

КРИТЕРИИ ОЦЕНКИ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

О степени совершенства химико-технологического процесса и его эффективности судят по следующим показателям (критериям): степени превращения реагента, выходу целевого продукта, селективности процесса и расходным возможностям химико-технологического процесса.

Степень превращения (конверсия) показывает, насколько полно используется реагент A_i в химическом процессе. В технологических расчетах конверсия может задаваться или рассчитываться. Для простых и сложных реакций конверсия рассчитывается по формуле:

- в долях:

$$\alpha_{Ai} = (m_{Ai, пр.} / m_{Ai, 0}) = 1 - (m_{Ai} / m_{Ai, 0}) \quad (1)$$

- или в процентах:

$$\alpha_{Ai, \%} = \alpha_{Ai} * 100\%, \quad (2)$$

Из уравнения (3.1) следует:

$$m_{Ai} = m_{Ai, 0}(1 - \alpha_{Ai}), \quad (3)$$

$$m_{Ai, пр.} = m_{Ai, 0} \alpha_{Ai} \quad (4)$$

Если количество вещества выражено в молях, ($n_{Ai} = m_{Ai} / M_{Ai}$) или концентрациях (C_{Ai}) при $v = \text{const}$, то уравнения (3,1) и (3.3) имеют вид

$$\alpha_{Ai} = 1 - (n_{Ai} / n_{Ai, 0}) = 1 - (C_{Ai} / C_{Ai, 0}), \quad (5)$$

$$n_{Ai} = n_{Ai, 0}(1 - \alpha_{Ai}), \quad (6)$$

$$C_{Ai} = C_{Ai, 0}(1 - \alpha_{Ai}), \quad (7)$$

В случае протекания реакции с изменением объема ($V \neq \text{const}$), концентрация C_{Ai} рассчитывается по формуле;

$$C_{Ai} = C_{Ai,0}((1 - \alpha_{Ai}) / (1 + \alpha_{Ai}\epsilon)), \quad (8.)$$

Где $\epsilon = (V_{\alpha=0} / V_{\alpha=1}) - 1$ - доля изменения объема; $V_{\alpha=0}, V_{\alpha=1}$ - объемы реакционной смеси при конверсии равной нулю ($\alpha=0$) и 100% ($\alpha=1$).

При протекании простой необратимой реакции (например, $a_1A_1 + a_2A_2 \rightarrow v_1B_1 + v_2B_2$), зная конверсию одного реагента (α_{A1}), можно определить конверсию другого реагента:

$$\alpha_{A2} = \alpha_{A1}(a_2/a_1) * (n_{A1,0}/n_{A2,0}), \quad (9)$$

где a_i, v_i - стехиометрические коэффициенты соответственно реагентов A_i и продуктов B_i -реакции.

Если реагенты A_1, A_2 взяты:

- в стехиометрических количествах ($n_{A1,0}/n_{A2,0} = a_1/a_2$), то конверсии равны $\alpha_{A2} = \alpha_{A1}$;

- в избытке A_1 ($(n_{A1,0}/n_{A2,0}) > (a_1/a_2)$), то $\alpha_{A2} > \alpha_{A1}$;

- в избытке A_2 ($(n_{A1,0}/n_{A2,0}) < (a_1/a_2)$), то $\alpha_{A2} < \alpha_{A1}$.

На практике с целью повышения степени использования ценного реагента берут избыток дешевого сырья (например, воздух, воды). Обратимые реакции идут не до конца, а только до равновесного состояния ($\alpha_{Ai}^* < 1$), определяемого условиями проведения процесса. Равновесную конверсию простой обратимой реакции (например, $a_1A_1 + a_2A_2 \leftrightarrow v_1B_1 + v_2B_2$) рассчитывают по формуле:

$$\alpha_{Ai}^* = 1 - (m_{Ai}^* / m_{Ai,0}) = 1 - (n_{Ai}^* / n_{Ai,0}), \quad (10)$$

где m_{Ai}^*, n_{Ai}^* - соответственно количество массы и моли i -го реагента в момент равновесия.

На практике для обеспечения повышенной производительности реактора процесс не доводят до равновесного

состояния. Действительная конверсия реагента несколько ниже равновесной:

$$\alpha_{Ai} = Z \cdot \alpha_{Ai}^*, \quad (11)$$

где $Z=0,85-0,95$ - степень достижения равновесия.

Из уравнения (3.10) следует:

$$m_{Ai}^* = m_{Ai,o} (1 - \alpha_{Ai}^*), \quad (12)$$

$$n_{Ai}^* = n_{Ai,o} (1 - \alpha_{ai}). \quad (13)$$

При протекании сложной реакции (параллельной, последовательной или комбинированной) рассчитывают общую ($\alpha_{Ai,общ.}$) и избирательную ($\alpha_{Ai,изб.}$) конверсии.

Общая конверсия характеризует доля (или процент) количества массы реагента A_i , пошедшего на все реакции ($m_{Ai,пр.} = \sum m_{Ai,пр.}$), от всего поданного ($m_{Ai,o}$):

$$\alpha_{Ai,общ.} = \frac{m_{Ai,пр.}}{m_{Ai,o}} \quad (14)$$

Избирательная конверсия (селективность процесса) показывает долю (или процент) количества массы реагента A_i , пошедшего на получение целевого продукта B_1 ($m_{Ai \rightarrow B1}$), от всего превращенного ($m_{Ai,пр.}$)

$$\alpha_{Ai,изб.} = \frac{m_{Ai \rightarrow B1}}{m_{Ai,пр.}}. \quad (15)$$

Решая совместно уравнения (3.14) и (3.15), определяем количество полезно использованного реагента A_i :

$$m_{Ai \rightarrow B1} = m_{Ai,o} \cdot \alpha_{Ai,общ.}^* \cdot \alpha_{Ai,изб.} \quad (16)$$

ИЛИ

$$n_{A_i \rightarrow B_1} = n_{A_i, o} \cdot \alpha_{A_i, \text{общ.}} \cdot \alpha_{A_i, \text{изб.}} \quad (17)$$

Выход продукта B_1 характеризует долю (или процент) фактически полученного количества целевого продукта ($m_{B_1, \phi}$) от максимально возможного (теоретического) его количества ($m_{B_1, T}$), которое могло быть получено при данных условиях химической реакции:

- в долях:

$$\beta_{B_1} = m_{B_1, \phi} / m_{B_1, T} = n_{B_1, \phi} / n_{B_1, T}; \quad (18)$$

- в процентах:

$$\beta_{B_1, \%} = \beta_{B_1} 100\%.$$

Значения $m_{B_1, \phi}$ и $n_{B_1, \phi}$ берут из производственных данных или при отсутствии потерь рассчитывают по зависимостям:

- для простой необратимой реакции:

$$m_{B_1, \phi} = (v_1 M_{B_1} / a_1 M_{A_i}) \cdot m_{A_i, o} \cdot \alpha_{A_i}, \quad (19)$$

$$n_{B_1, \phi} = (v_1 / a_i) \cdot n_{A_i, o} \cdot \alpha_{A_i}; \quad (20)$$

- для сложной необратимой реакции:

$$m_{B_1, \phi} = [(v_1 M_{B_1}) / (a_i M_{A_i})] \cdot m_{A_i, o} \cdot \alpha_{A_i, \text{общ.}} \cdot \alpha_{A_i, \text{изб.}}; \quad (21)$$

$$n_{B_1, \phi} = (v_1 / a_i) \cdot n_{A_i, o} \cdot \alpha_{A_i, \text{общ.}} \cdot \alpha_{A_i, \text{изб.}}; \quad (22)$$

- для простой обратимой реакции:

$$m_{B_1, \phi}^* = [(v_1 M_{B_1}) / (a_i M_{A_i})] \cdot m_{A_i, o} \cdot Z \cdot \alpha_{A_i}^* \quad (23)$$

$$n_{B1,\phi}^* = (v_1/a_i) \cdot n_{Ai,o}^* \cdot Z^* \cdot \alpha_{Ai}^* \quad (24)$$

-для сложной обратимой реакции:

$$m_{B1,\phi}^* = [(v_1 M_{B1}) / (a_i M_{Ai})] \cdot m_{Ai,o}^* \cdot Z^* \cdot \alpha_{Ai,общ.}^* \cdot \alpha_{Ai,изб.}^* \quad (25)$$

$$n_{B1,\phi}^* = (v_1/a_i) \cdot n_{Ai,o}^* \cdot Z^* \cdot \alpha_{Ai,общ.}^* \cdot \alpha_{Ai,изб.}^* \quad (26)$$

Значения $m_{B1,T}$ и $n_{B1,T}$ также зависят от типа химической реакции и рассчитываются по зависимостям:

-для простой и сложной необратимых реакций:

$$m_{B1,T} = [(v_1 M_{B1}) / (a_i M_{Ai})] \cdot m_{Ai,o}; \quad (27)$$

$$n_{B1,T} = (v_1/a_i) \cdot n_{Ai,o} \quad (28)$$

-для простой и сложной обратимых реакций:

$$m_{B1,T}^* = [(v_1 M_{B1}) / (a_i M_{Ai})] \cdot m_{Ai,o}^* \cdot \alpha_{Ai}^*; \quad (29)$$

$$n_{B1,T}^* = (v_1/a_i) \cdot n_{Ai,o}^* \cdot \alpha_{Ai}^* \quad (30)$$

Подставляя в уравнение (3.1) значения $m_{B1,\phi}$ (или $n_{B1,\phi}$) и $m_{B1,T}$ (или $n_{B1,T}$), имеем;

-для простой необратимой реакции:

$$\beta_{B1} = \alpha_{Ai}; \quad (31)$$

-для сложной необратимой реакции:

$$\beta_{B1} = \alpha_{Ai,общ.}^* \cdot \alpha_{Ai,изб.}^* \quad (23)$$

-для простой обратимой реакции:

$$\beta_{B1} = Z * \alpha_{Ai,o}^* \quad (33)$$

-для сложной обратимой реакции:

$$\beta_{B1}^* = Z * \alpha_{Ai,изб.} * \alpha_{Ai,o} \quad (34)$$

Расходный коэффициент по сырью (или реагенту) характеризует расход каждого вида сырья (или реагента A_i) на производство единицы целевого продукта B_1 . Различают теоретический и практический расходные коэффициенты.

Теоретический расходный коэффициент

$$K_T = (a_i M_{Ai}) / (b_1 M_{B1}) \quad (35)$$

Практический расходный коэффициент определяют по производственным данным:

-по реагенту:

$$K_{\Pi} = m_{Ai,o} / m_{B1,\phi}; \quad (36)$$

-по сырью:

$$K_{\Pi} = (m_{Ai,o}) / (X_{T,Ai} * m_{B1,\phi}) \quad (37)$$

При этом $K_{\Pi} > K_T$. Решая уравнение (3.36) с учетом (3.19), имеем:

$$K_T = ((a_i M_{Ai}) / (b_1 M_{B1})) * (1 / \alpha_{Ai,o}) = K_T / \alpha_{Ai},$$

или

$$K_T / K_{\Pi} = \alpha_{Ai,o} = \beta_{B1}. \quad (38)$$

Для снижения величины K_{Π} K_T необходимо проводить химический процесс при более высоких выходах целевого продукта. Практические расходные коэффициенты используют в

экономических расчетах при определении себестоимости готовой продукции.

Важным показателем работы аппарата (установки) являются производительность и интенсивность.

Производительность-это количество полученного продукта (или переработанного сырья) в единицу времени. Количество вещества вещества может быть выражено в массах, молях и других единицах. Массовая производительность:

$$\Pi_i = m_i / \tau$$

(39)

Измеряется в кг/ч (т/сут, т/год и др.). Если известны объемный расход реакционной смеси V_τ и концентрация компонента в смеси C_i , то производительность определяется по формуле:

$$\Pi_i = C_i * V_\tau$$

(40)

Максимально возможная (проектная) производительность называется мощностью ($\Pi_{\max}$). Увеличение мощности ведет к снижению капитальных удельных затрат и повышению производительности труда:

$$\Pi_T = \Pi_i / N = m_i / \tau N,$$

(41)

Интенсивность-это производительность, отнесенная к единице объема V (или площади поперечного сечения S) аппарата:

$$I_i = \Pi_i / V \quad \text{или} \quad I_i = \Pi_i / S$$

(42)

Измеряется в кг/ч м^3 или кг/ч м^2 . Интенсивность применяется для сравнения работы аппаратов различной конструкции и размеров, в которых протекают одни и те же процессы.

Интенсивность контактного аппарата (производительность катализатора) рассчитывается по формулам:

$$I_{\text{кат.}} = \Pi / V_{\text{кат.}} \quad \text{или} \quad I_{\text{кат.}} = \Pi / m_{\text{кат.}}; \quad (43)$$

где $V_{\text{кат.}}$, $m_{\text{кат.}}$ - соответственно объем и масса катализатора, загруженного в реактор.

Задачи

1. В контактный аппарат поступают печной газ и воздух. Протекает простая обратимая реакция:



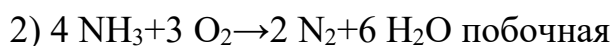
По данным таблицы материального баланса.

Приход			Расход		
№	Наименование	кг/ч	№	Наименование	кг/ч
1	Печной газ:	1000	1	SO ₃	125
	SO ₂	110	2	SO ₂	10
	O ₂	150	3	O ₂	445
	N ₂	740	4	N ₂	1820
2	Воздух:	1400			
	O ₂	320			
	N ₂	1080			
Итого		2400	Итого		2400

Рассчитать критерии оценки процесса: степень превращения реагентов (SO₂ и O₂), выход SO₃ по данным SO₂ и O₂, расходные коэффициенты (K_T и K_П) по реагентам (SO₂ и O₂), а также K_П по печному газу и воздуху.

2. В реактор поступают аммиак и воздух. Протекает сложная необратимая реакция:

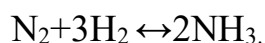




По данным таблицы материального баланса рассчитать критерий оценки процесса: общую и избирательную конверсии NH_3 и O_2 , выход целевого продукта NO по поданному и превращенному NH_3 , расходные коэффициенты (K_T и K_{Π}) по реагентам (NH_3 и O_2), а также K_{Π} по воздуху.

Приход			Расход		
№	Наименование	кг/ч	№	Наименование	кг/ч
1	NH_3	1300	1	NO	2100
2	Воздух:	21300	2	NH_3	50
	O_2	4900	3	O_2	2015
	N_2	16400	4	N_2	16450
			5	H_2O	1985
Итого		22600	Итого		22600

3. В колонну синтеза аммиака поступают свежая азотоводородная смесь (в мольном соотношении $n_{\text{N}_2} : n_{\text{H}_2} = 1:3$) и рециркулят. Протекает простая обратимая реакция:



По данным таблицы материального баланса рассчитать критерии оценки процесса: степень превращения реагентов (N_2 и H_2) с рециркуляцией и без нее, выход аммиака по поданному N_2 , расходные коэффициенты (K_T и K_{Π}) по N_2 и H_2 K_{Π} по сырью и коэффициент рециркуляции $K_{\text{рец.}}$.

Приход			Расход		
№	Наименование	кг/ч	№	Наименование	кг/ч
1	Азотоводородная смесь:	379	1	NH_3	23670
	N_2	312	2	Рециркулят:	1516
	H_2	67		N_2	1248

2	Рециркулят:	1516		H ₂	268
	N ₂	1248			
	H ₂	268			
Итого		1895	Итого		1895