

## Лабораторна робота №7-2

Розрахунок матеріального балансу ХТС при наявності реакційних процесів в середовищі Mathcad

Мета: навчитися досліджувати стехіометрію реакцій та розраховувати матеріальні баланси ХТС при заданих значеннях управляючих параметрів і деяких вхідних, проміжних і вихідних змінних.

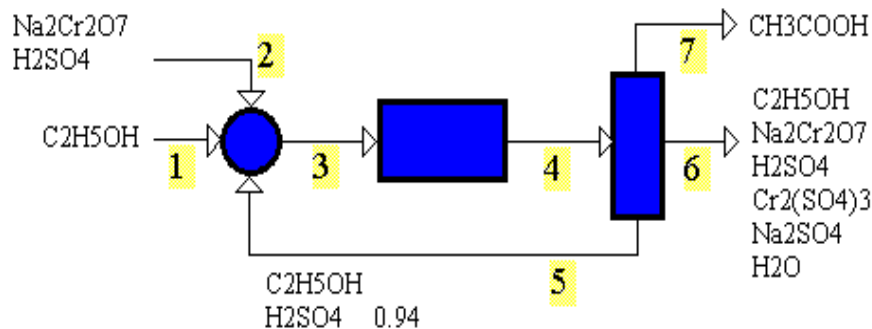
Завдання:

1. Ознайомитися зі схемою.
2. Для реакції процесу дослідити стехіометрію.
3. Провести аналіз степенів свободи.
4. Провести послідовний розрахунок матеріального балансу. Результати вивести у таблицю. Використовувати одиниці системи СИ
5. Провести перевірку отриманих результатів.

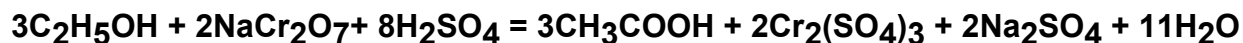
### Синтез оцтової кислоти

#### Постановка задачі

Наведена на рис. схема складається із змішувача, реактора та сепаратора.



Реактор окислює етанол в оцтову кислоту з сумішшю біхромату і сірчаної кислоти. 90% повне перетворення досягається рециклом при відношенні подачі етанолу до рециклу 1:1, 10% надлишку сірчаної кислоти, і 20% надлишку біхромату натрію. Потік, що перероблюється, містить тільки етанол і сірчану кислоту. Концентрація кислоти в рециклі 94%. Досягається повне розділення оцту. Реакція, що відбувається:



## Аналіз степенів свободи

Назва	Зміш	Реакт	Сеп	Заг.баланс	Процес
Змінні	8	10+1	16	10+1	22+1
Баланс	3	7	7	7	17
Склад	1	0	1	0	1
Перетворення	0	0	0	1	1
Надл. фракції	2	0	0	2	2
Коеф. рециклу	1	0	0	0	1
Баз. потік	1	0	0	1	1
Степені свободи	0	4	8	0	0
Загальні баланси			7		
Змішувач	0	4	1		
		3	1		
Сепаратор		1	0		
		1			
			0		

Примітка: зверніть увагу на те, що повне перетворення не використовується для реактора, а використовується для загальних балансів.

Оптимальний порядок обчислень:

Заг.баланс --> Змішувач --> Сепаратор.

## Матеріальні баланси

Індекси потоків:

$$j := 1..7$$

Індекси речовин:

$$s := 1..7$$

Коефіцієнт надл. фракцій i:

$$\alpha_i = \frac{\sigma_1}{\sigma_i} \cdot \frac{n_{i,2}}{n_{1,2}} - 1$$

Коефіцієнт рециркуляції:

$$\beta = \frac{N_5}{N_1}$$

Повний ступінь перетворення етанолу:

$$X = \frac{n_{1,1} - n_{1,6}}{n_{1,1}}$$

**Дані:**

ініціалізуємо масив складу  $x_{s,j} := 0$

Загальне перетворення етанолу  $X := 0.9$

Надлишкові фракції  $\alpha_2 := 0.1$

$$\alpha_3 := 0.2$$

Коефіцієнт рециркуляції  $\beta := 1$

Рециркуляційний склад  $x_{3,5} := 0.94$



Матриця стехіометричних коефіцієнтів

$$\sigma := \begin{pmatrix} -3 \\ -2 \\ -8 \\ 3 \\ 2 \\ 2 \\ 11 \end{pmatrix}$$

Молекулярні маси:  $M := (46.068 \ 261.99 \ 98.08 \ 60.052 \ 392.184 \ 142.062 \ 18.016) \cdot \frac{\text{gm}}{\text{mol}}$

**Анализ задачі:** базисним вибирається потік етанолу

$$N_1 := 1000 \frac{\text{mol}}{\text{hr}}$$

(Ініціалізуємо масив швидкостей потоку)

$$n_{s,j} := 0 \cdot \frac{\text{mol}}{\text{hr}}$$

Розрахунок для першого потоку:

$$x_{1,1} := 1$$

$$n_{s,1} := x_{s,1} \cdot N_1$$

**Поток 2:** швидкості потоків діхромата і сірчаної кислоти задаються надлишковими фракціями.

Діхромат:

$$n_{2,2} := (1 + \alpha_2) \cdot \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \cdot N_1$$

Сірчана кислота

$$n_{3,2} := (1 + \alpha_3) \cdot \frac{\sigma_3}{\sigma_1} \cdot N_1$$

$$N_2 := \sum_{s=2}^3 n_{s,2}$$

$$x_{s,2} := \frac{n_{s,2}}{N_2}$$

**Загальні баланси:** порядок реакції може бути обчислений з повного перетворення.

$$r := \frac{-X \cdot N_1}{\sigma_1}$$

Вхідними потоками в загальний процес являються потоки 1 і 2, вихідні потоки 6 і 7. Оцтова кислота з'являється в потоці 7.

Поток 6:  $n_{s,6} := n_{s,1} + n_{s,2} + r \cdot \sigma_s$

$$n_{4,6} := 0 \cdot \frac{\text{mol}}{\text{hr}}$$

Поток 7:  $n_{4,7} := r \cdot \sigma_4$

Розрахунок:

$$N_6 := \sum_{s=1}^7 n_{s,6}$$

$$N_7 := \sum_{s=1}^7 n_{s,7}$$

$$x_{s,6} := \frac{n_{s,6}}{N_6}$$

$$x_{s,7} := \frac{n_{s,7}}{N_7}$$

**Баланси змішувача:** оскільки, коефіцієнт рециркуляції і перетворення відомі, то швидкість потоку може бути визначена, що дозволить обчислити баланси змішувача.

Поток реактора:  $N_5 := \beta \cdot N_1$

$$x_{1,5} := 1 - x_{3,5}$$

$$n_{s,5} := N_5 \cdot x_{s,5}$$

$$n_{s,3} := n_{s,1} + n_{s,2} + n_{s,5}$$

$$N_3 := \sum_{s=1}^3 n_{s,3}$$

$$x_{s,3} := \frac{n_{s,3}}{N_3}$$

**Баланси сепаратора:**

Вихід реактора:

$$n_{s,4} := n_{s,5} + n_{s,6} + n_{s,7}$$

$$N_4 := \sum_{s=1}^7 n_{s,4}$$

$$x_{s,4} := \frac{n_{s,4}}{N_4}$$

**Загальний матеріальний баланс:**

$$x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0.1787 & 0.0215 & 0.06 & 0.0181 & 0 \\ 0 & 0.1864 & 0.1236 & 0.0179 & 0 & 0.0241 & 0 \\ 0 & 0.8136 & 0.6978 & 0.2341 & 0.94 & 0.1446 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.1211 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0.0807 & 0 & 0.1084 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.0807 & 0 & 0.1084 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.4439 & 0 & 0.5964 & 0 \end{pmatrix}$$

$$N = \begin{pmatrix} 1000 \\ 3933 \\ 5933 \\ 7433 \\ 1000 \\ 5533 \\ 900 \end{pmatrix} \frac{\text{mol}}{\text{hr}}$$

$$n = \begin{pmatrix} 1000 & 0 & 1060 & 160 & 60 & 100 & 0 \\ 0 & 733 & 733 & 133 & 0 & 133 & 0 \\ 0 & 3200 & 4140 & 1740 & 940 & 800 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 900 & 0 & 0 & 900 \\ 0 & 0 & 0 & 600 & 0 & 600 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 600 & 0 & 600 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3300 & 0 & 3300 & 0 \end{pmatrix} \frac{\text{mol}}{\text{hr}}$$

## Загальний матеріальний баланс(Масові долі)

$$f_{s,j} := n_{s,j} \cdot (M^T)_s$$

$$F_j := \sum_{s=1}^7 f_{s,j}$$

$$\omega_{s,j} := \frac{f_{s,j}}{F_j}$$

$$F = \begin{pmatrix} 46.07 \\ 505.98 \\ 647.01 \\ 647.01 \\ 94.96 \\ 498 \\ 54.05 \end{pmatrix} \frac{\text{kg}}{\text{hr}}$$

$$f = \begin{pmatrix} 46.07 & 0 & 48.83 & 7.37 & 2.76 & 4.61 & 0 \\ 0 & 192.13 & 192.13 & 34.93 & 0 & 34.93 & 0 \\ 0 & 313.86 & 406.05 & 170.66 & 92.2 & 78.46 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 54.05 & 0 & 0 & 54.05 \\ 0 & 0 & 0 & 235.31 & 0 & 235.31 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 85.24 & 0 & 85.24 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 59.45 & 0 & 59.45 & 0 \end{pmatrix} \frac{\text{kg}}{\text{hr}}$$

$$\omega = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0.0755 & 0.0114 & 0.0291 & 0.0093 & 0 \\ 0 & 0.3797 & 0.2969 & 0.054 & 0 & 0.0701 & 0 \\ 0 & 0.6203 & 0.6276 & 0.2638 & 0.9709 & 0.1576 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.0835 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0.3637 & 0 & 0.4725 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.1317 & 0 & 0.1712 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.0919 & 0 & 0.1194 & 0 \end{pmatrix}$$

### Перевірка:

$$\text{Errx} := \sum_{j=1}^7 \left[ \sum_{s=1}^7 x_{(s,j)} - 1 \right] \quad \text{Errx} = 0$$

$$\text{Errn} := \sum_{j=1}^7 \left[ \sum_{s=1}^7 n_{(s,j)} - N_j \right] \quad \text{Errn} = 0 \frac{\text{mol}}{\text{hr}}$$

$$\text{ErrR} := \frac{F_4 - F_3}{F_3} \quad \text{ErrR} = 0$$

$$\text{ErrSep} := \frac{F_4 - F_5 - F_6 - F_7}{F_4} \quad \text{ErrSep} = 0$$

$$\text{ErrOvrl} := \frac{F_1 + F_2 - F_6 - F_7}{F_1 + F_2} \quad \text{ErrOvrl} = 0$$

---

ORIGIN≡ 1

mol≡ 1