«Київський політехнічний інститут»

Хіміко-технологічний факультет

ЕЛЕКТРОННЕ НАВЧАЛЬНЕ ВИДАННЯ

ЗАГАЛЬНА ХІМІЧНА ТЕХНОЛОГІЯ

МЕТОДИЧНІ РЕКОМЕНДАЦІЇ ДО ВИКОНАННЯ РОЗРАХУНКОВО – ГРАФІЧНОЇ РОБОТИ

для студентів хіміко-технологічного факультету.

Напрямок підготовки: 6.051301 – Хімічна технологія

Рекомендовано Вченою радою ХТФ НТУУ «КПІ»

Київ НТУУ «КПІ»

2012

Методичні рекомендації до виконання розрахунково - графічної роботи з дисципліни «Загальна хімічна технологія» для студентів хіміко-технологічного факультету. Київ: НТУУ «КПІ», 2012. – 25 с.

*Гриф надано Вченою радою ХТФ НТУУ «КПІ»
(Протокол № 1 від 30 січня 2012 р.)*

ЕЛЕКТРОННЕ НАВЧАЛЬНЕ ВИДАННЯ
ЗАГАЛЬНА ХІМІЧНА ТЕХНОЛОГІЯ
МЕТОДИЧНІ РЕКОМЕНДАЦІЇ
ДО ВИКОНАННЯ РОЗРАХУНКОВО – ГРАФІЧНОЇ РОБОТИ

Укладач:

А.Л. Концевой, канд. техн. наук, доцент.

Відповідальний редактор І.М. Астрелін, докт. техн. наук, професор.

Рецензент: І.Ф. Хірх-Ялан, канд. техн. наук, доцент кафедри технології електрохімічних виробництв хіміко-технологічного факультету.

За редакцією укладача

Зміст

Вступ.....	4
Завдання розрахунково – графічної роботи.....	5
1 Розрахунок рівноважного ступеня перетворення.....	9
2 Матеріальний розрахунок (баланс) виробництва	11
3 Тепловий (енергетичний) баланс.....	14
4 Обґрунтування типу реактора та розрахунок його габаритів	19
Список рекомендованої літератури	21
Захист розрахунково - графічної роботи	21
Контрольні питання самоперевірки знань перед захистом РГР.....	22

ВСТУП

Хіміко-технологічний факультет готує бакалаврів, спеціалістів і магістрів виробничо-технологічної, проектно-конструкторської і дослідницької діяльності в галузі розробки та експлуатації хімічних виробництв, що вимагає знання технологічних особливостей процесів, закономірностей вибору технологічного режиму, апаратного оформлення, вимог раціонального використання сировинних та паливно-енергетичних ресурсів, врахування питань охорони навколишнього середовища. Власне, ці базові знання студент отримує при вивченні дисципліни «Загальна хімічна технологія» і використовує їх при засвоєнні спеціальних дисциплін професійної спрямованості.

Виконання розрахунково – графічної роботи (РГР) сприятиме засвоєнню і поглибленому вивченню кредитного модуля «Основні закономірності» дисципліни «Загальна хімічна технологія»

Дані методичні рекомендації визначають порядок виконання, обсяг, зміст РГР і порядок її захисту та передбачає виконання рівноважного, матеріального, теплового і конструктивного розрахунків відповідного хіміко-технологічного процесу на рівні основного апарату.

Структура пояснювальної записки (обсяг до 15 с.): титульний аркуш; завдання; основна частина з чотирьох розділів; ескіз основного апарата, висновки, список використаної літератури.

ЗАВДАННЯ ДО РОЗРАХУНКОВО – ГРАФІЧНОЇ РОБОТИ

Далі пропонується 8 завдань А, Б, В, Г, ..., З, в кожному з яких значення вихідних даних залежать від номера варіанта. Вид завдання і номер варіанта N визначає викладач. Наприклад, А5 означає завдання А, для якого N=5. *Наведені в завданнях залежності константи рівноваги (у вигляді $\lg K_p$) від температури передбачають, що у виразах константи рівноваги парціальні тиски продуктів (у відповідних степенях) знаходяться у чисельнику, а вихідних речовин – в знаменнику.*

Завдання А. Виробництво технологічного газу

Для реакції $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_2 + \text{CO}_2 + Q = 42,3 \cdot 10^3 \text{ кДж/кмоль}$
скласти матеріальний баланс на отримання N т водню на годину. Ступінь досягнення рівноваги дорівнює 0,95, температура на виході реактора, К: $T^k = 683 + 2N$; вихідні концентрації (молярні частки, %): оксиду карбону (II) $20 + 0,2 N$, водяної пари $65 + 0,3 N$, решта – азот, тиск – 3,0 МПа. Розрахувати і критично оцінити початкову температуру суміші, якщо процес відбувається в адіабатичному режимі. Обґрунтувати конструкцію реактора і обчислити об'єм каталізатора, якщо об'ємна швидкість за парогазовою сумішшю дорівнює 5000 год^{-1} . Література [1 - 5].

Залежність константи рівноваги від температури T:
 $\lg K_p = 2203,24/T + 5,1588 \cdot 10^{-05} \cdot T + 2,5426 \cdot 10^{-07} \cdot T^2 - 7,4617 \cdot 10^{-11} \cdot T^3 - 2,3$.

Завдання Б. Виробництво сульфатної (сірчаної) кислоти

Для реакції $\text{SO}_2 + 0,5\text{O}_2 \leftrightarrow \text{SO}_3 + Q = 94,5 \cdot 10^3 \text{ кДж/кмоль}$
скласти матеріальний баланс на отримання N т SO_3 на годину. Температура на виході реактора, К: $T^k = 753 + 2N$, ступінь досягнення рівноваги дорівнює 0,9, тиск атмосферний. Вихідні концентрації (молярні частки, %): оксиду сульфуру (IV) $7 + 0,1N$, кисню $10 + 0,1N$, решта – азот. Розрахувати і критично оцінити початкову температуру суміші, якщо

процес відбувається в адіабатичному режимі. Обґрунтувати конструкцію реактора і розрахувати об'єм каталізатора, якщо об'ємна швидкість дорівнює 12000 год^{-1} . Література [1 - 5].

Залежність константи рівноваги від температури T якщо тиск надано в атм: $\lg K_p = 4905,5/T - 4,6455$.

Залежність константи рівноваги від температури T якщо тиск надано в Па: $\lg K_p = 4905,5/T - 7,1552$.

Завдання В. Синтез етанолу

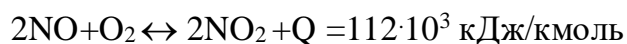
Для газофазної реакції $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + Q = 46 \cdot 10^3 \text{ кДж/кмоль}$ скласти матеріальний баланс на отримання N т продукту на годину. Ступінь досягнення рівноваги дорівнює 0,96. Температура на виході реактора, К: $T^k = 553 + 0,2N$, концентрація C_2H_4 у вихідній суміші (молярні частки, %): $55 + 0,2 N$, решта – водяна пара; тиск (МПа) $6 + 0,1N$. Розрахувати початкову температуру суміші, якщо процес відбувається в адіабатичному режимі. Обґрунтувати конструкцію реактора і обчислити об'єм каталізатора, якщо об'ємна швидкість дорівнює 2000 год^{-1} . Література [4,5].

Залежність константи рівноваги від температури T :

$$\lg K_p = 1090/T - 4,71 \cdot \lg T + 0,00235 \cdot T + 7,05.$$

Завдання Г. Виробництво нітратної (азотної) кислоти

Для реакції



скласти матеріальний баланс на отримання N т продукту на годину. Ступінь досягнення рівноваги 0,97, температура на виході реактора, К: $T^k = 380 + N$, тиск (МПа) $0,7 + 0,1 N$, початкова концентрація (молярні частки, %): оксиду азоту (II) $9 + 0,1 N$, кисню $7 + 0,1N$, решта – азот. Розрахувати і критично оцінити початкову температуру, якщо процес

відбувається в адіабатичному режимі. Обґрунтувати конструкцію реактора та розрахувати його об'єм, якщо інтенсивність дорівнює $1000 \text{ м}^3/(\text{м}^3 \cdot \text{годину})$. Література [1 - 5].

Залежність константи рівноваги від температури T:

$$\lg K_p = 5749/T - 1,75 \cdot \lg T + 0,0005 \cdot T - 2,83.$$

Завдання Д. Синтез аміаку

Для реакції $0,5\text{N}_2 + 1,5\text{H}_2 \leftrightarrow \text{NH}_3 + Q = 56 \cdot 10^3 \text{ кДж/кмоль}$

скласти матеріальний баланс на отримання N т аміаку на годину. Ступінь досягнення рівноваги дорівнює 0,95; тиск (МПа) $30 + 0,1N$, температура, К: на виході з реактора $T^k = 753 + N$; вихідні концентрації (молярні частки, %): азоту $23 + 0,1N$, водню $69 + 0,3N$, решта – аргон. Розрахувати і критично оцінити початкову температуру суміші, якщо процес відбувається в адіабатичному режимі. Обґрунтувати конструкцію реактора і обчислити об'єм каталізатора, якщо об'ємна швидкість дорівнює 20000 год^{-1} . Література [1 - 5]. Залежність константи рівноваги від температури T:

$$\lg K_p = 2074,8/T - 2,4943 \cdot \lg T - 0,0001256 \cdot T + 1,8564 \cdot 10^{-07} \cdot T^2 + 2,206.$$

Завдання Е. Синтез метанолу

Для реакції $\text{CO} + 2\text{H}_2 \leftrightarrow \text{CH}_3\text{OH} + Q = 109 \cdot 10^3 \text{ кДж/кмоль}$

скласти матеріальний баланс на отриманий N т метанолу. Ступінь досягнення рівноваги дорівнює 0,94, температура на виході реактора, К:

$T^k = 523 + N$; тиск (МПа) $5 + 0,1N$; вихідні концентрації (молярні частки, %): оксиду карбону (II) $20 + 0,1N$; водню $75 + 0,1N$; решта – метан. Розрахувати і критично оцінити початкову температуру суміші, якщо процес відбувається в адіабатичному режимі. Обґрунтувати конструкцію реактора і обчислити об'єм каталізатора, якщо об'ємна швидкість дорівнює 10000 год^{-1} . Література [1, 4, 5].

Залежність константи рівноваги від температури T:

$$\lg K_p = 3971/T - 7,492 \cdot \lg T + 0,00177 \cdot T - 3,11 \cdot 10^{-08} \cdot T^2 + 9,218.$$

Завдання Є. Виробництво технологічного газу

Для реакції $\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow 3\text{H}_2 + \text{CO}$ $-Q = 206 \cdot 10^3$ кДж/кмоль

скласти матеріальний баланс на отримання N, т, водню на годину. Ступінь досягнення рівноваги 0,92; температура на виході з реактора, К: $T^k = 1073 + N$, тиск (МПа) $2,8 + 0,1 N$; вихідні концентрації (молярні частки, %): метану $22 + 0,1N$, решта – водяна пара. Розрахувати і критично оцінити початкову температуру суміші, якщо процес відбувається в адіабатичному режимі. Обґрунтувати конструкцію реактора і обчислити об'єм каталізатора, якщо об'ємна швидкість дорівнює 500 год^{-1} . Література [1 - 5]. Залежність константи рівноваги від температури T:

$$\lg K_p = -9840/T + 8,343001 \cdot \lg T - 0,002059 \cdot T + 1,7810^{-07} \cdot T^2 - 11,96.$$

Завдання З. Виробництво нітратної (азотної) кислоти

Для реакції $4\text{NH}_3 + 5\text{O}_2 \leftrightarrow 4\text{NO} + 6\text{H}_2\text{O} + Q = 907 \cdot 10^3$ кДж/кмоль

скласти матеріальний баланс на отримання N т оксиду азоту (II) на годину. Ступінь досягнення рівноваги дорівнює 1, тиск 0,73 МПа, температура на виході реактора, К: $T^k = 1123 + 2 N$, вихідні концентрації (молярні частки, %): аміаку $9 + 0,1 N$; кисню $17 + 0,1 N$, решта – азот. Розрахувати початкову температуру суміші, якщо процес відбувається в адіабатичному режимі. Обґрунтувати конструкцію реактора і розрахувати масу каталізатора, якщо інтенсивність його роботи дорівнює $3,84 \text{ т NH}_3/(\text{кг} \cdot \text{добу})$. Література [1 - 5].

Залежність константи рівноваги від температури T:

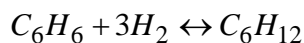
$$\lg K_p = 47500/T + 1,75 \cdot \lg T + 8,4.$$

В розділах 1 – 4 надано необхідний теоретичний матеріал з прикладами розрахунків, що відповідають порядку виконання, обсягу і змісту розрахункової роботи.

1 РОЗРАХУНОК РІВНОВАЖНОГО СТУПЕНЯ ПЕРЕТВОРЕННЯ

Усі індивідуальні завдання з роботи передбачають складення матеріального балансу промислових процесів, заснованих на оборотних газофазних реакціях. Це потребує насамперед розрахунку (обсягом до 2-3 с.) рівноважного ступеня перетворення X_p за наступною методикою.

Приклад 1.1. Обчислити рівноважний склад суміші для реакції



при температурі 525 К і тиску 1,0 МПа (10 атм). Склад вихідної суміші (об'ємна частка, %): $C_6H_6 - 20$; $H_2 - 78$; $C_6H_{12} - 2$. Залежність константи рівноваги $K_p = f(T)$ (одиниця тиску - атмосфера) [4, додаток 5] :

$$\lg K_p = \lg \frac{P_{C_6H_{12}}}{P_{C_6H_6} \cdot P_{H_2}^3} = \frac{9530}{T} - 9,9194 \cdot \lg T + 2,285 \cdot 10^{-3} T + 8,565$$

Розв'язання. Приймають кількість вихідної суміші рівної 1 моль. У стані рівноваги число моль компонентів буде:

$$n_{C_6H_6} = 0,2 - 0,2 X_p; \quad n_{H_2} = 0,78 - 0,2 \cdot 3 X_p;$$

$$n_{C_6H_{12}} = 0,02 + 0,2 X_p; \quad \Sigma n = 1 - 0,6 X_p$$

Увага! В багатьох випадках вихідна суміш містить інертні компоненти – ті, що не приймають участь в хімічних перетвореннях. Їх кількість (моль) не змінюється в ході реакції і враховується у виразі

$$\Sigma n = 1 +/ - \quad , \text{ що починається обов'язково з 1.}$$

Дана газофазна реакція відбувається із великою зміною об'єму, що необхідно врахувати в подальших розрахунках.

Концентрації компонентів (молярні доли) у стані рівноваги ($N_i = n / \Sigma n_i$):

$$N_{C_6H_6} = \frac{0,2 \cdot (1 - X_P)}{1 - 0,6 \cdot X_P}; N_{H_2} = \frac{0,78 - 0,6 \cdot X_P}{1 - 0,6 \cdot X_P}; N_{C_6H_{12}} = \frac{0,02 + 0,2X_P}{1 - 0,6X_P};$$

Для обчислення X_P підставляємо значення рівноважних концентрацій (з врахуванням того, що парціальний тиск компонента $P_i = N_i P$) у рівняння константи рівноваги $K_p = \frac{P_{C_6H_{12}}}{P_{C_6H_6} \cdot P_{H_2}^3}$. Отримуємо рівняння

$$K_p = \left(\frac{1 - 0,6X_P}{P} \right)^3 \cdot \frac{(0,02 + 0,2 \cdot X_P)}{(0,2 - 0,2 \cdot X_P) \cdot (0,78 - 0,6 \cdot X_P)^3} \quad (1.1)$$

$$\left(\frac{1 - 0,6X_P}{P} \right)^3 \cdot \frac{(0,02 + 0,2 \cdot X_P)}{(0,2 - 0,2 \cdot X_P) \cdot (0,78 - 0,6 \cdot X_P)^3} - K_p = 0 \quad (1.2)$$

Увага! Тиск в рівняння підставляти в атм, якщо використано залежності $K_p = f(T)$ за наданими в завданні формулами або за посібником [4, додаток 5].

Обчислення X_P із останнього рівняння на ПК дає значення $X_P = 0,9986$. Тоді концентрації компонентів реакції в стані рівноваги: $N_{C_6H_6} = 7 \cdot 10^{-4}$; $N_{H_2} = 0,4518$; $N_{C_6H_{12}} = 0,5475$.

Значення X_P може бути розраховано шляхом побудови графіку $K_p = f(X_P)$ – рівняння (1.1), де X_P змінюється в діапазоні 0,01 – 0,999 (7 – 10 точок). Визначають X_P за допомогою побудованого графіку при значенні константи рівноваги K_p , що розраховано при заданій температурі.

Сучасна технологія розрахунку X_P в середовищі *Excel* полягає в наступному:

- розрахувати в окремій комірці (наприклад, A15) значення константи рівноваги: $K_p = f(T)$.

- записати в будь-яку комірку (наприклад B15) після знаку «=» ліву частину рівняння (1.2) з посиланням на комірку з розрахованим K_p (A15). Використати при цьому (посилання) адресу порожньої комірки під значення X_P , що треба знайти (наприклад, C15).

- встановити курсор на комірці В15. Ввійти в меню Сервіс, надбудова «Підбір параметра», з'являється діалогове вікно: «Встановити в комірку» - посилання на комірку, в якій записана ліва частина рівняння (1.2) – В15, «Значення:» ввести з клавіатури 0, «Змінюючи значення комірки» - посилання на порожню комірку, де буде видано рішення (адреса комірки значення X_p , – С15), натиснути кнопку ОК.

Підвищення точності розрахунку: «Сервіс, Параметри, Обчислення», відзначити «ітерації», змінити «Відносна похибка:» на 0,000001, наприклад. При зміні початкових даних або точності розрахунку повторити знову процедуру підбору параметра.

Увага! При запису в Excel типова помилка: некоректний запис знаменника. Вірно, якщо увесь вираз знаменника після знаку «/» розміщується в дужках.

2 МАТЕРІАЛЬНИЙ РОЗРАХУНОК (БАЛАНС)

ВИРОБНИЦТВА

За ступенем досягнення рівноваги η розраховують фактичний ступінь перетворення $X = \eta \cdot X_p$, що дозволяє визначити витратні коефіцієнти за сировиною, кількістю і складом побічних продуктів, відходів, викидів. Матеріальний баланс (до 2 – 4 с. тексту) може бути складено на одиницю часу (добу, годину), на одиницю маси сировини або готової продукції (тонну, кілограм).

Матеріальний баланс хіміко-технологічного процесу (ХТП) – математичний вираз закону збереження маси речовини, відповідно до якого маса всіх видів сировини і матеріалів, що надходять на переробку (прихід), дорівнює масі отриманих продуктів і втрат (витрати). Завданням матеріального балансу в рамках розрахункової роботи є визначення витратних коефіцієнтів усіх вихідних реагентів за заданою продуктивністю

за цільовим продуктом, а також обчислення складу вихідної суміші і продуктів реакції.

Основою для матеріальних розрахунків ХТП є рівняння хімічних реакцій (основної та побічних). Результати матеріальних розрахунків використовують як вихідні дані для визначення габаритів реактора.

Для реакції $aA + bB \leftrightarrow rR + sS$ (2.1)

для заданої кількості G_R (кг) цільового продукту практичний витратний коефіцієнт (кг) за компонентом А становить:

$$G_A^0 = \frac{G_R \cdot M_A \cdot a}{M_R \cdot r \cdot X}, \quad (2.2)$$

де M_A, M_R - молярні маси компонентів А і R; X - ступінь перетворення за компонентом А, взятим у нестачі щодо компонента В, частка; об'єм компонента А (m^3) при цьому становить $V_A^0 = G_A^0 / \rho_A$, де ρ_A - питома вага компонента А, $кг/м^3$. Вихідні маси G^0 і об'єм V^0 усіх компонентів реакції

$$G^0 = G_A^0 / m_A^0; \quad V^0 = V_A^0 / N_A^0, \quad (2.3)$$

де m_A^0, N_A^0 масова і об'ємна (молярна) частки речовини А у вихідній суміші відповідно.

Вихідна маса і об'єм речовини В /аналогічно R і S /

$$G_B^0 = G^0 \cdot m_B^0; \quad V_B^0 = N_B^0 \cdot V^0, \quad (2.4)$$

Маса і об'єм продукту S, що утворився у ході реакції,

$$G_S = \frac{G_R \cdot M_S \cdot S}{M_R \cdot r}; \quad V_S = G_S / \rho_S, \quad (2.5)$$

І, нарешті, кількості А, В, R, S після перебігу реакції (2.1) дорівнюють :

$$G_A^K = G_A^0 \cdot (1 - X); \quad V_A^K = V_A^0 \cdot (1 - X) = G_A^K / \rho_A; \quad (2.6)$$

$$G_B^K = G_B^0 - \frac{G_A^0 \cdot X \cdot M_B \cdot b}{M_A \cdot a}; \quad V_B^K = V_B^0 - V_A^0 \cdot X \cdot b / a = \frac{G_B^K}{\rho_B}; \quad (2.7)$$

$$G_R^K = G_R^0 + G_R; \quad V_R^K = \frac{G_R^K}{\rho_R} = V_R^0 + V_R; \quad (2.8)$$

$$G_S^K = G_S^0 + G_S; \quad V_S^K = \frac{G_S^K}{\rho_S} = V_S^0 + V_S. \quad (2.9)$$

Обчислення об'ємів суміші і компонентів виконують для рідких і газоподібних речовин.

Приклад 2.1. Для газофазної реакції $C_6H_6 + 3H_2 \leftrightarrow C_6H_{12}$ скласти матеріальний баланс із розрахунку на отримання 1000 кг C_6H_{12} . Склад вихідної суміші (мол. частка, %): $C_6H_6 - 20$; $C_6H_{12} - 2$; $H_2 - 78$. Ступінь, досягнення рівноваги у $\eta = 0,9$. Температура 525 К, тиск 1 МПа.

Розв'язання.

За даними прикладу 1.1 рівноважний ступінь перетворення $X_p = 0,9906$. Тоді практичний ступінь перетворення за C_6H_6 : $X_p = 0,9 \cdot 0,9986 = 0,9$.

Молярні маси учасників реакції: $M_{C_6H_6} = 78$, $M_{H_2} = 2$, $M_{C_6H_{12}} = 84$.

Значення питомої ваги (густини) газів при нормальних умовах можуть бути легко визначені за формулою $\rho = M_i/22,4$ [кг/м³].

Примітка 1: для газів молярна частка дорівнює об'ємній відповідно до закону Авогадро.

Примітка 2: при складанні матеріальних балансів об'єми газів визначають за нормальних умов (атмосферний тиск, температура 273 К), якими б не були робочі температура та тиск (у нашому прикладі бензол і циклогексан за нормальних умов є рідинами).

Для учасників реакції $\rho_{C_6H_6} = 76/22,4 = 3,482$; $\rho_{H_2} = 2/22,4 = 0,09$; $\rho_{C_6H_{12}} = 84/22,4 = 3,75$, тоді за формулами (2.2 - 2.4) отримаємо:

$$G_{C_6H_6} = \frac{1000 \cdot 78}{84 \cdot 0,9} = 1032 \text{ кг};$$

$$V^o_{C_6H_6} = 1032/3,482 = 296,4 \text{ м}^3; \quad V^o = 296,4/0,2 = 1481 \text{ м}^3;$$

$$V^o_{H_2} = 1481 \cdot 0,78 = 1155 \text{ м}^3;$$

$$G^o_{H_2} = V^o_{H_2} \cdot \rho_{H_2} = 1155 \cdot 0,09 = 104 \text{ кг};$$

$$V_{C_6H_{12}} = 1481 \cdot 0,02 = 29,6 \text{ м}^3;$$

$$G^o_{C_6H_{12}} = 29,6 \cdot 3,75 = 111 \text{ кг}.$$

Результати обчислень заносимо до табл.2.1, стаття "Прихід".

Після реакції залишається у суміші (за формулами (2.6 – 2.8):

$$G^{K}C_6H_6 = 1032 (1 - 0,9) = 103,3 \text{ кг};$$

$$V^{K}C_6H_6 = 296,4 (1 - 0,9) = 29,6 \text{ м}^3.$$

$$G^{K}_{H_2} = 104 - \frac{1031,79 \cdot 0,9 \cdot 2 \cdot 3}{78} = 32,7 \text{ кг};$$

$$V^{K}H_2 = 1155,57 - 296,3 \cdot 0,9 \cdot 3 = 355,4 \text{ м}^3;$$

$$G^{K}C_6H_{12} = 111 + 1000 = 1111 \text{ кг};$$

$$V^{K}C_6H_{12} = 1111/3,75 = 296 \text{ м}^3.$$

Отримані значення мас і об'ємів вносимо до відповідної колонки та рядка табл. 2.1 (стаття витрат).

Таблиця 2.1 – Матеріальний баланс

Компонент	Прихід				Витрати			
	кг	%	м ³	%об.	кг	%	м ³	%об.
<i>C₆H₆</i>	1032	82,8	296,4	20	103,3	8,3	29,6	4,4
<i>H₂</i>	104	8,3	1155	78	32,7	2,6	355,4	52,1
<i>C₆H₆</i>	111	8,9	29,6	2	1111	89,1	296	43,5
Разом	1247	100	1481	100	1247	100	681	100

Природно, що збігаються маси вихідних та кінцевих продуктів, але не збігаються їх об'єми, оскільки реакція відбувається із зменшенням об'єму.

Відзначимо, що в багатьох випадках вихідна суміш містить інертні компоненти – ті, що не приймають участь в хімічних перетвореннях. Їх маса і об'єм не змінюються в ході реакції, але враховуються обов'язково у матеріальному балансі (статті прихід і витрати) і в інших розрахунках.

3 ТЕПЛОВИЙ (ЕНЕРГЕТИЧНИЙ) БАЛАНС

Тепловий баланс складається з метою:

- розрахунку початкової (кінцевої) температури матеріальних потоків;

- розрахунку втрат тепла до довкілля;
- розрахунку кількості теплоносіїв (холодоагентів);
- розрахунку поверхні теплообміну та ін.

Методика розрахунку початкової температури T^0 вихідної суміші надана нижче. В результаті розрахунку T^0 необхідно критично оцінити можливість адіабатичного перебігу реакції і вирішити потребу відведення (підведення) теплоти з урахуванням зауважень, наведених далі у цьому розділі.

Енергетичний баланс складається на основі закону збереження енергії, відповідно до якого у замкненій системі сума всіх видів енергії є сталою. Звичайно для ХТП складають тепловий баланс, при цьому закон збереження енергії формулюють таким чином: прихід теплоти $Q_{\text{пр}}$ у даному апараті (процесі) повинен дорівнювати витраті теплоти $Q_{\text{вит}}$ з того самого апарату (процесу). В даному розділі розглянуто принцип складання теплового балансу для окремого апарату. Складається тепловий баланс так само, як і матеріальний, на одиницю цільового продукту, одиницю вихідної сировини або на задану продуктивність (годинну або добову).

Результати обчислення теплового балансу істотно впливають на вибір конструкції реактора. Значна кількість реакторів або їх окремі секції (наприклад, каталізаторні полиці) працюють в адіабатичному режимі, тобто без теплообміну з довкіллям. У політермічному (неадіабатичному) реакторі необхідний температурний профіль реалізується підведенням (відведенням) теплоти за допомогою теплообмінних елементів і відповідних теплоносіїв.

Для адіабатичного реактора як ідеального витіснення, так і ідеального змішування:

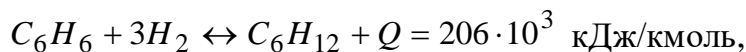
$$Q_{\text{пр}} = Q_{\text{фіз.пр.}} \pm Q_{\text{х.р.}} = n^o \bar{C}^o_P (T^o - 273) \pm n^o N^o_A X q_A;$$

$$Q_{\text{вит}} = Q_{\text{фіз.вит}} = \bar{C}^K_P (T^K - 273)$$

і оскільки $Q_{\text{пр}} = Q_{\text{вит}}$, отримуємо:

$$n^o \bar{C}_{oP}^o (T^o - 273) \pm n^o N_A^o X q_A = n^K \bar{C}_{oP}^K (T^K - 273), \quad (3.1)$$

де n^o, n^K - кількість вихідних речовин і продуктів реакції, кмоль; C_{oP}^o, C_{oP}^K - середня теплоємність вихідної суміші і продуктів реакції, кДж/(кмоль К); T^o, T^K - температура вихідної суміші і продуктів реакції, К; N_A^o - початкова концентрація вихідного компонента, який взято у нестачі, молярна частка; X - ступінь перетворення за компонентом А, частки од.; q_A - питомий тепловий ефект, позитивний для екзотермічних реакцій, негативний для ендотермічних реакцій, кДж/кмоль; $q_A = \frac{Q}{a}$, де Q - тепловий ефект реакції; a - стехіометричний коефіцієнт компонента А (див. рівняння (2.1)). Так, для розглянутої раніше реакції



$q_{C_6H_6} = Q = 206 \cdot 10^3$ кДж/кмоль. У випадку, якщо реакція відбувається без зміни кількості кмоль (без зміни об'єму для газофазних реакцій) або якщо цією зміною можна знехтувати, $n^o = n^K$ і рівняння (3.1) набирає вигляду при $\bar{C}_P^o \approx \bar{C}_P^K$:

$$T^K = T^o \pm \frac{N_A^o \cdot q_A \cdot X}{C_P} = T^o \pm \Delta T, \quad (3.2)$$

де ΔT - адіабатичне розігрівання або охолодження суміші.

Відмітимо важливу особливість розрахунку фізичної теплоти потоків, а саме використання по суті температури у °С: $(T^o - 273)$ або $(T^K - 273)$. При обчисленні за рівняннями (3.1) і (3.2) потрібно звернути особливу увагу на розмірності використаних значень теплових ефектів кДж/кмоль і теплоємності кДж/(кмоль·гр.) – під гр. необхідно розуміти зміну на один градус К або °С, значення теплоємності від цього не залежить згідно визначення теплоємності.

Рівняння (3.1), (3.2) дозволяють визначити адіабатичний розігрів для екзотермічної реакції або охолодження для ендотермічної реакції і вирішити питання про саму можливість роботи в адіабатичному режимі.

Це у свою чергу визначає конструкцію реактора. Так, застосування багатополічних реакторів для оборотних екзотермічних реакцій з проміжним охолодженням суміші визначається двома чинниками: вихідна температура суміші не повинна бути нижчою за температуру запалювання каталізатора T_{zan} , а температура суміші на виході із шару не повинна перевищувати межу термічної стійкості каталізатора T_{cp} . Розігрівання (охолодження) суміші за рівняннями (3.1) і (3.2) визначаються початковою концентрацією, тепловим ефектом і, головне, ступенем перетворення X . Для досягнення високих значень X у межах T_z і T_{cp} необхідно організувати ступінчасте або безперервне відведення (підведення) теплоти. При користуванні цими рівняннями необхідно пам'ятати, що кількість кіло моль газоподібної речовини, наприклад речовини А, визначають через його масу G_A (кг), об'єм V_A (м³) і молярну масу M_A :

$$n_A = G_A / M_A = V_A / 22.4. \quad (3.3)$$

Теплоємність суміші C_P для реакції (2.1) визначають за правилом адитивності:

$$\bar{C}_P = \bar{C}_{pA} N_A + \bar{C}_{pB} N_B + \bar{C}_{pR} N_R + \bar{C}_{pS} N_S. \quad (3.4)$$

Значення C_P для конкретних компонентів залежно від температури наведені у [7] або [4, додаток X]. Відмітимо, що тепловий баланс можна скласти тільки на основі результатів розрахунку матеріального балансу, при цьому знання значення ступеня перетворення X є обов'язковим.

Приклад 3.1. Обчислимо початкову температуру суміші для даних прикладу 2.1, де відома кінцева температура 525 К і результати матеріального розрахунку надано у таблиці 2.1. Середні теплоємності учасників реакції, кДж/ (кмоль · К) при $T^K = 525$ К приймаємо рівним:

$$\bar{C}_{p_{H_2}} = 29.2; \quad \bar{C}_{p_{C_6H_6}} = 141.8; \quad \bar{C}_{p_{C_6H_{12}}} = 190.68.$$

Як видно з таблиці 2.1, реакція відбувається із значним зменшенням об'єму. Це означає, що розрахунок T^o необхідно вести за рівнянням (3.1), із якого:

$$T^0 = 273 + \left[n^k \bar{C}_p^k (T^k - 273) - n^0 N_{C_6H_6}^0 X_{q_{C_6H_6}} \right] / (n^0 \bar{C}_p^0).$$

Кількість вихідної і кінцевої суміші, кмоль:

$$n^0 = V^0 / 22.4 = 1481.5 / 22.4 = 66.14; \quad n^k = V^k / 22.4 = 681.48 / 22.4 = 30.42.$$

Визначаємо теплоємності вихідної і кінцевої суміші, кДж/(кмоль·К), за рівнянням (3.4) з використанням значень концентрацій з таблиці 2.1 (пам'ятаємо, що для газів об'ємна частка дорівнює молярній):

$$C_{oP}^0 = 0,2 \cdot 141,18 + 0,78 \cdot 29,2 + 0,02 \cdot 190,68 = 54,83;$$

$$C_{oP}^k = 0,0435 \cdot 141,18 + 0,5217 \cdot 29,2 + 0,4348 \cdot 190,68 = 104,28.$$

Початкова температура за вище наведеним рівнянням дорівнює, К:

$$T^0 = 273 + \left[30,42 \cdot 104,2 \cdot (525 - 273) - 66,14 \cdot 0,2 \cdot 0,9 \cdot 206 \cdot 10^3 \right] / (66,14 \cdot 54,63) = -182,8.$$

Отримана температура не має фізичного сенсу, що свідчить про неможливість адіабатичного процесу для умов даної реакції. Саме тому гідрування бензолу проводять у трубчастому (неадіабатичному) реакторі, де ступінь перетворення бензолу сягає 90%, з відводом теплоти у міжтрубному просторі. Завершення процесу відбувається у 2-му ступені – поличному адіабатичному реакторі.

У випадку політермічного (неадіабатичного) реактора задаються початковою температурою суміші з технологічних міркувань і розраховують кількість теплоти, що відводиться (для екзотермічної реакції) або підводиться (для ендотермічної реакції), з теплоносієм $Q_{Т.Н}$ за таким рівнянням:

$$n^0 \cdot \bar{C}_p^0 \cdot (T^0 - 273) \pm n^0 \cdot N_A^0 \cdot X \cdot q_A = n^k \cdot \bar{C}_p^k \cdot (T^k - 273) \pm Q_{Т.Н}. \quad (3.5)$$

В рівнянні (3.5) знак «+» у лівій частині відповідає екзотермічному ефекту реакції, а в правій – необхідності відведення теплоти теплоносієм. Для ендотермічного процесу застосовують знак «-» в обох частинах рівняння (3.5).

При припущеннях, прийнятих для рівняння (3.2), отримаємо:

$$T^k = T^0 \pm \frac{N_A^0 \cdot q_A}{C_p} \pm \frac{Q_{Т.Н}}{n^0 \cdot C_p} = T^0 \pm \Delta T \pm \Delta T_{Т.Н},$$

де $\Delta T_{Т.Н}$ - пониження (підвищення) температури реакційної суміші за рахунок відведення (підведення) теплоти теплоносієм. Так, у нашому прикладі при $T^0 = 473$ К, з рівняння (3.5) отримуємо:

$$Q_{Т.Н} = n^0 \cdot \overline{C}_p^0 \cdot (T^0 - 273) + n^0 \cdot N_A^0 \cdot X \cdot q_A - n^K \cdot \overline{C}_p^K \cdot (T^K - 273);$$

$$Q_{Т.Н.} = 66,14 \cdot 54,83 \cdot (473 - 273) + 66,14 \cdot 0,2 \cdot 0,9 \cdot 206 \cdot 10^3 - 30,42 \cdot 104,26 \cdot (525 - 273) =$$

$$= 2384865 \text{ кДж}.$$

Таким чином, при отриманні 1000 кг C_6H_{12} необхідно відвести 2,385 ГДж теплоти при допустимому розігріванні суміші від 473 до 525 К.

Загальний висновок: початкову температуру T^0 визначають за рівнянням (3.1) при відсутності зміни або при незначній (до 5%) зміні об'єму суміші в ході реакції, інакше – за рівнянням (3.2).

4 ОБҐРУНТУВАННЯ ТИПУ РЕАКТОРА ТА РОЗРАХУНОК ЙОГО ГАБАРИТІВ

У цьому розділі (на 2–3 с. тексту) необхідно класифікувати реактор за такими ознаками:

- гідродинамічні умови (реактори ідеального змішування РІЗ і реактори ідеального витискування РІВ);
- умови теплообміну (реактори ізотермічні, адіабатичні і неадіабатичні);
- фазовий склад реакційної суміші (реактори для гомогенних, гетерогенних і гетерогенно-каталітичних процесів);
- спосіб організації процесу (реактори безперервні, періодичні та напівбезперервні);
- характер зміни параметрів процесу (реактори для стаціонарних і нестаціонарних процесів);
- конструктивні характеристики (ємнісні реактори, колонні реактори, каталітичні реактори з нерухомим, рухомим і киплячим шаром

каталізатора, поличні реактори, реактори типу теплообмінників, реактори типу реакційної печі).

Потім необхідно викласти вимоги до використаного у схемі реактора, надати його стислий опис та ескіз на форматі А4 і розрахувати об'єм реакційного простору або об'єм каталізатора для виробництва заданої кількості продукту. Зазначимо, що для безперервних реакторів їх об'єм V_p може бути визначений за формулою $V_p = R \cdot \tau$, де R – витрата суміші, $\text{м}^3/\text{с}$; τ час перебування, с. Час перебування обчислюють з кінетичних рівнянь, що наведені в посібниках [1-6]. Числове інтегрування рівняння швидкості процесу вимагає використання комп'ютера.

Існує також спрощений метод обчислення реакційного об'єму за відомими із практичних даних значеннями інтенсивності процесу I [м^3 суміші/ $(\text{м}^3 \text{ год.})$]. Для каталітичних процесів об'єм гранульованого каталізатора V_{cat} , від якого залежить розмір реактора, визначають за об'ємною швидкістю V_v [м^3 суміші/ $(\text{м}^3_{\text{кат}} \cdot \text{год}) = \text{год}^{-1}$]: $V_{\text{cat}} = R_v / V_v$, де R_v – витрата суміші за даними матеріального розрахунку, $\text{м}^3/\text{год}$. Витрату газової суміші виражають за нормальних умов як і при складанні матеріального балансу. Для каталізаторів у вигляді сіток масу каталізатора визначають за інтенсивністю I [$\text{т}/(\text{кг}_{\text{кат}} \cdot \text{добу})$]: $g_{\text{cat}} = G/I$, де G – продуктивність процесу, $\text{т}/\text{добу}$.

Використовуючи дані розрахунків X_p , X і T^0 , необхідно подати на одному графіку залежності $X_p = f(T)$; $X = f(T)$ для розглянутого за темою завдання реактора і пояснити їх хід.

ВИСНОВКИ

Містять констатуючі результати з кожного виду розрахунку, в тому числі можливість або неможливість проведення процесу в адіабатичних умовах, коротку характеристику типу і конструкції реактора.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

Наводяться джерела, що реально використані при виконання роботи, зокрема з нижченаведених.

СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. **Кутепов, А.М.** Общая химическая технология. / А.М. Кутепов, Т.И. Бондарева, М.Г. Беренгартен. - М.: Высш.шк., 1990. - 520 с.
2. **Амелин, А.Г.** Общая химическая технология. / А.Г Амелин. М.: Химия, 1977.- 400 с.
3. **Яворський, В.Т.** Загальна хімічна технологія. / В.Т. Яворський, Т.В. Перекупко, З.О. Знак, Л.В. Савчук. - Львів: НУ «Львівська політехніка», 2005.-552 с.
4. Расчеты химико-технологических процессов / Под ред. И.П.Мухленова. - Л.: Химия, 1962. - 248 с.
5. **Мухленов, И.П.** Основы химической технологии. / И.П. Мухленов, А.Е. Горштейн, Е.С. Тумаркина. - М.: Высш.шк., 1991. - 463 с.
6. **Смирнов, Н.Н.** Химические реакторы в примерах и задачах. / Н.Н. Смирнов, А.И. Волжинский. - Л.: Химия, 1986. - 224 с.
7. Краткий справочник физико-химических величин. /под ред. А.А. Равделя и А.М. Пономаревой. - СПб.: Специальная литература, 1998–232 с.

ЗАХИСТ РОЗРАХУНКОВО - ГРАФІЧНОЇ РОБОТИ

На захист допускаються РГР, що перевірені і підписані керівником. Для доповіді студентові надається до 5 хвилин. В доповіді необхідно привести основні результати проведених розрахунків, описати основний апарат, сформулювати умови підвищення ефективності його роботи. Після доповіді студент відповідає на запитання керівника РГР. Якість РГР і рівень його захисту в балах керівник оцінює згідно *Положення про рейтингову систему оцінювання*. Оцінка в 0 балів виставляється за

використання (плагіат) матеріалів інших студентів або при повній нездатності студента захистити основні положення РГР.

Захищена РГР (зшита пояснювальна записка) здається на кафедру ТНР та ЗХТ для зберігання.

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ САМОПЕРЕВІРКИ ЗНАНЬ ПЕРЕД ЗАХИСТОМ РГР

1. Технологічні показники хіміко-технологічного процесу (ХТП): потужність P , інтенсивність I , ступінь перетворення X , вихід продукту Φ , вибірність інтегральна ϕ і диференційна ϕ' ; швидкість хімічної реакції ω .

2. Визначення і розрахунок ступеня перетворення X_A і X_B для двох вихідних реагентів A і B , що взяті у стехіо- і нестехіометричному співвідношеннях.

3. Теоретичний G_T і практичний G_{TP} витратні коефіцієнти та їх розрахунок для простих і складних (оборотних, послідовних і паралельних) реакцій.

4. Хімічна рівновага. Закон діючих мас.

5. Константа рівноваги K_C , K_N , K_P і зв'язок між ними.

6. Рівноважні ступінь перетворення X_p і вихід продукту Φ_p . Принцип розрахунку X_p і рівноважного складу.

7. Принцип Ле-Шательє і його використання для визначення напрямку зсуву рівноваги при зміні температури T , тиску P і концентрації C учасників реакції.

8. Стадії і області перебігу гомогенного і гетерогенного ХТП.

9. Ізотермічний реактор ідеального витіснення (РІВ) і обчислення його об'єму за тривалістю перебування для необоротної і оборотної реакцій першого порядку. Графік $X=f(T)$.

10. Адіабатичний РІВ і обчислення його об'єму за часом перебування для необоротної і оборотної реакцій першого порядку. Графік $X=f(T)$. Тепловий баланс адіабатичного реактора.

11. Політермічний (неадіабатичний) РІВ і обчислення його об'єму для необоротної і оборотної реакцій першого порядку. Тепловий баланс неадіабатичного реактора.

12. Реактори для гетерогенно-каталітичних процесів. Необхідність і способи організації теплообміну в реакторах.

12.1. Реактори з фільтруючим шаром каталізатора /одно- і багатополічні/. Графіки $X=f(T)$ для екзо- і ендотермічних оборотних реакцій.

12.2. Трубчасті реактори для екзо- і ендотермічних оборотних реакцій. Графіки $X=f(T)$.

12.3. Реактори киплячого шару. Графік $X=f(T)$ для оборотної екзотермічної реакції.

Зразок титульного листа

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
"КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ"
ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ТЕХНОЛОГІЇ НЕОРГАНІЧНИХ РЕЧОВИН
ТА ЗАГАЛЬНОЇ ХІМІЧНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ

ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА
ДО РОЗРАХУНКОВО – ГРАФІЧНОЇ РОБОТИ З ДИСЦИПЛІНИ
ЗАГАЛЬНА ХІМІЧНА ТЕХНОЛОГІЯ

на тему:

Виробництво технологічного газу

Результат захисту ____ балів

Дата

Керівник:

_____/ас. Банюк К.М./

підпис

посада, прізвище

Виконавець:

Студент групи ХЕ -81

_____/Петренко В.О./

підпис

прізвище

Київ 201_

Зразок завдання

Хіміко-технологічний факультет НТУУ „КПІ”
Кафедра технології неорганічних речовин та загальної хімічної технології

ЗАВДАННЯ *на розрахунково–графічну роботу* *з дисципліни „Загальна хімічна технологія”*

студент гр. ХН-91

прізвище, ім'я, по батькові

1. Тема РГР Синтез аміаку

2. Вихідні дані і зміст РГР

Для реакції $0,5N_2 + 1,5H_2 \leftrightarrow NH_3 + Q = 56 \cdot 10^3$ кДж/кмоль скласти матеріальний баланс на отримання 10 т, аміаку на годину. Ступінь досягнення рівноваги дорівнює 0,95; тиск (МПа) $31 + N$, температура, К, на виході з реактора $T^k = 763$; вихідні концентрації /молярні доли, %/: азоту 24, водню 71,5, решта - аргон. Розрахувати і критично оцінити початкову температуру суміші, якщо процес відбувається в адіабатичному режимі. Обґрунтувати конструкцію реактора і обчислити об'єм каталізатора, якщо об'ємна швидкість дорівнює 20000 год⁻¹.

3. Перелік графічного матеріалу: ескіз основного апарату – формат А4.

Термін подання РГР до захисту 15 квітня 201_ р.

Дата видачі завдання 01 березня 201_ р.

Керівник

_____ /Банюк К.М./

підпис

П.І.Б.

Завдання прийняв до виконання

підпис