

# Расчёт теплового баланса реакционного узла

Цель расчёта теплового баланса – рассчитать тепловую нагрузку на каждый аппарат технологической схемы.

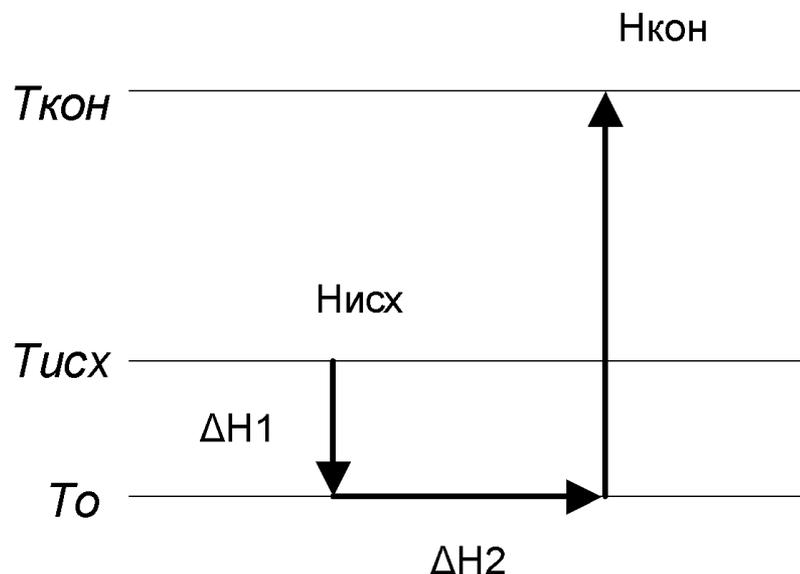
Если процесс адиабатический – рассчитывают температуру на выходе.

При  $P = \text{const}$  тепловая нагрузка  $Q$  равна разности энтальпий системы в конечном и исходном состояниях:

$$Q = H_{\text{кон}} - H_{\text{исх}}$$

Расчёт удобно проводить по схеме, приведённой на рисунке:

$$H_{\text{исх}} + \Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3 = H_{\text{кон}}$$
$$Q = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3$$



$\Delta H_1$  – изменение энтальпии при охлаждении смеси от исходной температуры  $T_{\text{исх}}$  до стандартной  $T_0$ ;

$\Delta H_2$  – изменение энтальпии в результате протекания химических реакций при температуре  $T_0$ ;

$\Delta H_3$  – изменение энтальпии при нагревании смеси от исходной температуры  $T_0$  до конечной температуры  $T_{\text{кон}}$ ;

Будем считать, что  $\Delta H < 0$ , если тепло выделяется из системы и  $\Delta H > 0$ , если тепло поглощается системой.

В качестве стандартной температуры удобно использовать температуру 298К (25°C), так как энтальпии образования веществ, необходимые для расчёта тепловых эффектов химических реакций приводятся в справочниках именно при этой температуре.

Энтальпию системы можно приближённо рассчитать, как сумму энтальпий компонентов, входящих в систему. Для упрощения расчёта будем считать, что фазовый переход и расчёт теплоты фазового перехода осуществляется при температуре  $T_o = 298\text{К}$ .

1. Расчёт  $\Delta H_1$ :

$$\Delta H_1 = \sum_{i=1}^N G_{io} \left( \int_{T_{ucx}}^{T_o} c_{pi}(T) dT + (\Delta H_i^\phi)_{T_o} \right) = \sum_{i=1}^N G_{io} \int_{T_{ucx}}^{T_o} c_{pi}(T) dT + \sum_{i=1}^N G_{io} (\Delta H_i^\phi)_{T_o}$$

.....  $Q_1$  .....  $Q_2$  .....

Если  $c_{pi} = \text{const}$ , то:

$$\Delta H_1 = \sum_{i=1}^N G_{io} c_{pi} (T_{исх} - T_0) + \sum_{i=1}^N G_{io} (\Delta H_i^{\phi})_{T_0}$$

$$\dots\dots\dots Q_1 < 0 \quad \dots\dots\dots Q_2 < 0 \quad \dots\dots$$

где  $Q_1$  – тепло, выделяемое при охлаждении исходной смеси от температуры  $T_{исх}$  до температуры  $T_0$ ;

$Q_2$  – тепло, выделяемое при конденсации компонентов при температуре  $T_0$ .

2. Расчёт  $\Delta H_2$  ( $Q_3 > 0$  или  $< 0$ ) – тепло, выделяемое (поглощаемое) при протекании химических реакций при температуре  $T_0$ ;

$$\Delta H_2 = \sum_{i=1}^3 G_i^k (\Delta H_i^k)_{T_0}$$

где  $M$  – число линейно независимых химических реакций;

$\Delta H_i^k$  – тепловой эффект образования или исчезновения единицы массы (кг)

ключевого компонента  $k$  в реакции  $i$ .

$G_i^k$  – масса ключевого компонента  $k$ , реагирующего в реакции  $i$ .

$$\Delta H_i^k = \frac{1000 \cdot \Delta H_i^r}{M_k \cdot |v_k|}$$

где  $M_k$  – молекулярная масса компонента  $k$ ;

$v_k$  – стехиометрический коэффициент при компоненте  $k$ ;

$\Delta H_i^r$  – тепловой эффект реакции  $i$ .

$$\Delta H_i^r = \sum_{j=1}^N (v_{ij} H_j)_{\text{прод}} - \sum_{i=1}^N (v_{ij} H_j)_{\text{исход}}$$

где  $v_{ij}$  - стехиометрический коэффициент при компоненте  $j$  в реакции  $i$  для продуктов и исходных веществ;

$H_j$  - энтальпия образования компонента  $j$ .

3. Расчёт  $\Delta H_3$ :

$$\Delta H_3 = \sum_{i=1}^N G_i \left( \int_{T_0}^{T_{\text{кон}}} c_{pi}(T) dT + (\Delta H_i^{\phi})_{T_0} \right) = \sum_{i=1}^N G_i \int_{T_0}^{T_{\text{кон}}} c_{pi}(T) dT + \sum_{i=1}^N G_i (\Delta H_i^{\phi})_{T_0}$$

.....  $Q_4$  .....  $Q_5$  .....

Если  $c_{pi} = \text{const}$ , то:

$$\Delta H_3 = \sum_{i=1}^N G_i c_{pi} (T_{\text{кон}} - T_o) + \sum_{i=1}^N G_i (\Delta H_i^{\phi})_{T_o}$$

.....  $Q_4 > 0$  .....  $Q_5 > 0$  .....

где  $Q_4$  – тепло, необходимое для нагревания исходной смеси от температуры  $T_o$  до температуры  $T_{\text{кон}}$ ;  
 $Q_5$  – тепло, необходимое для испарения компонентов при температуре  $T_o$ .

Таким образом, тепловая нагрузка  $Q$  реакционного узла будет равна:

$$Q = Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q_5$$

При необходимости можно учесть также потери тепла в окружающую среду и на нагрев самого реактора для периодических процессов.

## Пример расчёта теплового баланса гидратации оксида этилена

Рассчитать температуру сырья на входе в реактор гидратации оксида этилена, при условии, что температура на выходе из реактора должна составлять  $200^{\circ}\text{C}$ . Материальный баланс процесса гидратации приведён в таблице.

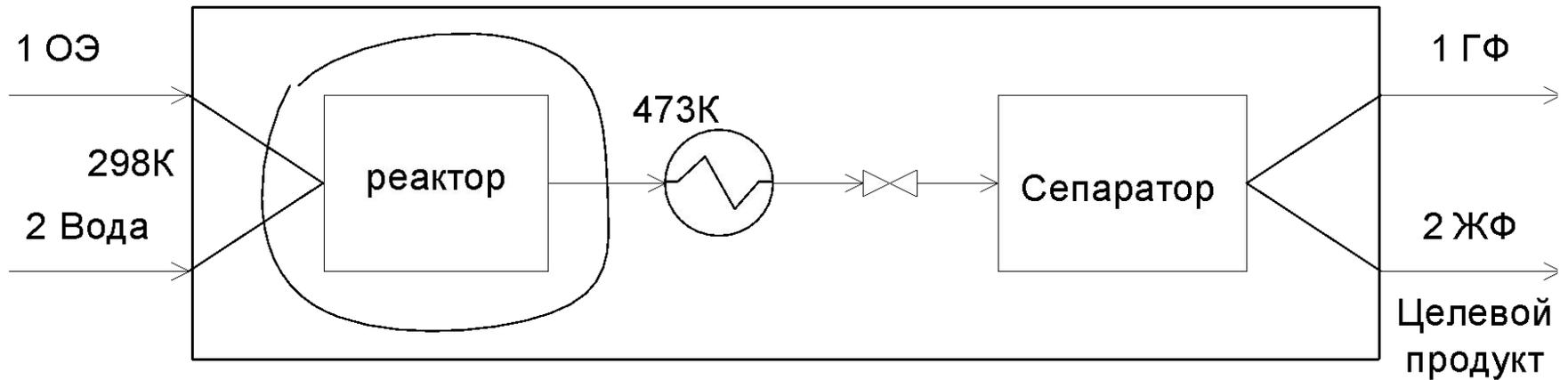
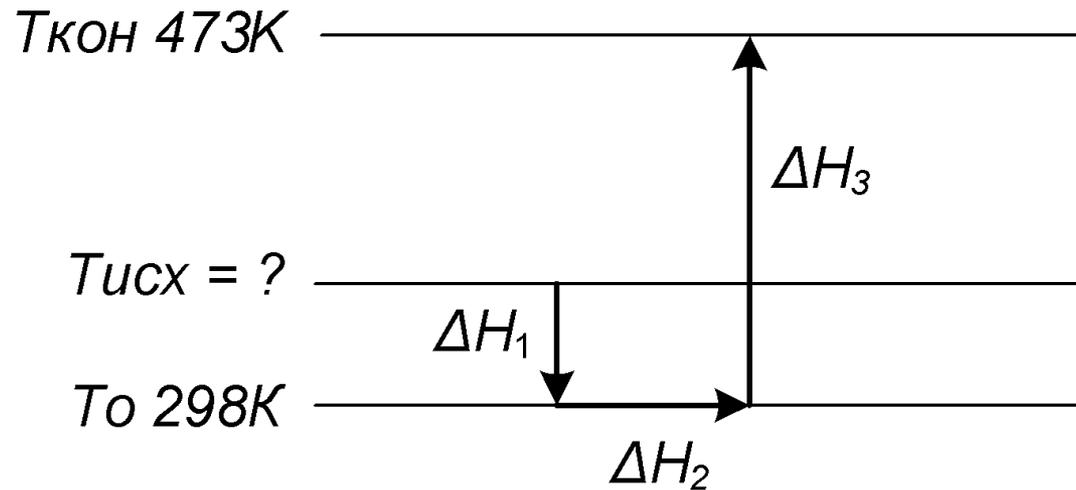


Схема реакционного узла

Приход	кг/ч	Расход	кг/ч
Оксид этилена	2960,37	Этиленгликоль	3546,32
Вода	21792,86	ДЭГ	428,00
Ацетальдегид	1,46	ТЭГ	84,11
Примеси	1,46	Вода	20680,94
		Оксид этилена	14,78
		Ацетальдегид	1,46
		Примеси	1,46
Итого:	24756,15	Итого:	24756,15

## Расчётная схема



$$Q = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3$$

$Q = 0$  для адиабатического реактора

$$\Delta H_1 = -\Delta H_2 - \Delta H_3$$

1. Расчёт изменения энтальпии при химическом превращении  $\Delta H_2$

Реакции:



Теплоты образования компонентов,  $H_i$  (ккал/моль):

$$H_2O = -57,80; OЭ = -12,58; ЭГ = -93,05; ДЭГ = -136,5; ТЭГ = -156$$

Тепловые эффекты химических реакций, (ккал/моль):

$$1. \quad \Delta H_r = -93,05 - (-57,80) - (-12,58) = -22,67$$

$$2. \quad \Delta H_r = -136,5 - (-57,80) - 2(-12,58) = -53,54$$

$$3. \quad \Delta H_r = -156 - (-57,80) - 3(-12,58) = -60,46$$

Тепловые эффекты химических реакций, (ккал/кг продукта):

$$Q_{\text{ккал/кг}} = \frac{-22,67 \cdot 1000}{62} = -365,65 \quad \text{ЭГ}$$

$$Q_{\text{ккал/кг}} = \frac{-53,54 \cdot 1000}{106} = -505,09 \quad \text{Д}$$

$$Q_{\text{ккал/кг}} = \frac{-60,46 \cdot 1000}{150} = -403,06 \quad \text{Д}$$

Изменение энтальпии при химических превращениях  $\Delta H_2$ :

$$\Delta H_2 = \sum_{i=1}^M G_i \Delta H_i$$

$$\Delta H_2 = -365,65 \cdot 3546,32 - 428 \cdot 505,09 - 84,11 \cdot 403,06 =$$
$$-1296711,9 - 216178,52 - 33901,376 = -1546791,8 \quad (\text{л/час})$$

2. Расчёт изменения энтальпии при нагреве продуктов от температуры 298К до 473К.

Теплоёмкости компонентов (ккал/кг.К), при средней температуре от 25 до 200 °С:

$$C_{ЭГ} = 0,72; \quad C_{ДЭГ} = 0,63; \quad C_{ТЭГ} = 0,60; \quad C_{ОЭ} = 0,44; \quad C_{H_2O} = 1$$

$$\Delta H_3 = \sum G_{i \text{ кон } p_i} C_p (T_o - T)$$

$$\begin{aligned} \Delta H_3 &= (3546,32 \cdot 0,72 + 428,00 \cdot 0,63 + 84,11 \cdot 0,60 + 20680,44 \cdot 1 + \dots)(473 - 298) = \\ &= (2557,3 + 269,6 + 50,5 + 20680,4) \cdot 175 = 4121915 \quad \text{ас} \end{aligned}$$

3. Находим  $\Delta H_1$  – энтальпия охлаждения от  $T_{\text{нач}}$  до  $298^\circ\text{C}$ :

$$\Delta H_1 = 1546791,8 - 4121915 = -2575123 \quad (\text{ккал/ч})$$

$$\Delta H_{\text{исх}} = \sum_{i=1}^N G_{oi} c_p^{\text{жс}} (T_o - T);$$

$$(T_o - T_{исх}) = \frac{\Delta H_1}{\sum_{i=1}^N G_{oi} C_{pi}^{жс}}$$

$$T_o - T_{исх} = \frac{-2575123}{(2960,37 \cdot 0,44 + 21792,86 \cdot 1 + \dots)} = \frac{-2575123}{23095,4} = -111,5$$

$$298 - T_{исх} = -111,5 \quad T_{исх} = 298 + 111,5 = 409,5$$

$$T_{исх} = 136,5 \text{ } ^\circ\text{C}$$