

выпарной установки, получение хлористого этила, синтез оптимальных систем теплообмена, расчет различных типов химических реакторов, моделирование различных процессов ректификации многокомпонентных смесей, процесс синтез-газа, фрагмент ХТС окисления SO_2 в SO_3 .

1. Холоднов В.А., Дьяконов В.П., Иванова Е.Н., Кирьянова Л.С. Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов: Практическое руководство Печ. СПб. АНО НПО «Профессионал», 2003. – 480 с.
2. Холоднов В.А., Лебедева М.Ю. Системный анализ и принятие решений. Решение задач оптимизации химико-технологических систем в среде Mathcad и Excel. Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2005. – 220 с.
3. Холоднов В.А., Лебедева М.Ю., Пунин А.Е., Хартманн К. Системный анализ и принятие решений. Компьютерные технологии решения задач многоцелевой оптимизации систем. Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2006. – 152 с.
4. В.А.Холоднов, Ас. М.Гумеров, В.М.Емельянов и др. Системный анализ и принятие решений. Математическое моделирование и оптимизация объектов химической технологии. Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2006. – 340с.
5. В.А.Холоднов, В.Решетиловский и др. Системный анализ и принятие решений. Компьютерное моделирование и оптимизация объектов химической технологии в Mathcad и Excel. Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2007. – 434с.
6. В.А.Холоднов, К.Хартманн и др. Системный анализ и принятие решений. Компьютерные технологии моделирования химико - технологических систем. Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2007. – 160с.
7. В.М.Крылов, В.А.Холоднов. Теория и практика математического моделирования. Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2007. – 178с.
8. Холоднов В.А., Кирьянова Л.С., Сидоров В.А. Системный анализ и принятие решений. Компьютерное моделирование объектов химической технологии в Mathcad. ПРАКТИКУМ к лабораторным работам по учебным дисциплинам «Информатика» и «Системный анализ химических технологий»: учебное пособие. – СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2008. – 91 с.
9. Холоднов В.А. Компьютерные технологии точечного и интервального оценивания параметров парной линейной регрессии по методу наименьших квадратов. Учебное пособие / В.А.Холоднов, СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2008. – 78 с.
10. Холоднов В.А. Системный анализ и принятие решений. Математическое моделирование гидродинамической структуры однофазных потоков в химических реакторах. Учебное пособие / В.А. Холоднов, В.П. Решетиловский, Е.С. Боровинская, В.П. Андреева. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2009. – 35 с.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗО-ЖИДКОСТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В ТЕХНОЛОГИИ ПРОИЗВОДСТВА КАЛЬЦИНИРОВАННОЙ СОДЫ

Цейтлин М.А., Райко В.Ф.

Национальный технический университет «ХПИ», mzeit@mail.ru

Кальцинированная сода производится на заводах Украины по так называемому «аммиачному методу», известному также как метод Сольвэ. Он заключается в последовательном насыщении раствора поваренной соли аммиаком и диоксидом углерода. При этом в осадок выпадает малорастворимый в этой системе гидрокарбонат натрия, который отделяют и прокаливают (кальцинируют) с получением готового продукта.

Как видно из приведенного описания, основные процессы в производстве соды протекают в системе $\text{NH}_3 - \text{CO}_2 - \text{H}_2\text{O} - \text{NaCl}$. Сложность математического моделирования газо-жидкостных взаимодействий в этой системе обусловлена следующими ее особенностями: а) инертные носители отсутствуют, а вода является не только растворителем,

но и реагентом; б) все компоненты системы, за исключением NaCl, летучи и присутствуют в газовой и жидкой фазах; в) химические реакции между компонентами системы протекают, как в газовой, так и в жидкой фазе; г) на некоторых стадиях процесс протекает в трехфазной системе; д) сорбция летучих компонентов системы сопровождается весьма значительными тепловыми эффектами (2000 – 2800 кДж/кг), оказывающими существенное влияние на кинетику сорбции.

При столь высокой сложности создание универсальной математической модели газожидкостного взаимодействия вряд ли имеет перспективу и целесообразно представляется разработка моделей для отдельных стадий процесса.

Рассмотрим, для примера, построение модели процессов, протекающих на стадии абсорбции содового производства. Для насыщения раствора поваренной соли аммиаком на этой стадии используется, так называемый «газ дистилляции», содержащий 50-55 % аммиака, до 30 % CO₂, остальное – водяной пар. Принятое в модели распределение парциальных давлений компонентов вблизи поверхности раздела фаз иллюстрирует рис. 1. Такое распределение соответствует ситуации, когда сопротивление абсорбции аммиака и водяного пара сосредоточено в газе, а диоксида углерода в жидкой фазе.

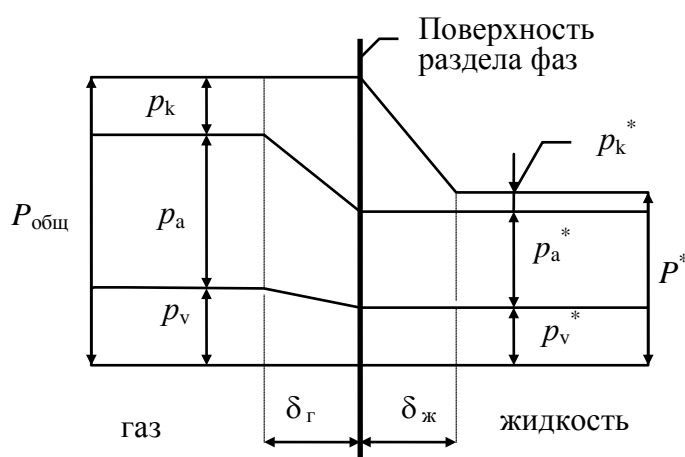


Рис. 1. Распределение парциальных давлений компонентов вблизи поверхности раздела фаз.

Обозначения: P и p – суммарное и парциальное давление компонентов, соответственно; δ – толщина пограничной пленки. Индексы: а – аммиак; к – диоксид углерода; в – водяной пар; * – равновесные значения.

ся к поверхности раздела фаз. В результате, уравнение, описывающее скорость абсорбции аммиака и водяного пара может быть представлено в следующем виде.

$$r_i = k_a(p_i - p_i^*) + \frac{p_i}{P_{\text{газ}}} \sum r_j, \quad (1)$$

где k_r – коэффициент массоотдачи в газовой фазе; $P_{\text{общ}}$ – общее давление газа; p – парциальное давление компонента; r – скорость абсорбции; индекс i может принимать значения a или v (аммиак или вода), индекс j – значения a , v и k (аммиак, вода, или диоксид углерода).

Кинетика абсорбции диоксида углерода определяется реакцией этого вещества с аммиаком в жидкой фазе. В литературе можно встретить различные данные о влиянии концентрации аммиака в жидкости на скорость абсорбции CO₂. Так, автор книги [2] полагает, что скорость абсорбции CO₂ пропорциональна концентрации аммиака в первой

степени. Однако в большинстве работ ([3; 4] и ряде других) полагают, что она пропорциональна концентрации NH_3 в степени 0,5. Это соответствует и собственному опыту авторов [5]. Уравнение скорости абсорбции диоксида углерода, учитывающее влияние концентрации аммиака в растворе, будет иметь вид:

$$r_k = k_{s,k} \sqrt{[\text{NH}_3]} (P_{\text{газ}} - p_a^* - p_v^* - p_k^*) \quad (2)$$

Для использования уравнений (1) и (2) в математической модели необходимы экспериментальные данные по коэффициентам k_T и $k_{s,k}$. Этих уравнений в сочетании с уравнениями покомпонентного материального и теплового баланса достаточно для формирования математической модели абсорбции газа дистилляции в адиабатическом абсорбере производства соды. Однако в других аппаратах необходимо применять другие кинетические уравнения. Например, в абсорбере со встроенными поверхностями охлаждения лимитирующей стадией процесса является отвод теплоты. Скорость абсорбции аммиака определяется скоростью охлаждения, то есть, уравнением теплопередачи. В колонне предварительной карбонизации (КЛПК), где процесс протекает при температуре 20-40 °С, необходимо учитывать ассоциацию CO_2 и водяных паров с аммиаком и абсорбцию продукта ассоциации. Анализ механизма абсорбции CO_2 в КЛПК [6] показывает, что скорость этого процесса пропорциональна концентрации аммиака в первой степени и, что особенно важно, с ростом парциального давления CO_2 степень его влияния на скорость абсорбции падает.

Аналогичные подходы использованы для разработки математических моделей и других аппаратов содового производства. Результаты вычислительных экспериментов с этими моделями используются для проектирования соответствующих аппаратов, а также для определения путей интенсификации процессов в них.

1. *Pinsent B. R. The Kinetics of Combination of Carbon Dioxide with Ammonia* / B. R. W. Pinsent, L. Pearson, F.G.W. Roughton // Transactions of the Faraday society – London: England. Faraday Soc.–1956. – V.52. – P. 1594-1598.
2. *Крашенинников С.А. Технология соды* / Крашенинников С.А. – М.: Химия, 1988. – 304 с.
3. *Andrew S. P. S. A rapid method of absorption rates measurement and its application to CO_2 absorption to partially carbonated ammonia liquor* / S. P. S. Andrew // Chemistry and industry London. – 1954. – V. 41. – P. 279-286.
4. *Hatch T.F. Simultaneous Absorption of Carbon Dioxide and Ammonia in Water* / T.F. Hatch, R.I. Pigford // Ind. & Chem. Fundam. – 1962. – №3. – P. 209-214.
5. *Цейтлин М.А. Интенсификация абсорбционных процессов в содовом производстве* / М.А. Цейтлин, Д.А. Воронин // Хімічна промисловість України. – К., 1998. – № 3. – С. 110-112.
6. *Цейтлин М.А. Абсорбционная очистка газов в содовом производстве* / М.А. Цейтлин, В.Ф. Райко, Л.Л. ТОВАЖНЯНСКИЙ, В.П. Шапоров – Харьков: НТУ «ХПИ», 2005 – 144 с.

МОДЕЛЮВАННЯ РЕАКЦІЇ ГІДРОЛІЗУ САХАРОЗИ НА ПОВЕРХНІ КРЕМНЕЗЕМУ

Цендра О.М., Гребенюк А.Г., Лобанов В.В.

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, oksynka@ukr.net

Моделювання реакційної здатності, тобто особливостей хімічної взаємодії молекул, є досить складною і тривалою за часом, але цілком можливою для розв'язання задачею теоретичної, зокрема квантової хімії. Складність її вирішення многократно зростає при розгляді взаємодії молекул з поверхнею твердого тіла, один або декілька атомів якої бере участь в елементарному акті. В такому випадку доречно використовувати кластерну модель, яка передбачає розгляд локальних хімічних зв'язків між молекулою і поверхнею твердого тіла.