

2. Látkové bilancie

Výpočty látkových bilancií sú prvým predpokladom presného určenia kapacity výrobného zariadenia, hodnotenia jeho ekonomie alebo kontroly jeho činnosti.

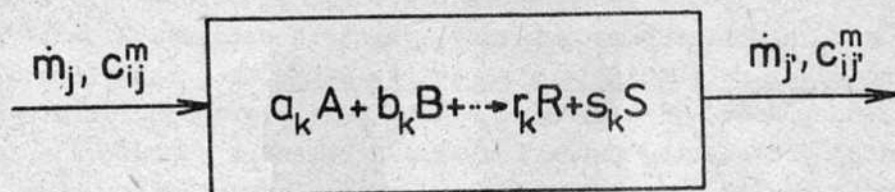
Látkové (materiálové) bilancie sú základnými a niekedy len jedinými kvantitatívnymi informáciami o fyzikálnych a chemických procesoch, o činnosti chemického zariadenia. Látkové bilancie počítame buď pre celú výrobu, alebo len pre určitý výrobný úsek. Cieľom je získať prehľad o množstvách látok, ktoré do výroby vo zvolenom časovom období vstupujú, z výroby vystupujú, vo výrobnom stupni sa premenia, prípadne sa akumulujú. Pri výpočtoch vychádzame z technologickej schémy, alebo z výrobného návrhu, ktorý výpočtom súčasne do- tvoríme a dopĺňame.

Základom stanovenia látkovej bilancie je vlastný fyzikálny alebo chemický proces, ktorý sa v zariadení realizuje.

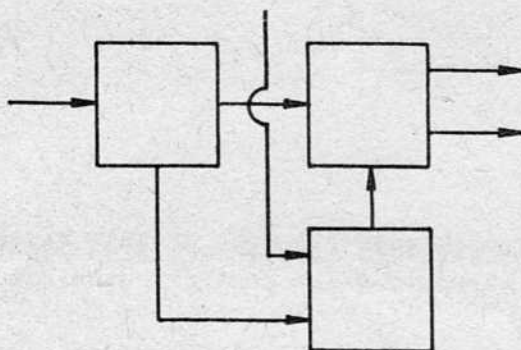
Látkové bilancie sú výpočty založené na zákone zachovania hmotnosti. Pre otvorenú sústavu, ktorá je vyznačená na obr. 2.1, látkovú bilanciu zložky i možno vyjadriť nasledovne

$$\left(\sum_j \dot{m}_{ij} \right)_{\text{VSTUP}} + \left(\sum_k \dot{m}_{ik} \right)_{\text{TVORBA}} = \left(\sum_j \dot{m}_{ij} \right)_{\text{VÝSTUP}} + \left(\frac{d m_i}{dt} \right)_{\text{AKUM.}} \quad (2-1)$$

$$\left[\begin{array}{l} \text{VSTUP zložky} \\ \text{i do sústavy} \\ \text{vo všetkých} \\ \text{vstupujúcich} \\ \text{prúdoch } j \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{TVORBA zložky} \\ \text{i v sústave} \\ \text{chemickými} \\ \text{reakciami } k \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{VÝSTUP zložky} \\ \text{i zo sústavy} \\ \text{vo všetkých} \\ \text{vystupujúcich} \\ \text{prúdoch } j \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{AKUMULÁCIA} \\ \text{zložky } i \\ \text{v sústave} \end{array} \right]$$



Obr. 2.1
Schéma otvorenej sústavy



Obr. 2.2
Schéma bilančnej sústavy

V technologických schémach chemických a potravinárskych procesov označujeme jednotlivé zariadenia ako uzly, dopravné linky ako prúdy. Na bilančné účely si kreslíme tzv. bilančné schémy procesu (obr. 2.2). Jednotlivé uzly zakresľujeme ako obdĺžniky (alebo štvorce), jednotlivé prúdy ako lomené čiary, ktoré pozostávajú z vodorovných a zvislých úsečiek. Každá úsečka musí byť označená šípkou smeru toku látky v prúde.

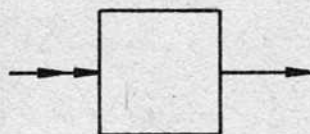
Existuje niekoľko nezávislých hľadísk, podľa ktorých môžeme charakterizovať určité vlastnosti a teda aj typy látkových bilancií. Podľa toho rozoznávame bilancie bez tvorby (bilancia fyzikálnych procesov), keď v sústave prebieha len fyzikálny proces ako napr. rozpúšťanie, sedimentácia, kryštalizácia, filtrácia, sušenie, odparovanie, destilácia, absorpcia a pod. Ak v sústave prebieha chemická premena látok, t.j. v sústave existuje chemická reakcia, potom hovoríme o bilancii s tvorbou (bilancia chemických procesov).

Procesy chemickej technológie sa realizujú v zariadeniach, ktoré sú vzájomne spojené dopravnými linkami (potrubiami). Rozoznávame štyri typy zariadení a strojov. Schémy jednotlivých zariadení sú vyznačené na obr. 2.3.

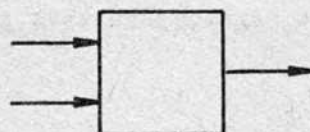
Druhým hľadiskom je závislosť stavu sústavy od času. Podľa toho rozoznávame bilancie ustálených a neustálených sústav. Zvláštnym prípadom neustálenej sústavy je sústava uzavretá.

Tretím hľadiskom je vzťah medzi vstupujúcimi a vystupujúcimi prúdmi (obr. 2.4). Keď existuje spätná väzba aspoň medzi jedným vstupujúcim a jedným vystupujúcim prúdom, hovoríme o recirkulácii (alebo o obtoku). Z tohto hľadiska poznáme bilancie bez recirkulácie a s recirkuláciou. Keď rozšírime hľadisko vzájomného vzťahu prúdov aj na miestne vzťahy medzi vstupujúcimi a vystupujúcimi prúdmi prietochných sústav, potom hovoríme o bilancii súprúdového, prípadne protiprúdového systému. V protiprúdovom systéme aspoň jeden vstupujúci a jeden vystupujúci prúd je v opačnom smere k ostatným prúdom.

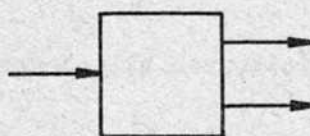
Každé hľadisko, podľa ktorého boli látkové bilancie rozdelené má vplyv na tvar bilančnej rovnice (2.1). Podrobnejšie sa týmito otázkam budeme venovať v nasledujúcich kapitolách.



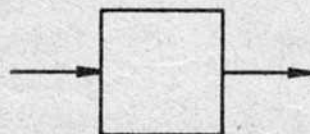
Zariadenia (stroje) na úpravu fyzikálnych vlastností (sekanie, drvenie, mletie) zme-
na skupenstva (tavenie, vyparovanie, kon-
denzácia, sublimácia), zohrievanie, chla-
denie



Zariadenia na zmiešavanie (rozpušćovanie tu-
hej látky v kvapaline, zmiešavanie kvapa-
lín, plynov). Existujú minimálne dva vstu-
py a jeden výstup



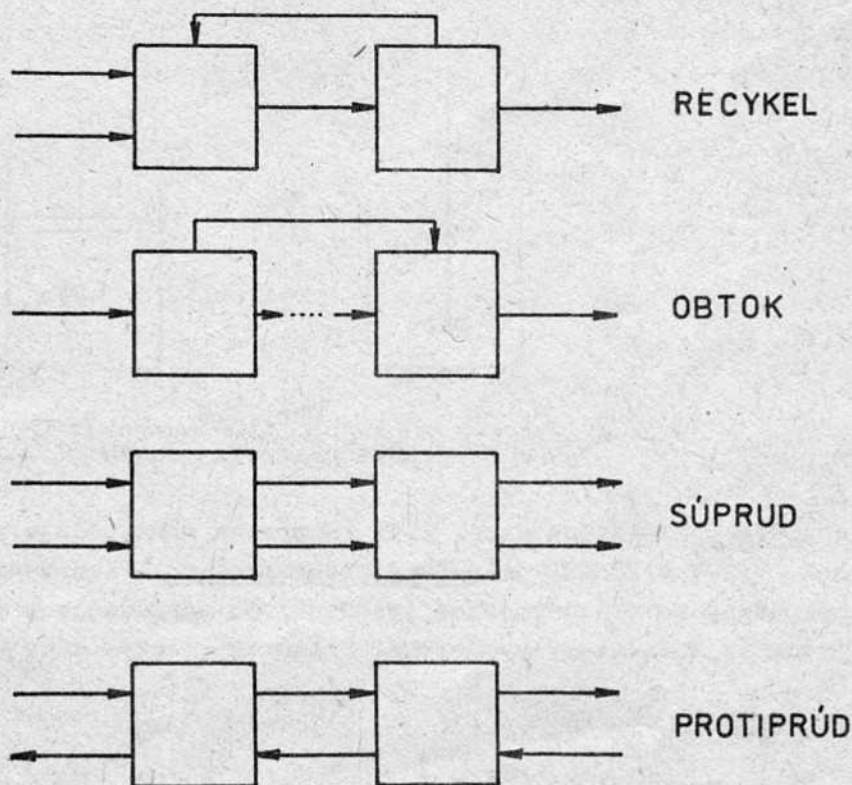
Zariadenia separečné (delenie fáz filtra-
ciou, sedimentáciou, odstredovaním a pod.,
delenie zložiek - destiláciou, kryštaliza-
ciou, absorpciou, sušením). Existuje mini-
málne jeden vstup a dva výstupy



Chemický reaktor (chemická premena látky-
chemické reakcie). Existuje minimálne je-
den vstup a jeden výstup

Obr. 2.3

Schéma jednotlivých typov zariadení



Obr. 2.4
Usporiadanie toku

2.1 LÁTKOVÁ BILANCIA FYZIKÁLNYCH PROCESOV

V bilančných rovniciach pre systavy s fyzikálnymi procesmi nevystupuje člen TVORBA. Pre každú zložku systavy potom možno napísať nasledujúcu tzv. zložkovú bilančnú rovnicu

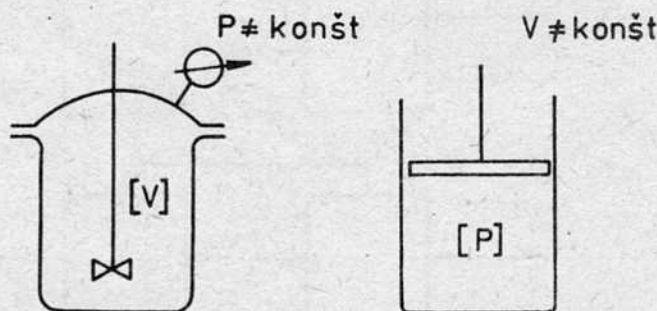
$$\left(\sum_j \dot{m}_{ij} \right)_{\text{VSTUP}} = \left(\sum_j \dot{m}_{ij} \right)_{\text{VÝSTUP}} + \left(\frac{dm_i}{dt} \right)_{\text{AKUM.}} \quad (2.1-1)$$

Celková bilančná rovnica sa získa súčtom všetkých zložkových bilančných rovníc

$$\left(\sum_i \sum_j \dot{m}_{ij} \right)_{\text{VSTUP}} = \left(\sum_i \sum_j \dot{m}_{ij} \right)_{\text{VÝSTUP}} + \left(\frac{d \sum_i m_i}{dt} \right)_{\text{AKUM.}} \quad (2.1-2)$$

V prípade otvoreného (prietochného) ustáleného systému sa proces uskutočňuje bez AKUMULÁCIE. Bilančná rovnica (2.1-1) potom bude mať jednoduchý tvar

$$\left(\sum_j \dot{m}_{ij} \right)_{\text{VSTUP}} = \left(\sum_j \dot{m}_{ij} \right)_{\text{VÝSTUP}} \quad (2.1-3)$$



Obr. 2.5

Schéma uzavretej sústavy

V uzavretom systéme (obr. 2.5) sa proces uskutočňuje za neustálených podmienok. VSTUP a VÝSTUP je nulový počas procesu. Pred začatím procesu sú suroviny jednorazovo nadávkované (vsadené) do zariadenia a po ukončení procesu sú produkty zo sústavy vypustené. Bilancia zložky i v tomto prípade je

$$0 = \left(\frac{dm_i}{dt} \right)_{\text{AKUM.}} \quad (2.1-4)$$

Na začiatku procesu hmotnosť zložky i je tzv. počiatočná, t.j.

$$t = 0 \quad m_i = m_{i0} \quad (2.1-5)$$

Teda ak bilancujeme látku i v uzavretom systéme medzi začiatkom (o) a koncom procesu (f), bilančnú rovnicu možno vyjadriť jednoduchou rovnicou:

$$m_{i0} = m_{if} \quad (2.1-6)$$

$$\left[\begin{array}{l} \text{hmotnosť zložky } i \\ \text{na začiatku proce-} \\ \text{su} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{hmotnosť zložky } i \\ \text{na konci procesu} \end{array} \right]$$

Bilancie spracujeme spravidla tabelárne. Do tabuľky napíšeme pod seba všetky prítomné zložky (komponenty) a ku každej z nich priradíme ich množstvá vo vstupujúcich a vystupujúcich prúdoch. Pri posudzovaní látkového toku predovšetkým venujeme pozornosť látkam, ktorých množstvá sa počas procesu nemenia. Tieto látky sú tzv. spojovacie látky. Bilancie vzťahované na spojovacie látky sú zvlášť jednoduché.

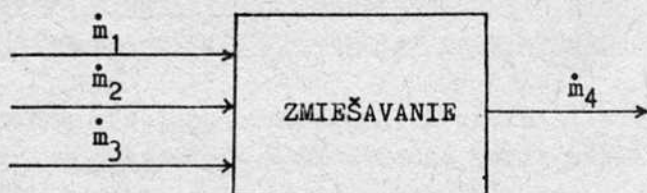
Aplikáciu hlavných zásad pri riešení bilančných úloh si ukážeme na príklade: Treba pripraviť 100 kg/h roztoku v hmotnostnom zložení 28 % HNO_3 , 66 % H_2SO_4 a zvyšok je voda. K dispozícii je starý roztok v zložení 23,2 % HNO_3 , 58,6 % H_2SO_4 a 18,2 % H_2O , koncentrovaná kyselina dusičná v zložení 92 % HNO_3 a kyselina sírová v zložení 98 % H_2SO_4 . Vypočítajte potrebné množstvá týchto troch roztokov.

Známe a neznáme veličiny si zapíšeme do bilančnej tabuľky.

Bilančná tabuľka zmiešavania

Tabuľka 2.1

Látka i		VSTUP j kg/h			VÝSTUP j \dot{m}_{i4}
		\dot{m}_{i1}	\dot{m}_{i2}	\dot{m}_{i3}	
HNO_3	1	0,232 \dot{m}_1	0,92 \dot{m}_2	-	28
H_2SO_4	2	0,586 \dot{m}_1	-	0,98 \dot{m}_3	66
H_2O	3	0,182 \dot{m}_1	0,08 \dot{m}_2	0,02 \dot{m}_3	6
Σ		\dot{m}_1	\dot{m}_2	\dot{m}_3	100



Na výpočet \dot{m}_1 , \dot{m}_2 , \dot{m}_3 máme k dispozícii štyri rovnice (všetky riadky tab. 2.1), z ktorých využijeme nasledujúce tri

$$0,232 \dot{m}_1 + 0,92 \dot{m}_2 = 28$$

$$0,586 \dot{m}_1 + 0,98 \dot{m}_2 = 66$$

$$\dot{m}_1 + \dot{m}_2 + \dot{m}_3 = 100$$

Riešením týchto rovníc dostaneme $\dot{m}_1 = 14,8$ kg/h starého roztoku, $\dot{m}_2 = 26,7$ kg/h koncentrovanej kyseliny dusičnej a $\dot{m}_3 = 58,5$ kg/h koncentrovanej kyseliny sírovej.

Kontrolu výpočtu môžeme uskutočniť pomocou bilančnej rovnice vody ($i = 3$)

$$0,182 \dot{m}_1 + 0,08 \dot{m}_2 + 0,02 \dot{m}_3 = 6$$

Po dosadení za \dot{m}_1 , \dot{m}_2 a \dot{m}_3 sa môžeme presvedčiť, že výpočet je správny.

2.2 LÁTKOVÉ BILANCIE CHEMICKÝCH PROCESOV

Keď v uvažovanej sústave prebieha chemická reakcia, t.j. nastáva chemická tvorba, potom niektoré látky v sústave zanikajú a na ich úkor vznikajú iné. Ak hovoríme o chemickej tvorbe, máme na mysli vždy chemické reakcie, t.j. reakcie medzi molekulami, prípadne medzi rôznymi časticami molekúl (ióny, radikály a pod.). Pri chemických reakciách nastáva zmena molekúl alebo časti molekúl, ale nemení sa druh a počet atómov, z ktorých sa molekuly skladajú.

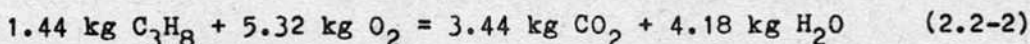
Preskupovanie atómov v molekulách sa jednoducho zapisuje pomocou symbolov predstavujúcich jednotlivé atómy a molekuly v chemických rovniciach - stochiometrických rovniciach. Jednotlivé atómy označujeme značkami (H, C, O, Fe, ...) a molekuly ako aj zlúčeniny vzorcami (O_2 , N_2 , CO_2 , H_2O , C_3H_8 , ...). Značky a vzorce majú význam kvalitatívny i kvantitatívny) pozri tab. I. v prílohe). Napr. uvažujme úplnú oxidáciu propánu. Stechiometrická rovnica tejto reakcie je



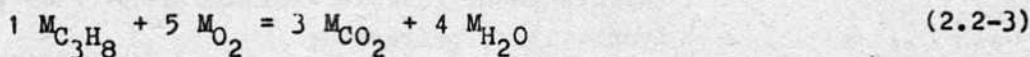
Na ľavej strane rovnice sa nachádzajú látky vstupujúce do reakcie - východiskové látky, tzv. reaktanty, na pravej strane sú látky vystupujúce z reakcie, tzv. produkty. Každý vzorec zlúčeniny v stochiometrickej rovnici predstavuje 1 mol (prípadne 1 kmol) zložky i . Pri oxidácii propánu teda do reakcie vstu-

puje 1 mol C_3H_8 + 5 mol O_2 a reakciou vznikne 3 mol CO_2 + 4 mol H_2O . Hmotnosť 1 mol látky i je daná jej mólovou hmotnosťou M_i , čiže napr. 1 mol C_3H_8 predstavuje 44 g C_3H_8 .

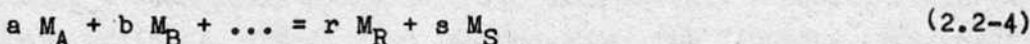
Súčasne s chemickou rovnicou (2.2-1) platí aj nasledujúca rovnica (2.2-2)



Na rozdiel od stechiometrickej rovnice (2.2-1) je rovnica (2.2-2) už vyslovene bilančnou rovnicou a preto sme použili v rovnici znamienko rovnosti. Rovnicu (2.2-2) možno prepísať do tvaru



alebo všeobecne pre akúkoľvek reakciu



kde a, b, r, s, \dots sú stechiometrické koeficienty látky A, B, R, S, \dots

Upravme rovnicu (2.2-4) tak, že od súčtu hmotnosti produktov odpočítame súčet hmotnosti reaktantov, t.j.

$$[rM_R + sM_S] \text{ PRODUKTY} - [aM_A + bM_B + \dots] \text{ REAKTANTY} = 0 \quad (2.2-5)$$

Označme stechiometrické koeficienty zložky i symbolom ν_i a dosadíme ich do rovnice (2.2-5)

$$\nu_R M_R + \nu_S M_S + \nu_A M_A + \nu_B M_B + \dots = \sum \nu_i M_i = 0 \quad (2.2-6)$$

Z porovnania rovníc (2.2-5) a (2.2-6) vidíme, že stechiometrickým koeficientom ν_i sú jednoznačne priradené znamienka.

Podľa tejto zavedenej dohody pre látky, ktoré sú východiskovými, sú stechiometrické koeficienty ν_i záporné, kým pre látky vznikajúce reakciou (produkty) sú kladné, t.j.

$$\nu_A = -a, \quad \nu_B = -b \quad (\nu_{C_3H_8} = -1; \quad \nu_{O_2} = -5)$$

$$\nu_R = r, \quad \nu_S = s \quad (\nu_{CO_2} = 3; \quad \nu_{H_2O} = 4)$$

Látky, ktoré sa nezúčastnia reakcie sú inerty. Ich stechiometrický koeficient je nulový.

V nasledujúcich úvahách sa budeme zaoberať takou sústavou (reaktorom), v ktorej sa uskutočňuje len jedna chemická reakcia a do sústavy vstupujú látky len v jednom vstupujúcom prúde a vystupujú v jednom vystupujúcom prúde. Zložková bilančná rovnica za týchto podmienok je

$$\dot{m}_i(V) + \dot{m}_i(T) = \dot{m}_i(U) + \dot{m}_i(A) \quad (2.2-7)$$

kde $\dot{m}_i(V)$, $\dot{m}_i(U)$ je rýchlosť vstupu a výstupu zložky i do a zo sústavy;
 $\dot{m}_i(T)$ - rýchlosť tvorby látky i chemickou reakciou. Východiskové zložky počas chemickej reakcie ubúdajú a preto hovoríme, že majú zápornú tvorbu, tzv. úbytok. Produkty reakcie počas reakcie vznikajú a hovoríme o kladnej tvorbe, tzv. prírastku;
 $\dot{m}_i(A)$ - akumulácia zložky i v sústave.

Rýchlosť vstupu a výstupu môže byť konštantná alebo časove premenlivá. Túto zmenu môže spôsobiť buď zmena koncentrácie zložky i alebo zmena celkového množstva prúdu. Napr. rýchlosť vstupujúceho prúdu možno vyjadriť nasledovne

$$\dot{m}_i(V) = \frac{d(m(V) \cdot c_i^m(V))}{dt} = m(V) \frac{dc_i^m(V)}{dt} + c_i^m(V) \frac{dm(V)}{dt} \quad (2.2-8)$$

Ak je sústava ustálená, potom $\dot{m}_i(V) = \text{konšt.}$, t.j. rýchlosť vstupu zložky i do sústavy je konštantná. Podobná úvaha platí aj pre rýchlosť vystupujúcej zložky i zo sústavy.

V homogénnej sústave rýchlosť tvorby látky i ($\dot{m}_i(T)$) chemickou reakciou možno vyjadriť vzťahom

$$\dot{m}_i(T) = \int_0^V \nu_i M_i \cdot r \, dV \quad (2.2-9)$$

kde r je rýchlosť chemickej reakcie. Rýchlosť reakcie r vyjadruje zmenu rozsahu reakcie ξ za jednotku času na jednotku objemu tekutiny, v ktorom sa uskutočňuje reakcia $[\text{mol}/\text{m}^3 \cdot \text{s}]$.

V rovnici (2.2-9) súčin $\nu_i \cdot r$ vyjadruje rýchlosť, ktorou sa látka i mení v sústave. Napr. $\nu_{\text{C}_3\text{H}_8} \cdot r$ vyjadruje rýchlosť, ktorou sa propén stráca počas reakcie a mení sa za prítomnosti kyslíka na kysličník uhličitý a vodu. Súčin $\nu_{\text{CO}_2} \cdot r$ potom vyjadruje rýchlosť prírastku CO_2 počas reakcie a pod.

Akumuláciu zložky i možno vyjadriť nasledujúcou rovnicou

$$\dot{m}_{i(A)} = \frac{dm_i}{dt} \quad (2.2-10)$$

Ak sústava, ktorú bilancujeme má vlastnosť, že vnútorné veličiny ako koncentrácia, teplota, tlak a pod. sú v každom mieste sústavy rovnaké - sústava s dokonalým premiešavaním, potom v tejto sústave bude konštantná aj rýchlosť chemickej reakcie r a integráciu rovnice (2.2-9) možno jednoducho uskutočniť. Ak súčasne možno predpokladať konštantnú rýchlosť vstupu a výstupu zložky i (pričom $\dot{m}_{i(V)} \neq \dot{m}_{i(U)}$), potom zložkovú bilančnú rovnicu možno zapísať nasledovne

$$\dot{m}_{i(V)} + \nu_i M_i r V = \dot{m}_{i(U)} + \frac{dm_i}{dt} \quad (2.2-11)$$

Celkovú bilančnú rovnicu získame sumáciou rovnice (2.2-11) cez všetky zložky i , t.j.

$$\sum_i \dot{m}_{i(V)} = \sum_i \dot{m}_{i(U)} + \frac{d \sum_i m_i}{dt} \quad (2.2-12)$$

prípadne

$$\dot{m}_{(V)} = \dot{m}_{(U)} + \frac{dm}{dt}$$

kde m je hmotnosť sústavy v určitom časovom okamihu t ,

$\dot{m}_{(V)}$ - rýchlosť vstupu všetkých látok do sústavy,

$\dot{m}_{(U)}$ - rýchlosť výstupu všetkých látok zo sústavy.

Výraz

$$\sum_i \nu_i M_i r V = 0$$

predstavuje celkovú tvorbu všetkých zložiek v sústave. Súčin $r \cdot V \neq 0$ a preto výraz $\sum_i \nu_i M_i = 0$, čo je v súlade s rovnicou (2.2-6). Táto rovnica vyjadruje v inej forme zákon zachovania celkovej hmotnosti. Hmotnosť látok chemickou reakciou zanikajúcich sa musí rovnať hmotnosti látok chemickou reakciou vznikajúcich.

Bilančné rovnice (2.2-11) a (2.2-12) platia pre uvažovanú sústavu, v ktorej sa uskutočňujú fyzikálne alebo chemické procesy.

Treba zdôrazniť, že doteraz sme uvažovali len bilanciu látky i v jednotkách kg/s. Keď však budeme bilancovať v jednotkách mol/s, potom už uvedené úvahy o celkovej tvorbe chemickou reakciou nemusia platiť, pretože mol je

mierou látkového množstva. Látkové množstvo vyjadruje počet častíc a pri chemických reakciách môžu vznikáť rôzne častice v rôznom počte. Potom bude pre celkovú tvorbu platiť

$$\sum_i \nu_i r V = \sum_i \dot{n}_i(T) \stackrel{\approx}{=} 0 \quad (2.2-13)$$

Celková tvorba chemickou reakciou môže byť menšia, väčšia alebo rovná nule. Celková tvorba v mol/s teda závisí od charakteru prebiehajúcej reakcie. Táto závislosť je daná súčtom stechiometrických koeficientov ν_i chemickej reakcie.

Bilanciu toku látkového množstva (mol/s) možno vyjadriť nasledujúcimi rovnicami

- zložková bilančná rovnica

$$\dot{n}_i(V) + \nu_i r V = \dot{n}_i(U) + \frac{dn_i}{dt} \quad (2.2-14)$$

- celková bilančná rovnica

$$\sum_i \dot{n}_i(V) + \sum_i \nu_i r V = \sum_i \dot{n}_i(U) + \frac{d \sum_i n_i}{dt} \quad (2.2-15)$$

Uvedené bilančné rovnice opisujú zmenu zložky i v otvorenom prietokovom systéme, v ktorom možno predpokladať dokonalé premiešavanie tekutiny. Z týchto rovníc za predpokladu, že poznáme rýchlosť reakcie $r = f(c_i, T)$, možno napr. určiť veľkosť reaktora, prípadne určiť prípustný nástrek, alebo určiť stupeň premeny zložky i a pod.

Pre prípad, keď sa budeme zaujímať len o bilanciu zložky i bez ohľadu na čas trvania reakcie a veľkosť zariadenia, v ktorom sa chemická reakcia uskutočňuje, potom možno odvodiť jednoduché bilančné rovnice, v ktorých nevystupuje rýchlosť reakcie.

Ak bilancujeme hmotnosť zložky i v kg, možno použiť rovnicu

$$m_{i0} + M_i \nu_i \xi = m_{if} \quad (2.2-16)$$

a ak bilancujeme látkové množstvo v mol, použijeme rovnicu

$$n_{i0} + \nu_i \xi = n_{if} \quad (2.2-17)$$

$$\left[\begin{array}{l} \text{Látkové množstvo} \\ \text{zložky } i \text{ na za-} \\ \text{čiatku reakcie} \\ \text{(na VSTUPE do re-} \\ \text{aktora)} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{TVORBA} \\ \text{látky } i \\ \text{chemickou} \\ \text{reakciou} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{Látkové množstvo} \\ \text{zložky } i \text{ na} \\ \text{konci reakcie} \\ \text{(na VÝSTUPE z re-} \\ \text{aktora)} \end{array} \right]$$

kde ξ je tzv. rozsah reakcie definovaný rovnicou

$$\xi = \frac{n_i(T)}{\nu_i} = \frac{[\text{Tvorba látky } i]}{[\text{Stechiometrický koeficient látky } i]} \quad (2.2-18)$$

Rozsah reakcie je mierou zmeny zložky ($i = A, B, R, S, \dots$) počas reakcie. Pre všetky zúčastnené látky danej reakcie má rovnakú kladnú hodnotu, napr. pre všeobecnú reakciu



rozsah reakcie je

$$\xi = \frac{n_A - n_{A0}}{-a} = \frac{n_B - n_{B0}}{-b} = \frac{n_R - n_{R0}}{r} = \frac{n_S - n_{S0}}{s} > 0 \quad (2.2-19)$$

Ak sa v sústave súčasne uskutočňuje niekoľko chemických reakcií (najčastejši prípad) s rozsahom reakcií $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k, \dots$ potom bilančná rovnica zložky i je v nasledujúcom tvare

$$n_{i0} + \sum_k \nu_{ik} \xi_k = n_{if} \quad (2.2-20)$$

kde index k sa dotýka len tých reakcií, v ktorých sa vyskytuje zložka i .

Mierou chemickej reakcie je aj stupeň premeny, ktorý je definovaný vzhľadom na jednu tzv. klúčovú zložku (látka A), ktorá je východiskovou zložkou a ktorej je v sústave najmenej.

$$X_A = \frac{n_{A0} - n_A}{n_{A0}} = \frac{(-\nu_A) \xi}{n_{A0}} = \frac{\left[\begin{array}{l} \text{Látkové množstvo zložky } A, \\ \text{ktoré zreagovalo} \end{array} \right]}{\left[\begin{array}{l} \text{Látkové množstvo zložky } A \\ \text{na začiatku reakcie} \end{array} \right]} \quad (2.2-21)$$

Ak vynásobíme stupeň premeny zložky A číslom 100 dostaneme konverziu v %, t.j.

$$\text{konverzia v \%} = X_A \cdot 10^2$$

Bilančná rovnica zložky i vyjadrená stupňom premeny je

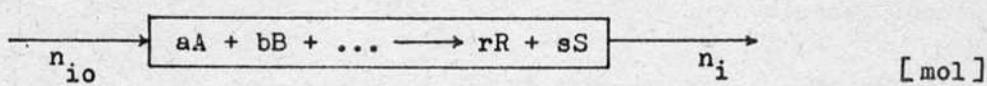
$$n_{io} - \frac{\nu_i}{\nu_A} n_{Ao} X_A = n_{if} \quad (2.2-22)$$

Rozsahom reakcie a stupňom premeny zložky A možno veľmi názorne zapísať látkovú bilanciu chemickej reakcie.

V tab. 2.2 a 2.3 sú uvedené bilančné rovnice pre uvažovanú všeobecnú stochiometrickú rovnicu.

Bilančná tabuľka chemického procesu

Tabuľka 2.2

			
Zložka i	Látkové množstvo zložky i na začiatku reakcie n_{io}	Tvorba látky i chemickou reakciou $n_{i(T)} = \nu_i \xi$	Látkové množstvo zložky i v určitom čase n_i
A	n_{Ao}	$-a\xi$	n_A
B	n_{Bo}	$-b\xi$	n_B
I	n_{Io}	0ξ	n_I
R	n_{Ro}	$r\xi$	n_R
S	n_{So}	$s\xi$	n_S
Σ	$\sum_i n_{io}$	$\sum_i \nu_i \xi$	$\sum_i n_i$

Zložka i	Hmotnosť zložky i na VSTUPE do sústavy \dot{m}_{i1}	TVORBA zložky i che- mickou reakciou $\nu_i M_i$ $\dot{m}_{i(T)} = - \frac{\nu_i M_i}{\nu_A M_A} \dot{m}_{A1} X_A$	Hmotnosť zložky i na VÝSTUPE zo sústavy \dot{m}_{i2}
A	\dot{m}_{A1}	$-\dot{m}_{A1} X_A$	\dot{m}_{A2}
B	\dot{m}_{B1}	$-\frac{bM_B}{aM_A} \dot{m}_{A1} X_A$	\dot{m}_{B2}
I	\dot{m}_{I1}	-	\dot{m}_{I2}
R	\dot{m}_{R1}	$\frac{rM_R}{aM_A} \dot{m}_{A1} X_A$	\dot{m}_{R2}
S	\dot{m}_{S1}	$\frac{sM_S}{aM_A} \dot{m}_{A1} X_A$	\dot{m}_{S2}
Σ	$\sum_i \dot{m}_{i1}$	0	$\sum_i \dot{m}_{i2}$

Použitie uvedených bilančných rovníc si ukážeme pri riešení nasledujúceho príkladu.

Zemný plyn v zložení 92 % mol CH_4 , 5 % mol H_2 , 3 % mol ($\text{N}_2 + \text{Ar}$) sa v parnom reformingu štiepi vodnou parou. Pritom 40 % metánu zreaguje podľa rovnice



a 50 % metánu reaguje podľa rovnice



Nástrek vody v kmol je 4-násobným množstvom oproti nástreku zemného plynu. Zostavte tabuľku látkovej bilancie a vypočítajte množstvo a zloženie produktov.

Známe a neznáme veličiny si zapíšeme do bilančnej tabuľky.

Tabuľka 2.4

$\begin{array}{l} n_1 \\ \text{zemný plyn} \\ n_2 \\ \text{vodná para} \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow \text{CO} + 3 \text{H}_2 \\ \text{CH}_4 + 2 \text{H}_2\text{O} \longrightarrow \text{CO}_2 + 4 \text{H}_2 \end{array} \xrightarrow{n_3} \text{produkt reakcie}$		[kmol]				
Zložka <i>i</i>		VSTUP		TVORBA		VÝSTUP <i>n_{i3}</i>
		<i>n_{i1}</i>	<i>n_{i2}</i>	(1)	(2)	
				<i>n_{i(T)1}</i>	<i>n_{i(T)2}</i>	
CH ₄	A	92,0	-	-ξ ₁	-ξ ₂	<i>n_{A3}</i>
H ₂ O	B	-	400,0	-ξ ₁	-2ξ ₂	<i>n_{B3}</i>
N ₂ + Ar	I	3,0	-	0	0	3,0
H ₂	R	5,0	-	3ξ ₁	4ξ ₂	<i>n_{R3}</i>
CO	S	-	-	ξ ₁	-	<i>n_{S3}</i>
CO ₂	T	-	-	-	ξ ₂	<i>n_{T3}</i>
Σ		100,0	400,0	2ξ ₁	2ξ ₂	<i>n₃</i>
		500,0				

Za základ výpočtu sme zvolili 100 kmol zemného plynu. Nástrek vodnej pary potom je 400 kmol. Z tab. 2.4 vyplýva, že ak budeme poznať rozsah reakcie (1) a (2), vieme určiť množstvá jednotlivých zložiek v produkte.

Rosah reakcie (1) pri 40% konverzii metánu podľa 1. reakcie je

$$\xi_1 = \frac{n_{A1} X_{A1}}{(-\nu_{A1})} = \frac{92 \cdot 0,4}{1} = 36,8 \text{ kmol} \quad (3)$$

a rozsah reakcie (2) pri 50% konverzii metánu podľa 2. reakcie je

$$\xi_2 = \frac{n_{A1} X_2}{(-\nu_{A2})} = \frac{92 \cdot 0,5}{1} = 46 \text{ kmol} \quad (4)$$

Každý riadok bilančnej tabuľky je bilančnou rovnicou

$$n_{i3} = n_{i1} + n_{i2} + \sum_k \nu_{ik} \xi_k \quad (5)$$

z ktorej vypočítame neznáme hodnoty zložiek produktu. Napr. množstvo vodíka bude

$$n_{R3} = 3,0 + 3 \cdot 36,8 + 4 \cdot 46 = 297,4 \text{ kmol} \quad (6)$$

Zo znalostí všetkých zložiek produktu možno vypočítať celkové množstvo produktu n_3 a z nasledujúcej rovnice jeho zloženie

$$c_{i3}^n = \frac{n_{i3}}{n_3} \quad (7)$$