

Podstawy technologii chemicznej Dr inż. Ewelina Ortyl

Literatura:

- 1) „Podstawowy obliczeń projektowych w technologii chemicznej” Głowiński, Kucharski
- 2) „Podstawy teoretyczne technologii chemicznej” Piotrowski
- 3) „Podstawy technologii chemicznej. Bilanse projektów technologicznych” pod red. Schmidt-Szelowskiego
- 4) „Termodynamika i technika cieplna. Ćwiczenia rachunkowe” Kieloch, Kruszynski

Koncepcja chemiczna

- Ustalenie równań stechiometrycznych proponowanych reakcji chemicznych
- Wykonanie obliczeń stechiometrycznych, podanie bilansu stechiometrycznego i teoretycznych wskaźników zużycia
- Wykonanie obliczeń termodynamicznych
- Dokonanie wstępnej kalkulacji kosztów produkcji
- Dokonanie wstępnej weryfikacji koncepcji chemicznej, dobranie optymalnego wariantu z szeregu możliwych
- Obliczenie / wyznaczenie doświadczalne właściwości fizykochemicznych czystych reagentów i ich mieszanin
- Doświadczalne przebadane kinetyki wybranych przemian chemicznych i fazowych

Zasady technologii chemicznej według Bretsznajdera:

1. Zasada najlepszego wykorzystania różnic potencjałów
2. Zasada najlepszego wykorzystania surowców
3. Zasada najlepszego wykorzystania energii
4. Zasada najlepszego wykorzystania aparatury
5. Zasada umiaru technologicznego

Ocena zgodności koncepcji z Najlepszymi Dostępnymi Technikami BAT (Best Available Techniques)

Dyrektywa Rady UE (Dyrektywa 96 61 WE)

IPPC (Integrated Pollution Prevention and Control)

Europejskie Biuro ds Kontroli Zanieczyszczeń Przemysłowych (EIPPCB) z siedzibą w Sewilli opracowuje tzw. dokumenty referencyjne (BAT Reference Documents – BREFs) opisujące najlepsze dostępne techniki dla poszczególnych gałęzi przemysłu.

Operacje jednostkowe i jednostki procesowe

Całkowity proces wytwarzania można podzielić na operacje jednostkowe, których funkcjonowanie bada się oddzielnie. Operacje jednostkowe przebiegają w urządzeniach zwanych jednostkami procesowymi.

Operacje jednostkowe:

- przepływ płynów
- reakcje chemiczne
- absorpcja
- destylacja

Jednostki procesowe:

- reaktory
- wymienniki ciepła

- urządzenia rozdzielające
- kolumny destylacyjne

We wszystkich jednostkach procesowych bez względu na ich złożoność obowiązują następujące prawa:

- zasada zachowania masy (poza reakcjami jądrowymi)
- zasada zachowania atomów (w reakcjach chemicznych)
- zasada zachowania energii

Zasady te wykorzystuje się do sporządzania bilansów materiałowych i energetycznych wszystkich procesów chemicznych.

Procesy chemiczne:

- okresowe (opłacalne przy małej wielkości produkcji – przemysł farmaceutyczny, kosmetyczny)
- ciągłe (produkcje wielkotonażowe)

Bilans materiałowy:

[masowe natężenie przepływu strumieni doptywających] – [masowe natężenie przepływu strumieni odpływających] = [szybkość akumulacji wewnątrz aparatu]

Bilans materiałowy – podstawa obliczeń w technologii chemicznej

Przy braku akumulacji masy wewnątrz aparatu (stan ustalony):

$$\sum F_{i,zasil} = \sum F_{i,prod}$$

[masowe natężenie przepływu strumieni doptywających] = [masowe natężenie przepływu strumieni odpływających]

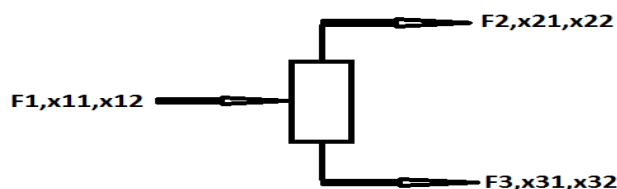
Analiza bilansu materiałowego

Zasady postępowania (10 przykazań bilansu materiałowego sformułowane przez Hummelblau(?))

1. Narysować schemat procesu – określić obszar bilansowania
2. Zaznaczyć strumienie natężenia przepływu i ich skład
3. Nanieść wartości znane
4. Nanieść lub wyszczególnić wartości nieznanne
5. Określić liczbę niezależnych równań bilansowych i sprawdzić, czy układ tych równań można rozwiązać. Jeśli nie, znaleźć dodatkowe dane lub założyć ich wartości
6. Wybrać układ odniesienia
7. Ułożyć układ równań bilansowych do rozwiązania
8. Wybrać sposób rozwiązania układu równań
9. Rozwiązać układ równań
10. Sprawdzić poprawność rozwiązania

Przykład

Wodny roztwór acetonu zawierający 10% wagowych acetonu podaje się do kolumny destylacyjnej w ilości 1000kg/h w celu wydzielenia technicznego acetonu w postaci destylatu o zawartości 99% produktu. Warunki pracy kolumny są tak dobrane, by zawartość acetonu w cieczy wyczerpanej wynosiła nie więcej niż 100 ppm (0,01% wag.). Sporządzić bilans materiałowy pracy kolumny:



1-aceton
2-woda

Równanie bilansu dla acetonu: $F_1x_{11} = F_2x_{21} + F_3x_{31}$

Równanie bilansu dla wody: $F_1x_{12} = F_2x_{22} + F_3x_{32}$

Te dwa równania tworzą układ równań.

$F_1 = 1000 \text{ kg/h}$

$$1000 \cdot 0,1 = F_2 \cdot 0,99 + F_3 \cdot 0,0001$$

$$1000 \cdot 0,9 = F_2 \cdot 0,01 + F_3 \cdot 0,9999$$

$$x_{11} + x_{12} = 1$$

wyniki:

$$F_2 = 100,92 \text{ kg/h}$$

$$F_3 = 899,08 \text{ kg/h}$$

$$F_1 = F_2 + F_3$$

Jednostkę procesową opisuje N_c równań bilansu materiałowego, po jednym dla każdego z N_c składników przez nią przepływających. Równania ograniczeń dla ułamków molowych oznaczają, że suma ułamków molowych (wag.) jest równa 1 dla każdego strumienia. Jeżeli granice jednostki procesowej przekraczają N_s strumieni i każdy strumień zawiera N_c składników, to całkowitą liczbę zmiennych N_v we wszystkich równaniach obliczymy z zależności:

$N_v = N_s (N_c + 1) + N_p$, gdzie N_p to liczba parametrów procesowych.

Jeżeli istnieje N_e niezależnych równań zawierających wszystkie N_v zmiennych, to liczba zmiennych projektowych (decyzyjnych) N_d wynosi:

$$N_d = N_v - N_e$$

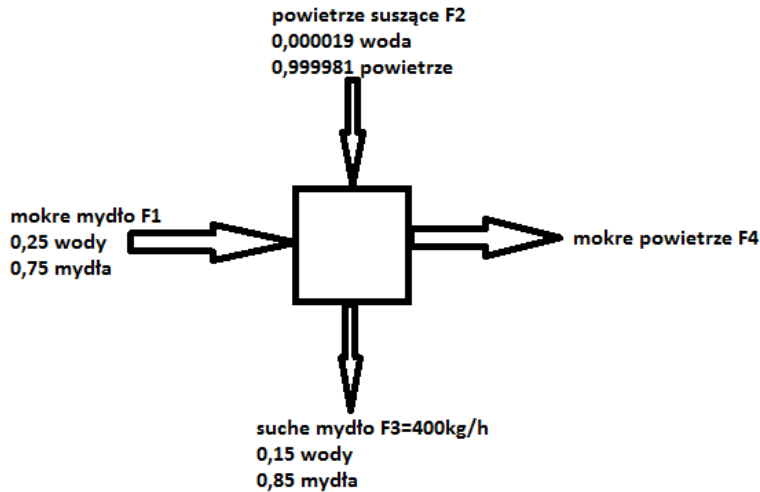
Liczba równań musi być bowiem równa liczbie niewiadomych. Wyrażenie $N_d = N_v - N_e$ określa liczbę stopni swobody układu. Na podstawie liczby swobody można ocenić, czy rozważany układ jest dobrze zdefiniowany.

Bilans materiałowy

- bilanse w obrębie jednostek procesowych, w których następuje przepływ masy
- substancje biorące udział w procesach nie zmieniają charakteru chemicznego

Przykład

Gorące mydło jest chłodzone na bębnie i zeszkrobwane w sposób ciągły na przenośnik taśmowy, który przenosi je do suszarki. Wprowadzone do suszarki mydło zawiera 25% wagowych wody. Wymaga się zmniejszenia zawartości wody do 15% wagowych i produkcji wynoszącej 400 kg/h mydła wysuszonego. Powietrze suszące F_2 zawiera 0,000019% wagowych pary wodnej. Na podstawie doświadczeń stwierdzono, że suszarka pracuje skutecznie wtedy, gdy stosunek natężenia przepływu suchego powietrza do natężenia przyływu mokrych strużyn wynosi 3. Obliczyć nieznane natężenie przepływu układu.



1-woda
2-powietrze
3-mydło

$$x_{wag} = \frac{x_1 F_1}{x_1 F_1 + x_2 F_2}$$

$$\frac{F_2}{F_1} = 3$$

Ograniczenie procesowe: $F_2 = \alpha F_1$

woda: $F_1 x_{11} + F_2 x_{21} = F_3 x_{31} + F_4 x_{41}$

powietrze: $F_2 x_{22} = F_4 x_{42}$

mydło: $F_1 x_{13} = F_3 x_{33}$

ograniczenia dla ułamków wagowych:

$$x_{11} + x_{13} = 1$$

$$x_{21} + x_{22} = 1$$

$$x_{31} + x_{33} = 1$$

$$x_{41} + x_{42} = 1$$

Liczba zmiennych $N_v = 13$ (4 natężenia przepływu, 8 ułamków wagowych, 1 procesowe).

Liczba zmiennych decyzyjnych $N_d = N_v - N_e = 13 - 8 = 5$

Wybrano zmienne decyzyjne: $F_3, \alpha, x_{11}, x_{31}, x_{21}$.

$F_3 = 400 \text{ kg/h}$

$\alpha = 3$

$x_{11} = 0,25$

$x_{31} = 0,15$

$x_{21} = 0,000019$

$$F_1 = \frac{F_3 x_{33}}{x_{13}} = \frac{400 \times 0,85}{0,75} = 453,33$$

$$\frac{F_2}{F_1} = 3 \Rightarrow F_2 = 3 \times 453,33 = 1359,99$$

$$F_1 + F_2 = F_3 + F_4$$

$$F_4 = F_1 + F_2 - F_3 = 453,33 + 1359,99 - 400 = 1413,32$$

$$x_{42} = \frac{F_2 \times x_{22}}{F_4}$$

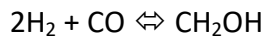
$$x_{41} = 1 - x_{42}$$

???

Bilans materiałowy układu z rachunkiem chemicznym

Jeżeli w obrębie jednostki procesowej zachodzi reakcja chemiczna, w której następuje zmiana struktury molekularnej i składu ilościowego układu, to mimo, że całkowita ilość

materii jest zachowana, sposób sporządzania bilansu masowego musi być podporządkowany regułom rządzącym przebiegiem reakcji chemicznych.



Równanie napisane według tego schematu przedstawia reakcję odwracalną, w której dla danych warunków ustala się stan równowagi, w jakim stopniu reakcja może zajść w kierunku od substratów do produktów, czyli jaki maksymalny stopień przereagowania mogą osiągnąć reagenty.

Stężenie w stanie równowagi w określonych warunkach można obliczyć na podstawie funkcji termodynamicznych, podobnie jak efekt energetyczny reakcji.

Każdą reakcję chemiczną można zapisać w postaci:

$$\sum_j \nu_j S_j = 0$$

ν_j – współczynnik stechiometryczny j-tego składnika; jest zawsze liczbą wymierną i często całkowitą

S_j – j-ty związek chemiczny

Zgodnie z umową przyjęto, że współczynnik stechiometryczny jest dodatni dla produktu i ujemny dla substratu.

Rozważając poprzednio układy równań, bilans materiałowy dla procesów ustalonych, niezwiązanych z reakcjami chemicznymi, przedstawić można w postaci:

$$\sum_{j=1} F_j x_0 = 0, \quad j=1,2,\dots,N_i$$

F_j – natężenie przepływu j-tego strumienia ze znakiem dodatnim dla strumieni dopływających do układu i ze znakiem ujemnym dla strumieni odpływających

x_0 – ułamek molowy lub wagowy

0 – lewa strona tego równania wyraża szybkość akumulacji j-tego składnika w obrębie układu i jest ona równa zeru w stanie ustalonym