

Международный журнал прикладных наук и технологий "Integral

Научная статья

Original article

УДК 66-94

DOI 10.55186/02357801-2022-7-1-5



**МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ХИМИКО-  
ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ПРОИЗВОДСТВА  
ГИДРОКСИДА НАТРИЯ ФЕРРИТНЫМ СПОСОБОМ  
MATHEMATICAL MODEL OF CHEMICAL-TECHNOLOGICAL  
PROCESS OF SODIUM HYDROXIDE PRODUCTION BY FERRITE  
METHOD**

**Ермолаева Вера Анатольевна**, к.х.н., доцент кафедры «Техносферная безопасность», Муромский институт (филиал) Владимирского государственного университета имени А. Г. и Н. Г. Столетовых, E-mail: ErmolaevaVA2013@mail.ru

**Шабалина Лариса Валерьевна**, студент кафедры «Техносферная безопасность», Муромский институт (филиал) Владимирского государственного университета имени А. Г. и Н. Г. Столетовых, E-mail: lara1808shabalina@gmail.com

**Ermolaeva Vera Anatolievna**, Ph. D. in Chemistry, Associate Professor of the Department of Technosphere safety, Murom Institute (branch) Vladimir state University named A.G. and N.G. Stoletovs, E-mail: ErmolaevaVA2013@mail.ru

**Shabalina Larisa Valeryevna**, student of the Department of Technosphere safety, Murom Institute (branch) Vladimir state University named A.G. and N.G. Stoletovs, E-mail: lara1808shabalina@gmail.com

**Аннотация:** В статье рассмотрены физико-химические основы процесса производства гидроксида натрия ферритным способом. По ним были построены математические модели: модель упругости диссоциации  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  при разных температурах (в присутствии и отсутствии  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ), кинетическая модель получения гидроксида натрия, модель среднего значения теплоемкости феррита натрия, а также приведены графики каждой моделей. Приведен расчет ферритной печи: тепловая мощность печи; объемная производительность печи; количество и скорость газов, проходящих через печь, продолжительность пребывания материала в печи.

**Abstract:** The article considers the physical and chemical foundations of the process of producing sodium hydroxide by the ferrite method. Mathematical models were built from them: a model of the elasticity of dissociation of  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  at different temperatures (in the presence and absence of  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ), a kinetic model of the production of sodium hydroxide, a model of the average heat capacity of sodium ferrite, and graphs of each model are also given. The calculation of the ferrite furnace is given: the thermal capacity of the furnace; volumetric capacity of the furnace; quantity and velocity of gases passing through furnace, duration of material stay in furnace.

**Ключевые слова:** гидроксид натрия, кинетическая модель, упругость диссоциации, ферритная печь.

**Keywords:** sodium hydroxide, kinetic model, dissociation elasticity, ferrite furnace.

### **Введение**

В работе подробно изучен технологический процесс производства гидроксида натрия ферритным способом, представлена технологическая

Международный журнал прикладных наук и технологий "Integral" схема. Основным аппаратом производства является ферритная печь. Представляет интерес построение компьютерных моделей работы ферритной печи для детального анализа параметров работы и их усовершенствования. Также выполнен расчет ферритной печи и продолжительности пребывания материала в ней.

### **Модель упругости диссоциации $\text{Na}_2\text{CO}_3$ при разных температурах**

Карбонат натрия, является одним из основных исходных веществ в производстве гидроксида натрия ферритным способом. Равновесное давление двуокиси углерода  $p(\text{CO}_2)$  называют его упругостью диссоциации.

При исследовании магнитных свойств продуктов, получаемых при сплавлении углекислого натрия с окисью железа, было установлено, что  $\text{Na}_2\text{O}\cdot\text{Fe}_2\text{O}_3$  и сплавы, содержащие большие количества щелочного окисла, приобретают магнитные свойства при температуре  $70^\circ$ . Процесс получения феррита натрия следует вести при  $800\text{—}1000^\circ$ .

В результате изучения упругости диссоциации  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  в присутствии  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  получены данные, приведенные в табл. 1.

Таблица 1- Упругости диссоциации  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  в присутствии  $\text{Fe}_2\text{O}_3$

Температура $^\circ\text{C}$	$p(\text{CO}_2)$ , мм рт. ст	Температура $^\circ\text{C}$	$p(\text{CO}_2)$ , мм рт. ст
729	161,20	835	653,90
775	314,06	841	761,50
790	341,50	850	753,96
823	572,38	851,65	760,00

Из табл. 1 следует, что упругость диссоциации  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  в присутствии  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  резко возрастает, достигая 760 мм рт. ст. при температуре плавления соды.

Необходимо найти эмпирические зависимости  $p(\text{CO}_2)$  от изменения температуры в присутствии  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ .

Используя метод аппроксимации, математическая модель зависимости упругости диссоциации от температуры в присутствии  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  будет выглядеть следующим образом:

$$f(z) = \begin{cases} a_1 \cdot (z - 729) + 161.2, & 729 \leq z \leq 790. \\ a_2 \cdot (z - 790) + 341.5, & 790 < z \leq 850. \end{cases}$$

где  $a_1 = 3.08$ ;  $a_2 = 6.9$

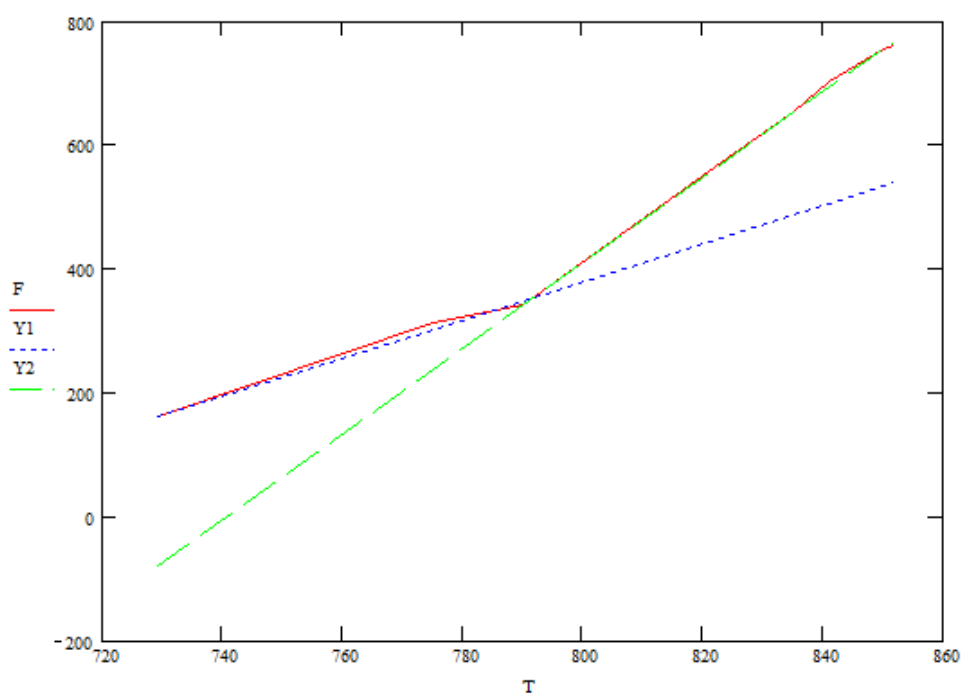


Рис. 1. Компьютерная модель зависимости упругости диссоциации от температуры в присутствии  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ :

$F$  - равновесное давление двуокиси углерода  $p(\text{CO}_2)$ ;  $T$  – температура;  $Y_1, Y_2$  – коэффициенты уравнения математической модели научно-линейной функции аппроксимации температурной зависимости упругости диссоциации в присутствии  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ .

Ошибка аппроксимации  $Q_1 = 182,449$ , а  $Q_2 = 129,107$ .

При анализе данных, приведенные в таблице 2, где  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  отсутствует, можно заметить, что при температуре  $1200^\circ\text{C}$  упругость диссоциации  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  достигает всего лишь  $41,0$  мм рт. ст.

Таблица 2- Упругости диссоциации  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  при отсутствии  $\text{Fe}_2\text{O}_3$

Температура °C	$p(\text{CO}_2)$ , мм рт. ст	Температура °C	$p(\text{CO}_2)$ , мм рт. ст
700	1,0	1050	16,0
820	3,0	1150	28,1
920	4,6	1200	41,0
990	12,2		

По теоретическим расчетам упругость диссоциации  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  (при отсутствии  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ) может достигнуть 760 мм рт. ст. при температуре около 2000°.

Необходимо найти эмпирические зависимости  $p(\text{CO}_2)$  от изменения температуры в отсутствии  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ .

Используя метод аппроксимации, математическая модель зависимости упругости диссоциации от температуры в отсутствии  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  будет выглядеть следующим образом:

$$f(z) = a \cdot z^2$$

где  $a = 0,3746$ ; а параметр  $z$  зависит от температуры:

$$z_i = \frac{T_i - 700}{50}$$

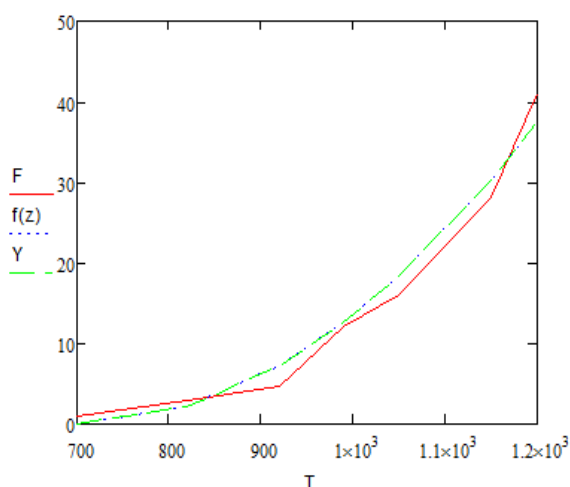


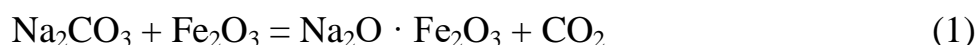
Рис. 2. Компьютерная модель зависимости упругости диссоциации от температуры в отсутствии  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ :

$F$  - равновесное давление двуокиси углерода  $p(\text{CO}_2)$ ;  $T$  – температура;  $Y$  – коэффициент уравнения математической модели научно-линейной функции аппроксимации температурной зависимости упругости диссоциации в отсутствие  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ;  $f(z)$  - зависимость упругости диссоциации от температуры в отсутствие  $\text{Fe}_2\text{O}_3$

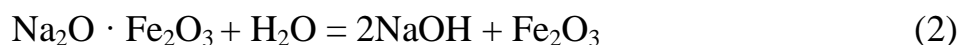
Ошибка аппроксимации  $Q = 32,014$ .

### **Кинетическая модель получения гидроксида натрия**

Процесс производства едкого натра протекает в две стадии. При прокаливании смеси углекислого натрия с окисью железа образуется феррит натрия:



Феррит натрия разлагают водой:



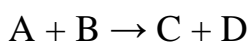
Построим математическую модель для реакции (1). Введем следующие обозначения:

а) Исходные вещества (реагенты):  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  – А;  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  – В.

Б) Целевой продукт:  $\text{Na}_2\text{O} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$  – С.

В) Побочный продукт:  $\text{CO}_2$  – D.

Вследствие замены получим следующее уравнение:



Данную реакцию можно записать в следующем виде:



Расчет проводится по модели кинетики для уравнения реакции, отображающего скорость протекания реакций (скорость изменения концентраций реагентов и продуктов в реакциях). Математическая модель выглядит следующим образом:

$$D(t, c) \equiv \begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -k_A \cdot C_A \cdot C_B \\ \frac{dC_B}{dt} = -k_B \cdot C_A \cdot C_B \\ \frac{dC_C}{dt} = k_C \cdot C_A \cdot C_B \\ \frac{dC_D}{dt} = k_D \cdot C_A \cdot C_B \end{cases}$$

где  $k_{A, B, C, D}$  – константа скорости;  $C_{A, B, C, D}$  – концентрация веществ А, В, С, D.

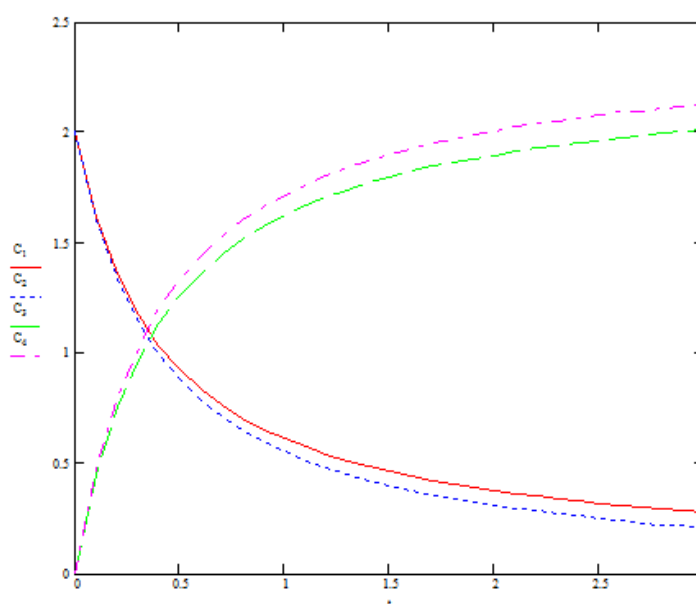


Рис.3. Компьютерная кинетическая модель реакции (1):

$C_1$ - концентрация вещества А;  $C_2$ -концентрация вещества В;  $C_3$ - концентрация вещества С;  $C_4$ -концентрация вещества D;  $t$  – время.

Выводы следующие: вещество А (кальцинированная сода) расходуется до 0,284 за время равное 2,9 секундам; вещество В (окись железа) расходуется до 0,213 за время равное 2,9 секундам; выход целевого продукта С (феррит натрия) составляет 2,002 за время равное 2,9 секундам и выход вещества D (углекислый газ) составляет 2,117 за время равное более 2,9 секундам.

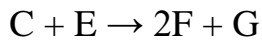
Построим математическую модель для реакции (2). Введем следующие обозначения:

а) Исходные вещества (реагенты):  $\text{Na}_2\text{O} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3 - \text{C}$ ;  $\text{H}_2\text{O} - \text{E}$ .

б) Целевой продукт:  $2\text{NaOH} - \text{F}$ .

в) Побочный продукт:  $\text{Fe}_2\text{O}_3 - \text{G}$ .

Вследствие замены получим следующее уравнение:



Данную реакцию можно записать в следующем виде:

$$2\text{F} + \text{G} - \text{C} - \text{E} = 0$$

Математическая модель выглядит следующим образом:

$$D(t, c) \equiv \begin{cases} \frac{dC_C}{dt} = -k_C \cdot C_C \cdot C_E \\ \frac{dC_E}{dt} = -k_E \cdot C_C \cdot C_E \\ \frac{dC_F}{dt} = k_F \cdot C_C \cdot C_E \\ \frac{dC_G}{dt} = k_G \cdot C_C \cdot C_E \end{cases}$$

где  $k_{C, E, F, G}$  – константа скорости;  $C_{C, E, F, G}$  – концентрация веществ  $C, E, F, G$ .

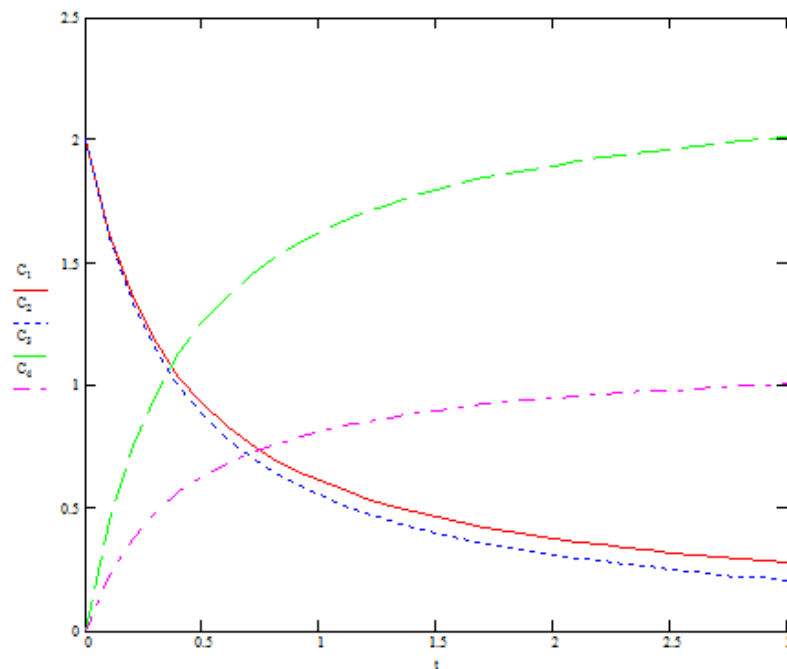


Рис.4. Компьютерная кинетическая модель реакции (2):



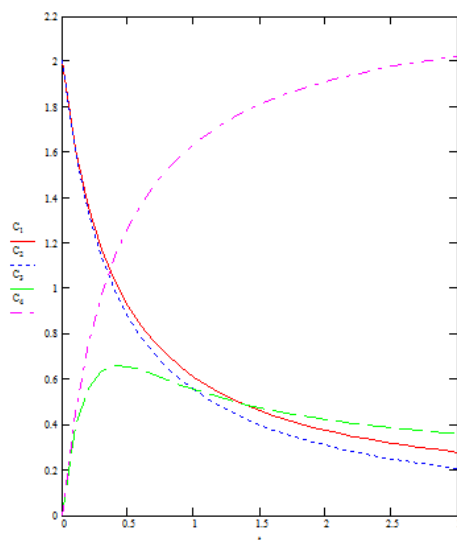
$C_1$ - концентрация вещества С;  $C_2$ -концентрация вещества Е;  $C_3$ -  
концентрация вещества F;  $C_4$ -концентрация вещества G; t – время.

Выводы следующие: вещество С (феррит натрия) расходуется до 0,284 за время равное 2,9 секундам; вещество Е (вода) расходуется до 0,213 за время равное 2,9 секундам; выход целевого продукта F (гидроксида натрия) составляет 2,002 за время равное 2,9 секундам и выход вещества G (окись железа) составляет 1,001 за время равное 0,3 секундам.

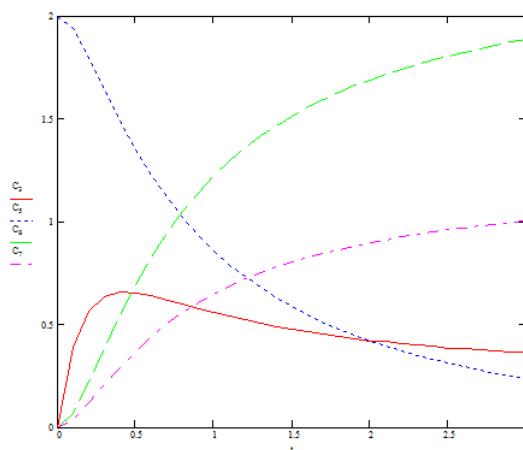
В результате проделанной работы, можно построить общую математическую модель по реакциям (1) и (2), которая выглядит следующим образом:

$$D(t, c) \equiv \left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_A}{dt} = -k_A \cdot C_A \cdot C_B \\ \frac{dC_B}{dt} = -k_B \cdot C_A \cdot C_B \\ \frac{dC_C}{dt} = k_C \cdot C_A \cdot C_B - k_C \cdot C_C \cdot C_E \\ \frac{dC_D}{dt} = k_D \cdot C_A \cdot C_B \\ \frac{dC_E}{dt} = -k_E \cdot C_C \cdot C_E \\ \frac{dC_F}{dt} = k_F \cdot C_C \cdot C_E \\ \frac{dC_G}{dt} = k_G \cdot C_C \cdot C_E \end{array} \right.$$

где  $k_{A, B, C, D, E, F, G}$  – константа скорости;  $C_{A, B, C, D, E, F, G}$  – концентрация веществ А, В, С, D, Е, F, G.



а



б

Рис.5. Компьютерная кинетическая модель по двум реакция: а – по реакции (1); б – по реакции (2):

$C_1$ - концентрация вещества А;  $C_2$ -концентрация вещества В;  $C_3$ - концентрация вещества С;  $C_4$ -концентрация вещества D;  $C_5$ - концентрация вещества Е;  $C_6$ -концентрация вещества F;  $C_7$ - концентрация вещества G;  $t$  – время.

Выводы следующие: вещество А (кальцинированная сода) расходуется до 0,284 за время равное 2,9 секундам; вещество В (окись железа) расходуется до 0,213 за время равное 2,9 секундам; выход целевого продукта С (феррита натрия) составляет 0,366 за время равное 2,9 секундам; выход

Международный журнал прикладных наук и технологий "Integral" побочного вещества D (углекислый газ) составляет 2,016 за время равное 2,9 секундам; вещество E (вода) расходуется до 0,247 за время равное 2,9 секундам; выход целевого продукта F (гидроксида натрия) составляет 1,87 за время равное 2,9 секундам и выход побочного вещества G (окись железа) составляет 0,933 за время равное 0,6 секундам.

### Модель среднего значения теплоемкости феррита натрия

При расчете процессов, протекающих в ферритных печах, пользуются экспериментально определенными средними данными теплоемкости феррита в определенных интервалах температур. Эти данные приведены в табл.3 .

Таблица 3 - Средние значения теплоемкостей феррита натрия

Интервал температур °С	Средняя теплоемкость кал/Г·град	Интервал температур °С	Средняя теплоемкость кал/Г·град
20-100	0,189	20-500	0,214
20-150	0,195	20-550	0,228
20-200	0,201	20-600	0,219
20-250	0,208	20-650	0,219
20-300	0,212	20-700	0,222
20-350	0,214	20-750	0,228
20-400	0,216	20-800	0,237
20-450	0,214	20-850	0,249

Необходимо найти эмпирические зависимости средней теплоемкости феррита от изменения температуры в разных интервалах.

Используя метод аппроксимации, математическая модель зависимости средней теплоемкости феррита от температуры будет выглядеть следующим образом:

$$f(x) = m + n \cdot \left[ 1 + \frac{(x + p)^3}{4} \right]$$

где  $m = 0,215$ ;  $n = 0,000276$ ;  $p = 2,675$ .

Интервал температур, при которых протекает реакция, определяется по формуле:  $T(x) = 500 + 50 \cdot x$

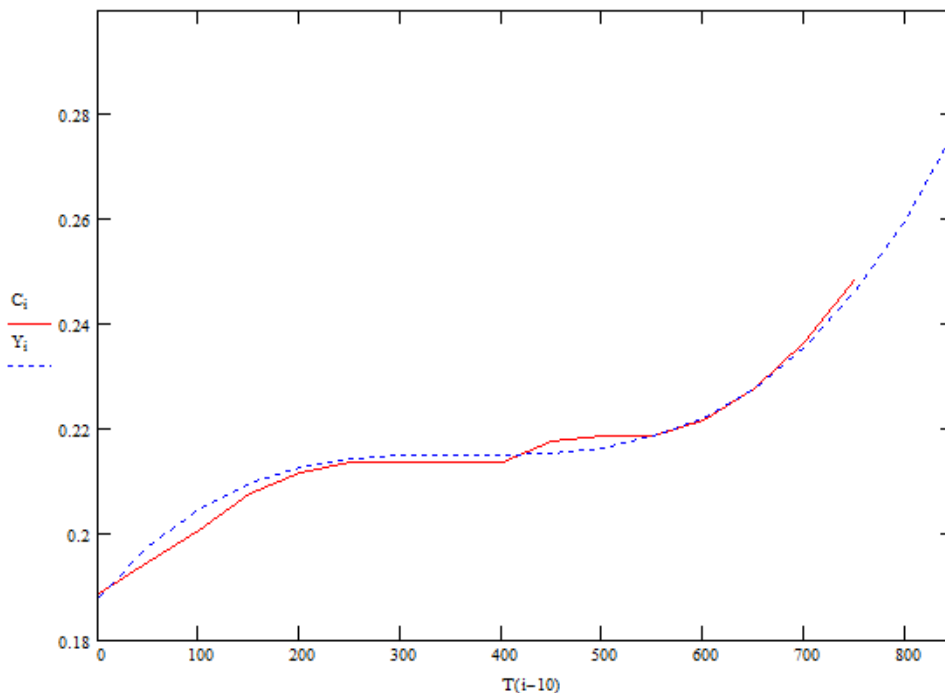


Рис.6. Компьютерная модель зависимости средней теплоемкости феррита натрия от температуры:

$C_i$  - средняя теплоемкость феррита натрия;  $T$  - интервал температур;  $Y$  – коэффициент уравнения математической модели теплоемкости феррита натрия в зависимости от температуры.

Ошибка аппроксимации  $Q = 5,124 \cdot 10^{-5}$ .

### Показатели работы ферритной печи

Производительность ферритной печи принята 20 т/сут каустической соды. Для получения 1 т каустической соды обжигается 7413,0 кг смеси и образуется 5321,8 кг феррита.

## Международный журнал прикладных наук и технологий "Integral"

Расчетная часовая производительность печи (в кг/час): по смеси – 6177,5, по ферриту – 4434,2. Расход условного топлива на 1 т каустической соды составляет 600 кг.

Тепловая мощность печи найдена равной 3500000 ккал/час.

Удельная тепловая мощность печи при ее объеме, равном

$$\frac{\pi \cdot 1,7^2}{4} \cdot 13,0 = 29,5 \text{ м}^3$$

составляет:  $3500000/29,5 = 118644,1 \text{ ккал/м}^3 \cdot \text{час}$

*Объемная производительность печи* равна ( $\text{кг/м}^3 \cdot \text{час}$ ):

$$\text{по смеси: } \frac{6177,5}{29,5} = 209,4$$

$$\text{по ферриту: } \frac{4434,2}{29,5} = 150,3$$

*Количество газа*, проходящего через печь ( $\text{нм}^3/\text{час}$ ) (см. материальный и тепловой балансы печи):

$$\text{продуктов горения: } \frac{530,5 \cdot 435,3 \cdot 22,4 \cdot 20}{1000 \cdot 24} = 4310,6$$

$$\text{CO}_2 \text{ от разложения Na}_2\text{CO}_3: \frac{548,0 \cdot 22,4 \cdot 20}{44 \cdot 24} = 232,5$$

$$\text{водяных паров из смеси: } \frac{912,6 \cdot 22,4 \cdot 20}{18 \cdot 24} = 946,4$$

$$\text{Всего: } 4310,6 + 232,5 + 946,4 = 5489,5$$

В зоне сжигания углеводородов температура газов  $1000^\circ$ , объем газов, проходящих через печь в течение 1 часа, равен:

$$4310,6 \left(1 + \frac{1}{273} t_1\right) = 4310,6 \left(1 + \frac{1000}{273}\right) = 20100 \text{ м}^3$$

На выходе из печи, при температуре  $478^\circ$ , объем газов, выходящих из печи в течение 1 часа, равен:

$$5489,5 \left(1 + \frac{1}{273} t_2\right) = 5489,5 \left(1 + \frac{478}{273}\right) = 15101 \text{ м}^3$$

где  $\frac{1}{273}$  - тепловой коэффициент расширения газов;

$t_1$  и  $t_2$  - температуры газов,  $^\circ\text{C}$ .

*Скорость газов* равна (в м/сек):

В зоне горения

$$\frac{20100}{\frac{0,75 \cdot \pi \cdot 1,7^2}{4} \cdot 3600} = 3,28$$

где 0,75 - коэффициент свободного сечения барабана печи.

На выходе

$$\text{в сечении печи: } \frac{15101}{\frac{0,75 \cdot \pi \cdot 1,7^2}{4}} = 2,47$$

$$\text{в газоходе: } \frac{15101}{\frac{\pi \cdot 0,6^2}{4} \cdot 3600} = 14,8$$

где 0,60 - диаметр газохода, м.

### Заключение

В ходе работы были построены компьютерные модели по производству гидроксида натрия ферритным способом.

В компьютерную часть проекта включены модели: модель упругости диссоциации  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  при разных температурах; кинетическая модель получения гидроксида натрия; модель среднего значения теплоемкости феррита натрия.

### Литература

1. Гумеров А.М. Математическое моделирование химико-технологических процессов: Учебное пособие. – 2-е изд. – СПб.: Изд-во Лань, 2014. – 176с.
2. Зеликин М.Б. Производство каустической соды химическими способами. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://booksee.org/book/485246>
3. Кутепов А.М., Бондарева Т.И., Беренгартен М.Г. Общая химическая технология. - М.: Высш. шк., 1990. – 520 с.
4. Ермолаева В.А., Лаврова Е.В. Расчетные характеристики кислотного способа получения криолита, Естественные и технические науки, № 11 (125), 2018. – с.458-461.

5. Николаева Д.М. Ермолаева В.А. Математическое моделирование ректификации многокомпонентной смеси, Международный журнал гуманитарных и естественных наук, № 2, том 2, 2019. – с.35-39.
6. Гельперин Н.И. Основные процессы и аппараты химической технологии [Электронный ресурс]. Режим доступа: [http://www.newlibrary.ru/book/gelperin\\_n\\_i\\_/osnovnye\\_processy\\_i\\_apparaty\\_himicheskoi\\_tehnologii\\_kn\\_2.html](http://www.newlibrary.ru/book/gelperin_n_i_/osnovnye_processy_i_apparaty_himicheskoi_tehnologii_kn_2.html)

### References

1. Gumerov A.M. Mathematical modeling of chemical and technological processes: Tutorial. - 2nd ed. - St. Petersburg: Publishing House of Lan, 2014. – 176 pages.
2. Zelikin M.B. Caustic soda production by chemical methods. [Electronic Resource]. Access Mode: <https://booksee.org/book/485246>
3. Kutepov A.M., Bondareva T. I., Berengarten M. G. General chemical technology. - М.: Vysh. shk., 1990. – 520 pages.
4. Ermolaeva V.A., Lavrova E.V. Design characteristics of the acid method for producing cryolite, Natural and technical sciences, No. 11 (125), 2018. - p.458-461.
5. Nikolaev D.M. Ermolaeva V.A. Mathematical modeling of rectification of a multicomponent mixture, International Journal of Humanities and Natural Sciences, No. 2, volume 2, 2019. - p.35-39.
6. Gelperin N.I. Basic processes and devices of chemical technology [Electronic resource]. Режим доступа: [http://www.newlibrary.ru/book/gelperin\\_n\\_i\\_/osnovnye\\_processy\\_i\\_apparaty\\_himicheskoi\\_tehnologii\\_kn\\_2.html](http://www.newlibrary.ru/book/gelperin_n_i_/osnovnye_processy_i_apparaty_himicheskoi_tehnologii_kn_2.html)

© Ермолаева В.А., Шабалина Л.В., 2022. Международный журнал прикладных науки и технологий "Integral" №1/2022.

Для цитирования: Ермолаева В.А., Шабалина Л.В. Математическая модель химико-технологического процесса производства гидроксида натрия ферритным способом // Международный журнал прикладных наук и технологий "Integral" №1/2022