

УДК 669.168

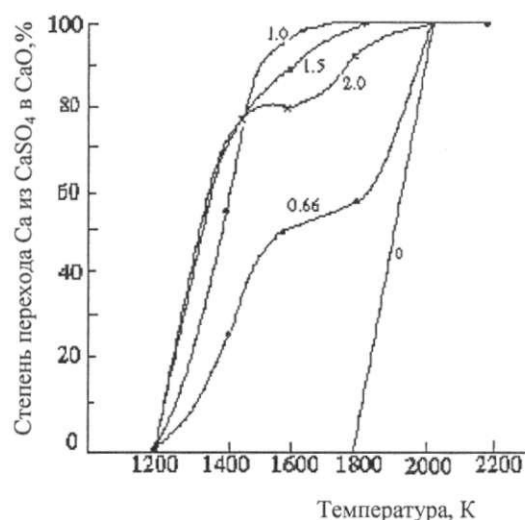
ОБРАЗОВАНИЕ CaO В СИСТЕМЕ CaSO₄- mC

Б.А.Капсалям, В.М.Шевко, Е.Я.Калашников
НПФ «Казхиминвест», г.Тараз,
ЮКГУ им. М.Ауезова, г.Шымкент

На основе термодинамического моделирования [1,2] нами изучено [3,4] исследование в системе CaSO₄- mC. В качестве базовой реакции рассматривалась реакция:



Кроме того, рассмотрены системы с числом молей углерода (m), равным 0,5; 0,66; 1,5; 2,0. Как следует из рисунка 1, характер влияния «m» на степень перехода CaO имеет довольно сложный вид.



Цифры на графиках – числа молей углерода

Рисунок 1- Влияние температуры и числа молей на степень перехода Са из CaSO₄ в СаО

Используя результаты данных термодинамического моделирования влияния числа молей углерода на восстановление сульфата кальция до оксида кальция при различных температурах, посредством использования рототабельного планирования второго порядка [5,6] была поставлена задача определения формы поверхности отклика исследуемого взаимодействия. Интервалы изменения мольного количества С и температуры показаны в таблице 1. В качестве целевой выходной переменной (поверхности отклика) выбрана степень перехода Са из CaSO₄ в СаО (α_{CaO}), %.

Независимыми параметрами (факторами) являлись:

Число молей С [кодированный вид – X_1 , натуральный – m]

Температура [кодированный вид – X_2 , натуральный – T , К]

Таблица 1 - Исходные данные для планирования экспериментов

Факторы	Кодированный вид		Натуральный вид	
	X_1	X_2	m	T
Нижний уровень	-1	-1	0,865	1461
Верхний уровень	+1	+1	1,785	1739
Нулевой уровень	0	0	1,325	1600
Интервал варьирования	Δ	Δ	0,46	139
Плечо + α	+1,44	+1,44	1,976	1797
Плечо – α	-1,44	-1,44	0,674	1403

План и результаты проведенных экспериментов приведены в таблице 2. На основании проведенных по плану исследований найдено уравнение регрессии:

$$\alpha_{\text{CaO}} = 424,68 \cdot m + 0,554 \cdot T - 75,38 \cdot m^2 - 0,000101 \cdot T^2 - 0,121 \cdot m \cdot T - 711,65 \quad (2)$$

Проверка значимости по критерию Стьюдента показала, что все коэффициенты оказались значимыми. Использование критерия Фишера подтвердило адекватность математической модели.

Таблица 2 - План проведения исследований, полученные результаты моделирования системой «Астра»

№ опыта	m	T	$\alpha_{\text{Ca}}, \%_{\text{эксп}}$	$\alpha_{\text{Ca}}, \%_{\text{расчет}}$	Отклонение, %
1	0,865	1461	39	40,2	-3,0
2	1,785	1461	82	84,5	-3,0
3	0,865	1739	74	75,3	-1,7
4	1,785	1739	88	88,6	-0,7
5	1,976	1600	79	78,5	0,7
6	0,674	1600	37	37,7	-1,9
7	1,325	1797	100	100,0	0,0
8	1,325	1403	75	72,2	3,7
9	1,325	1600	90	90,0	0,0
10	1,325	1600	92	90,0	2,1
11	1,325	1600	88	90,0	-2,3
12	1,325	1600	89	90,0	-1,2
13	1,325	1600	90	90,0	0,0

Как видно из таблицы, отклонение расчетного результата от экспериментального не превышает 3,7%, что говорит о хорошей сходимости.

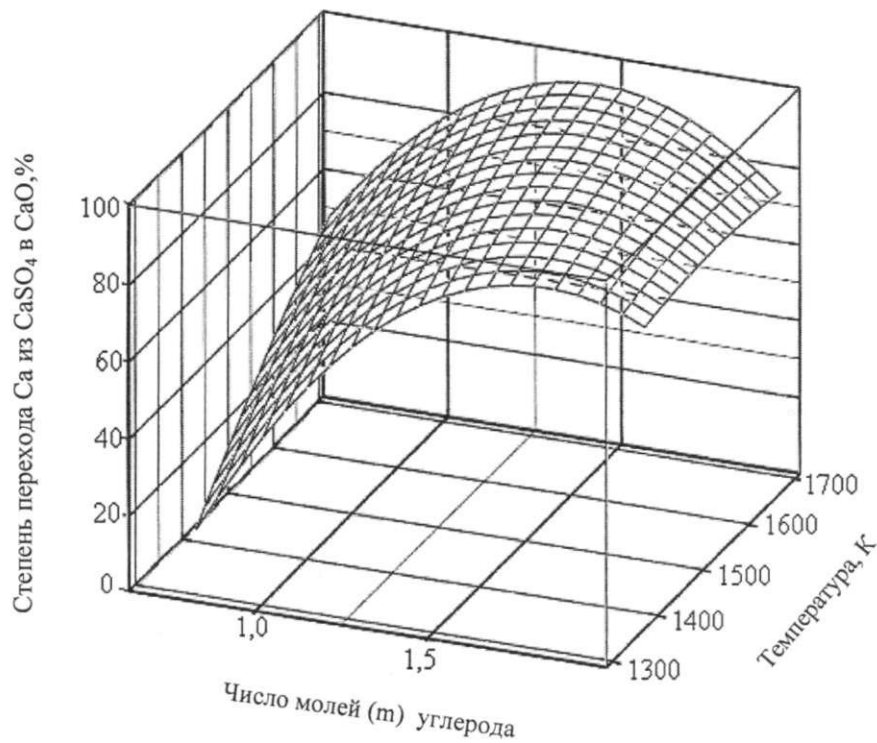
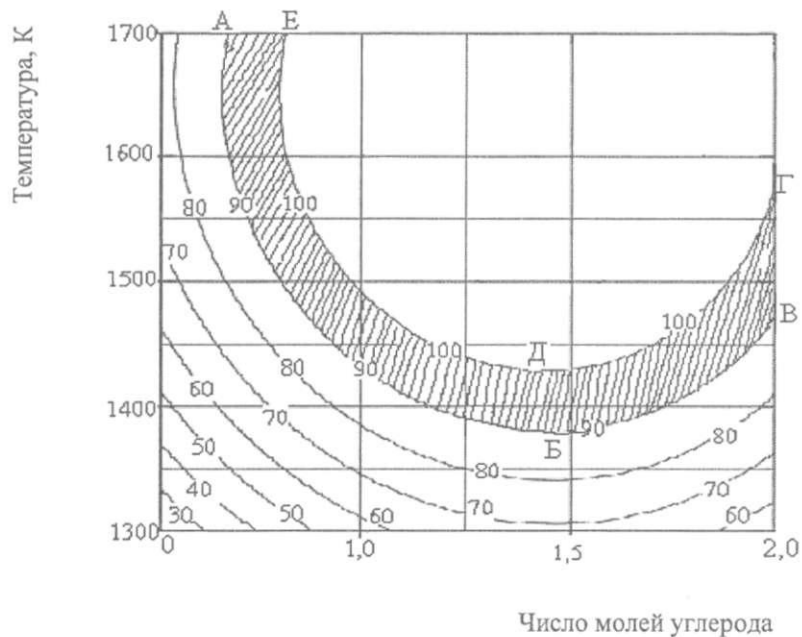


Рисунок 2- Влияние температуры и числа молей С на форму поверхности отклика – степень перехода Са из СаSO4 в СаО



Цифры на линиях - степень перехода Ca из CaSO₄ в CaO, %

Рисунок 2- Влияние температуры и числа молей С на форму изолиний-степень перехода Ca из CaSO₄ в CaO

Об одновременном влиянии температуры и числа молей углерода на форму поверхности отклика - степень перехода Ca из CaSO₄ в CaO при взаимодействии CaSO₄ с С можно судить по рисунку 2, на котором представлена информация о влиянии температуры и числа молей С на форму поверхности отклика - степень перехода Ca из CaSO₄ в CaO. Форма поверхности имеет экстремальный характер. Горизонтальные сечения поверхности показаны на рисунке 2. Как видно из рисунка, реализация реакции (1) на уровне $\geq 90\%$ наблюдается в области А-Б-В-Г-Д-Е (заштрихованная область), т.е. при $T \geq 1370\text{K}$ и числе молей С от 0,25 до 2,0, а полный переход Ca из CaSO₄ в CaO - по линии Е-Д-Г, т.е. в температурной области 1430-1700 К и числе молей углерода от 0,6 до 2,0.

Таким образом, на основе проведенных исследований можно сделать следующие выводы:

-температура и число молей С оказывают влияние на степень протекания реакции:

$2\text{CaSO}_4 + \text{C} = 2\text{CaO} + 2\text{SO}_2 + \text{CO}_2$ в соответствии с уравнением:

$$\alpha_{\text{Ca}} = 424,68 \cdot m + 0,554 \cdot T - 75,38 \cdot m^2 - 0,000101 \cdot T^2 - 0,121 \cdot m \cdot T - 711,65$$

- полная степень перехода Ca из CaSO₄ в CaO при восстановлении углеродом осуществляется при температуре более 1430К и числе молей С от 0,6 до 2,0.

Литература

- 1 Синярев Г.Б., Ватолин Н.А., Трусов Б.Г., Моисеев Г.К. Применение ЭВМ для термодинамических расчетов металлургических процессов.- М.: Наука, 1982.-263с.
- 2 Трусов Б.Г. Термодинамический метод анализа высокотемпературных состояний и процессов практическая реализация: дис... докт.техн.наук.- М.: МГУ, 1984. -292с.

- 3 Шевко В.М., Калашников Е.Я., Капсалямов Б.А. Возможность получения CaO при взаимодействии CaSO₄ с H₂, C, CO, CH₄ // Труды международной научно-практической конференции «Ауезовские чтения-4» и третьей научной конференции Вузов Южного региона. –Шымкент, 2004.- С 99-103.
- 4 Шевко В.М., Капсалямов Б.А., Калашников Е.Я. Термодинамическое моделирование высокотемпературного разложения сульфата кальция // Вестник НАН РК.-№6.-2006.- С-7-10.
- 5 Ахназарова С.А., Кафаров Б.В. Методы оптимизации эксперимента в химической промышленности. М.:Высшая школа, 1978.-319с.
- 6 Батунер А.М., Позин М.Е. Математические методы в химической технике.- Л.:Химия, 1971.-124с.

Қорытынды

Мақалада, CaSO₄ пен көміртегінің әрекеттесу арқылы CaO- шығуы қарастырылған. Эксперименттерді математикалық жоспарлау арқылы және «Астра» бағдарламалық кешенін қолданып отырып CaSO₄ пен көміртегінің CaO-ға дейін толық әрекеттесу $T \geq 1430\text{K}$ және C-нің моль саны 0,6 мен 2,0 арасына өтеді.

Summary

The article studies interaction of CaSO₄ with carbon to CaO. The method of parametric optimization along with multiple software "Astra" show that the full interaction of CaSO₄ with carbon occurs when $T \geq 1430\text{K}$ and the number of moles of C varies from 0.6 to 2.0.