



UDC 66.011

MODELING OF THE TECHNOLOGICAL PROCESS OF SULFUR DIOXIDE OXIDATION USING THE CHEMCAD PROGRAM

Michael A. Podzharsky, Anatoly M. Nesterov

*Oles Honchar Dnipro National University, 72, Gagarin Ave., Dnipro 49010, Ukraine**Received 15 November 2021; accepted 15 December 2021; available online 21 January 2022***Abstract**

Purification of process gases, primarily products of oil and gas production, from sulfur-containing compounds with the conversion of the latter into sulfuric acid by the method of wet catalysis is one of the demanded production processes. This work aimed to develop a way calculation of the most complex apparatus of this technology - a contact apparatus for the oxidation of sulfur dioxide - using the CHEMCAD program. The authors investigated the behavior of a model of the SO₂ oxidation process in a five-bed contact apparatus, proposed a method for calculating the optimal temperature line for SO₂ oxidation using CHEMCAD, and showed a graphical calculation of the contacting process diagram based on it. The authors propose to use this work to develop a method for the design of such equipment.

Keywords: sulfur dioxide; contact apparatus; modeling of the technological process; CHEMCAD; optimal temperature line.

МОДЕЛЮВАННЯ ТЕХНОЛОГІЧНОГО ПРОЦЕСУ ОКИСНЕННЯ СУЛЬФУР (IV) ОКСИДУ З ВИКОРИСТАННЯМ ПРОГРАМИ CHEMCAD

Михайло А. Поджарський, Анатолій М. Нестеров

*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, просп. Гагаріна, 72, Дніпро, 49010, Україна***Анотація**

Очищення технологічних газів, насамперед продуктів нафтогазодобування, від сірковмісних сполук з перетворенням останніх на сірчану кислоту методом мокрого каталізу - один з затребуваних виробничих процесів. Мета цієї роботи - розробка способу розрахунку найбільш складного апарату даної технології - контактного апарату для окислення діоксиду сірки - з використанням програми CHEMCAD. Досліджена поведінка моделі процесу окислення SO₂ у п'ятиполичному контактному апараті. Запропоновано спосіб розрахунку засобами CHEMCAD лінії оптимальних температур для окислення SO₂ і показаний зроблений на його основі графічний розрахунок схеми процесу контактування. Результати цієї роботи можна використати для розробки методики розрахунку контактних апаратів для окислення SO₂ в інтересах перспективного проектування.

Ключові слова: сульфур (IV) оксид; контактний апарат; моделювання технологічного процесу; CHEMCAD; лінія оптимальних температур.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ОКИСЛЕНИЯ ДИОКСИДА СЕРЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОГРАММЫ CHEMCAD

Михаил А. Поджарский, Анатолий Н. Нестеров

*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, просп. Гагаріна, 72, Дніпро, 49010, Україна***Аннотация**

Очистка технологических газов, в первую очередь продуктов нефтегазодобычи, от серосодержащих соединений с превращением последних в серную кислоту по методу мокрого катализа - один из востребованных производственных процессов. Цель этой работы - разработка способа расчёта наиболее сложного аппарата данной технологии - контактного аппарата для окисления диоксида серы - с использованием программы CHEMCAD. Исследовано поведение модели процесса окисления SO₂ в пятиполичном контактном аппарате. Предложен способ расчёта средствами CHEMCAD линии оптимальных температур для окисления SO₂ и показан сделанный на его основе графический расчёт схемы процесса контактирования. Результаты этой работы можно использовать для разработки методики расчёта контактных аппаратов для окисления SO₂ в интересах перспективного проектирования.

Ключевые слова: диоксид серы; контактный аппарат; моделирование технологического процесса; CHEMCAD; линия оптимальных температур.

*Corresponding author: e-mail: podzharsky@ua.fm

© 2021 Oles Honchar Dnipro National University;

doi: 10.15421/jchemtech.v29i4.244347

Введение

Интерес к предложенному около ста лет назад методу мокрого катализа за последние десятилетия значительно вырос, о чём можно судить по увеличению числа научных публикаций на эту тему [1]. Рост количества исследовательских и проектных работ в данной области объясняется совершенствованием производств по очистке от серы технологических газов, продуктов нефтегазодобычи [2–4]. Объектами разработок являются как целые технологии [5–8], так и отдельные аппараты, среди которых наиболее сложный – контактный аппарат для окисления SO_2 [9–11].

Современные подходы к созданию химико-технологического оборудования подразумевают использование средств автоматизированного проектирования, среди которых на одном из первых мест находится программный комплекс CHEMCAD [12; 13]. Он хорошо зарекомендовал себя при моделировании самых разных объектов химической технологии [14–23].

Цель этой работы – разработка способа расчёта контактного аппарата для окисления диоксида серы с использованием программы CHEMCAD.

Методика исследования

Реакция окисления SO_2



обратимая экзотермическая, с увеличением температуры её скорость

уменьшается. Чтобы обеспечить высокую производительность процесса, его необходимо вести по линии оптимальных температур (ЛОТ), определяющей условия максимума скорости реакции. ЛОТ указывает, как следует снижать температуру (t) по мере увеличения степени превращения SO_2 (X_{SO_2}). Вести процесс точно по ЛОТ сложно, но возможно его к ней приблизить, подобрав соответствующее строение реактора. В настоящее время широко используется конструкция контактного аппарата для окисления SO_2 , по сути процесс представляющая собой каскад адиабатических реакторов вытеснения с промежуточным охлаждением реакционной среды. В роли адиабатических реакторов выступают слои ванадиевого катализатора, между которыми включены промежуточные теплообменники-охладители реакционного газа [2; 9–11; 25; 26].

В работе ставилась задача выполнить в программе CHEMCAD следующее: построить модель технологического процесса окисления диоксида серы, проверить её адекватность, рассчитать с её помощью количество катализатора и расход воздуха на охлаждение реакционного газа, найти способ расчёта ЛОТ.

Исходными данными служили модельные смеси, состав которых приведён в табл. 1. Параллельно выполнялся «классический» расчёт по известной методике [25; 26].

Table 1

Composition of model mixtures, m^3/hour (0°C , 101325 Pa)

Таблица 1

Состав модельных смесей, $\text{m}^3/\text{час}$ (0°C , 101325 Па)					
№	SO_2	O_2	N_2	H_2O	CO_2
1	1500	3175	175876	1500	1238
2	1750	2825	17211	1750	1464
3	2000	2450	16740	2000	1810

Объектом моделирования служил пятиполочный контактный аппарат, изображённый на рис. 1а. Он работает следующим образом. Исходный газ делится на два потока: прямой поток подаётся в первый слой катализатора, байпасный – между первым и вторым слоями. Прямой поток за счёт тепла реакции адиабатически нагревается в первом слое катализатора,

смешивается с холодным байпасным газом и смесь с более низкой температурой подаётся во второй слой. Там он снова нагревается и выйдя из слоя катализатора, охлаждается воздухом в трубчатом теплообменнике, подаётся в третий слой и так далее. В каждом последующем слое катализатора X_{SO_2} больше, а температура ниже, чем в предыдущем.

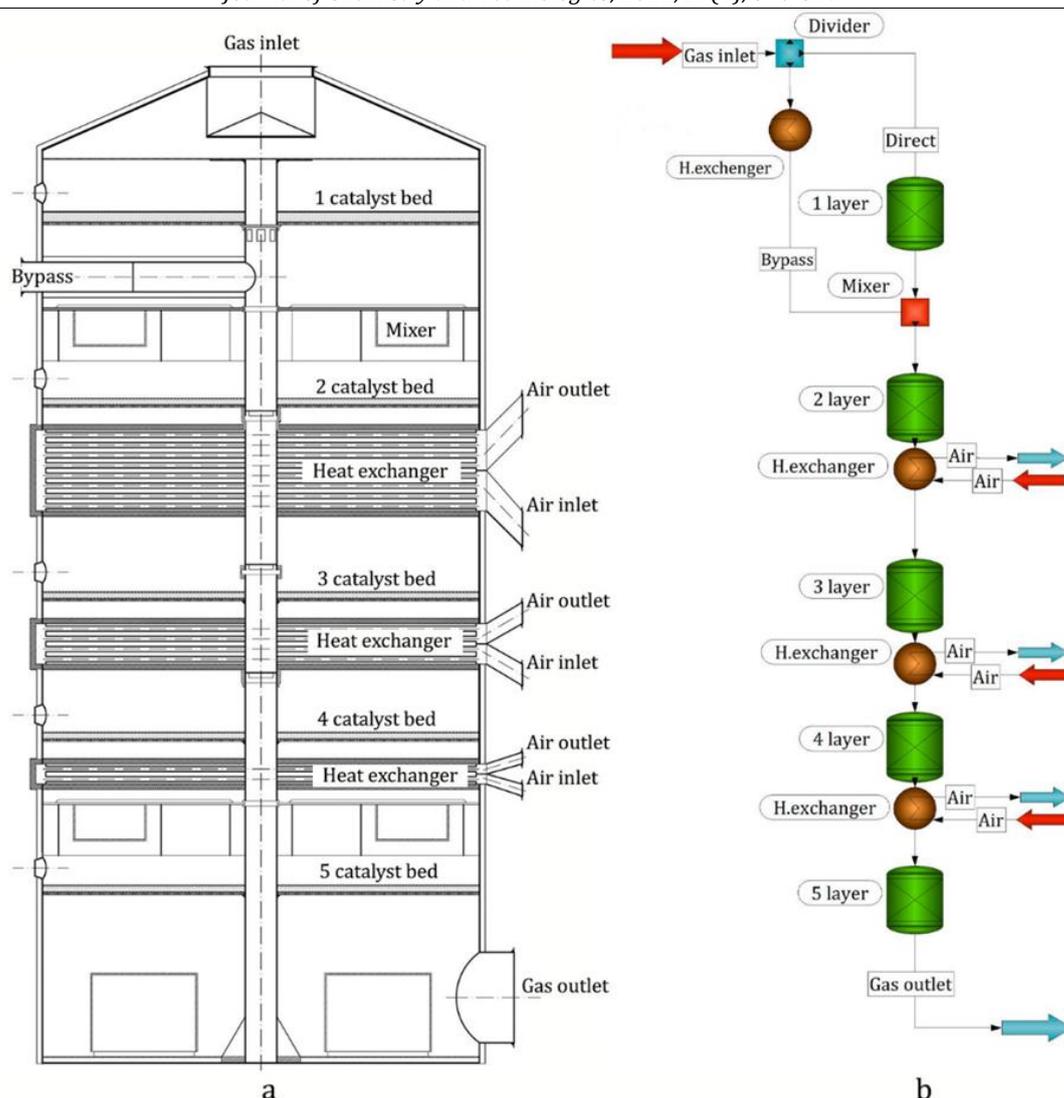


Fig. 1. Diagram of a five-bed contact apparatus (a) and process models (b)
 Рис. 1. Схема пятислоного контактного аппарата (a) и модели процесса (b)

Построенная в CHEMCAD математическая модель показана на рис. 1b. Исходный газ с температурой 440°C в модуле **Divider** делится на прямой и байпасный потоки. Прямой поток поступает в реакторный модуль **Kinetic Reactor (KREA)**, моделирующий первый слой катализатора, байпасный охлаждается во вспомогательном теплообменном модуле **Heat exchanger** (служит только для задания температуры байпасного газа и не отражает реальный аппарат). После модуля **KREA** прямой и байпасный потоки смешиваются в модуле **Mixer**, смесь направляется в модуль **KREA**, моделирующий второй слой катализатора. Затем газ охлаждается воздухом в модуле **Heat exchanger**. Для третьего и четвертого слоёв всё повторяется, после пятого слоя реакционный газ покидает схему.

Использовались модели расчёта константы фазового равновесия и энтальпии **SRC**. Каждый слой ванадиевого катализатора

представлен модулем **KREA**. Тип реактора – **Plug Flow**, способ расчёта: **Specify Conversion, Calculate volume**. Значения Conversion для каждого слоя $X_{SO_2}^i$ кроме первого рассчитывались следующим образом:

$$X_{SO_2}^i = \frac{(X_{SO_2} - X_{SO_2}^{i-1})}{(1 - X_{SO_2}^{i-1})},$$

где X_{SO_2} – величина степени превращения от начала процесса, $X_{SO_2}^{i-1}$ – на входе в i -тый слой.

Параметры реакции **Frequency factor** и **Activation energy** задавались по [27], соответственно, 0.225 и 59.9 кДж/моль. Использование величин 15.63 и 78.9 кДж/моль, приведённых в [4], даёт аналогичные результаты.

Модули **Heat exchanger** между слоями катализатора включены в режиме **CHEMCAD simulation** со служебной опцией **Calculate flow of steam#**. Задавалась температура газа на выходе из теплообменника. Температуры

охлаждающего воздуха: начальная 20°C, конечная 120°C.

Зависимость параметров реакции от температуры, а также величины реакционного объёма от энергии активации реакции изучались с использованием инструмента **Sensitivity Study** в единичном модуле **KREA**. Этот же инструмент использовался для расчёта равновесия в модуле **Equilibrium Reactor (EREA)**. Константа равновесия рассчитывалась по уравнению

$$\ln K_p = \frac{11295.3}{T} - 10.6966.$$

Вспомогательные расчёты и построение графиков проводились в программе Excel.

Результаты и их обсуждение

Адекватность данной модели была проверена на известных схемах процесса контактирования [26, стр. 542] для газов с таким же начальным содержанием SO₂ и O₂, как в модельных смесях (табл. 2, столбцы 2 и 3). В модель были введены значения $X_{SO_2}^{fin}$ и температуры газа t_{init} на входе в каждый слой катализатора. Программа должна была рассчитать значения температуры t_{fin} на выходе из слоя катализатора и величину реакционного объёма V_{react} . Результаты представлены в табл. 2 (столбцы 5 – 10) и на рис. 2.

Наклонные прямые на рис. 2 отображают протекание реакции окисления, сопровождающее адиабатическим разогревом газа. Угол наклона определяется параметрами реакции и теплофизическими свойствами газа. Вполне очевидно почти полное совпадение результатов расчётов в CHEMCAD, с литературными данными, что говорит о высокой адекватности модели.

Расчитанный реакционный объём (табл. 2, столбец 8) учитывает только объём реакционного газа. Необходимый объём катализатора (табл. 2, столбец 9)

рассчитывали, приняв усреднённую величину пористости ванадиевого катализатора 0,47 [26]. Полученное суммарное количество катализатора оказалось таким же, как рассчитанное «вручную» по известной методике.

В известной методике расчёта найденное количество катализатора следует увеличить, умножив на коэффициенты запаса, которые учитывают потери каталитической активности, вызванные снижением активности катализатора, неравномерностью распределения и смешения потоков газа, нарушениями устойчивости работы аппарата [26]. В данной работе этого не делали.

CHEMCAD позволяет скорректировать рассчитанную величину реакционного объёма (и, соответственно, объёма катализатора) с учётом ожидаемой потери активности катализатора, если принять в качестве неё увеличение энергии активации. На рис. 3 показан результат использования инструмента **Sensitivity Study** для единичного модуля **KREA**, моделирующего первый слой катализатора для смеси №1. Из графика видно, что рост энергии активации на 20 кДж/моль требует увеличения реакционного объёма более, чем в 30 раз. Выбор необходимой для корректировки величины энергии активации, а также уточнение коэффициентов запаса при известных параметрах катализатора – тема отдельного исследования.

В табл. 2 приведено также количество воздуха, расходуемого на охлаждение реакционного газа между слоями катализатора в отношении к количеству исходного газа в пересчёте на нормальные условия (столбец 10).

Для модельных смесей № 2 и 3 были получены результаты, аналогичные тем, что представлены в табл. 2. Здесь они не приводятся ради экономии печатного места.

Parameters of the contacting process schemes for model mixture №1

Table 2

Таблица 2

Параметры схем процесса контактирования для модельной смеси №1

Catalyst bed	According to known data			Model					
	Process parameters		V_{cat} , m ³	Process parameters		Conver-sion	V_{react} , m ³	V_{cat} , m ³	V_{air}/V_{gas} , m ³ /m ³
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	$X_{SO_2}^{fin}$	0.661	2.02	$X_{SO_2}^{fin}$	0.661	0.661	1.17	2.49	
	t_{init} , °C	440		t_{init} , °C	440				
	t_{fin} , °C	554		t_{fin} , °C	556.4				

	$t_{bypass}, \text{C}^\circ$	269		$t_{bypass}, \text{C}^\circ$	269				
	β^*	0.78		β^*	0.769				
2	$X_{SO_2}^{init}$	0.516	2.06	$X_{SO_2}^{init}$	0.508	0.657	1.17	2.49	
	$X_{SO_2}^{fin}$	0.834		$X_{SO_2}^{fin}$	0.831				
	t_{init}, C°	492		t_{init}, C°	492				
	t_{fin}, C°	547		t_{fin}, C°	548.4				
3	$X_{SO_2}^{fin}$	0.933	2.32	$X_{SO_2}^{fin}$	0.932	0.596	1.32	2.81	0.89
	t_{init}, C°	473		t_{init}, C°	473				
	t_{fin}, C°	490		t_{fin}, C°	490.7				
4	$X_{SO_2}^{fin}$	0.971	4.00	$X_{SO_2}^{fin}$	0.971	0.567	2.03	4.32	0.59
	t_{init}, C°	440		t_{init}, C°	440				
	t_{fin}, C°	446		t_{fin}, C°	446.9				
5	$X_{SO_2}^{fin}$	0.98	3.69	$X_{SO_2}^{fin}$	0.98	0.310	0.98	2.09	0.12
	t_{init}, C°	437		t_{init}, C°	437				
	t_{fin}, C°	438		t_{fin}, C°	438.6				
Σ			14.09				6.67	14.19	1.60

* β –доля байпасного газа в исходной газовой смеси.

Разумеется, интересно не только обчитывать с помощью CHEMCAD готовые схемы контактирования, но и создавать новые. В этой работе предпринята такая попытка.

Использовался следующий подход. Так как высота слоя катализатора намного меньше его ширины, то сделано допущение, что реакция протекает с равной скоростью во всём его объёме, и процесс может быть

описан характеристическим уравнением для реактора идеального смешения непрерывного действия:

$$\tau = \frac{C_{SO_2}^0 X_{SO_2}}{-r},$$

где τ – время контактирования, $C_{SO_2}^0$ – начальная концентрация SO_2 , $-r$ – скорость реакции окисления.

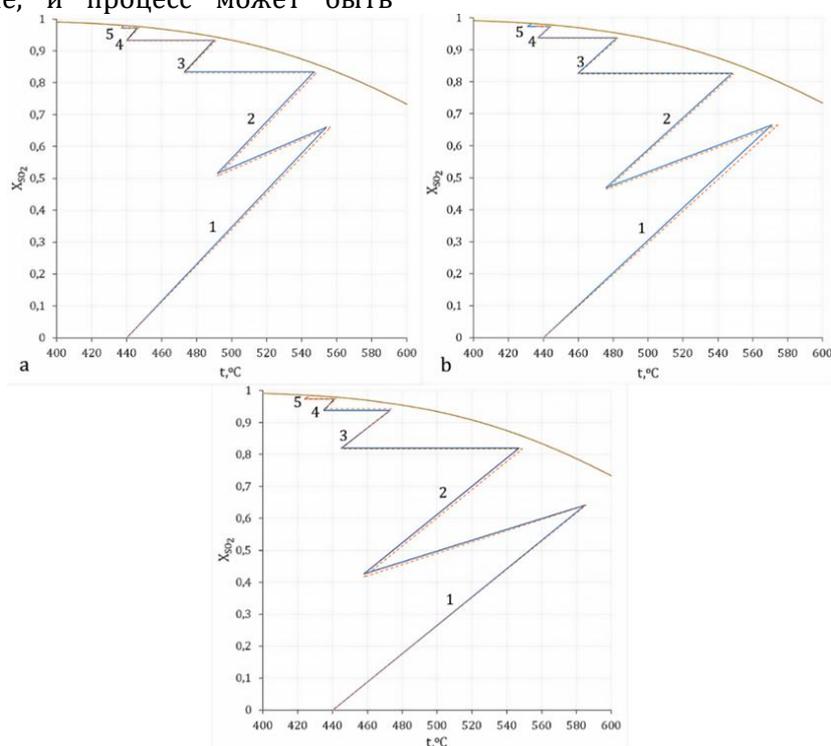


Fig. 2. Contacting process schemes for model mixtures 1 (a), 2 (b) and 3 (c): the numbers on the graphs are the catalyst beds numbers correspond to literature data, dashed lines – simulation results

Рис. 2. Схемы процесса контактирования для модельных смесей 1 (a), 2 (b) и 3 (c): цифры на графиках – номера слоёв катализатора, сплошные линии соответствуют литературным данным, пунктир – результаты моделирования, верхняя кривая – равновесная

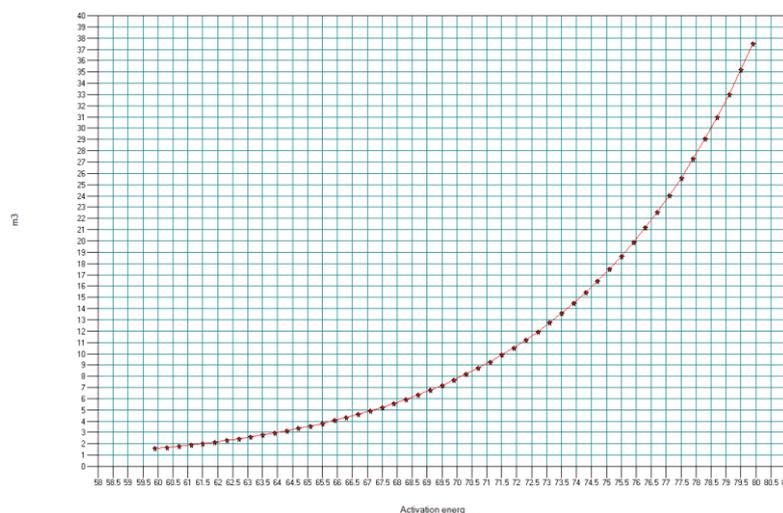


Fig. 3. Dependence of the reaction volume on the activation energy
Рис. 3. Зависимость реакционного объёма от величины энергии активации

Время контактирования можно рассчитать как отношение реакционного объёма v к объёмному расходу реакционной смеси V :

$$\tau = \frac{v}{V},$$

степень превращения выразить через начальное $m_{SO_2}^0$ и текущее m_{SO_2} количество SO_2 в газе:

$$X_{SO_2} = \frac{m_{SO_2}^0 - m_{SO_2}}{m_{SO_2}^0},$$

начальную концентрацию SO_2 – через парциальное давление:

$$C_{SO_2}^0 = \frac{p_{SO_2}}{RT} = \frac{\varphi_{SO_2} P_0}{RT},$$

где φ_{SO_2} – объёмное содержание SO_2 в исходном газе, P_0 – общее давление, которое для данного аппарата равно атмосферному.

Так как кислород в данных смесях взят в избытке, то скорость реакции определяется, главным образом, концентрацией $C_{SO_2}^0$. Следовательно, можем сделать допущение, что порядок реакции близок к первому. Тогда используем выражение $\left(1 - \frac{X}{X_{SO_2}^*}\right)$, которое определяет степень приближения к равновесию. Здесь X – задаваемая степень превращения, $X_{SO_2}^*$ – равновесная степень превращения [28].

Получим расчётную формулу:

$$-r = \frac{\varphi_{SO_2} P_0}{RT} \frac{m_{SO_2}^0 - m_{SO_2}}{m_{SO_2}^0} \frac{V}{v} \left(1 - \frac{X}{X_{SO_2}^*}\right).$$

Для расчёта m_{SO_2} и V при разных температурах использовался инструмент Sensitivity Study в единичном модуле KREA, моделирующем первый слой катализатора.

$X_{SO_2}^*$ рассчитывалась в том же температурном диапазоне с помощью инструмента Sensitivity Study в единичном модуле EREA.

На рис. 4. представлены рассчитанные температурные зависимости скорости реакции для разных значений X . Там же показаны ЛОТ (линия, соединяющая максимумы кривых) и изолинии, соответствующие меньшим значениям скорости реакции.

На рис. 5 показаны рассчитанные ЛОТ для исследованных модельных смесей. Для сравнения приведены ЛОТ для газа, полученного при сжигании сероводорода [26]. Содержание SO_2 и O_2 следующее (% об.): а – 6.13 и 12.68; б – 7.15 и 11.28; в – 8.17 и 9.78; д – 8 и 6.7; е – 9 и 3. Вполне очевидно, что ход кривых, рассчитанных с помощью CHEMCAD, и взятых из литературы идентичен.

На рис. 6а показан графический расчёт схемы процесса контактирования для модельной смеси №1, выполненное на основе рассчитанной ЛОТ. Адиабатические прямые для слоёв катализатора параллельны друг другу и проведены в области оптимальных температур, ограниченной соответствующими изолиниями скорости. Правая граница области отвечает меньшим величинам скорости реакции, чем левая, что объясняется замедлением процесса из-за разогрева газа в слоях катализатора. На выходе из пятого слоя процесс заканчивается, вследствие чего адиабатическая прямая касается равновесной кривой.

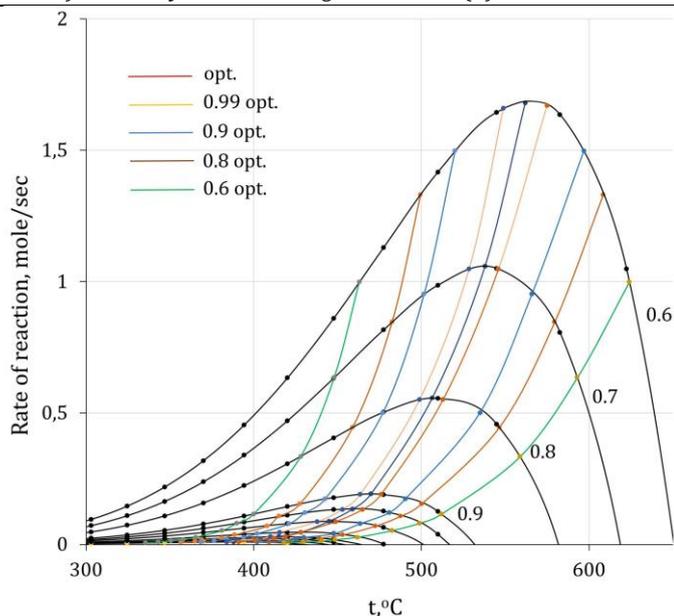


Fig. 4. Dependence of the reaction rate on temperature for mixture No. 1: the numbers on the curves are the X value
 Рис. 4. Зависимость скорости реакции от температуры для смеси №1: цифры на кривых – величина X

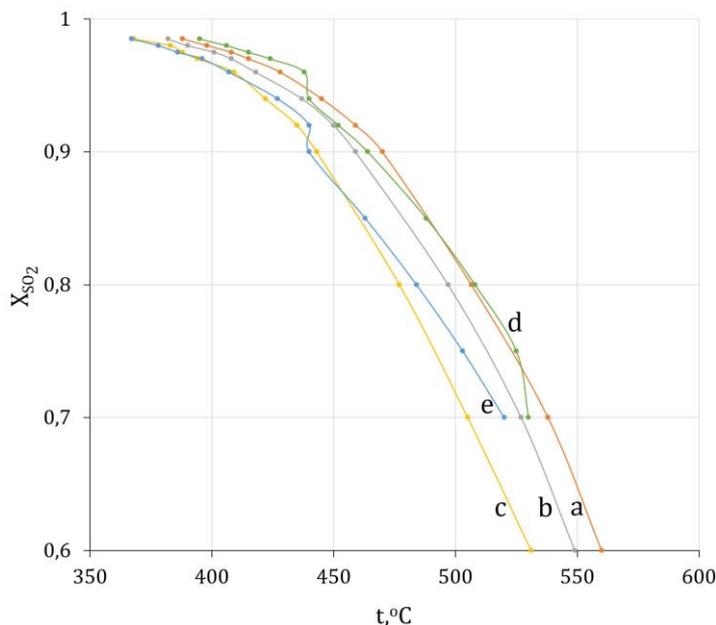


Fig. 5. Optimal temperature lines for gas mixtures: model - No. 1 (a), No. 2 (b), No. 3 (c); from [26] - (d, e)
 Рис. 5. Линии оптимальных температур для газовых смесей: модельных – №1 (a), №2 (b), №3 (c); из [26] – (d, e)

На рис. 6b для сравнения представлены результаты отработки на модели (рис. 1b) двух схем контактирования для смеси №1: построенной по литературным данным (old, что и на рис 2a) и полностью рассчитанной в

CHEMCAD (new, что и на рис. 6a). Результаты моделирования также представлены в табл. 3. Налицо почти полное совпадение схем контактирования, что говорит о высокой эффективности использованного подхода.

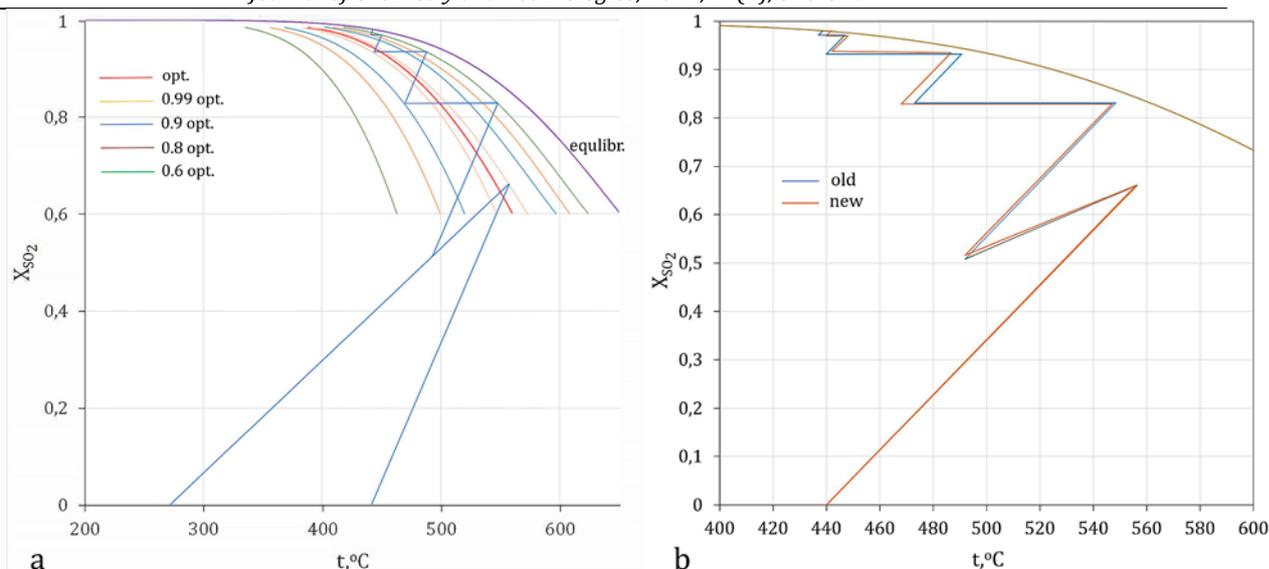


Fig. 6. Graphic calculation of the contacting process diagram for the model mixture 1 (a) and its comparison with the diagram built based on literature data (b)

Рис. 6. Графический расчёт схемы процесса контактирования для модельной смеси 1 (а) и её сравнение со схемой, построенной по литературным данным (б)

Table 3

Results of graphical calculation and testing on the model of the contacting process diagram for model mixture No. 1

Таблица 3

Результаты графического расчёта и отработки на модели схемы процесса контактирования для модельной смеси №1

Catalyst bed	Process parameters	Graphic calculation	Model	Conversion	$v_{react.} \cdot m^3$	$v_{cat.} \cdot m^3$	$V_{air}/V_{gas.} \cdot m^3/m^3$
1	2	3	6	7	8	9	10
1	$X_{SO_2}^{fin}$	0.661	0.661	0.661	1.19	2.38	
	$t_{init.} \cdot ^\circ C$	440	440				
	$t_{fin.} \cdot ^\circ C$	556	556.4				
	$t_{bypass.} \cdot ^\circ C$	269	269				
	β^*		0.78				
2	$X_{SO_2}^{init}$	0.516	0.516	0.647	1.11	2.22	
	$X_{SO_2}^{fin}$	0.829	0.829				
	$t_{init.} \cdot ^\circ C$	492	495.1				
	$t_{fin.} \cdot ^\circ C$	547	549.8				
3	$X_{SO_2}^{fin}$	0.935	0.935	0.620	1.48	2.96	0.97
	$t_{init.} \cdot ^\circ C$	468	468				
	$t_{fin.} \cdot ^\circ C$	483	486.7				
4	$X_{SO_2}^{fin}$	0.97	0.97	0.538	1.83	3.66	0.52
	$t_{init.} \cdot ^\circ C$	442	442				
	$t_{fin.} \cdot ^\circ C$	448.5	448.2				
5	$X_{SO_2}^{fin}$	0.98	0.98	0.333	1.02	2.04	0.10
	$t_{init.} \cdot ^\circ C$	440	440				
	$t_{fin.} \cdot ^\circ C$	441.5	441.8				
Σ					6.63	13.26	1.59

В заключение необходимо заметить, что сложная схема процесса окисления SO_2 в пятиполочном контактном аппарате с вводом холодного газа после первого слоя и

промежуточными теплообменниками после остальных была выбрана, чтобы продемонстрировать возможности CHEMCAD как средства

технологического проектирования. На проектируемых предприятиях могут быть использованы более простые схемы контактирования, например, с меньшим числом полок и без ввода холодного газа.

Выводы

Изучены возможности программы CHEMCAD как средства технологического расчёта процесса окисления SO₂ в пятиполочном контактном аппарате с вводом холодного газа после первого слоя и промежуточными теплообменниками после остальных. Полученные в ходе работы результаты математического моделирования совпадают с литературными данными, что говорит о высокой адекватности построенной модели процесса.

Показаны возможности CHEMCAD для расчёта необходимого количества катализатора, в том числе с учётом возможной потери его активности.

Предложена методика расчёта средствами CHEMCAD линии оптимальных температур для окисления SO₂. На основе полученных линии и области оптимальных температур рассчитана схема процесса контактирования. Показано её совпадение с литературными данными, что говорит о высокой эффективности использованного подхода.

Результаты данной работы с учётом сделанных допущений можно использовать для разработки методики расчёта контактных аппаратов для окисления SO₂ в интересах перспективного проектирования с использованием программы CHEMCAD.

Referens

- [1] Microsoft Academic. Wet sulfuric acid process [https://academic.microsoft.com/topic/91883011/publication/search?q=Wet%20sulfuric%20acid%20process&qe=And\(Composite\(F.Fid%253D91883011\)%252C.Ty%253D%270%27\)&f=&orderBy=0&pi=1](https://academic.microsoft.com/topic/91883011/publication/search?q=Wet%20sulfuric%20acid%20process&qe=And(Composite(F.Fid%253D91883011)%252C.Ty%253D%270%27)&f=&orderBy=0&pi=1).
- [2] Almirall, B. X. (2009). *Introduction to Wet Sulfuric Acid Plants Optimization Through Exergoeconomics* (Master's thesis). <https://upcommons.upc.edu/handle/2099.1/9246>
- [3] Choia B., Lima S., Andikaa R., Jeonb J., Lee M. (2014). Detailed process simulation of syngas treatment with wet sulfuric acid process in a 300 MWe IGCC power plant. *Energy Procedia*, 61, 2211 – 2214.
- [4] Al-Dallal, A. J. A. (2013). Simulation of a Wet Sulfuric Acid Process (WSA) for Utilization of Acid Gas Separated from Omani Natural Gas. *Al-Khwarizmi Engineering Journal* 9(3), 58 – 69.
- [5] Rosenberg, H. (2006). Topsoe wet gas sulphuric acid (WSA) technology – an attractive alternative for reduction of sulphur emissions from furnaces and converters / H. Rosenberg in The Southern African Institute of Mining and Metallurgy, *International Platinum Conference 'Platinum Surges Ahead'* Marshalltown, South Africa: SAIMM.
- [6] Husnil Y. A., Andika R., Lee M. (2019). Optimal plant-wide control of the wet sulfuric acid process in an integrated gasification combined cycle power plant. *Journal of Process Control*, 74, 147–159.
- [7] Igin, V. V., Filatov, Yu. V., Dolgov, D. V., Andrianov, A.A., Levin, N. V., Khodorchenko, V. M., Yegorov, V. S. (2014). *RU Patent No 2521626 (C1)*. Moscow, Russian Federation. Federal Service for Intellectual Property.
- [8] Zelenova M. A., Igin, V. V., Grabun, Ye. M., A. (2020). *RU Patent No 2711642 (C1)*. Moscow, Russian Federation. Federal Service for Intellectual Property.
- [9] Erkes B., Haverkamp V., Kuerten M. (2011). *European Patent No. 1979270 (B1)*.
- [10] Erkes B., Kuerten M., Haverkamp V. (2017). *European Patent No. 2256085 (A2)*.
- [11] Grabun, Ye. M., Dolgov, D. V., Igin, V. V., Kudelin, V. Kh., Krutikov, A. S., Smirnov, A. A. (2018). *RU Patent No 2652256 (C1)*. Moscow, Russian Federation. Federal Service for Intellectual Property.
- [12] Tian, Y., Demirel, S. E., Hasan, M. M. F., Pistikopoulos, E. N. (2018). An Overview of Process Systems Engineering Approaches for Process Intensification: State of the Art. *Chem. Engineering and Processing - Process Intensification*, 133, 160 – 210. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2018.07.014>
- [13] Towler, G., Sinnott, R. (2012). *Chemical engineering design: Principles, Practice and Economics of Plant and Process Design*, Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/C2009-0-61216-2>.
- [14] Latypov, R. M. (2017). [Experience in using advanced CHEMCAD capabilities in modeling the process of ethylene glycol rectification]. *Bull. of the Technol. University*. 20(17), 81 – 85.
- [15] Borello, D., Pantaleo, A. M., Caucci, M., De Caprariis, B., De Filippis, P., Shah, N. (2017). Modeling and Experimental Study of a Small-Scale Olive Pomace Gasifier for Cogeneration: Energy and Profitability Analysis. *Energies*, 10(12). <https://doi.org/10.3390/en10121930>.
- [16] Leonzio, G. (2017). Optimization through Response Surface Methodology of a Reactor Producing Methanol by the Hydrogenation of Carbon Dioxide. *Processes*, 5(4). <https://doi.org/10.3390/pr5040062>.
- [17] Leonzio, G. (2018). Methanol Synthesis: Optimal Solution for a Better Efficiency of the Process. *Processes*, 6(3). <https://doi.org/10.3390/pr6030020>.
- [18] Piotrowski, W., Kubica, R. (2021). Integration of the Process for Production of Ethyl Acetate by an Enhanced Extraction Process. *Processes*, 9(8). <https://doi.org/10.3390/pr9081425>
- [19] Al-Mhanna, N. M. (2018). Simulation of High-Pressure Separator Used in Crude Oil Processing. *Processes*, 6(11). <https://doi.org/10.3390/pr6110219>.
- [20] Huzova, I. (2018). [Simulation and optimization of the distillation column to produce 97 % propylene]. *Chemistry, Technology and Application of Substances*, 1(2), 111 – 118. <https://doi.org/10.23939/ctas2018.02.111>.
- [21] Huzova, I. (2019). [Using chemcad software for simulation of the process of distillation of benzene raffinate to prepare petroleum solvents]. *Voprosy khimii i khimicheskoi tekhnologii*, 6, 60 – 68.
- [22] Sánchez, A. P., Sánchez, E. J. P., Silva, R. M. S. (2019). Simulation of the acrylic acid production process through catalytic oxidation of gaseous propylene using ChemCAD ® simulator. *Ingeniare. Revista chilena de*

- ingeniería*, 27(1). <http://dx.doi.org/10.4067/S0718-33052019000100142>.
- [23] Giuliano, A, Catizzone, E, Freda, C. (2021). *Int. J. Environ. Res. Public Health*. 18(2). <https://doi.org/10.3390/ijerph18020807>.
- [24] Ziyatdinov, N.N, Lapteva, T. V., Ryzhov, D. A. (2008). [*Mathematical modeling of chemical-technological systems using the ChemCad program*]. – Kazan, Russian Federation (in Russian).
- [25] Amelin, A. G. (1983) [*Sulfuric acid technology*]. Moskow, USSR: Khimiya (in Russian).
- [26] Malin K.M. (1971). [*Sulfuric Acidist's Handbook*]. Moskow, USSR: Khimiya (in Russian).
- [27] Pozin, M. E., Zinyuk, R. Yu. (1985). [*Physical and chemical bases of inorganic technology*]. Leningrad, USSR: Khimiya (in Russian).
- [28] Kutepov A. M., Bondareva M. G., Berengarten M. G. (1990). [*General chemical technology*]. Moskow, USSR: Vysshaya shkola (in Russian).