

Раздел 1. «Металлургия»

УДК 669
МРНТИ 53.01.85

А.Х. Нурумгалиев, Т.Т. Жүнісқалиев, А.Т. Пушанова

*Карагандинский индустриальный университет, г. Темиртау, Казахстан
(Email.ru: aassemay99@mail.ru)*

Обзор использования программного комплекса HSC Chemistry для термодинамических расчетов и фазовых равновесии с применением широкой термохимической базы данных

Статья знакомит с перспективным научным подходом и инструментарием физико-химических исследований: термодинамическим моделированием и прогнозированием результатов химических взаимодействий и фазовых превращений в многоэлементных системах.

Целью работы является использование программного обеспечения для расчета термодинамических, теплотехнических и технологических задач, наиболее распространенных в практической деятельности металлургов и в учебном процессе. Для решения задач использованы возможности пакета прикладных программ HSC Chemistry, разработанного специалистами исследовательского центра фирмы Outotec.

Решение примеров позволяет пошагово реализовать алгоритм расчета, от постановки задачи, ее записи средствами программ пакета до решения и получения результатов и их правильной интерпретации в терминах, понятных специалистам-металлургам.

Актуальность работы в том, что программное обеспечение может быть с успехом использован при подготовке бакалавров, специалистов и магистров, специализирующихся по направлениям металлургии и химической технологии.

Ключевые слова: программное обеспечение, термодинамика, материальный баланс, тепловой баланс, равновесие фаз в термодинамике, энтальпия, энтропия, прогнозирование.

Введение

HSC Chemistry предоставляет собой единственную возможность обобщенного описания любого высокотемпературного состояния с помощью одних только законов термодинамики, независимо от условий существования или области применения, требуя минимум информации о самой системе и ее окружении. Набор модулей зависит от версии пакета. Важнейшей особенностью пакета является то, что программные модули автоматически взаимодействуют с базами данных, заимствуя из них необходимые для расчета справочные данные (стандартные значения энтальпии, энтропии, эмпирические коэффициенты для расчета мольной теплоемкости, коэффициенты теплопроводности материалов, степени черноты материалов и др.) и расчетные формулы (в определенных случаях). Это требует от пользователя аккуратности при вводе формул веществ и записи исходной задачи, в прочем при наличии ошибок пользователя программы пакета выдают общие сведения о пакете прикладных программ HSC Chemistry, с помощью которых поиск и устранение ошибок значительно

Раздел 1. «Металлургия»

облегчаются.

Главная часть

Для металлургических расчетов важно, что в базе данных представлены характеристики оксидов, сульфидов, силикатов, галогенидов и других соединений металлов, входящих в состав первичного и вторичного сырья. При составлении базы данных реферировано более 1500 литературных источников, в этой работе приняли участие несколько десятков авторитетных зарубежных организаций, включая университеты и исследовательские институты. Название программы основано на том, что расчетные модули автоматически используют одну и ту же обширную термодинамическую базу данных, которая содержит данные об энтальпии (H), энтропии (S) и теплоемкости (C) для более чем 29 000 химических соединений. Эта база данных эквивалентна более чем двадцати толстым книгам данных.

Цель HSC - сделать обычные термодинамические расчеты быстрыми и простыми для выполнения с использованием персональных компьютеров. Поэтому HSC имеет широкий спектр возможностей применения в научном образовании, промышленности и исследованиях. Термодинамические расчеты полезны, например, при разработке новых химических процессов и усовершенствовании старых.



Рисунок 1. Главное меню для работы с базой данных по термодинамическим свойствам веществ

Модуль HSC Equilibrium позволяет пользователю легко рассчитывать многокомпонентные равновесные составы в гетерогенных системах. Пользователю достаточно задать химическую реакцию с ее фазами и видами, а также указать количества исходных веществ. Программа рассчитывает количество продуктов при равновесии в изотермических и изобарических условиях.

Пользователь должен указать вещества и потенциально стабильные фазы, которые будут учитываться в расчетах, а также количества и температуры сырья. Обратите внимание, что, если в определении системы отсутствует стабильное вещество или фаза, результаты будут неверными. Уточнение можно легко сделать в интерфейсе программы HSC. Равновесный состав рассчитывается с помощью решателя GIBBS, который использует метод минимизации энергии Гиббса¹. Программа читает файлы результатов и рисует картинки и таблицы равновесных конфигураций, если было рассчитано несколько равновесий. Пользователь может переключаться между равновесной и графической программами, нажимая кнопки. Эта версия модуля Equilibrium также включает поддержку электрохимических расчетов (ранее известный как модуль Cell). В расчетах равновесия в ячейках пользователю также необходимо указать фазы электродов, типы фаз (газ/жидкость/твердое тело/металл), емкости и уравнение

Раздел 1. «Металлургия»

разряда для реакции зарядки/разрядки. Основной формат модуля Equilibrium - *.gem9, который содержит все данные и настройки форматирования каждого листа определения, а также названия фаз. Программа также может читать импортированные файлы из предыдущих версий HSC: * Формат файла *.GEM содержит все данные и настройки форматирования каждого листа определений, а также названия фаз и т.д., в то время как формат файла *.IGI содержит данные только для расчетов. Формат файла *.ICE содержит данные для одноточечных расчетов клеточного равновесия.

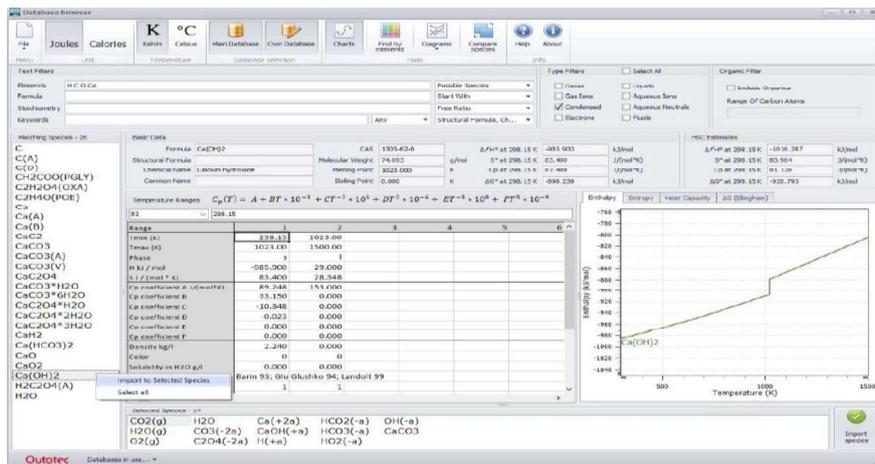


Рисунок 2. Указание элементов химической системы

Уменьшая количество видов, пользователь может увеличить скорость расчета и упростить решение. Особенно если пользователь выбрал С и/или Н среди других элементов, в расчет будет включено очень большое количество видов, и пользователю рекомендуется уменьшить количество видов. Конечно, пользователь может попробовать использовать все виды, но обычно целесообразно выбирать только те виды, которые могут быть стабильными. Однако, если стабильные виды не выбраны, результаты расчета равновесия будут неверными. Если пользователь хочет только рассчитать равновесные составы и нарисовать картинку с существующими файлами, нажмите Calculate, а затем нажмите Show Chart.

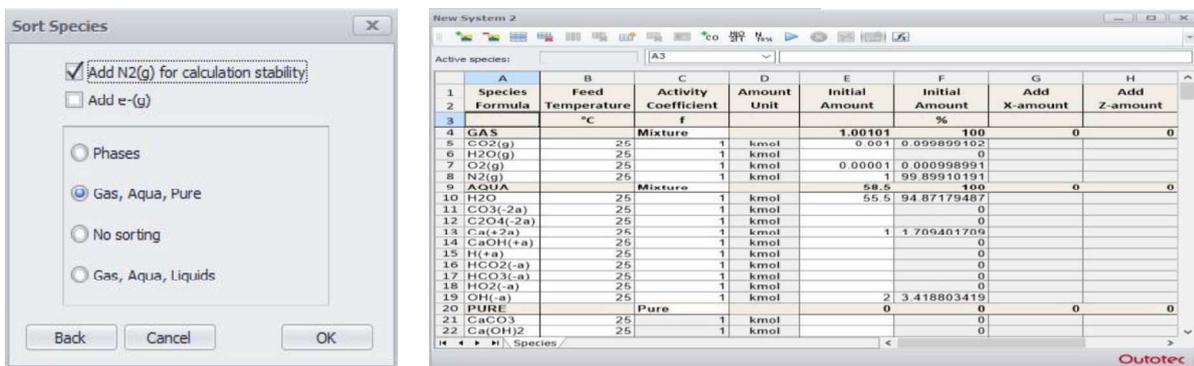


Рисунок 3. Спецификация видов и фаз для реакционной системы. Пользователь может изменить модель раствора из строки Species sheet phase (колонок C)

Раздел 1. «Металлургия»

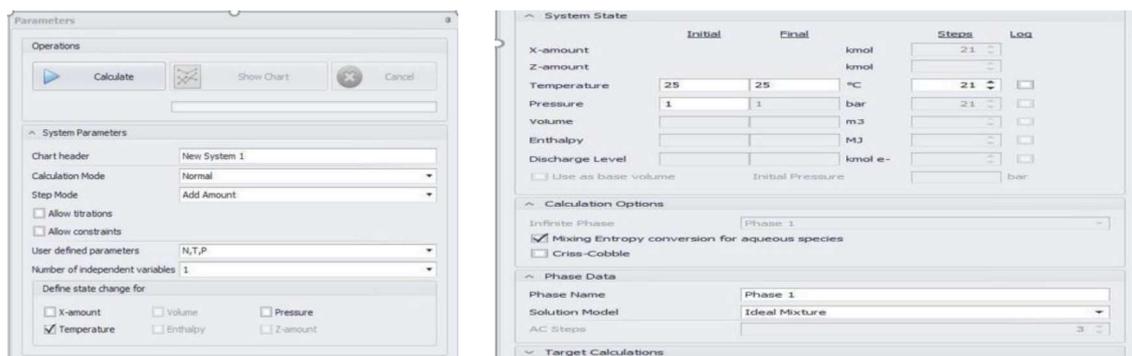


Рисунок 4. Указание параметров расчета

Данные для расчета задаются с помощью панели Parameters, рис. 4. Пользователь указывает все данные, необходимые для создания входного файла для решателей равновесия и для расчета равновесных составов в листах панели Species и Parameters, см. рис. 3 и рис. 4.

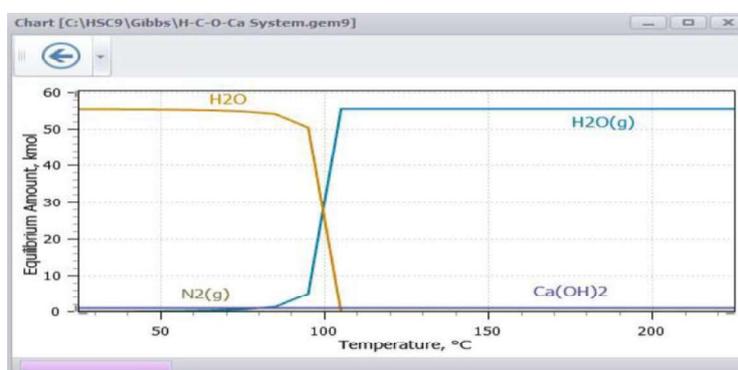


Рисунок 5. 2Д диаграмма

Самым ответственным этапом является выбор видов и фаз, т.е. определение химической системы. Это делается на листе Species редактора Equilibrium Editor, рис. 3. Пользователь может перемещаться по таблице с помощью мыши или клавиш Tab и Arrow. Пользователь должен обратить внимание на следующие моменты: виды (вещества, элементы, ионы...); фазы; формат; входные температуры видов; количество видов; сумма для сырья и материалов; коэффициенты активности.

Расчеты теплового баланса обычно проводятся при разработке новых технологии при прогнозировании протекания физико-химических процессов и совершенствовании старых технологии, поскольку ни один процесс не может работать, если выделяется слишком много тепла или не хватает тепловой энергии для поддержания температуры реакции. Данный модуль рассчитывает реальные или ограниченные тепловые балансы, с заданными балансами масс в качестве граничных условий, но не теоретические балансы в условиях равновесия.

Приложение теплового баланса всегда содержит листы BALANCE, IN1 и OUT1. Пара листов IN и OUT называется областью баланса, которая может считаться эквивалентной контрольному объему. Можно вставить много областей баланса, чтобы создать рабочую книгу с несколькими областями баланса. Основная идея модуля теплового баланса заключается в том, что пользователь указывает виды, температуры и количества IN1 и OUT1, а модуль теплового баланса автоматически рассчитывает тепловой и материальный балансы, используя лист BALANCE. Поскольку программа использует и создает новые области баланса в соответствии с именами листов, чрезвычайно важно не изменять автоматически созданные

Раздел 1. «Металлургия»

имена листов, т.е. листов BALANCE, INx и OUTx. Кроме того, меню «Тепловой баланс» предоставляет широкий спектр функций типа Excel, таких как: форматирование чисел, шрифта, выравнивание и границы, настройки определенных имен и защита ячеек. Поскольку они не обязательно нужны в расчетах теплового баланса, эти функции здесь подробно не описываются [2].

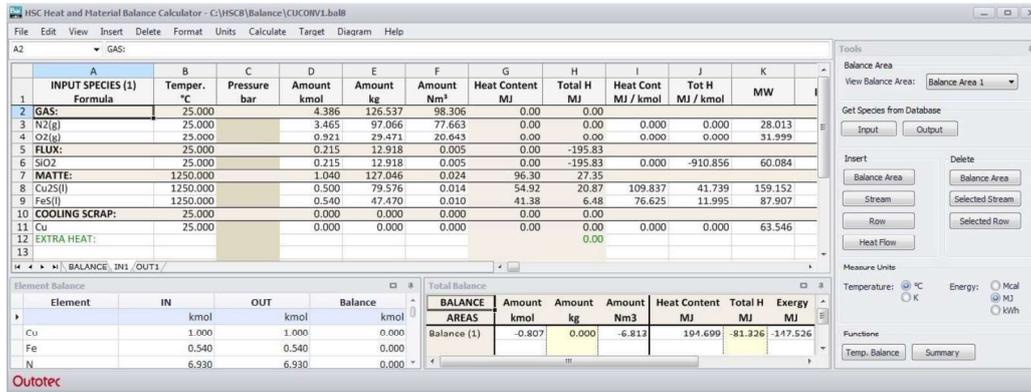


Рисунок 6. Рабочая книга "Тепловой и материальный баланс" с листами BALANCE, IN1 и OUT1.

Новый модуль теплового баланса предлагает несколько способов расчета теплового и материального балансов:

1. Пользователь вводит входные и выходные виды, температуры и количества в листы IN1 и OUT1 соответственно. Это простой способ расчета теплового и материального балансов.
2. Материалы (виды) даются в виде групп веществ, называемых потоками. Эти потоки могут быть такими же, как и фазы, но могут быть и смесью фаз.
3. Выходные суммы могут быть связаны с входными суммами с помощью ссылок на ячейки типа Excel, или наоборот.

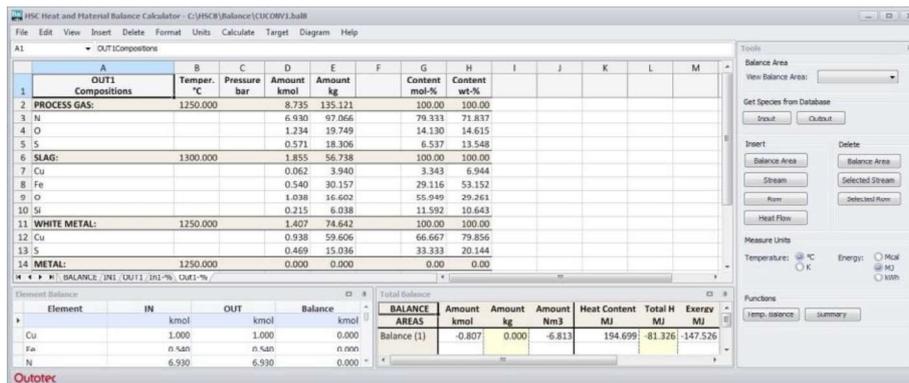


Рисунок 8. Лист Out1-% модуля Heat Balance. Этот лист показывает элементный состав фаз после выбора опции Stream Compositions в меню Calculate (Расчет)

Иногда бывает полезно увидеть результаты расчета теплового баланса, например, в графическом формате. Это можно выполнить вручную, внося пошаговые изменения в одну ячейку переменной и собирая данные из интересных ячеек, например, в листе Excel.

Раздел 1. «Металлургия»

На диаграмме, представленной на рис. 4, видно, что для приведения теплового баланса к нулю необходимо примерно 64 кг/ч лома. Обратите внимание, что единицами измерения на диаграмме являются кг/ч и кВт.

Если пользователь проводил эксперимент в лабораторных или промышленных масштабах или расчеты процесса, пользователь обычно знает:

1. Сырье (исходные материалы), и их количество, температура.
2. Материалы сырья (выход) и их количество, температура и анализ.
3. Входное тепло и тепловые потери могут быть сначала оценены как нулевые, если они отсутствуют.

Для расчета теплового баланса необходимо сначала преобразовать (элементный) химический анализ сырья и продуктов во входные и выходные вещества (виды). Иногда этот этап является самым сложным, поэтому пользователь может выполнить эту процедуру с помощью модуля HSC Species Converter, Конвертер видов. После завершения этой процедуры пользователь просто вводит входные вещества (виды) в лист IN1, а выходные вещества - в лист OUT1. Сразу после этого в нижней строке появится тепловой и материальный баланс.

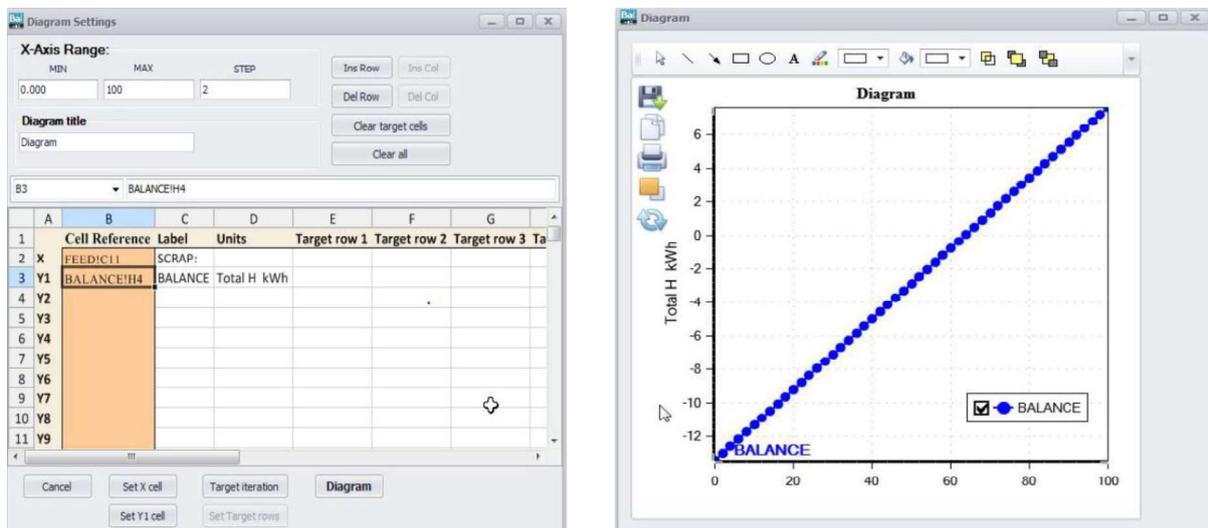


Рисунок 9. Простая диаграмма теплового баланса

Важно проверить баланс элементов, выбрав Calculate/Element Balance, чтобы избежать неправильных материальных и тепловых балансов. Это также может быть использовано для проверки достоверности химических анализов и других измерений количества в ходе эксперимента, если пользовательский ввод основан на этих данных [4].

При создании модели с несколькими областями баланса, выбрав Calculate/Total Balance, пользователь увидит обзор всех областей баланса в одном окне. Это полезно для быстрой проверки, когда материальный и/или тепловой баланс не равен нулю. Он также показывает общий (или чистый) материальный и тепловой баланс для всех областей баланса. Затем легко увидеть, какие области баланса производят тепло, какие требуют тепла, а также указания на то, как тепло может быть передано в рамках процесса.

Результаты и обсуждение

На основании результатов материального и теплового баланса (МТБ) можно сделать выводы о том, требуется ли дополнительная энергия, или выявить избыток энергии в данном

Раздел 1. «Металлургия»

процессе, или реактор нуждается в масштабном охлаждении. Тепловые потери также могут быть определены с помощью модуля HeatLoss. Комбинация этих двух модулей обеспечивает более надежный способ расчета МТБ физико-химических процессов получения различных видов сплавов.

Важно отметить, что это реальный тепловой баланс для инженерных целей, который также учитывает кинетические аспекты, если вводимые пользователем данные основаны на реальных экспериментальных данных. Тепловой баланс, который может быть получен из расчетов равновесия, является теоретическим и дает возможности оценки получения конечных продуктов реакций в технологических процессах. Достоверность результатов расчета зависит от достижения равновесия в реальном процессе.

Для проверки результатов необходимы экспериментальные работы, поскольку HSC не учитывает кинетические явления. Тем не менее, HSC помогает избежать или сократить проведения дорогостоящих экспериментов в высокотемпературных условиях, сэкономить химреактивы для проведения анализов продуктов реакций. HSC информативно дает подсказку о влиянии параметров процесса (Т, Р, С) на физико-химические процессы получения продуктов реакции и выявления оптимальных условий процесса, а также термодинамические расчеты показывают о возможности протекания тех или иных реакции, что является весьма ценной информацией при планировании экспериментальных исследований. Конечно, HSC полностью не решает всех химических задач, поскольку не учитывает скорость химических реакций и неидеальность растворов. Однако во многих случаях это очень недорогой и полезный инструмент, который помогает найти оптимальные условия проведения экспериментальных исследований и прогнозирования технологических процессов.

Список использованных источников

- 1 00 HSC Chemistry 07/24 Introduction
- 2 00 HSC Chemistry 08/24 Operating Instructions
- 3 00 HSC Chemistry 14/24 EQUILIBRIUM MODULE
- 4 00 HSC Chemistry 11/24 Heat and Material Balance

А.Х. Нурумғалиев, Т.Т. Жүнісқалиев, А.Т. Пушанова

HSC Chemistry – ауқымды термодинамикалық мәліметтер базасын пайдалана отырып, химиялық реакциялар мен фазалық тепе-теңдіктерді есептеуге арналған кешендік бағдарлама

Мақалада физика-химиялық зерттеулердің перспективті ғылыми тәсілі мен құралдары: термодинамикалық модельдеу және көп элементті жүйелердегі химиялық әрекеттесулердің және фазалық түрленулердің нәтижелерін болжау енгізілген.

HSC Chemistry жүйенің өзі және оның ортасы туралы ең аз ақпаратты талап ететін немесе қолдану шарттарына қарамастан, тек термодинамика заңдарын пайдалана отырып, кез келген жоғары температуралық күйді жалпы сипаттаудың жолын ұсынады. Модульдер жинағы бағдарлама нұсқасына байланысты. Бағдарламаның ең маңызды ерекшелігі бағдарламалық модульдер мәліметтер базасымен автоматты түрде өзара әрекеттеседі, олардан есептеу үшін қажетті анықтамалық деректерді (энтальпияның стандартты мәндері, энтропия, молярлық жылу

Раздел 1. «Металлургия»

сыйымдылығын есептеуге арналған эмпирикалық коэффициенттер, жылу өткізгіштік коэффициенттері) алады. Бұл пайдаланушыдан заттардың формулаларын енгізу және бастапқы есепті жазу кезінде абай болуды талап етеді, басқа жағдайларда, егер пайдаланушы қателері болса, пакеттік бағдарламалар HSC Chemistry бағдарламасы туралы жалпы ақпаратты береді, оның көмегімен іздеу және қателерді жою айтарлықтай жеңілдетілді. Мысалдар шешу есептерді шығарудан, оны пакеттік бағдарламаларды пайдаланып жазудан бастап есептеу мен нәтижелерді алуға және оларды металлургтерге түсінікті терминдермен дұрыс түсіндіруге дейін есептеу алгоритмін кезең-кезеңімен жүзеге асыруға мүмкіндік береді [1].

Кілт сөздер: бағдарламалық жасақтама, термодинамика, материалдық баланс, жылу балансы, термодинамикадағы фазалық тепе-теңдік, энтальпия, энтропия, болжау.

A.H. Nurumgaliev, T.T. Zhuniskaliyev, A.T. Pushanova

HSC Chemistry - software for calculating chemical reactions and phase equilibria using an extensive thermochemical database

This article introduces a promising scientific approach and toolkit for physico-chemical research: thermodynamic modelling and prediction of the results of chemical interactions and phase transformations in multi-element systems.

HSC Chemistry offers the only possibility to generalize the description of any high temperature state using only the laws of thermodynamics, whatever the conditions of existence or domain of application, requiring a minimum of information about the system itself and its environment. The set of modules depends on the version of the package. The most important feature of the package is that the software modules automatically interact with databases, retrieving from them the reference data necessary for calculation (standard enthalpy values, entropy, empirical coefficients for calculating the molar heat capacity, heat transfer coefficients of materials, degrees of blackness of materials etc.) and calculation formulas (in certain cases). This requires the user to be accurate when entering the formulas of substances and recording the original problem, however, if there are user errors, the programs of the package give general information about the HSC Chemistry application package, which makes finding and eliminating errors much easier. The solution of examples allows to realize step-by-step the algorithm of calculation, from statement of a problem, its recording by means of programs of the package up to the solution and getting of results and their correct interpretation in the terms understandable for experts in metallurgy [1].

Key words: software, thermodynamics, material balance, heat balance, phase equilibrium in thermodynamics, enthalpy, entropy, prediction.

References

- 1 00 HSC Chemistry 07/24 Introduction
- 2 00 HSC Chemistry 08/24 Operating Instructions
- 3 00 HSC Chemistry 14/24 EQUILIBRIUM MODULE
- 4 00 HSC Chemistry 11/24 Heat and Material Balance