ПОРЯДОК СОСТАВЛЕНИЯ МАТЕРИАЛЬНОГО И ТЕПЛОВОГО БАЛАНСОВ ДЛЯ ОТДЕЛЬНОЙ СТАДИИ ПРОИЗВОДСТВА

МБ ОДНА РЕАКЦИЯ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ

Исходные данные:

1. Состав входящего потока
   Могут быть % мольные или % объемные – это одинаково, т.к. 1моль=0,0224нм^3 (нм^3 – это м^3 при 0°С и 1кгс/см^2)
2. Расход входящего потока, Vвх в нм^3/ч
3. Протекающая химическая реакция
   например: A + B = C+2D
4. Степень превращения по ключевому компоненту
   например: Xa

Порядок расчетов:

1. Все балансовые расчеты ведутся с количеством вещества, поэтому условно разделим входной поток на чистые вещества и определим расход каждого вещества во входящем потоке посредством умножения расхода входящего потока на мольную (объемную) долю конкретного вещества:

$Va^{вх} = Vвх * Ca^{вх}/100$, нм^3/ч
$Vв^{вх} = Vвх * Cв^{вх}/100$
$Vc^{вх} = Vвх * Cc^{вх}/100$
$Vd^{вх} = Vвх * Cd^{вх}/100$
$Ve^{вх} = Vвх * Ce^{вх}/100$
$Vинертов^{вх} = Vвх * Синертов^{вх}/100$

При этом, естественно: $Va^{вх} + Vв^{вх} + Vc^{вх} + Vd^{вх} + Ve^{вх} + Vинертов^{вх} = Vвх$

2. Рассчитаем количества веществ, израсходованных и образованных в процессе, на основании степеней превращения и количеств вещества во входящем потоке, рассчитанных в п.1 выше.

$Va^{хр} = Va^{вх} * Xa$ - количество A, израсходованного по первой реакции
$Vв^{хр} = Va^{хр}$ - количество B, израсходованного по первой реакции
$Vc^{хр} = Va^{хр}$ - количество C, образовавшегося по первой реакции
$Vd^{хр} = 2*Va^{хр}$ - количество D, образовавшегося по первой реакции

3. Рассчитаем количества веществ в выходном потоке

$Va^{вых} = Va^{вх} - Va^{1хр}$, нм^3/ч
$Vв^{вых} = Vв^{вх} - Vв^{хр}$
$Vc^{вых} = Vc^{вх} + Vc^{хр}$
$Vd^{вых} = Vd^{вх} + Vd^{хр}$
$Vинертов^{вых} = Vинертов^{вх}$

При этом $Vвых = Va^{вых} + Vв^{вых} + Vc^{вых} + Vd^{вых} + Vинертов^{вых}$

4. Рассчитаем состав потока на выходе:

$Ca^{вых} = Va^{вых} / Vвых*100$, %объемн.
$Cв^{вых} = Vв^{вых} / Vвых*100$
$Cc^{вых} = Vc^{вых} / Vвых*100$
$Cd^{вых} = Vd^{вых} / Vвых*100$
$Синертов^{вых} = Vинертов^{вых} / Vвых*100$

5. *Произведем проверку материального баланса по массе*

Рассчитаем молекулярную массу веществ (гр/моль или кг/кмоль) участвующих в процессе и определим их плотность при нормальных условиях (0°С, 1кгс/см^2), при которых объем 1 кмоли = 22,4нм^3.

$\rho_A = MM_A / 22,4$, кг/нм^3
$\rho_B = MM_B / 22,4$
$\rho_C = MM_C / 22,4$
$\rho_D = MM_D / 22,4$
$\rho_{ИНЕРТ} = MM_{ИНЕРТ} / 22,4$

Рассчитаем массовый расход входящего потока:

$Ma^{вх} = Va^{вх} * \rho_A$, кг/ч
$Mв^{вх} = Vв^{вх} * \rho_B$
$Mc^{вх} = Vc^{вх} * \rho_C$
$Md^{вх} = Vd^{вх} * \rho_D$
$M_{ИНЕРТ}^{вх} = V_{ИНЕРТ}^{вх} * \rho_{ИНЕРТ}$
$Mвх = Ma^{вх} + Mв^{вх} + Mc^{вх} + Md^{вх} + M_{ИНЕРТ}^{вх}$, кг/ч

Рассчитаем массовый расход выходящего потока:

$Ma^{вых} = Va^{вых} * \rho_A$, кг/ч
$Mв^{вых} = Vв^{вых} * \rho_B$
$Mc^{вых} = Vc^{вых} * \rho_C$
$Md^{вых} = Vd^{вых} * \rho_D$
$M_{ИНЕРТ}^{вых} = V_{ИНЕРТ}^{вых} * \rho_{ИНЕРТ}$
$Mвых = Ma^{вых} + Mв^{вых} + Mc^{вых} + Md^{вых} + M_{ИНЕРТ}^{вых}$, кг/ч

При правильно проведенных расчетах, дебаланс: Мвых - Мвх будет равен НУЛЮ.

МБ ДВЕ РЕАКЦИИ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ

Исходные данные:

1. Состав входящего потока
   Могут быть % мольные или объемные – это одинаково, т.к. 1моль=0,0224нм^3 (нм^3 – это м^3 при 0°С и 1кгс/см^2)
2. Расход входящего потока, Vвх в нм^3/ч
3. Протекающие химические реакции
   например: A + B = C+2D
   C + B = E + D
4. Степени превращения по ключевым компонентам
   например: Xa и Xc

Порядок расчетов:

1. Все балансовые расчеты ведутся с количеством вещества, поэтому условно разделим входной поток на чистые вещества и определим расход каждого вещества во входящем потоке посредством умножения расхода входящего потока на мольную (объемную) долю конкретного вещества:

$Va^{вх} = Vвх * Ca^{вх}/100$, нм^3/ч
$Vв^{вх} = Vвх * Cв^{вх}/100$
$Vc^{вх} = Vвх * Cc^{вх}/100$
$Vd^{вх} = Vвх * Cd^{вх}/100$
$Ve^{вх} = Vвх * Ce^{вх}/100$
$Vинертов^{вх} = Vвх * Синертов^{вх}/100$

При этом, естественно: $Va^{вх} + Vв^{вх} + Vc^{вх} + Vd^{вх} + Ve^{вх} + Vинертов^{вх} = Vвх$

2. Рассчитаем количества веществ, израсходованных и образованных в процессе, на основании степеней превращения и количеств вещества во входящем потоке, рассчитанных в п.1 выше. При этом необходимо учесть то, что одни и те же вещества образуются и расходуются в двух химических реакциях.

$Va^{1хр} = Va^{вх} * Xa$ - количество A, израсходованного по первой реакции
$Vв^{1хр} = Va^{1хр}$ - количество B, израсходованного по первой реакции
$Vc^{1хр} = Va^{1хр}$ - количество C, образовавшегося по первой реакции
$Vd^{1хр} = 2*Va^{1хр}$ - количество D, образовавшегося по первой реакции

$Vc^{2хр} = (Vc^{вх} + Vc^{1хр}) * Xc$ - количество C, израсходованного во 2 хим.реакции
$Vв^{2хр} = Vc^{2хр}$ - количество B, израсходованного по второй реакции
$Ve^{2хр} = Vc^{2хр}$ - количество E, образовавшегося по второй реакции
$Vd^{2хр} = Vc^{2хр}$ - количество D, образовавшегося по второй реакции

3. Рассчитаем количества веществ в выходном потоке

$Va^{вых} = Va^{вх} - Va^{1хр}$, нм^3/ч
$Vв^{вых} = Vв^{вх} - Vв^{1хр} - Vв^{2хр}$
$Vc^{вых} = Vc^{вх} + Vc^{1хр} - Vc^{2хр}$
$Vd^{вых} = Vd^{вх} + Vd^{1хр} + Vd^{2хр}$
$Ve^{вых} = Ve^{вх} + Ve^{2хр}$
$Vинертов^{вых} = Vинертов^{вх}$

При этом $Vвых = Va^{вых} + Vв^{вых} + Vc^{вых} + Vd^{вых} + Ve^{вых} + Vинертов^{вых}$

4. Рассчитаем состав потока на выходе:

$Ca^{вых} = Va^{вых} / Vвых*100$, %объемн.
$Cв^{вых} = Vв^{вых} / Vвых*100$
$Cc^{вых} = Vc^{вых} / Vвых*100$
$Cd^{вых} = Vd^{вых} / Vвых*100$
$Ce^{вых} = Ve^{вых} / Vвых*100$
$Синертов^{вых} = Vинертов^{вых} / Vвых*100$

5. *Произведем проверку материального баланса по массе*

Рассчитаем молекулярную массу веществ (гр/моль или кг/кмоль) участвующих в процессе и определим их плотность при нормальных условиях ($0^{O}C$, 1кгс/см^2), при которых объем 1 кмоли = 22,4нм^3.

$\rho_A = MM_A / 22,4$, кг/нм^3

$\rho_B = MM_B / 22,4$

$\rho_C = MM_C / 22,4$

$\rho_D = MM_D / 22,4$

$\rho_E = MM_E / 22,4$

$\rho_{ИНЕРТ} = MM_{ИНЕРТ} / 22,4$

Рассчитаем массовый расход входящего потока:

$Ma^{вх} = Va^{вх} * \rho_A$, кг/ч

$Mв^{вх} = Vв^{вх} * \rho_B$

$Mc^{вх} = Vc^{вх} * \rho_C$

$Md^{вх} = Vd^{вх} * \rho_D$

$Me^{вх} = Ve^{вх} * \rho_E$

$M_{ИНЕРТ}^{вх} = V_{ИНЕРТ}^{вх} * \rho_{ИНЕРТ}$

$Mвх = Ma^{вх} + Mв^{вх} + Mc^{вх} + Md^{вх} + Me^{вх} + M_{ИНЕРТ}^{вх}$, кг/ч

Рассчитаем массовый расход выходящего потока:

$Ma^{вых} = Va^{вых} * \rho_A$, кг/ч

$Mв^{вых} = Vв^{вых} * \rho_B$

$Mc^{вых} = Vc^{вых} * \rho_C$

$Md^{вых} = Vd^{вых} * \rho_D$

$Me^{вых} = Ve^{вых} * \rho_E$

$M_{ИНЕРТ}^{вых} = V_{ИНЕРТ}^{вых} * \rho_{ИНЕРТ}$

$Mвых = Ma^{вых} + Mв^{вых} + Mc^{вых} + Md^{вых} + Me^{вых} + M_{ИНЕРТ}^{вых}$, кг/ч

При правильно проведенных расчетах, дебаланс: Мвых- Мвх будет равен НУЛЮ.

МБ ОДНА РЕАКЦИЯ (РАСЧЕТ ПО МАССЕ)
(универсальный метод)

Исходные данные:

1. Состав входящего потока
   например: C_A, %масс или C_B,%масс.
2. Расход входящего потока, Мвх в кг/ч
3. Протекающая химическая реакция
   например: A + 0,5B = 2C+D
   примечание: реакция должна быть записана на одну моль ключевого компонента
4. Степень превращения по ключевому компоненту
   например: Ха

Порядок расчетов:

1. *Все балансовые расчеты ведутся с количеством вещества, поэтому условно разделим входной поток на чистые вещества и определим расход каждого вещества во входящем потоке посредством умножения расхода входящего потока на массовое содержание конкретного вещества:*

$Ma^{вх} = Мвх * Ca^{вх}/100$, кг/ч
$Мв^{вх} = Мвх * Св^{вх}/100$
$Mc^{вх} = Мвх * Cc^{вх}/100$
$Md^{вх} = Мвх * Cd^{вх}/100$
$Минертов^{вх} = Мвх * Синертов^{вх}/100$

При этом, естественно: $Ma^{вх} + Мв^{вх} + Mc^{вх} + Md^{вх} + Минертов^{вх} = Мвх$

2. *Рассчитаем количество ключевого компонента, израсходованного в процессе, на основании степени превращения по ключевому компоненту и количества ключевого компонента во входящем потоке.*

$Ma^{хр} = Ma^{вх} * Ха$, кг/ч

3. *Рассчитаем молекулярные массы участвующих в процессе веществ, например:*

$MM_A = 30$, г/моль
$MM_B = 44$, г/моль
$MM_C = 15$, г/моль
$MM_D = 22$, г/моль,

Таким образом, по реакции:

30 + 0,5*44 = 2*15 + 22

4. *Исходя из количества израсходованного в процессе ключевого компонента, с использованием пропорций, рассчитаем количество других реагентов, пошедших в процесс:*

$Ma^{хр}$		$Мв^{хр}$		$Mc^{хр}$		$Md^{хр}$
A	+	0,5B	=	2C	+	D
30		22		30		22

т.е.

$Мв^{хр} = (Ma^{хр} * 22)/30$
$Mc^{хр} = (Ma^{хр} * 30)/30$
$Md^{хр} = (Ma^{хр} * 22)/30$

5. *Рассчитаем массовый расход входящего потока:*

$Ma^{вых} = Ma^{вх} - Ma^{хр}$, кг/ч
$Мв^{вых} = Мв^{вх} - Мв^{хр}$
$Mc^{вых} = Mc^{вх} + Mc^{хр}$
$Md^{вых} = Md^{вх} + Md^{хр}$
$Минертов^{вых} = Минертов^{вх}$
$Мвых = Ma^{вых} + Мв^{вых} + Mc^{вых} + Md^{вых} + Минертов^{вых}$, кг/ч

6. *Рассчитаем состав выходящего потока:*

$Ca^{вых} = Ma^{вых} / Mвых*100$, %масс

$Cв^{вых} = Mв^{вых} / Mвых*100$

$Cc^{вых} = Mc^{вых} / Mвых*100$

$Cd^{вых} = Md^{вых} / Mвых*100$

$Синертов^{вых} = Минертов^{вых} / Mвых*100$

При правильно проведенных расчетах, дебаланс: Мвых- Мвх будет равен НУЛЮ, а концентрации должны быть все положительные.

ТБ ДЛЯ АДИАБАТИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА В ГАЗЕ

В общем виде тепловой баланс для адиабатического процесса в газе рассчитывается по следующей формуле:

$$Q^{ФИЗ}_{ВЫХ} = Q^{ФИЗ}_{ВХОД} + Q_{ХР} - Q_{ПОТЕРЬ}$$

Таким образом, при проведении расчета необходимо определить теплоту выходящего потока и его температуру.

1. *Расчет физической теплоты с входящим потоком*

$$Q^{ФИЗ}_{ВХОД} = V_{ВХОД} * Cp_{ВХОД} * T_{ВХОД}$$

где $V_{ВХОД}$ – расход входящего потока, нм^3/сек
$Cp_{ВХОД}$ – изобарная теплоемкость потока газа на входе, Дж/(нм^3*К)
$T_{ВХОД}$ – температура входящего потока, гр.К

Таким образом: нм^3/сек * Дж/(нм^3*К) * гр.К = Дж/сек или Вт (ватты)

Значение $V_{ВХОД}$ берется из материального баланса, а $T_{ВХОД}$ это исходные данные для расчета теплового баланса.

Расчет изобарной теплоемкости потока газа для температуры входящего потока ($T_{ВХОД}$) рассчитывается по правилу аддитивности, например, для смеси из четырех компонентов:

$$Cp = Cp_A * C_A/100 + Cp_B * C_B/100 + Cp_C * C_C/100 + Cp_D * C_D/100$$

где Cp_A Cp_B Cp_C Cp_D – изобарные объемные теплоемкости соответствующих веществ для температуры $T_{ВХОД}$, Дж/(нм^3*К)
C_A C_B C_C C_D – концентрации соответствующих веществ во входящем потоке, которые берутся из материального баланса, %об.

Изобарные теплоемкости чистых веществ для температуры $T_{ВХОД}$ рассчитываются по справочным данным, например, по зависимости:

$$Cp = a + b * T + c * T^2 + d * T^3$$

Если данная зависимость позволяет рассчитать мольную теплоемкость в Дж/(моль*К), то пересчитаем ее в объемную теплоемкость через объем одной моли при нормальных термодинамических условиях (0°С и 1кгс/см^2), равную 0,0224 нм^3/моль:

$$Cp_{ОБЪЕМН.} = Cp_{МОЛЬН.} / 0{,}0224$$

2. Теплота химической реакции рассчитывается исходя из эффекта химической реакции $q_{ХР}$, Дж/моль ключевого компонента.

Количество ключевого компонента пошедшего в химическую реакцию берется из материального баланса и пересчитывается на моли.

$$Va^{хр}\ (нм^3/ч) / 0{,}0224\ (нм^3/моль) / 3600\ (сек/ч) = Va^{хр}\ (моль/сек)$$

Тогда

$$Va^{хр}\ (моль/сек) * q_{ХР}\ (Дж/моль) = Q_{ХР}\ (Дж/сек\ или\ Вт)$$

3. Количество потерь теплоты принимается как 2-7% (в зависимости от процесса) от общего прихода теплоты, т.е.

$$Q_{ПОТЕРЬ} = 0{,}02\ldots0{,}05\ (Q^{ФИЗ}_{ВХОД} + Q_{ХР})$$

Расчет температуры выходного потока производится исходя рассчитанной величины $Q^{ФИЗ}_{вых}$ по формуле:

$$T_{вых} = Q^{ФИЗ}_{вых} / (V_{вых} * Cp_{вых})$$

Однако расчеты температуры на выходе усложнены тем, что $Cp_{вых}$ является функцией от $T_{вых}$. Таким образом, необходимо решить трансцендентное уравнение:

$$T_{вых} = f(T_{вых})$$

Решение подобных уравнений производится с помощью математических методов (например «Поиск решения» в Excel), либо методом перебора вручную. В любом случае алгоритм решения будет следующий:

1. Задается некоторое начальное приближение температуры на выходе $T_{вых}$, естественно в гр.К
2. Для данной температуры и результатов расчета материального баланса рассчитывается физическая теплота потока на выходе ($Q^{ФИЗ}_{т}$). Расчеты изобарной теплоемкости Ср производятся аналогично п.1 («*Расчет физической теплоты с входящим потоком*») выше.
3. Рассчитывается разница между $Q^{ФИЗ}_{вых}$, рассчитанной по тепловому балансу, и $Q^{ФИЗ}_{т}$
$$dQ = Q^{ФИЗ}_{вых} - Q^{ФИЗ}_{т}$$
4. В зависимости от величины dQ подбирается новое значение величины $T_{вых}$ и расчеты повторяются с п.2 до тех пор, пока значение dQ не будет близко к НУЛЮ.

При использовании математических методов расчета имеется возможность подобрать $T_{вых}$ до тысячных долей градусов.

ТБ ДЛЯ ПРОЦЕССА В ГАЗЕ С ОТВОДОМ ИЛИ ПОДВОДОМ ТЕПЛОТЫ

В общем виде тепловой баланс для адиабатического процесса в газе с подводом теплоты или отводом теплоты ($Q_{ТП}$) рассчитывается по следующей формуле:

$$Q_{ТП} = Q^{ФИЗ}_{ВЫХ} - (Q^{ФИЗ}_{ВХОД} + Q_{ХР} - Q_{ПОТЕРЬ})$$

Таким образом, при проведении расчета необходимо определить количество подведенной (отведенной) теплоты.

1. *Расчет физической теплоты с входящим и выходящим потоком*

$$Q^{ФИЗ}_{ВХОД} = V_{ВХОД} * Cp_{ВХОД} * T_{ВХОД}$$

где $V_{ВХОД}$ – расход входящего потока, нм^3/сек
$Cp_{ВХОД}$ – изобарная теплоемкость потока газа на входе, Дж/(нм^3*К)
$T_{ВХОД}$ – температура входящего потока, гр.К

Таким образом: нм^3/сек * Дж/(нм^3*К) * гр.К = Дж/сек или Вт (ватты)

Значение $V_{ВХОД}$ берется из материального баланса, а $T_{ВХОД}$ это исходные данные для расчета теплового баланса.

Расчет изобарной теплоемкости потока газа для температуры входящего потока ($T_{ВХОД}$) рассчитывается по правилу аддитивности, например, для смеси из четырех компонентов:

$$Cp = Cp_A * C^{ВХ}_A/100 + Cp_B * C^{ВХ}_B/100 + Cp_C * C^{ВХ}_C/100 + Cp_D * C^{ВХ}_D/100$$

где Cp_A Cp_B Cp_C Cp_D – изобарные объемные теплоемкости соответствующих веществ для температуры $T_{ВХОД}$, Дж/(нм^3*К)
$C^{ВХ}_A$ $C^{ВХ}_B$ $C^{ВХ}_C$ $C^{ВХ}_D$ – концентрации соответствующих веществ во входящем потоке, которые берутся из материального баланса, %об.

Изобарные теплоемкости чистых веществ для температуры $T_{ВХОД}$ рассчитываются по справочным данным, например, по зависимости:

$$Cp = a + b * T + c * T^2 + d * T^3$$

Если данная зависимость позволяет рассчитать мольную теплоемкость в Дж/(моль*К), то пересчитаем ее в объемную теплоемкость через объем одной моли при нормальных термодинамических условиях (0°С и 1кгс/см^2), равную 0,0224 нм^3/моль:

$$Cp_{ОБЪЕМН.} = Cp_{МОЛЬН.} / 0{,}0224$$

Расчет $Q^{ФИЗ}_{ВЫХ}$ для температуры $T_{ВЫХ}$ и состава потока на выходе считается аналогично.

2. Теплота химической реакции рассчитывается исходя из эффекта химической реакции $q_{ХР}$, Дж/моль ключевого компонента.

Количество ключевого компонента пошедшего в химическую реакцию берется из материального баланса и пересчитывается на моли.

$$Va^{хр}\ (нм^3/ч) / 0{,}0224\ (нм^3/моль) / 3600\ (сек/ч) = Va^{хр}\ (моль/сек)$$

тогда

$$Va^{хр}\ (моль/сек) * q_{ХР}\ (Дж/моль) = Q_{ХР}\ (Дж/сек\ или\ Вт)$$

3. Количество потерь теплоты принимается как 2-7% (в зависимости от процесса) от общего прихода теплоты, т.е.

$$Q_{ПОТЕРЬ} = 0{,}02\ldots0{,}05\ (Q^{ФИЗ}_{ВХОД} + Q_{ХР})$$

Если $Q_{ТП}$ имеет положительное значение, то теплота подводилась, а если отрицательное – отводилась.

ТБ ДЛЯ ПРОЦЕССА С ПОТОКАМИ ЖИДКОСТИ ИЛИ УЧАСТИЕМ ТВЕРДЫХ ВЕЩЕСТВ

Тепловой баланс процесса с потоками жидкости или участием твердых веществ считаются аналогично тепловому балансу с газовыми потоками. Более того, в большинстве случаев данный расчет бывает много проще, чем для газов.

При проведении расчетов следует учитывать следующие особенности:

1. Для жидкости и твердых веществ теплоемкость практически не изменяется с изменением температуры, поэтому для данных потоков можно принимать теплоемкость как константу;
2. Зависимости теплоемкости растворов от состава достаточно сложны, и правило аддитивности для данных систем обычно не применимо, поэтому данные значения необходимо брать из таблиц;
3. При расчете физической теплоты потока необходимо делать анализ размерности и производить необходимый пересчет единиц измерения. Например, расходы будут массовые или мольные, а при пересчете мольной теплоемкости в массовую, или обратно, необходимо будет знать молекулярную массу вещества в гр/моль или кг/кмоль;
4. В случае, если в системе происходят фазовые переходы, в тепловом балансе необходимо учитывать теплоту фазовых переходов: при конденсации паров теплота выделяется, а при испарении жидкости – поглощается;