

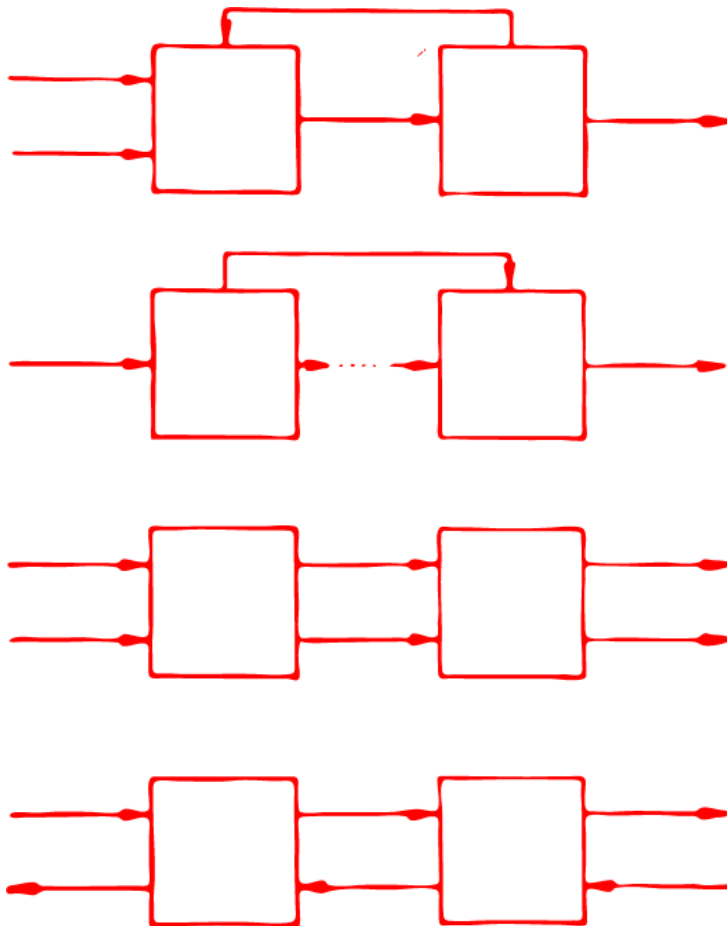
Látkové bilancie

Prednáška 2.

Vypracoval: Ing. Martin Juriga, PhD.

Bratislava, október 2020

Látkové bilancie



-Sú základným predpokladom pre správny návrh zariadenia

-Cieľom je získať prehľad o vstupujúcich a vystupujúcich látkach a ich zložení v bilancovanej sústave

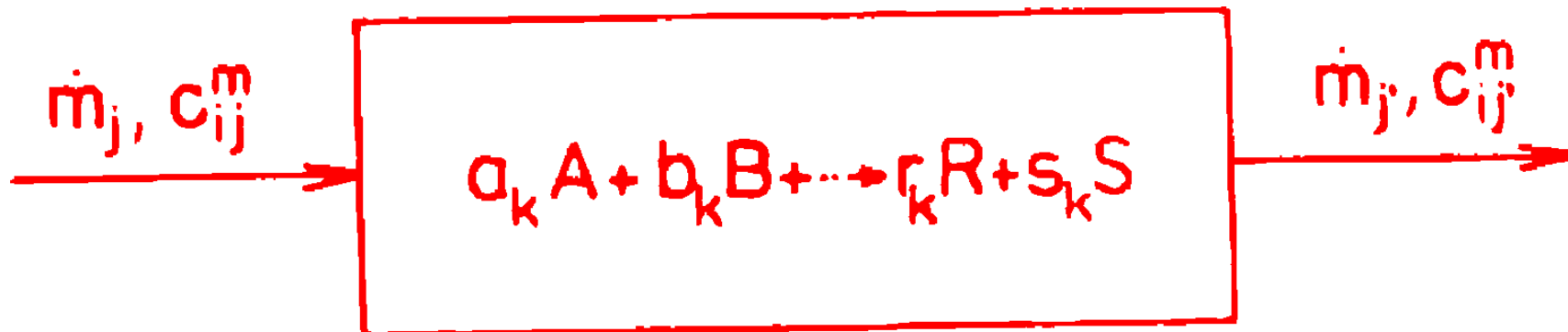
-Látkové a materiálové bilancie sú výpočty založené na základe zákona zachovania hmotnosti.

-Sú nezávislé na energetickej bilancii / ak v sústave neprebiehajú atómové reakcie/

Látkové bilancie

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

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



Látkové bilancie fyzikálnych procesov

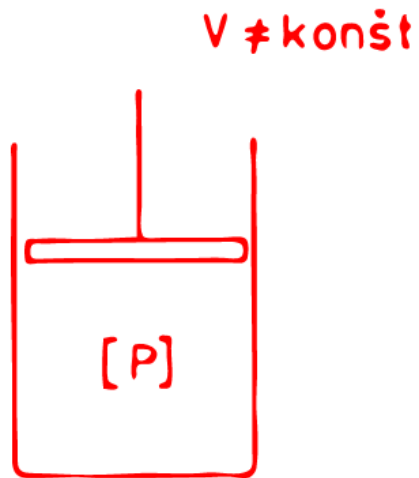
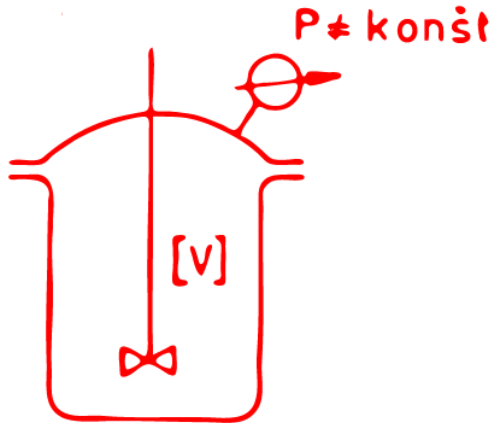
$$\left(\sum_j \dot{m}_{ij} \right)_{\text{VSTUP}} = \left(\sum_j \dot{m}_{ij} \right)_{\text{VÝSTUP}} + \left(\frac{dm_i}{dt} \right)_{\text{AKUM.}}$$

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

$$m_{i0} = m_{if}$$

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

Látkové bilancie fyzikálnych procesov




-bez tvorby

-Pre ustálený proces – bez akumulácie

- V uzavretom systéme, sa proces uskutočňuje za neustálených podmienok. Vstup a výstup sa nemení.

-Pred začatím procesu sú suroviny jednorazovo nadávkované do zariadenia, a po skončení sa produkty vypustia.

Látkové bilancie fyzikálnych procesov



The diagram shows a central box labeled "ZMIEŠAVANIE" (Mixing). Three arrows labeled \dot{m}_1 , \dot{m}_2 , and \dot{m}_3 point into the box from the left. One arrow labeled \dot{m}_4 points out of the box to the right.

Látka i		VSTUP j kg/h			VÝSTUP j
		\dot{m}_{i1}	\dot{m}_{i2}	\dot{m}_{i3}	\dot{m}_{i4}
HNO ₃	1	0,232 \dot{m}_1	0,92 \dot{m}_2	-	28
H ₂ SO ₄	2	0,586 \dot{m}_1	-	0,98 \dot{m}_3	66
H ₂ O	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

Látkové bilancie chemických procesov

(H, C, O, Fe, ...)

(O₂, N₂, CO₂, H₂O, C₃H₈, ...)

5 O₂



Reaktanty

Produkty

- Ak nastáva chemická reakcia dochádza k chemickej tvorbe

- pri chemických reakciách nastáva zmena molekúl alebo časti molekúl, ale nemení sa druh a počet atómov s ktorých sa molekuly skladajú.

- preskupovanie atómov v molekulách sa zapisuje v stechiometrických rovniciach.

Látkové bilancie chemických procesov



$$1.44 \text{ kg C}_3\text{H}_8 + 5.32 \text{ kg O}_2 = 3.44 \text{ kg CO}_2 + 4.18 \text{ kg H}_2\text{O}$$



Stechiometrický
koeficient



$$[r M_R + s M_S] \text{ PRODUKTY} - [a M_A + b M_B + \dots] \text{ REAKTANTY} = 0$$

$$\nu_R M_R + \nu_S M_S + \nu_A M_A + \nu_B M_B + \dots = \sum \nu_i M_i = 0$$

Látkové bilancie chemických procesov



$$\nu_A = -a, \quad \nu_B = -b \quad (\nu_{\text{C}_3\text{H}_8} = -1; \quad \nu_{\text{O}_2} = -5)$$

$$\nu_R = r, \quad \nu_S = s \quad (\nu_{\text{CO}_2} = 3; \quad \nu_{\text{H}_2\text{O}} = 4)$$

Látková bilancia

$$n_{i0} + \nu_i \xi = n_{iF}$$

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

Látkové bilancie chemických procesov

Rozsah reakcie - definícia

$$\xi = \frac{n_i(T)}{\nu_i} = \frac{[\text{Tvorba látky } i]}{[\text{Stoichiometrický koeficient látky } i]}$$

$$\xi = \frac{n_A - n_{A0}}{-a} = \frac{n_B - n_{B0}}{-b} = \frac{n_R - n_{R0}}{r} = \frac{n_S - n_{S0}}{e} > 0$$

Bilančná rovnica pre viac chemických reakcií

$$n_{i0} + \sum_k \nu_{ik} \xi_k = n_{if}$$

Látkové bilancie chemických procesov

Stupeň premeny X_A kľúčovej zložky

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

Ak vynásobíme stupeň premeny X_A kľúčovej zložky *100 % dostaneme Konverziu

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

Bilančná rovnica pre s použitím konverzie.

$$n_{i0} - \frac{\nu_i}{\nu_A} n_{A0} X_A = n_{if}$$

Látkové bilancie chemických procesov

Zložka <i>i</i>	Látkové množstvo zložky <i>i</i> na začiatku reakcie n_{i0}	Tvorba látky <i>i</i> chemickou reakciou $n_i(t) = \nu_i \xi$	Látkové množstvo zložky <i>i</i> v určitom čase n_i
A	n_{A0}	$-a\xi$	n_A
B	n_{B0}	$-b\xi$	n_B
I	n_{I0}	0ξ	n_I
R	n_{R0}	$r\xi$	n_R
S	n_{S0}	$s\xi$	n_S
Σ	$\Sigma_i n_{i0}$	$\Sigma_i \nu_i \xi$	$\Sigma_i n_i$

Látkové bilancie chemických procesov

$\dot{m}_{i1} \rightarrow \boxed{aA + bB + \dots \rightarrow rR + sS} \rightarrow \dot{m}_{i2} \quad [\text{kg/s}]$

Zložka <i>i</i>	Hmotnosť zložky <i>i</i> na VSTUPE do sústavy \dot{m}_{i1}	TVORBA zložky <i>i</i> che- mickou reakciou $\nu_i M_i$ $\dot{m}_i(T) = -\frac{\nu_i M_i}{\nu_A M_A} \dot{m}_A X_A$	Hmotnosť zložky <i>i</i> na VÝSTUPE zo sústavy \dot{m}_{i2}
A	\dot{m}_{A1}	$-\dot{m}_A X_A$	\dot{m}_{A2}
B	\dot{m}_{B1}	$-\frac{\nu_B M_B}{\nu_A M_A} \dot{m}_A X_A$	\dot{m}_{B2}
I	\dot{m}_{I1}	-	\dot{m}_{I2}
R	\dot{m}_{R1}	$\frac{\nu_R M_R}{\nu_A M_A} \dot{m}_A X_A$	\dot{m}_{R2}
S	\dot{m}_{S1}	$\frac{\nu_S M_S}{\nu_A M_A} \dot{m}_A X_A$	\dot{m}_{S2}
Σ	$\sum_1 \dot{m}_{i1}$	0	$\sum_1 \dot{m}_{i2}$

Látkové bilancie chemických procesov

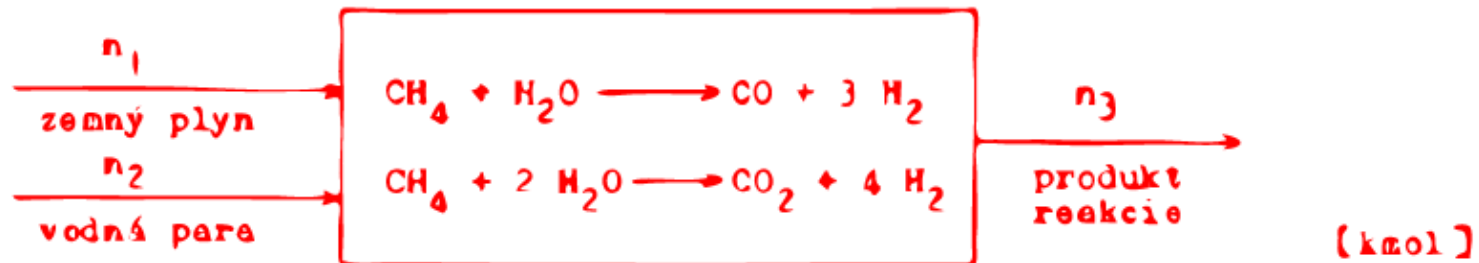
Zemný plyn v zložení 92 % mol CH_4 , 5 % mol H_2 , 3 % mol ($\text{N}_2 + \text{Ar}$) sa v parnom reformingu štiepi vodnou parou. Prítom 40 % metánu zreaguje podľa rovnice



a 50 % metánu reaguje podľa rovnice



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



Látkové bilancie chemických procesov

Zložka i		VSTUP		TVORBA		VÝSTUP n_{i3}
		n_{i1}	n_{i2}	(1)	(2)	
				$n_{i(T)1}$	$n_{i(T)2}$	
CH ₄	A	92,0	-	$-\xi_1$	$-\xi_2$	n_{A3}
H ₂ O	B	-	400,0	$-\xi_1$	$-2\xi_2$	n_{B3}
N ₂ + Ar	I	3,0	-	0	0	3,0
H ₂	R	5,0	-	$3\xi_1$	$4\xi_2$	n_{R3}
CO	S	-	-	ξ_1	-	n_{S3}
CO ₂	T	-	-	-	ξ_2	n_{T3}
Σ		100,0	400,0	$2\xi_1$	$2\xi_2$	n_3
		500,0				

Látkové bilancie chemických procesov

Máme reakciu

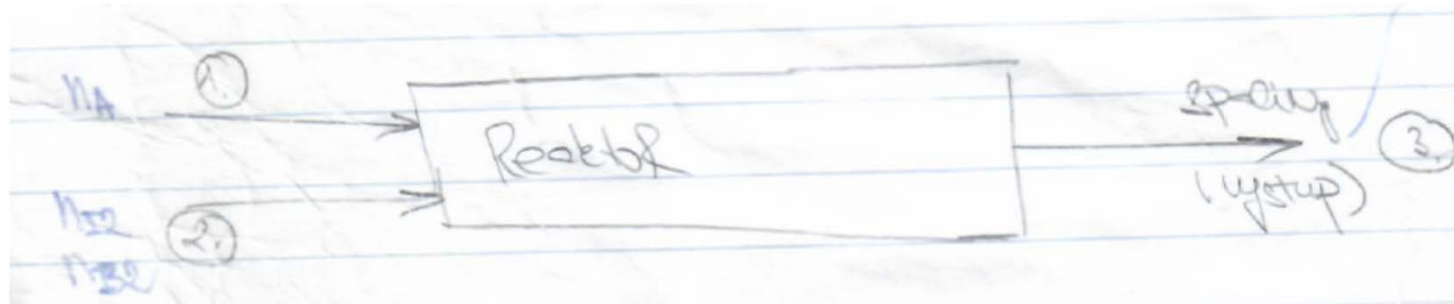


Prebytok vzduchu je 30 % oproti teoretickej spotrebe. Vypočítajte koľko m³, vzduchu treba na spálenie 10 kg etanolu / C₂H₅OH/, pri teplote T= 0°C, tlaku p=101325 Pa a konverzii X_A =95%.

$$M = 46,07 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}} \Rightarrow n = \frac{m}{M} = \frac{10}{46,07 \cdot 10^{-3}} = \underline{\underline{217,06 \text{ mol}}}$$

$$10 \text{ kg C}_2\text{H}_5\text{OH} \rightarrow \begin{matrix} V & 22 \\ n & 22 \end{matrix}$$

Látkové bilancie chemických procesov



Zložka i	VSTUP		TVORBA	VÝSTUP
	1.	2.		
$C_{21}H_5OH$ (A)	1	—	$-1.095 \cdot 1$	(0,05)
O_2 B.	—	$0,21 n_2$	$-3.095 \cdot 1$	n_{B3}
N_2 H.	—	$0,79 n_2$	—	n_{H3}
CO_2 R.	—	—	$+2.095 \cdot 1$	n_{R3}
H_2O S.	—	—	$+3.095 \cdot 1$	n_{S3}
Σ	1	n_2	0,95	n_3