

Министерство образования и науки Украины

**Украинский государственный химико-технологический уни-
верситет**

КАФЕДРА ОБЩЕЙ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

РАСЧЕТЫ В КУРСЕ

ОБЩЕЙ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Днепропетровск

2004 год

УДК 669.01.010(075.8)

Расчеты процессов и реакторов в курсе общей химической технологии.- Украинский государственный химико - технологический университет. - Днепропетровск, 2004. - 104 с.

Учебное пособие содержит пояснения и примеры решения задач в курсе общей химической технологии.

Предназначено для студентов всех специальностей дневной и заочной форм обучения.

Авторы: д.т.н. В.Д. Барский, д.х.н. Л.А. Снежко, к.т.н. А.А. Чернышев.

Рекомендовано Ученым Советом
Украинского государственного
химико-технологического университета
как учебное пособие

Днепропетровск 2004

ВВЕДЕНИЕ	6
1. РАСЧЕТ МАТЕРИАЛЬНОГО БАЛАНСА ХТП	7
<i>1.1. Расчет приходной части баланса</i>	8
1.1.1. Расчет состава и расхода потока.....	8
1.1.2. Газы и их смеси	10
1.1.3. Способы выражения концентрации растворов	11
1.1.4. Степень превращения и выход продуктов.....	12
<i>1.2. Расчет по уравнению химической реакции.....</i>	14
<i>1.4. Расчет расходной части баланса</i>	15
<i>1.5. Сводная таблица материального баланса.....</i>	15
<i>1.6. Примеры решения задач</i>	16
1.6.1. Простейшие упражнения.....	16
1.6.2. Расчет состава равновесной смеси и степени превращения	18
1.6.3. Расчет материального баланса обратимых реакций	19
1.6.4. Расчет материального баланса обратимых реакций, протекающих при смешении газовых потоков	24
1.6.5. Расчет материального баланса обратимых реакций при заданной производительности реактора.....	26
1.6.6. Расчет материального баланса при одновременном протекании нескольких реакций.....	30
2. РАСЧЕТ ТЕПЛОВОГО БАЛАНСА ХТП	36
<i>2.1. Основные расчетные соотношения</i>	36
<i>2.2. Примеры решения задач</i>	39
3. РАСЧЕТ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ.....	45
<i>3.1. Основные расчетные соотношения</i>	45
<i>3.2. Примеры решения задач</i>	52
4. РАСЧЕТЫ НА ПЕРСОНАЛЬНЫХ КОМПЬЮТЕРАХ.....	57

<i>4.1. Расчет K_p</i>	57
<i>4.2. Расчет равновесной степени превращения X_A^*</i>	58
<i>4.3. Расчет реактора с использованием эмпирических зависимостей</i>	60
4.3.1. Программа расчета реактора средствами Mathcad	62
ЛИТЕРАТУРА	67
ПРИЛОЖЕНИЯ	68
<i>Приложение 1. Термодинамические свойства веществ</i>	68
<i>Приложение 2. Средняя мольная теплоемкость веществ</i>	70
<i>Приложение 3. Соотношения размерностей физических величин</i>	70
КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ	72
<i>Раздел 1</i>	72
<i>Раздел 2</i>	73
<i>Раздел 3</i>	74
<i>Раздел 4</i>	76
<i>Раздел 5</i>	77
<i>Раздел 6</i>	78
ЗАДАЧИ	80
<i>Задание 1</i>	80
<i>Задание 2</i>	80
<i>Задание 3</i>	82
<i>Задание 4</i>	82

<i>Задание 5.....</i>	<i>84</i>
<i>Задание 6.....</i>	<i>86</i>
<i>Задание 7.....</i>	<i>89</i>
<i>Задание 8.....</i>	<i>93</i>
<i>Задание 9.....</i>	<i>96</i>
<i>Задание 10.....</i>	<i>98</i>
<i>Задание 11.....</i>	<i>100</i>
<i>Задание 12.....</i>	<i>101</i>
<i>Задание 13.....</i>	<i>102</i>
<i>Задание 14.....</i>	<i>104</i>

ВВЕДЕНИЕ

Курс общей химической технологии обобщает знания, полученные студентами по физике, общей, аналитической и физической химии. Расчетный практикум призван дать навыки вычислений основных показателей химико-технологического процесса (ХТП) – степени превращения сырья, выхода продуктов, селективности. Успешное выполнение контрольных заданий зависит также от умения определять концентрации взаимодействующих веществ, выполнять вычисления по стехиометрическим уравнениям, свободно владеть пересчетами из одних размерностей в другие, понимать и применять основные принципы составления балансовых уравнений.

Исходя из этих соображений, авторы включили в предлагаемое пособие задачи нарастающей сложности, призванные, с одной стороны, закрепить основные элементы расчетов из общих химических курсов, а с другой – дать представления об алгоритме расчета реакторов, основанном на решении уравнений гидродинамики, термодинамики, кинетики, материального и теплового балансов. В данном пособии сделана попытка последовательного подведения студента к выполнению расчета реактора в целом после овладения отдельными элементарными этапами вычислений.

В настоящем пособии впервые предлагается унифицированная форма составления балансовых задач, облегчающая их компьютерное решение. Даны подробные комментарии и примеры решения задач, в том числе с применением ПЭВМ в программах Excel и Mathcad.

Приведены контрольные вопросы по программе курса ОХТ и варианты заданий для расчетных и лабораторных занятий, а также для выполнения контрольных работ студентами заочного отделения.

1. РАСЧЕТ МАТЕРИАЛЬНОГО БАЛАНСА ХТП

Материальный баланс устанавливает связь между вещественными потоками на входе и выходе ХТП. В основе материального баланса лежат расчеты по стехиометрическим уравнениям химических реакций. Критерием правильного решения задачи является схождение приходной и расходной частей баланса по массам исходных веществ и продуктов:

$$\sum m_{i,0} = \sum m_i, \quad (1.1)$$

где $m_{i,0}$ и m_i , - массовый расход i -го индивидуального компонента смеси, кг/ч.

Некоторые компоненты исходной смеси, например, вещество И, могут не участвовать в химических превращениях, однако их присутствие обязательно следует учитывать в балансе массы.

Схема составления материального баланса химико-технологического процесса представлена на рис.1.

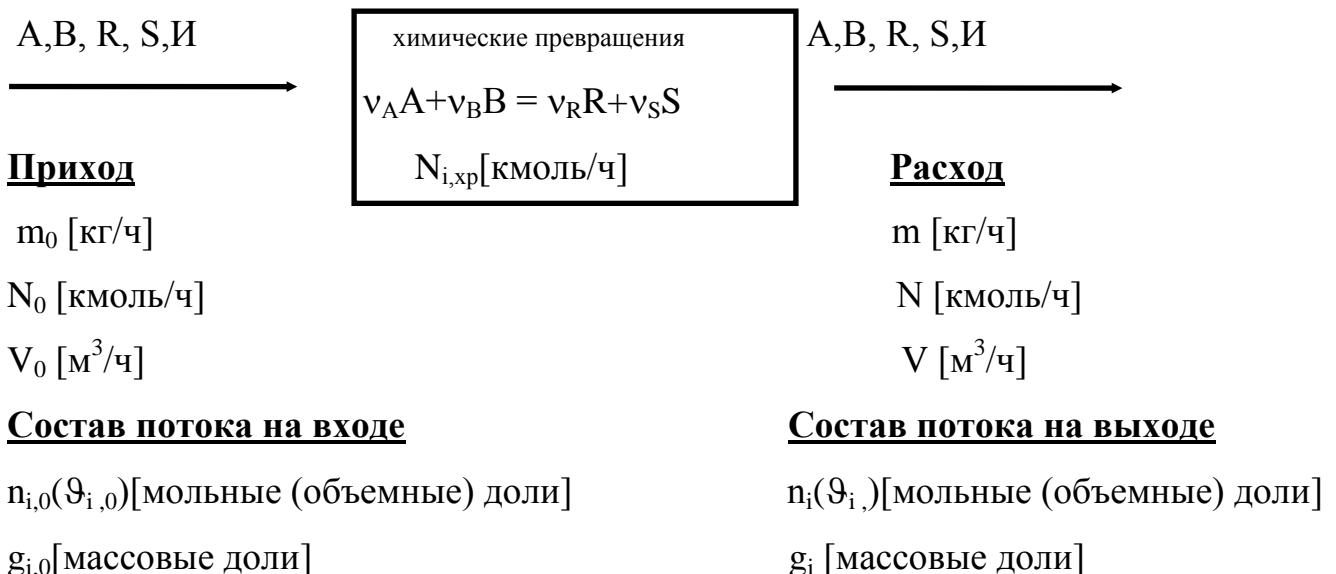


Рис.1.1. Схема составления материального баланса ХТП

что расчеты ведут, исходя из производительности по целевому продукту или ключевому компоненту исходной реакционной смеси.

Расчет количеств веществ, участвующих в химических превращениях ($N_{i,xp}$, кмоль/ч), проводят по уравнениям реакций, стехиометрические коэффициенты ко-
©УГХТУ, кафедра общей химической технологии

торых определяют мольные отношения между исходными веществами и продуктами ХТП.

Выходной поток представляет собой разницу между количеством веществ, поступивших на переработку, и количеством веществ, расходуемых в химических превращениях.

Решение задач сводится к выполнению трех основных этапов:

1. Расчет входного потока (составление приходной части баланса);
2. Расчет мольного количества веществ, вступивших в химические реакции (по химическому уравнению);
3. Расчет выходного потока (составление расходной части баланса).

1.1. Расчет приходной части баланса

1.1.1. Расчет состава и расхода потока

Состав потока обычно выражают в мольных, объемных или массовых долях. В ходе решения необходимо придерживаться единства размерностей. Если входной поток задают в массовых единицах (кг/ч), его состав необходимо выразить в массовых долях g_i ; если в мольных (кмоль/ч) или объемных ($m^3/ч$) - в мольных n_i (объемных ϑ_i) долях.

Мольная доля n_i - отношение мольного расхода i -го компонента в потоке N_i к мольному расходу смеси:

$$n_i = \frac{N_i}{\sum_i N_i} \quad (1.1)$$

Объемная доля ϑ_i - отношение объемного расхода i -го компонента в потоке V_i к объемному расходу смеси:

$$\vartheta_i = \frac{V_i}{\sum_i V_i} \quad (1.2)$$

Поскольку все газы в одинаковых условиях имеют одинаковый мольный объем $n_i = \vartheta_i$

Массовая доля g_i - отношение массового расхода i -го компонента в потоке m_i к массовому расходу смеси:

$$g_i = \frac{m_i}{\sum_i m_i} \quad (1.3)$$

Мольные, объемные и массовые проценты получают умножением соответствующих долей на 100%.

Связь между g_i и $n_i (\vartheta_i)$ задается выражениями:

$$g_i = \frac{n_i M_i}{\sum_i n_i M_i}; \quad (1.4)$$

$$n_i (\vartheta_i) = \frac{\frac{g_i}{M_i}}{\sum_i \frac{g_i}{M_i}}, \quad (1.5)$$

где M_i - молярная масса i -го компонента, кг/кмоль.

Среднюю молярную массу смеси веществ M_{cm} рассчитывают по формуле:

$$M_{cm} = \sum (n_i M_i). \quad (1.6)$$

Как видно, знаменатель выражения (1.4) равен средней молярной массе смеси, а знаменатель (1.5) - величине, пропорциональной мольному расходу потока. Поэтому вычисления g_i и n_i удобно начинать с нахождения этих величин.

Величина входного потока (расход вещества в единицу времени) может быть выражена в мольных (N , кмоль/ч), объемных (V , м³/ч) или массовых (m , кг/ч) единицах (рис.1.1).

Мольный расход i -го компонента смеси N_i рассчитывают по его массовому расходу и соответствующей молярной массе:

$$N_i = m_i / M_i, \quad (1.7)$$

а мольный расход смеси - по массовому расходу и средней молярной массе смеси:

$$N_{cm} = m_{cm} / M_{cm} = m_{cm} / \sum (n_i M_i). \quad (1.8)$$

Если величина потока задана в массовых единицах, а его состав в массовых долях, мольный расход реакционной смеси можно найти по формуле:

$$N_{cm} = m_{cm} \cdot \sum_i (g_i / M_i). \quad (1.9)$$

Массовый расход смеси рассчитывают по ее мольному расходу и составу:

$$m_{cm} = N_{cm} \cdot \sum_i (n_i M_i). \quad (1.10)$$

1.1.2. Газы и их смеси

Согласно закону Авогадро, при одинаковых условиях одно и то же число молекул любого газа занимает один и тот же объем. С другой стороны, 1 моль любого вещества содержит одинаковое число частиц. Таким образом, при нормальных условиях ($P_0 = 101,325$ кПа и $T_0 = 273,15$ К) 1 кмоль любого газа занимает объем 22,4 m^3 . В этом случае мольный расход смеси находят по ее объемному расходу:

$$N_{cm} = V_{cm}/22,4. \quad (1.11)$$

Измерения объемов газов обычно проводят в условиях, отличных от нормальных. Для приведения объема газа к нормальным условиям можно пользоваться уравнением, объединяющим законы Бойля-Мариотта и Гей-Люссака

$$PV/T = P_0V_0/T_0 \quad (1.12)$$

Здесь V – объем газа при давлении P и температуре T ; V_0 – объем газа при нормальном давлении P_0 и температуре T_0 .

Мольные массы газов вычисляют по уравнению Клапейрона - Менделеева

$$PV = mRT/M, \quad (1.13)$$

где P – давление газа, кПа; V – объем, m^3 ; m – масса, кг; M – молярная масса, кг/кмоль; R – универсальная газовая постоянная (8,314 кДж/кмоль·К)

Рассмотренные соотношения справедливы лишь при очень малых давлениях.

Воздух представляет собой природную газовую смесь, состав которой для технических расчетов приведен в табл. 1.1.

Таблица 1.1.

Состав воздуха для технических расчетов

Компоненты воздуха	O ₂	N ₂
Мольные(объемные) доли, n (%)	0,21	0,79
Массовые доли, g	0,23	0,77

Различные газы смешиваются друг с другом в любых соотношениях. При этом каждый газ, входящий в состав смеси, характеризуется своим парциальным давлением. По закону Дальтона давление смеси газов, химически не взаимодействующих

друг с другом, равно сумме давлений газов, составляющих смесь.

Парциальное давление i -го компонента p_i в газовой смеси определяется его мольной долей в этой смеси:

$$p_i = P \cdot n_i. \quad (1.14)$$

где P - общее давление, кПа.

Таблица 1.2.

Давление насыщенного водяного пара ($P_{\text{н.п.}}$) при различных температурах

$T, {}^{\circ}\text{C}$	$P_{\text{н.п.}}, \text{kPa}$	$T, {}^{\circ}\text{C}$	$P_{\text{н.п.}}, \text{kPa}$
0	0,61	50	12,3
10	1,23	60	19,9
20	2,34	70	31,2
30	4,24	80	47,4
40	7,37	100	101,3

Плотность любого газа или газовой смеси ρ ($\text{кг}/\text{м}^3$) можно рассчитать по формуле:

$$\rho_{(P,T)} = M/V_{(P,T)}, \quad (1.15)$$

где $V_{(P,T)}$ – объем газовой смеси при данных условиях.

Для идеальных газов и их смесей при нормальных условиях

$$\rho_{n,i} = M_i / 22,4 \quad \text{и} \quad \rho_{n,cm} = M_{cm} / 22,4. \quad (1.16)$$

1.1.3. Способы выражения концентрации растворов

Процентная концентрация соответствует массе растворенного вещества в 100 г раствора. Так, 100 г 12% раствора КОН содержит 12 г КОН и 88 г воды.

Эквивалентной массой называется масса одного эквивалента вещества в г/моль и представляет собой четное от деления мольной массы атомов элемента на его валентность в данном химическом соединении.

Эквиваленты кислот могут быть вычислены как четное от деления их мольных масс на основность. Так эквиваленты кислот HCl , HNO_3 , H_2SO_4 равны 36,46, 63,01 и $98/2 = 49$ г соответственно.

Эквиваленты оснований - это четное от деления их мольной массы на валентность металла или, что то же самое, на кислотность основания. Так эквиваленты NaOH, Ca(OH)₂ и Al(OH)₃ равны соответственно 40, 74/2 = 36 и 78/3 = 26 г.

Эквивалент соли может быть вычислен как четное от деления ее мольной массы на произведение числа ионов металла и его валентности. Таким образом, эквиваленты солей NaCl и KNO₃ численно равны их мольным массам, а для MgSO₄, AlCl₃, Al₂(SO₄)₃ эквиваленты составляют соответственно 1/2, 1/3 и 1/6 их мольных масс.

Число эквивалентов растворенного вещества, содержащихся в 1 л раствора, выражает эквивалентную концентрацию (нормальность). Однонормальным (1N) называется раствор, в 1 л которого содержится 1 г-эквивалент растворенного вещества.

Молярность определяется количеством г-моль вещества, растворенного в 1000 мл раствора, например, 3M раствор Na₂SO₄ соответствует 3 · 142 = 426 г в литре. В химической технологии широко используются комбинированные оценки содержания вещества в смеси:

- мольно-объемная концентрация в потоке $C_i^N = N_i / V_{cm}$ [кмоль/м³];
- массово-объемная концентрация в потоке $C_i^m = m_i / V_{cm}$ [кг/м³].

Связь между этими концентрациями определяется выражением: $C_i^N = C_i^m \cdot M_i^{-1}$.

1.1.4. Степень превращения и выход продуктов

Степень превращения - это отношение израсходованного в реакции количества реагента к его исходному количеству. Для реакции A ⇌ R степень превращения компонента A находят по формуле:

$$X_A = \frac{N_{A,0} - N_A}{N_{A,0}}, \quad (1.17)$$

где N_{A,0} и N_A - начальное и текущее (конечное) количество (в нашем случае – мольный расход) компонента A.

При задании количества вещества в массовых единицах справедливо выражение

$$X_A = \frac{m_{A,0} - m_A}{m_{A,0}}. \quad (1.18)$$

Из (1.17) и (1.18) следует, что

$$N_A = N_{A,0} (1 - X_A), \quad (1.19)$$

$$m_A = m_{A,0} (1 - X_A). \quad (1.20)$$

Равновесная степень превращения X_A^* характеризует максимальную глубину протекания *обратимого* ХТП в определенных условиях. Связь X_A с X_A^* задается соотношением $X_A = \alpha_x \cdot X_A^*$, где $0 \leq \alpha_x \leq 1$ - доля приближения реальной степени превращения к равновесной.

Для реакции общего вида $\nu_A A + \nu_B B \rightleftharpoons \nu_R R + \nu_S S \pm Q$ X_A^* связана с K_p выражением:

$$K_p = \left(\frac{P}{1 + \frac{\Delta\nu}{\nu_A} n_{A,0} X_A^*} \right)^{\Delta\nu} \frac{(n_{R,0} + \frac{\nu_R}{\nu_A} n_{A,0} X_A^*)^{\nu_R}}{n_{A,0} (1 - X_A^*)^{\nu_A}} \cdot \frac{(n_{S,0} + \frac{\nu_S}{\nu_A} n_{A,0} X_A^*)^{\nu_S}}{(n_{B,0} - \frac{\nu_B}{\nu_A} n_{A,0} X_A^*)^{\nu_B}}, \quad (1.21)$$

где $K_p = k_1/k_2$, а k_1, k_2 - константы скоростей прямой и обратной реакций соответственно.

Константу равновесия берут из справочных данных либо рассчитывают по величине приращения энергии Гиббса:

$$K_T^0 = e^{\Delta G_T / RT}, \quad (1.22)$$

где ΔG_T - термодинамическая движущая сила ХТП (приращение энергии Гиббса в ходе химических превращений).

Энергию Гиббса при температуре Т находят из уравнения:

$$\Delta G_T = I_1 - \Delta a \cdot T \cdot \ln T - \frac{\Delta b}{2} T^2 - \frac{\Delta c}{6} T^3 + \frac{\Delta c'}{2T} - \frac{\Delta d}{12} T^4 + I_2 T \quad (1.23)$$

Здесь I_1 и I_2 - постоянные для данной реакции величины, которые вычисляют по стандартным значениям изменения энталпии и энтропии:

$$\Delta H_{298} = \sum \nu'_i \Delta H'_{298,i} - \sum \nu''_i \Delta H''_{298,i} \quad \text{и} \quad \Delta G_{298} = \sum \nu'_i \Delta G'_{298,i} - \sum \nu''_i \Delta G''_{298,i}. \quad (1.24)$$

Отсюда:

$$I_1 = \Delta H_{298} - \Delta a \cdot 298 - \frac{\Delta b}{2} 298^2 - \frac{\Delta c}{3} 298^3 + \frac{\Delta c'}{298} - \frac{\Delta d}{4} 298^4 \quad (1.25)$$

$$I_2 = \frac{\Delta G_{298} - \Delta H_{298}}{298} + \Delta a \cdot (1 + \ln 298) + \Delta b \cdot 298 + 0,5 \Delta c \cdot 298^2 - \frac{\Delta c'}{2 \cdot 298^2} + \frac{\Delta d}{12} \cdot 298^3. \quad (1.26)$$

Значения коэффициентов и стандартные значения ΔH_{298} , ΔG_{298} и ΔS_{298} при $T=298$ К и $P=101,325$ кПа берут из таблиц (см. Приложения).

Если нет необходимых значений $\Delta G_{298,i}$, но есть $\Delta H_{298,i}$ и $\Delta S_{298,i}$, то используют формулу (1.27) (см. Приложение 1):

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S. \quad (1.27)$$

Как видно, расчет X_A^* по совокупности приведенных выше формул требует значительных усилий, что существенно ограничивает их применение.

Полученное значение X_A^* используют в дальнейшем для расчета материального и теплового баланса реактора.

Выходом продукта Φ_R называется отношение практического выхода продукта $N_{R,p}$ к его максимально возможному (теоретическому) количеству $N_{R,t}$:

$$\Phi_R = \frac{N_{R,p}}{N_{R,t}} \cdot 100\% \quad (1.28)$$

Величину $N_{R,t}$ рассчитывают по уравнению химической реакции, используя выражения (1.23), (1.24).

Связь между Φ_R и X_A выражается соотношениями:

- для необратимых реакций $\Phi_R = X_A$;

- для обратимых реакций $\Phi_R = \frac{X_A}{X_A^*}$.

1.2. Расчет по уравнению химической реакции

В химической реакции общего вида $v_A A + v_B B \rightleftharpoons v_R R + v_S S \pm Q$ вещества реагируют в соответствии с соотношением стехиометрической эквивалентности:

$$\frac{N_{A,0} - N_A}{v_A} = \frac{N_{B,0} - N_B}{v_B} = \frac{N_R - N_{R,0}}{v_R} = \frac{N_S - N_{S,0}}{v_S}, \quad (1.29)$$

где $N_{i,0}$ – мольные количества веществ до начала химической реакции, N_i – текущие (конечные) количества, v_i – стехиометрические коэффициенты.

Количество всех учащиков и продуктов реакции ($N_{i,xp}$) рассчитывают по любому из веществ ($N_{A,0}$), количество которого известно:

$$N_{i,xp} = \frac{v_i}{v_A} \cdot N_{A,0} \cdot X_A; \quad (1.30)$$

$$m_{i,xp} = \frac{v_i}{v_A} \cdot \frac{M_i}{M_A} \cdot m_{A,0} \cdot X_A. \quad (1.31)$$

Здесь m и M – масса и молярная масса веществ соответственно.

1.4. Расчет расходной части баланса

На выходе из реактора (расходная часть баланса) поток состоит из продуктов реакции, непрореагировавших исходных веществ (при $X_A < 1$), и веществ, не участвующих в химических превращениях (инертов). Количество каждого компонента в расходной части баланса рассчитывают по формуле:

$$N_i = N_{i,0} - N_{i,xp}, \quad (1.32)$$

где $N_{i,xp}$ – количество вещества, израсходованного (для исходных) или образовавшегося (для продуктов) в результате реакции.

1.5. Сводная таблица материального баланса

Для реакции типа $v_A A + v_B B \leftrightarrow v_R R + v_S S$, протекающей в присутствии инерта I , результаты расчета материального баланса рекомендуется представлять в табличном виде (табл.1.3):

Таблица 1.3.

Сводная таблица материального баланса

В-во	M_i , кг/кмоль	ПРИХОД		РЕАКЦИЯ		РАСХОД	
		$N_{i,0}$, кмоль/ч	$m_{i,0}$, кг/ч	v_i	$N_{i,x}$, кмоль/ч	N_i , кмоль/ч	m_i , кг/ч
A	M_A	$N_{A,0}$	$m_{A,0}$	v_A	$N_{A,0} \cdot X_A$	$N_{A,0} - N_{A,xp}$	$N_A \cdot M_A$
B	M_B	$N_{B,0}$	$m_{B,0}$	v_B	$\frac{v_B}{v_A} N_{A,0} \cdot X_A$	$N_{A,0} - N_{A,xp}$	$N_B \cdot M_B$
R	M_R	$N_{R,0}$	$m_{R,0}$	$-v_R$	$\frac{v_R}{v_A} N_{A,0} \cdot X_A$	$N_{R,0} - N_{R,xp}$	$N_R \cdot M_R$

S	M _S	N _{S,0}	m _{S,0}	-v _S	$\frac{-v_S}{v_A} N_{A,0} X_A$	N _{S,0} - N _{S,xp}	N _S · M _S
И	M _И	N _{И,0}	M _{И,0}	-	-	N _И =N _{И,0}	N _И · M _И
ВСЕГО		$\Sigma N_{i,0}$	$\Sigma m_{i,0}$			ΣN_i	Σm_i

При необходимости состав равновесной смеси можно представить в мольных либо массовых долях:

$$n_i(\vartheta_i) = \frac{n_{i,0} \pm \frac{v_i}{v_A} n_{A,0} X_A}{1 + \frac{\Delta v_i}{v_A} n_{A,0} X_A} \quad (1.33)$$

$$g_i = \frac{g_{i,0} \pm \frac{v_i}{v_A} \frac{M_i}{M_A} g_{A,0} X_A}{1 + \frac{\Delta(v_i M_i)}{v_A M_A} g_{A,0} X_A}, \quad (1.34)$$

где "--" относится к исходным реагентам, "+" - к продуктам, v - стехиометрические коэффициенты; $\Delta v = v_R + v_S - (v_A + v_B)$; $\Delta(v_i M_i) = v_R M_R + v_S M_S - v_A M_A - v_B M_B$.

1.6. Примеры решения задач

1.6.1. Простейшие упражнения

Пример 1

Сколько граммов соли и воды содержится в 800 г 12% раствора NaNO₃?

Решение

Масса растворенной соли составляет 12% от массы раствора

$$800 \cdot 12/100 = 96 \text{ г},$$

а масса растворителя – 88% от массы раствора: $800 \cdot 88/100 = 704 \text{ г}$.

Пример 2

Сколько граммов HCl следует растворить в 250 мл г воды для получения 10% раствора HCl?

Решение

250 граммов воды составляют 90% массы раствора, а масса HCl – 10% массы раствора или $250 \cdot 10/90 = 27,7 \text{ г}$.

Пример 3

Сколько граммов 10% раствора H_2SO_4 потребуется для взаимодействия с 100 мл 13,7% раствора Na_2CO_3 плотностью 1,145 г/см³.

Решение

Масса 100 мл раствора составляет $100 \cdot 1,145 = 114,5$ г. В нем содержится $114,5 \cdot 0,137 = 15,68$ г Na_2CO_3 . Определив молярные массы Na_2CO_3 и H_2SO_4 , из уравнения реакции $Na_2CO_3 + H_2SO_4 = Na_2SO_4 + CO_2 + H_2O$ по пропорции находим необходимое количество серной кислоты $15,68 \cdot 98,06 / 106 = 14,5$ г, а 10%-ного раствора H_2SO_4 потребуется: $14,5 \cdot 100 / 10 = 145$ г.

Пример 4

Сколько мл 32,5% раствора NH_3 плотностью 0,888 г/см³ требуется для образования сульфата аммония $(NH_4)_2SO_4$ с 250 мл 27,3% раствора H_2SO_4 плотностью 1,2 г/см³?

Решение

Масса раствора кислоты составляет $250 \cdot 1,2 = 300$ г.

Раствор содержит $300 \cdot 0,273 = 81,9$ г H_2SO_4 .

По уравнению реакции $2NH_3 + H_2SO_4 = (NH_4)_2SO_4$ вычисляем массу амиака, пошедшего на реакцию: $34,06 \cdot 81,9 / 98,08$ г.

Этому количеству амиака соответствуют

$34,06 \cdot 81,9 \cdot 100 / 98,08 \cdot 32,5$ г или $34,06 \cdot 81,9 \cdot 100 / 98,08 \cdot 32,5 \cdot 0,888 = 98,6$ мл.

Пример 5

Сколько граммов Na_2CO_3 прореагирует со 100 мл 4N раствора HCl ?

Решение

Вычислим массу HCl в 100 мл 4N раствора:

1000 мл 4N раствора содержат $36,46 \cdot 4$ г HCl

100 мл 4N раствора - x г

$$x = 36,46 \cdot 4 \cdot 0,1 \text{ г.}$$

По уравнению реакции $\frac{Na_2CO_3}{106} + \frac{2HCl}{2 \cdot 36,46} = 2NaCl + H_2O + CO_2$ находим:

106 г Na_2CO_3 - $2 \cdot 36,46$ г HCl



$$y = 21,2 \text{ г.}$$

Пример 6

Вычислить парциальное давление 570 мл газа, собранного над водой при температуре 20°C и давлении 104,1 кПа.

Решение

Полное давление складывается из двух величин: парциального давления самого газа и давления насыщенного водяного пара (см. табл. 1.2). Следовательно, парциальное давление газа в данном случае равно $104,1 - 2,34 = 101,76 \text{ кПа}$. Приводя измененный объем газа к нормальным условиям, следует подставить в уравнение не общее давление газовой смеси (104,1 кПа), а парциальное давление газа (101,76 кПа):

$$V_0 = \frac{PVT_0}{P_0T} = \frac{101,76 \cdot 570 \cdot 273}{101,325 \cdot (273 + 20)} = 533 \text{ мл.}$$

Если не учесть поправку на давление паров воды, то вместо найденного объема получим

$$V_0 = \frac{PVT_0}{P_0T} = \frac{104,1 \cdot 570 \cdot 273}{101,325 \cdot (273 + 20)} = 546 \text{ мл.}$$

Ошибка составляет 13 мл, т.е. около 2,5%, что можно допустить только при ориентировочных расчетах.

1.6.2. Расчет состава равновесной смеси и степени превращения

Пример 7

Рассчитать состав равновесной смеси и установить связь между X_A^* и константой равновесия K_p при давлении P для газофазной реакции $2A \leftrightarrow R + S$. Исходные количества веществ: $N_{A,0}; N_{R,0} = N_{S,0} = 0$; степень превращения вещества A - X_A ;

Решение

$$K_p = \frac{p_R \cdot p_S}{p_A^2} = \frac{P \cdot n_R \cdot P \cdot n_S}{P^2 \cdot n_A^2} = \frac{n_R \cdot n_S}{n_A^2}$$

Рассчитаем мольные доли компонентов равновесной смеси, используя таблицу 1.3.

Таблица 1.4.

В-во	M _i , кг/кмо ль	ПРИХОД	РЕАКЦИЯ		РАСХОД	$n_i = \frac{N_i}{\sum N_i} i$
		N _{i,0} , кмоль/ч	v _i	N _{i,x} , кмоль/ч	N _i , кмоль/ч	
A	M _A	N _{A,0}	v _A	N _{A,0} ·X _A	N _{A,0} ·(1 - X _A)	$\frac{N_{A,0}(1 - X_A)}{N_{A,0}} = 1 - X_A$
R	M _R	N _{R,0}	-v _R	- $\frac{v_R}{v_A} N_{A,0} \cdot X_A$	$\frac{1}{2} N_{A,0} \cdot X_A$	$\frac{1}{2} \frac{N_{A,0} \cdot X_A}{N_{A,0}} = \frac{X_A}{2}$
S	M _S	N _{S,0}	-v _S	- $\frac{v_S}{v_A} N_{A,0} \cdot X_A$	$\frac{1}{2} N_{A,0} \cdot X_A$	$\frac{1}{2} \frac{N_{A,0} \cdot X_A}{N_{A,0}} = \frac{X_A}{2}$
ВСЕГО		$\Sigma N_{i,0}$			$\Sigma N_i = N_{A,0}$	1

По формуле (1.1) получим значения n_i для каждого компонента равновесной смеси (см. табл. 1.4).

Подставляем полученные значения в выражение для K_p:

$$K_p = \frac{P^2 \cdot X_A^2}{4 \cdot P^2 (1 - X_A)^2}.$$

Извлекая из обеих частей уравнения квадратный корень, получим:

$$\sqrt{K_p} = \frac{X_A}{2(1 - X_A)}. \text{ Отсюда } 2\sqrt{K_p} - 2X_A\sqrt{K_p} = X_A, \text{ а } X_A = \frac{2\sqrt{K_p}}{1 + 2\sqrt{K_p}}$$

1.6.3. Расчет материального баланса обратимых реакций

Задача 1

На окисление сернистого ангидрида по реакции $2SO_2 + O_2 \rightleftharpoons 2SO_3 + Q$ поступает N₀ = 500 кмоль/ч SO₂. Для окисления используют воздух в стехиометрическом количестве. X_{SO2} = 0,8. Рассчитать материальный баланс процесса.

Решение

Рассчитываем количество SO₂, вступившего в химическую реакцию:

$$N_{SO2,xp} = N_{SO2,0} \cdot X_{SO2};$$

По уравнению химической реакции определяем количество кислорода и серного ангидрида:

$$N_{O_2, \text{xp}} = \frac{\nu_{O_2}}{\nu_{SO_2}} N_{SO_2} \cdot X_{SO_2} = \frac{1}{2} \cdot 500 \cdot 0,8 = 200 \text{ кмоль/ч}$$

$$N_{SO_3, \text{xp}} = \frac{-\nu_{SO_3}}{\nu_{SO_2}} N_{SO_2, 0} \cdot X_{SO_2} = \frac{-2}{2} 500 \cdot 0,8 = -400 \text{ кмоль/ч}$$

Из воздуха вместе с кислородом поступит азот (см. табл.1.1):

$$N_{N_2} = \frac{0,79}{0,21} N_{O_2} = 3,76 \cdot 200 = 752 \text{ кмоль/ч}$$

Найденные значения для кислорода и азота заносим в приходную часть баланса. Кислород, как второй участник химического взаимодействия, попадает также в столбец «Реакция». Азот – инертный компонент, в реакции не участвует, поэтому в расходе его количество остается неизменным. Далее решение выполняем в табличном виде (табл.1.5).

Таблица 1.5.

Сводная таблица материального баланса

В-во	M _i , кг/кмоль	ПРИХОД		РЕАКЦИЯ		РАСХОД	
		N _{i,0} , кмоль/ч	m _{i,0} , кг/ч	v _i	N _{i,x} , кмоль/ч	N _i , кмоль/ч	m _i , кг/ч
SO ₂	64	500	500·64=32000	2	500·0,8=400	500 – 400=100	6400
O ₂	32	200	32·200=6400	1	$\frac{1}{2} 500 \cdot 0,8 = 200$	200 – 200=0	0
N ₂	28	752	752·28=21056	0	0	752 – 0=752	21056
SO ₃	80	0	0	-2	$\frac{-2}{2} 500 \cdot 0,8 = -400$	0-(-400)=400	32000
ВСЕГО		1452	59456			1252	59456

Внимание! Баланс должен сходиться только в массовых единицах. В мольных единицах он может сходиться лишь в том случае, если реакция идет без изменения объема.

ема.

Задача 2

На окисление сернистого ангидрида по реакции $2SO_2 + O_2 \rightleftharpoons 2SO_3 + Q$ поступает $N_0 = 500$ кмоль/ч газовой смеси, состоящей из четырех индивидуальных компонентов (мол. доли): $n_{SO_2}=0,15$; $n_{O_2}=0,20$; $n_{SO_3}=0$; $n_{N_2}=0,65$. Степень превращения $X_{SO_2} = 0,8$. Рассчитать материальный баланс процесса.

Решение

Решение выполняем в табличной форме по следующей схеме:

- Рассчитываем мольное и массовое количество компонентов в приходе:

$$N_{i,0} = N_0 \cdot n_i; m_{i,0} = N_{i,0} \cdot M_i;$$

- Рассчитываем количество компонентов, участвующих в химической реакции;
- Рассчитываем мольные и массовые количества компонентов в расходе.

Решение задачи приведено в табл. 1.6.

Таблица 1.6.

Таблица материального баланса

В-во	M_i , кг/кмоль	ПРИХОД		РЕАКЦИЯ		РАСХОД	
		$N_{i,0}$, кмоль/ч	$m_{i,0}$, кг/ч	v_i	$N_{i,xp}$, кмоль/ч	N_i , кмоль/ч	m_i , кг/ч
SO_2	64	$500 \cdot 0,15 = 75$	$75 \cdot 64 = 4800$	2	$75 \cdot 0,8 = 60$	$75 - 60 = 15$	$15 \cdot 64 = 960$
O_2	32	$500 \cdot 0,2 = 100$	$100 \cdot 32 = 3200$	1	$75 \cdot 0,8 \cdot 1/2 = 30$	$100 - 30 = 70$	$70 \cdot 32 = 2240$
SO_3	80	0	0	-2	$75 \cdot 0,8 \cdot -2/2 = -60$	$0 + 60 = 60$	$60 \cdot 80 = 4800$
N_2	28	$500 \cdot 0,65 = 325$	$325 \cdot 28 = 9100$	0	0	325	$325 \cdot 28 = 9100$
ВСЕГО		500	17100			470	17100

При компьютерном расчете в среде пакета EXCEL оперируем адресами клеток:

- для заполнения столбца D: в клетку D3 вносим значение $=\$B\$9*C3$, а затем копируем это произведение в клетки D4:D6. В клетке D7 получаем значение суммы, используя значок автосуммы Σ ;
- для заполнения столбца E в клетку E3 вносим произведение $=D3*C3$ и копируем его в клетки E4:E6. В клетке E7 получаем значение суммы, используя зна-

чок автосуммы Σ ;

- для заполнения столбца G: в клетку G3 вносим значение =\$D\$3*\$B\$10, в клетку G4 - =\$D\$3*\$B\$10* F4/F3, в клетку G5 - =\$D\$3*\$B\$10* F5/F3. В клетке G6 значение равно 0;
- для заполнения столбца H в клетку H3 вносим значение =D3-G3 и копируем его в клетки H4:H6. В клетке H7 получаем значение суммы, используя значок автосуммы Σ ;
- для заполнения столбца I в клетку I3 вносим произведение =H3*B3 и копируем его в клетки I4:I6. В клетке I7 получаем значение суммы, используя значок автосуммы Σ .

Решение с использованием программы EXCEL приведено в табл.1.7.

Таблица 1.7.

Расчет материального баланса с использованием программы EXCEL

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	
1				ПРИХОД			РЕАКЦИЯ		РАСХОД	
2	<i>В-во</i>	<i>M_i,кг/кмоль</i>	<i>n_{i,0}</i>	<i>N_{i,0},кмоль/ч</i>	<i>m_{i,0},кг/ч</i>	<i>vⁱ</i>	<i>N_{i,xr},кмоль</i>	<i>N_i,кмоль/ч</i>	<i>m_i,кг/ч</i>	
3	SO ₂	64	0,15	75	4800	2	60	15	960	
4	O ₂	32	0,2	100	3200	1	30	70	2240	
5	SO ₃	80	0	0	0	-2	-60	60	4800	
6	N ₂	28	0,65	325	9100	0	0	325	9100	
7	ВСЕГО		1	500	17100			470	17100	
8										
9	<i>No=</i>		<i>500</i>	<i>кмоль/ч</i>						

Задача 3

На синтез аммиака по реакции $N_2+3H_2 \Leftrightarrow 2NH_3 + Q$ поступает 50000 кг/ч газовой смеси, состоящей из четырех индивидуальных компонентов (мол. доли): $n_{H_2,0}=0,75$, $n_{N_2,0}=0,15$, $n_{NH_3,0}=0,05$, $n_{CH_4,0}=0,05$. Степень превращения водорода $X_{H_2} = 0,18$. Рассчитать материальный баланс процесса.

Решение

Исходный поток задан в массовых единицах, а его состав – в мольных долях. Для приведения размерностей состава и расхода к одним единицам измерения следует предпринять одно из следующих действий:

- рассчитать молярную массу смеси по формуле (1.6), а затем мольный расход смеси по формуле (1.8) либо

- пересчитать мольный состав потока в массовый по формуле (1.4).

В решении, представленном в табл. 1.8, реализован первый путь.

Ход расчета:

- По формуле (1.6) рассчитываем молярную массу смеси и получаем $M_{cm} = 7,35$ кг/кмоль. При компьютерном расчете в клетку B12 вводим выражение: $=C3*B3+C4*B4+C5*B5+C6*B6;$
- По формуле (1.7) находим мольный расход смеси. При компьютерном расчете в клетку B13 вводим выражение $=B9/B12$. $N_{0,cm} = 6802,72109$ кг/кмоль.

Далее решаем по схеме, приведенной в задаче 1.

Решение (с использованием пакета EXCEL) приведено в табл.1.8.

Таблица 1.8.

Расчет материального баланса с использованием программы Excel

A	B	C	D	E	F	G	H	I
1		<i>ПРИХОД</i>			<i>РЕАКЦИЯ</i>		<i>РАСХОД</i>	
2	<i>B-во</i>	<i>Mi, кг/кмоль</i>	<i>ni, 0</i>	<i>Ni, 0, кмоль</i>	<i>ti, 0, кг/ч</i>	<i>vi</i>	<i>Ni,xp, кмоль/ч</i>	<i>Ni, кмоль/ч</i>
3	H ₂	2	0,75	5102,041	10204,08	3	918,3673469	4183,673469
4	N ₂	28	0,15	1020,408	28571,43	1	306,122449	714,2857143
5	NH ₃	17	0,05	340,1361	5782,313	-2	-612,244898	952,3809524
6	CH ₄	16	0,05	340,1361	5442,177	0	0	340,1360544
7	<u>ВСЕГО</u>		<u>1</u>	<u>6802,721</u>	<u>50000</u>			<u>6190,47619</u>
8								
9	<i>m0=</i>	50000	кг/ч					
10	<i>XH₂=</i>	0,18						
11								
12	<i>M cm=</i>	7,35	кг/кмоль					
13	<i>N0=</i>	6802,72109	кмоль/ч					

Задача 4

На синтез аммиака по реакции $N_2 + 3H_2 = 2NH_3 + Q$ поступает 50000 кмоль/ч газовой смеси, состоящей из четырех индивидуальных компонентов (масс. доли): $g_{H_2,0}=0,15$, $g_{N_2,0}=0,55$, $g_{NH_3,0}=0,20$; $g_{CH_4,0}=0,10$. Степень превращения водорода X_{H_2} - 0,18. Рассчитать материальный баланс процесса.

Решение

Исходный поток задан в мольных единицах, а его состав – в массовых долях. Следует пересчитать состав потока из массовых долей в мольные по формуле (1.5). Далее решать по схеме, приведенной в задаче 1.

Ход расчета:

1. Рассчитываем мольные доли компонентов потока (см. столбец D в таблице).
- в клетку D12 вводим выражение: =C3/B3+C4/B4+C5/B5+C6/B6 и получаем 0,112658;
 - в столбец D вводим формулы для расчета n_i . В клетку D3: =C3/B3/\$D\$12; в клетку D4: =C4/B4/\$D\$12 и т.д.

Решение с использованием пакета EXCEL приведено в табл.1.9.

Таблица 1.9.

Расчет материального баланса с использованием программы Excel

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1				ПРИХОД			РЕАКЦИЯ		РАСХОД	
2	<i>B-во</i>	<i>Mi, кг/кмоль</i>	<i>gi, 0</i>	<i>ni</i>	<i>Ni, 0, кмоль</i>	<i>m, кг/ч</i>	<i>v</i>	<i>Ni, хр, км</i>	<i>Ni, кмоль</i>	<i>m, кг/ч</i>
3	H ₂		2	0,15	0,665734	33286,71	66573,4	3	5991,6	27295,1
4	N ₂		28	0,55	0,174359	8717,949	244103	1	1997,2	6720,75
5	NH ₃		17	0,2	0,104429	5221,445	88764,6	-2	-3994,4	9215,85
6	CH ₄		16	0,1	0,055478	2773,893	44382,3	0	0	2773,89
7	ВСЕГО			1	1	50000	443823			46005,6
8										
9	<i>N0=</i>		50000	кмоль/ч						
10	<i>XH2=</i>		0,18							
11										

1.6.4. Расчет материального баланса обратимых реакций, протекающих при смешении газовых потоков

Задача 5

На паровую конверсию метана по реакции $CH_4 + H_2O = 3H_2 + CO - Q$ поступает два потока:

- $V_{0,1}=1000 \text{ м}^3/\text{ч}$, состав (мольн. доли): $n_{CH_4}=0,5$, $n_{CO}=0,3$, $n_{H_2}=0,1$, $n_{N_2}=0,1$;
- $m_{0,2}=2000 \text{ кг/ч}$, состав (мольн. доли): $n_{H_2O}=0,7$, $n_{H_2}=0,2$, $n_{CO}=0,1$.

$X_{CH_4} = 0,9$. Рассчитать материальный баланс процесса.

Решение

Рассчитываем приходные части баланса для первого и второго потоков отдельно:

- 1-й поток: по формуле (1.11) $N_{0,1} = 1000/22,4 = 44,643(\text{кмоль/ч})$, далее - мольные и массовые количества всех компонентов;
- 2-й поток: по формуле (1.6) $M_{0,2} = \sum(n_i \cdot M_i)$, а затем $N_{0,2} = m_0 / M_{0,2}$:

$$M_{0,2} = 18 \cdot 0,7 + 2 \cdot 0,2 + 28 \cdot 0,1 = 12,6 + 0,4 + 2,8 = 15,8 (\text{кг/кмоль});$$

$$N_{0,2} = 2000 / 15,8 = 126,58 (\text{кмоль/ч}).$$

- Суммируем данные по обоим потокам в третьей сводной таблице общего вида.

Далее решаем по аналогии с задачей 1.

Решение задачи с использованием программы EXCEL представлено в табл.1.10.

Таблица 1.10.

Расчет материального баланса с использованием программы Excel

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J		
1	ПРИХОД 1 ПОТОКА					ПРИХОД 2 ПОТОКА					
2	<i>В-во</i>	<i>M_i,кг/кмоль</i>	<i>n_i</i>	<i>N_{i,0},кмоль/ч</i>	<i>m_{i,0},кг/ч</i>	<i>В-во</i>	<i>M_i,кг/кмоль</i>	<i>n_i</i>	<i>N_{i,0},кмоль</i>	<i>m_{i,0},кг/ч</i>	
3	CH ₄		16	0,5	22,32142857	357,1429	H ₂ O	18	0,7	88,60759	1594,937
4	CO		28	0,3	13,39285714	375	H ₂	2	0,2	25,31646	50,63291
5	H ₂		2	0,1	4,464285714	8,928571	CO	28	0,1	12,65823	354,4304
6	N ₂		28	0,1	4,464285714	125					
7	ВСЕГО			1	44,64285714	866,0714	ВСЕГО		1	126,5823	2000
8											
9	N _{0,1}	44,6428571	кмоль/ч				m _{0,2}	2000	кг/ч		
10							M _{0,2}	15,8	кг/кмоль		
11							N _{0,2}	126,58228	кмоль/ч		
12											
13	<i>Сводная таблица материального баланса</i>										
14	<i>В-во</i>	<i>M_i,кг/кмоль</i>	ПРИХОД		РЕАКЦИЯ		РАСХОД				
15			<i>N_{i,0},кмоль</i>	<i>m_{i,0},кг/ч</i>	<i>v_i</i>	<i>N_{i,xp},кмоль/ч</i>	<i>M_i,кмоль</i>	<i>t_{i,0},кг/ч</i>			
16	CH ₄	16	22,321	357,1428571	1	20,09	2,23214	35,71429			
17	CO	28	26,051	729,4303797	-1	-20,1	46,1404	1291,93			
18	H ₂	2	29,781	59,56148282	-3	-60,3	90,0486	180,0972			
19	N ₂	28	4,4643	125	0	0	4,46429	125			
20	H ₂ O	18	88,608	1594,936709	1	20,09	68,5183	1233,33			
21	ВСЕГО		171,23	2866,071429				211,404	2866,071		
22											
23	XCH ₄	0,9									

Задача 6

На окисление сернистого ангидрида по реакции $2\text{SO}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2\text{SO}_3 + \text{Q}$ поступает два потока:

- $N_{0,1}=2000$ кмоль/ч, состав (мольн. доли): $n_{\text{SO}2}=0,8$; $n_{\text{SO}3}=0,1$; $n_{\text{N}2}=0,1$;
- $N_{0,2}=15000$ кмоль/ч, состав - воздух,.

Степень превращения $X_{\text{SO}2} = 0,9$. Рассчитать материальный баланс процесса.

Решение

Для расчетов используем состав воздуха в мольных долях, приведенный в табл. 1.1. Рассчитываем состав каждого потока отдельно, а затем в сводной таблице используем суммарный поток. Решение с помощью программы EXCEL представлено в табл.1.11.

Таблица 1.11.

Расчет материального баланса с использованием программы EXCEL

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	
1	ПРИХОД 1 ПОТОКА					ПРИХОД 2 ПОТОКА				
2	<i>B-во</i>	<i>M_i, кг/кмоль</i>	<i>n_i</i>	<i>N_{i,0}, кмоль</i>	<i>m_{i,0}, кг/ч</i>	<i>B-во</i>	<i>M_i, кг/кмоль</i>	<i>n_i</i>	<i>N_{i,0}, кмоль</i>	<i>m_{i,0}, кг/ч</i>
3	SO ₂	64	0,8	1600	102400	O ₂	32	0,21	3150	331800
4	SO ₃	80	0,1	200	16000	N ₂	28	0,79	11850	100800
5	N ₂	28	0,1	200	5600					
6	ВСЕГО		1	2000	124000	ВСЕГО		1	15000	432600
7										
8	N _{0,1}	2000	кмоль/ч			N _{0,2}	15000	кмоль/ч		
9	<i>X_{SO2}</i>	0,9								
10	<i>Сводная таблица материального баланса</i>									
11	<i>B-во</i>	<i>M_i, кг/кмоль</i>	ПРИХОД		РЕАКЦИЯ		РАСХОД			
12			<i>N_{i,0}, кмоль</i>	<i>m_{i,0}, кг/ч</i>	<i>v_i</i>	<i>N_{i,xp}, кмоль/ч</i>	<i>N_i, кмоль/ч</i>	<i>m_i, кг/ч</i>		
13	SO ₂	64	1600	102400	2	1440	160	10240		
14	SO ₃	80	200	16000	-2	-1440	1640	131200		
15	O ₂	32	3150	100800	1	720	2430	77760		
16	N ₂	28	12050	337400	0	0	12050	337400		
17	ВСЕГО		17000	556600			16280	556600		

1.6.5. Расчет материального баланса обратимых реакций при заданной производительности реактора

В химической технологии широко распространены задачи, в которых исходной величиной служит производительность по целевому продукту или по какому-либо компоненту входного потока. При этом обычно задают только состав входного потока, а его величину необходимо рассчитывать. Лишь после этого переходят к составлению материального баланса процесса. Рассмотрим 2 метода решения подобных задач.

1. Расчет массовой величины входного потока m_0 комбинированием формул:

$$m_0 = \frac{m_R v_A M_A}{v_R M_R g_{A,0} X_A} \quad (1.30)$$

$$m_0 = \frac{N_R v_A \sum_i (n_{i,0} M_i)}{v_R M_R n_{A,0} X_A} \quad (1.31)$$

Здесь m_R и N_R - массовая (кг/ч) и мольная (кмоль/ч) производительность реактора по веществу R соответственно.

2. Расчет величины входного потока по "условному" потоку.

Решение задач сводят к выполнению следующих этапов:

- Принимают, что на вход реактора поступает поток с некоторым условным расходом, например, $N_{o, \text{ усл}} = 1000 \text{ кмоль/ч}$;
- По условному расходу и мольному составу потока рассчитывают материальный баланс процесса, как показано выше;
- По пропорции находят реальный расход входного потока N_o , пользуясь заданной производительностью реактора по компоненту R:

$$N_o = N_{o, \text{ усл}} \cdot m_R / m_{R, \text{ усл}}, \quad (1.32)$$

где m_R - массовая производительность реактора по продукту R, $m_{R, \text{ усл}}$ – то же для условного входного потока.

- Повторно решают задачу, но уже для реально полученного расхода N_o . Состав реального потока в объемных или массовых долях остается неизменным.

Задача 7

Рассчитать материальный баланс процесса $2SO_2 + O_2 \rightleftharpoons 2SO_3 + Q$, если производительность реактора по SO_3 (m_{SO_3}) = 30000 кг/ч; $X_{SO_2} = 0,8$; состав потока: $n_{SO_2} = 0,15$; $n_{O_2} = 0,2$; $n_{SO_3} = 0$; $n_{N_2} = 0,65$.

Решение способом 1

По (1.30) находим $m_0 = \frac{30000 \cdot 2 \cdot (64 \cdot 0,15 + 32 \cdot 0,2 + 28 \cdot 0,65)}{2 \cdot 80 \cdot 0,15 \cdot 0,8} = 106875 \text{ кг/ч}$, что соответствует

$N_0 = \frac{m_0}{M_{\text{пл}}} = \frac{106875}{34,2} = 3125 \text{ кмоль/ч}$. Далее решаем как задачу 1.

Решение способом 2

1. Расчет материального баланса для условного потока $N_{o, \text{ усл}} = 1000 \text{ кмоль/ч}$ представлен в табл. 1.12.

Таблица 1.12.

Материальный баланс для условного входного потока

В-во	M_i , кг/кмоль	ПРИХОД		РЕАКЦИЯ		РАСХОД	
		$N_{i,0, \text{ усл}}$ кмоль/ч	$m_{i,0, \text{ усл}}$ кг/ч	v_i	$N_{i,xp}$, кмоль/ч	$N_{i, \text{ усл}}$ кмоль/ч	$m_{i, \text{ усл}}$ кг/ч
SO ₂	64	1000 · 0,15 = 150	150 · 64 = 9600	2	150 · 0,8 = 120	150 - 120 = 30	30 · 64 = 1920

O ₂	32	1000·0,2=200	200·32=6400	1	120·1/2=60	200-60=140	140·32=4480
SO ₃	80	0	0	-2	120·-2/2=-120	0+120=120	120·80=9600
N ₂	28	1000·0,65=650	650·28=18200	0	0	650	650·28=18200
ВСЕГО		1000	34200			940	34200

2. Составляем пропорцию для определения реального расхода входного потока:

$$N_o = 1000 \cdot 30000 / 9600 = 3125 \text{ (кмоль/ч);}$$

3. Составляем таблицу материального баланса для реального входного потока.

Таблица 1.13.

Расчет материального баланса для реального потока 3125 кмоль/ч

В-во	M _i , кг/кмоль	ПРИХОД		РЕАКЦИЯ		РАСХОД	
		N _{i,0} , кмоль/ч	m _{i,0} , кг/ч	v _i	N _{i,xp} , кмоль/ч	N _i , кмоль/ч	m _i , кг/ч
SO ₂	64	3125·0,15 = 468,75	468,75·64= = 30000	2	468,75·0,8= = 375	468,75 -375= = 93,75	93,75·64=6000
O ₂	32	3125·0,2= = 625,0	625,0·32= = 20000	1	375·1/2= = 187,5	625-187,5= = 437,50	437,5·32=14000
SO ₃	80	0	0	-2	375·-2/2= = -375	0+375= = 375,0	375,0·80=30000
N ₂	28	3125·0,65 = 2031,25	2031,25·28= = 56875	0	0	2031,25	56875
ВСЕГО		3125,0	106875			3037,50	106875

Решение контролировать по заданной производительности в расходной части баланса – m_{SO3,pacx} = 30000 кг/ч

Задача 8

Рассчитать материальный баланс процесса $2SO_2 + O_2 \leftrightarrow 2SO_3 + Q$, если производительность реактора по SO₃ (m_{SO3}) = 30000 кг/ч; степень превращения X_{SO2} = 0,8. Исходный поток образуется смешением двух потоков в объемном соотношении 1:2. Состав 1 потока: n_{SO2}=0,95; n_{SO3}=0,05; состав второго – воздух. Рассчитать материальный баланс процесса.

Решение способом 1

Определяют состав суммарного потока на входе:

$$n_{SO_2,0} = \frac{0,95 \cdot 1 + 0 \cdot 2}{1+2} = 0,3167$$

$$n_{SO_3,0} = \frac{0,05 \cdot 1 + 0 \cdot 2}{1+2} = 0,0167$$

$$n_{O_2,0} = \frac{0 \cdot 1 + 0,21 \cdot 2}{1+2} = 0,1400$$

$$n_{N_2,0} = \frac{0 \cdot 1 + 0,79 \cdot 2}{1+2} = 0,5267 .$$

По формуле (1.30) получаем:

$$m_0 = \frac{30000 \cdot 2 \cdot (64 \cdot 0,3167 + 80 \cdot 0,0167 + 32 \cdot 0,1400 + 28 \cdot 0,5267)}{2 \cdot 80 \cdot 0,3167 \cdot 0,8} = 60436,3357 \text{ кг/ч.}$$

Далее решают как задачу 1.1.

Решение способом 2

1. Принимаем $N_{0,1,\text{ усл}} = 1000$ кмоль/ч и второго $N_{0,2,\text{ усл}} = 2000$ кмоль/ч. Рассчитываем приход для обоих условных потоков, а затем сводную таблицу материального баланса. Далее решаем как задачу 7. В табл.1.14 представлено решение с использованием программы Excel.

Таблица 1.14.

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J								
1	ПРИХОД 1 ПОТОКА					ПРИХОД 2 ПОТОКА											
2	В-во	M _i , кг/кмоль	n _i	Ni,0, кмоль	m _{i,0} , кг/ч	В-во	M _i , кг/кмоль	n _i	Ni,0, кмоль	m _{i,0} , кг/ч							
3	SO ₂	64	0,95	950	60800	O ₂	32	0,21	420	26880							
4	SO ₃	80	0,05	50	4000	N ₂	28	0,79	1580	126400							
5	N ₂	28	0	0	0												
6	ВСЕГО		1	1000	64800	ВСЕГО		1	2000	153280							
7	N _{0,1}	1000 кмоль/ч				N _{0,2}	2000 кмоль/ч										
8	Сводная таблица материального баланса для условной смеси:																
9	В-во	M _i , кг/кмоль	ПРИХОД		РЕАКЦИЯ		РАСХОД										
10			Ni,0, кмоль	m _{i,0} , кг/ч	n _i	Ni,x _p , кмоль/ч	Ni, кмоль	m _i , кг/ч									
11	SO ₂	64	950	60800	2	760	190	12160									
12	SO ₃	80	50	4000	-2	-760	810	64800									
13	O ₂	32	420	13440	1	380	40	1280									
14	N ₂	28	1580	44240	0	0	1580	44240									
15	ВСЕГО		3000	122480			2620	122480									
16	XSO ₂	0,8			30000	кг/ч											
17	Рассчитываем реальный расход смеси по пропорции:																
18	N ₀	= 3000*30000/64800=	1388,889 кг/ч														
19	Пересчитываем состав суммарного потока в мольные доли по формуле (1.1) и составляем																
20	таблицу материального баланса:																
21	nSO ₂	0,316667															
22	nSO ₃	0,016667															
23	nO ₂	0,14															
24	nN ₂	0,526667															
25	Всего	1															
26	Таблица материального баланса																
27	В-во	M _i , кг/кмоль	n _i	ПРИХОД		РЕАКЦИЯ		РАСХОД									
28				Ni,0, кмоль	m _{i,0} , кг/ч	n _i	Ni,x _p , кмоль/ч	Ni, кмоль/ч	m _i , кг/ч								
29	SO ₂	64	0,3167	439,8148	28148,15	2	351,9	87,96296	5629,63								
30	SO ₃	80	0,0167	23,14815	1851,852	-2	-352	375	30000								
31	O ₂	32	0,14	194,4444	6222,222	1	175,9	18,51852	592,5926								
32	N ₂	28	0,5267	731,4815	20481,48	0	0	731,4815	20481,48								
33	ВСЕГО		1	1388,889	56703,7			1212,963	56703,7								
34																	

Далее решаем как задачу 1:

1.6.6. Расчет материального баланса при одновременном протекании нескольких реакций

В простейшем случае такие задачи описывают реакции горения газовых смесей. При этом количество воздуха, необходимое для процесса горения, рассчитывают по стехиометрическим уравнениям реакций. Решение включает следующие этапы:

- рассчитывают мольное и массовое количество каждого компонента исходного газового потока;
- записывают уравнения всех химических превращений, возможных в данной системе;

- по химическим уравнениям рассчитывают количество воздуха, необходимое для реакций горения, а также количество продуктов реакций;
- рассчитывают материальный баланс процесса.

Задача 9

Рассчитать материальный баланс процесса горения смеси веществ $N_o = 3000$ кмоль/ч состава $n_{N_2}=0,2$; $n_{C_2H_6}=0,4$; $n_{C_2H_4}=0,3$; $n_{CO_2}=0,1$ в воздухе (избыток воздуха - 15%). $X_i = 1$.

Решение

1. Рассчитываем мольный расход каждого компонента горючего газа (табл. 1.15).

Таблица 1.15.

Мольный расход компонентов горючего газа

Вещество	M_i , кг/кмоль	n_i	$N_{i,0}$, кмоль/ч
N_2	28	0,2	$3000 \cdot 0,2 = 600$
C_2H_6	30	0,4	$3000 \cdot 0,4 = 1200$
C_2H_4	28	0,3	$3000 \cdot 0,3 = 900$
CO_2	44	0,1	$3000 \cdot 0,1 = 300$
ВСЕГО		1	3000

2. По стехиометрическим уравнениям реакций рассчитываем количество кислорода, необходимое для полного сгорания компонентов смеси:

- по реакции (1) : $2C_2H_6 + 7O_2 \rightarrow 4CO_2 + 6H_2O$

$$N_{O_2,1} = \frac{7}{2} N_{C_2H_6,0} = \frac{7}{2} 1200 = 4200 \text{ (кмоль/ч);}$$

- по реакции (2) : $C_2H_4 + 3O_2 \rightarrow 2CO_2 + 2H_2O$

$$N_{O_2,2} = \frac{3}{1} N_{C_2H_4,0} = \frac{3}{1} 900 = 2700 \text{ (кмоль/ч);}$$

3. Суммарное количество кислорода, необходимое для обеих реакций, с учетом избытка:

$$N_{O_2,\text{возд}} = (N_{O_2,1} + N_{O_2,2}) \cdot 1,15 = (4200 + 2700) \cdot 1,15 = 6900 \cdot 1,15 = 7935 \text{ (кмоль/ч);}$$

4. Рассчитываем мольный расход азота, пришедшего в реактор из воздуха вместе с кислородом $N_{N_2, \text{возд}}$:

$$N_{N_2, \text{возд}} = \frac{0,79}{0,21} N_{O_2, \text{возд}} = \frac{0,79}{0,21} 7935 = 29850,71 \text{ (кмоль/ч)};$$

5. Так как в исходном газовом потоке уже присутствовал азот, его общее количество на входе в реактор составит:

$$N_{N_2, \text{общ}} = N_{N_2, \text{возд}} + N_{N_2, 0} = 29850,71 + 600 = 30450,71 \text{ (кмоль/ч)};$$

6. Избыточное количество кислорода на выходе из реактора:

$$N_{O_2} = N_{O_2, \text{возд.}} - (N_{O_2, 1} + N_{O_2, 2}) = 7935 - 6900 = 1035 \text{ (кмоль/ч)};$$

7. Количество азота, вышедшее из реактора, остается неизменным: $N_{N_2} = N_{N_2, \text{общ}}$.

8. Количество образовавшихся продуктов:

- по реакции 1 : $2C_2H_6 + 7O_2 \rightarrow 4CO_2 + 6H_2O$

$$N_{CO_2, 1} = \frac{-4}{2} N_{C_2H_6, 0} = \frac{-4}{2} 1200 = -2400 \text{ (кмоль/ч)};$$

$$N_{H_2O, 1} = \frac{-6}{2} N_{C_2H_6, 0} = \frac{-6}{2} 1200 = -3600 \text{ (кмоль/ч)};$$

- по реакции 2 : $C_2H_4 + 3O_2 \rightarrow 2CO_2 + 2H_2O$

$$N_{CO_2, 2} = \frac{-2}{1} N_{C_2H_4, 0} = \frac{-2}{1} 900 = -1800 \text{ (кмоль/ч)};$$

$$N_{H_2O, 2} = \frac{-2}{1} N_{C_2H_4, 0} = \frac{-2}{1} 900 = -1800 \text{ (кмоль/ч)};$$

10. Суммируем аналогичные продукты по обеим реакциям:

$$N_{CO_2(1+2)} = -N_{CO_2, 1} - N_{CO_2, 2} = -2400 - 1800 = -4200 \text{ (кмоль/ч)};$$

11. С учетом CO_2 , поступающего на вход реактора, его суммарное количество на выходе составит: $N_{CO_2} = N_{CO_2, 0} - (-N_{CO_2(1+2)}) = 4200 + 300 = 4500 \text{ (кмоль/ч)}$;

12. Суммарное количество воды на выходе из реактора: $N_{H_2O} = 0 - (-N_{H_2O, (1+2)}) = 3600 + 1800 = 5400 \text{ (кмоль/ч)}$.

Результаты расчета сводим в таблицу материального баланса (табл.1.16). При решении задачи на компьютерах с помощью пакета Excel решение выполняется в такой же таблице.

Таблица 1.16.

Материальный баланс при одновременном протекании нескольких реакций

В-во	M_i , кг/кмоль	ПРИХОД		РЕАКЦИИ			РАСХОД	
		$N_{i,0}$, кмоль/ч	$m_{i,0}$, кг/ч	$v_{i,1}$	$v_{i,2}$	$N_{i,xp}$, кмоль/ч	N_i , кмоль/ч	m_i , кг/ч
C_2H_6	30	1200	36000	2	-	1200	-	-
C_2H_4	28	900	25200	-	1	900	-	-
CO_2	44	300	13200	-4	-2	-4200	4500	198000
O_2	32	7935	253920	7	3	6900	1035	33120
H_2O	18	-	-	-6	-2	-5400	5400	97200
N_2	28	30450,71	852619,88	-	-	-	30450,71	852619,88
ВСЕГО		40785,71	1180940				41385,71	1180940

Задача 10

Рассчитать материальный баланс процесса горения смеси веществ $V_o = 50000 \text{ м}^3/\text{ч}$ состава $g_{N_2}=0,2$; $g_{C_2H_6}=0,2$; $g_{C_2H_4}=0,05$; $g_{CH_4}=0,5$; $g_{CO_2}=0,05$ в воздухе (избыток – 15%). $X_i=1$.

Решение

Пример решения задачи в пакете EXCEL представлен в табл.1.17.

Таблица 1.17.

Решение

Объемный расход смеси, V_0 , м ³ /ч =	50000	Мольный объем, м ³ /кмоль =	22,4
Расчет мольного расхода смеси $N_0 = V_0 / 22,4$		2232,143	кмоль
Избыток воздуха, %	15	1,15	0,15

Пересчет состава потока из массовых долей в мольные: $n_i = g_i / M_i / \text{sum}(g_i / M_i)$

Расчет мольного расхода компонентов смеси $N_i = N_0 * n_i$

Расчет массового расхода компонентов смеси $m_i = N_i * M_i$ $\text{sum}(g_i / M_i) 0,047982$

Вещество	$M_i, \text{кг/кмоль}$	g_i	n_i	N_i	m_i
C ₂ H ₆	30	0,2	0,138942	310,1387166	9304,161
CH ₄	16	0,5	0,651291	1453,775234	23260,4
C ₂ H ₄	28	0,05	0,037217	83,07287052	2326,04
N ₂	28	0,2	0,148867	332,2914821	9304,161
CO ₂	44	0,05	0,023683	52,86455396	2326,04
ВСЕГО		1	1	2232,142857	46520,81

Расчеты по химическим уравнениям

Реакция 1			Реакция 2			Реакция 3		
$2\text{C}_2\text{H}_6 + 7\text{O}_2 = 4\text{CO}_2 + 6\text{H}_2\text{O}$			$\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 = \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$			$\text{C}_2\text{H}_4 + 3\text{O}_2 = 2\text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$		
В-во	v	$N_{i,\text{xp}}$	В-во	v	$N_{i,\text{xp}}$	В-во	v	$N_{i,\text{xp}}$
C ₂ H ₆	2	310,1387	CH ₄		1 1453,775	C ₂ H ₄		1 83,07287
O ₂	7	1085,486	O ₂		2 2907,55	O ₂		3 249,2186
H ₂ O	-6	-930,416	H ₂ O		-2 -2907,55	H ₂ O		-2 -166,146
CO ₂	-4	-620,277	CO ₂		-1 -1453,78	CO ₂		-2 -166,146
$N_{\text{O}_2,\text{xp}} = N_{\text{C}_2\text{H}_6} * 7/2$			$N_{\text{O}_2,\text{xp}} = N_{\text{CH}_4} * 2/1$			$N_{\text{O}_2,\text{xp}} = N_{\text{C}_2\text{H}_4} * 3/1$		
$N_{\text{H}_2\text{O},\text{xp}} = N_{\text{C}_2\text{H}_6} * -6/2$			$N_{\text{H}_2\text{O},\text{xp}} = N_{\text{CH}_4} * -2/1$			$N_{\text{H}_2\text{O},\text{xp}} = N_{\text{C}_2\text{H}_4} * -2/1$		
$N_{\text{CO}_2,\text{xp}} = N_{\text{C}_2\text{H}_6} * -4/2$			$N_{\text{CO}_2,\text{xp}} = N_{\text{CH}_4} * -1/1$			$N_{\text{CO}_2,\text{xp}} = N_{\text{C}_2\text{H}_4} * -2/1$		

Суммируем кислород по трем реакциям:	Всего О ₂ с учетом избытка:
$N_{\text{O}_2,\text{стех},1} = 1085,486$ кмоль/ч	$N_{\text{O}_2,\text{сумм}} = 4242,255 * 1,15 = 4878,593$ кмоль/ч
$N_{\text{O}_2,\text{стех},2} = 2907,55$ кмоль/ч	$N_{\text{O}_2,\text{изб}} = 636,3382$ кмоль/ч
$N_{\text{O}_2,\text{стех},3} = 249,2186$ кмоль/ч	С кислородом придет азота (из воздуха) N_{N_2} :
Всего 4242,255 кмоль/ч	$4878,592776 * 0,79/0,21 = 18352,8$ кмоль/ч

N_{N_2} и $N_{\text{O}_2,\text{сумм}}$ вносим в приходную часть баланса

Суммируем продукты по трем реакциям:

$$\text{NCO}_2: -2240,2 \text{ кмоль/ч} \quad \text{NH}_2\text{O}: -4004,11 \text{ кмоль/ч}$$

Учитывая, что исходная смесь содержала азот, необходимо:

в приходной части баланса сложить кол-во исходного азота и азота, пришедшего с воздухом:

$$\text{NN}_2,\text{расх} = 332,2915 + 18352,80139 = 18685,09 \text{ кмоль/ч}$$

Расходную часть баланса рассчитываем по формуле $\text{Нрасх} = \text{Нпр} - \text{Нxp}$

В расходной части баланса учитываем количество CO₂ в исходной смеси.

$$\text{NCO}_2,\text{расх} = 52,86455 - 2240,198408 = 2293,063 \text{ кмоль/ч}$$

В расход также переходит избыток кислорода;

Азот остается в том же количестве, что и в приходной части баланса.

Сводная таблица материального баланса:

В-во	$M_i, \text{кг/кмоль}$	ПРИХОД		РАСХОД	
		$N_i, \text{кмоль/ч}$	$m_i, \text{кг/ч}$	$N_i, \text{кмоль/ч}$	$m_i, \text{кг/ч}$
C ₂ H ₆	30	310,1387	9304,161	0	0
CH ₄	16	1453,775	23260,4	0	0
C ₂ H ₄	28	83,07287	2326,04	0	0
O ₂	32	4878,593	156115	636,3381881	20362,82
N ₂	28	18685,09	523182,6	18685,09288	523182,6
CO ₂	44	52,86455	2326,04	2293,062962	100894,8
H ₂ O	18	0	0	4004,112359	72074,02
ВСЕГО		25463,54	716514,2	25618,60639	716514,2

Если реакция проходит с изменением объема, а реакционная смесь содержит нестехиометрическое содержание веществ, рассчитывают коэффициент изменения объема смеси.

Пример

Рассчитать коэффициент изменения объема и долю стехиометрической смеси для реакции $A + 3B \rightleftharpoons 2R$, если исходная газовая смесь содержит (кмоль/м³):

$$C_{A,0} = 2, C_{B,0} = 6, C_{R,0} = 0,33.$$

Решение

$$\nu_A = 1, \nu_B = 3, \nu_R = 2, \nu_S = 0;$$

$$\alpha_B = \frac{\nu_{A,0}}{\nu_{B,0}} \cdot \frac{C_{B,0}}{C_{A,0}} = \frac{1}{3} \cdot \frac{6}{2} = 1; \quad \alpha_R = \frac{\nu_{A,0}}{\nu_{R,0}} \cdot \frac{C_{R,0}}{C_{A,0}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{0,33}{2} = 0,0825;$$

$$\xi = \frac{\nu_R - \nu_A - \nu_B}{\nu_A + \nu_B \alpha_B + \nu_R \alpha_R} = \frac{2 - 1 - 3}{1 + 3 \cdot 1 + 2 \cdot 0,0825} = -0,48019$$

Пример

- Рассчитать коэффициент изменения объема и долю стехиометрической смеси для реакции $SO_2 + 0,5O_2 \rightleftharpoons SO_3$, если исходная газовая смесь имеет состав (мол. доли): $SO_2 - 0,09; O_2 - 0,11; N_2 - 0,80$;

Решение

$$\nu_A = 1, \nu_B = 0,5, \nu_R = 1, \nu_S = 0;$$

$$\alpha_{O_2} = \frac{\nu_{SO_2}}{\nu_{O_2}} \cdot \frac{n_{O_2}}{n_{SO_2}} = \frac{1}{0,5} \cdot \frac{0,11}{0,09} = 2,444; \quad \alpha_{SO_3} = \frac{\nu_{SO_2}}{\nu_{SO_3}} \cdot \frac{n_{SO_3}}{n_{SO_2}} = \frac{1}{1} \cdot \frac{0}{0,09} = 0;$$

$$\xi = \frac{\nu_{SO_3} - \nu_{SO_2} - \nu_{O_2}}{\nu_{SO_2} + \nu_{O_2} \alpha_{O_2} + \nu_{SO_3} \alpha_{SO_3}} = \frac{1 - 1 - 0,5}{1 + 0,5 \cdot 2,444 + 1 \cdot 0} = -0,22502$$

2. РАСЧЕТ ТЕПЛОВОГО БАЛАНСА ХТП

2.1. Основные расчетные соотношения

Энергетический баланс отражает закон сохранения энергии, в соответствии с которым в замкнутой системе сумма всех видов энергии постоянна.

Чтобы применить этот закон к ХТП, все внутренние и внешние источники энергии рассматривают как элементы процесса. Это приводит к уравнению теплового баланса в виде:

$$Q_{уд} + Q_{то} + Q_{фп} + Q_{xp} = Q_{накопл}, \quad (2.1)$$

где $Q_{уд}=Q_{мп,прих}$ - $Q_{мп,расх}$; $Q_{то}=Q_{то,прих}-Q_{то,расх}$; $Q_{фп}=Q_{фп,прих}-Q_{фп,расх}$; $Q_{xp}=Q_{xp,прих}-Q_{xp,расх}$.

Здесь $Q_{мп,прих}$ и $Q_{мп,расх}$ - теплоты материальных потоков на входе и выходе из реактора или малой части реакционного объема; $Q_{то,прих}$ и $Q_{то,расх}$ - теплота, приходящая в реакционный объем и уходящая из него при теплообмене с окружающей средой; $Q_{фп,прих}$ и $Q_{фп,расх}$ - суммы теплот фазовых экзо- и эндотермических переходов; $Q_{xp,прих}$ - $Q_{xp,расх}$ - суммы теплот химических экзо- и эндотермических реакций; $Q_{накопл}$ - теплота, накопленная реакционным объемом (может быть положительной, отрицательной или равной нулю).

Если теплоту представить ее приращением в единице объема за малое время, то получим дифференциальную форму теплового баланса ХТП. В производственных условиях тепловой баланс обычно находят по начальному и конечному результатам:

1. Для вычисления $Q_{мп,прих}$ и $Q_{мп,расх}$ используют формулу

$$Q_{мп} = c_p \cdot T \cdot W, \quad (2.2)$$

где c_p - теплоемкость при температуре T ; W - расход потока. Расход потока может быть массовый, мольный или объемный в соответствии с размерностью теплоемкости c_p ($\text{кДж}/\text{кг}\cdot\text{К}$, $\text{кДж}/\text{кмоль}\cdot\text{К}$, $\text{кДж}/\text{м}^3\cdot\text{К}$).

Теплоемкость смеси компонентов находят по формуле:

$$c_{p,cm} = \frac{\sum_j (c_{p,j} \cdot W_j)}{\sum_j W_j} \quad (2.3)$$

где $c_{p,j}$ и W_j - теплоемкость и расход j -го компонента потока.

Теплоемкость газов существенно зависит от температуры и определяется по формуле:

$$c_{p,j} = a_j + b_j T + c_j T^2 + c'_j T^{-2} + d_j T^3. \quad (2.4)$$

Коэффициенты этого уравнения для j -го компонента реакционной смеси находят по таблицам (см. Приложение 1).

Процедура использования банка данных пакета САТРАПИС для подобных расчетов приведена ниже.

При вычислении Q_{mp} что используют также среднюю мольную теплоемкость \bar{c}_p (см. Приложение 2).

2. Вычисление Q_{to} проводят следующим образом:

- по изменению температуры охлаждающего агента

$$Q_{to} = c_{p,x} \cdot W_x (T_{x,h} - T_{x,k}), \quad (2.5)$$

где $c_{p,x}$ и W_x - теплоемкость и расход, $T_{x,h}$ и $T_{x,k}$ - начальная и конечная температуры хладагента, К.

Если $(T_{x,h} - T_{x,k}) > 0$, Q_{to} заносится в приходную часть баланса, если $(T_{x,h} - T_{x,k}) < 0$ - в расходную;

- по изменению температуры реакционной смеси от T_h до T_k при $Q_{\phi p} = 0$ и $Q_{xp} = 0$

$$Q_{to} = c_p \cdot W (T_k - T_h), \quad (2.6)$$

где c_p и W - теплоемкость и расход реакционной смеси;

- по параметрам теплообмена через стенку реактора

$$Q_{to} = \frac{\lambda}{\delta} \cdot \tau \cdot F \cdot (T_k - T_x) = k_{to} \cdot F \cdot (T_k - T_x), \quad (2.7)$$

где λ - коэффициент теплопроводности стенки, кДж/с·м·К; δ - толщина стенки, м; τ - время, с; F - поверхность теплообмена, м². Здесь $k_{to} = \frac{\lambda}{\delta} \cdot \tau$ - коэффициент теплопередачи, кДж/с·м²·К.

3. Теплоту фазовых переходов $Q_{\text{фп}}$ рассчитывают по формуле:

$$Q_{\text{фп}} = \sum q_{j,\text{фп}} W_{j,\text{фп}}, \quad (2.8)$$

где $q_{j,\text{фп}}$ - теплота фазового перехода, кДж/кмоль; $W_{j,\text{фп}}$ - количество j -го компонента, претерпевшее фазовое превращение, кмоль/с.

Значения $q_{j,\text{фп}}$ находят по таблицам [2]. Теплота экзотермических фазовых переходов (конденсация, кристаллизация, абсорбции, адсорбция и др.) заносится в приходную часть баланса ($Q_{\text{фп,прих}}$), а эндотермических (парообразование, плавление, растворение, десорбцию) – в расходную ($Q_{\text{фп,расх.}}$).

5. Тепловой эффект ХТП является алгебраической суммой тепловых эффектов всех реакций. Тепловые эффекты отдельных реакций q_{xp}^T при температуре процесса T в расчете на 1 кмоль ключевого компонента определяют по формуле

$$q_{xp}^T = q_{xp}^{T_0} + \int_{T_0}^T \Delta c_p dT, \quad (2.9)$$

где $\Delta c_p = \sum v_j' c_{pj}' - \sum v_j'' c_{pj}''$; v_j - стехиометрические коэффициенты; индекс ' относится к продуктам, а индекс '' - к исходным веществам.

Величину c_{pj} находят по формуле (2.4), а $q_{xp}^{T_0}$ - по формуле (2.10):

$$q_{xp}^{T_0} = -\Delta H_{T_0} = \sum_j v_j' \Delta H_{T_0,j}' - \sum_j v_j'' \Delta H_{T_0,j}'' \quad (2.10)$$

После преобразований и интегрирования получаем:

$$-q_{xp}^T = \Delta H_{T_0} + \Delta a(T_1 - T_0) + \frac{\Delta b}{2} (T_1^2 - T_0^2) + \frac{\Delta c}{3} (T_1^3 - T_0^3) - \Delta c' \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_0} \right) + \frac{\Delta d}{4} (T_1^4 - T_0^4) \quad (2.11)$$

где $\Delta a = \sum v_j' a_j' - \sum v_j'' a_j''$; $\Delta b = \sum v_j' b_j' - \sum v_j'' b_j''$; $\Delta c = \sum v_j' c_j' - \sum v_j'' c_j''$;

$$\Delta d = \sum v_j' d_j' - \sum v_j'' d_j''. \quad \Delta c' = \sum v_j' (c_j')' - \sum v_j'' (c_j'')''; \quad T_0 = 298K \quad (2.12)$$

Значения коэффициентов для (2.12), энталпии для (2.10) и теплового эффекта q_{xp}^T берут из таблиц [1, с. 136-137] (см. Приложение 1-3).

Чтобы рассчитать тепловой эффект химической реакции для конкретного количества прореагировавшего вещества, содержащегося во всей массе реакционной смеси, используют формулу

$$Q_{x,p}^T = q_{xp}^T \cdot N_{A,0} \cdot X_A / v_A, \quad (2.13)$$

где v_A - стехиометрический коэффициент при компоненте A.

При компьютерном расчете можно использовать пакет STR (базу данных пакета САТРАПИС). С помощью программы определяют физико-химические свойства многокомпонентных смесей и тепловой эффект реакций при заданных условиях:

- в пункте меню <Расчет физико-химических свойств смесей> выбирают подменю <Расчет свойств свободного потока> (если с данным потоком работали ранее) или <Обновить описание потока> (если данный состав или процесс рассматриваются впервые);
- указывают число веществ в системе и из базы данных выбирают необходимые вещества;
- задают состав потока и условия проведения процесса;
- выбирают желаемую размерность и получают результаты расчета теплофизических параметров - теплоемкость, плотность и др. свойства газовой смеси.

2.2. Примеры решения задач

Задача 1

Рассчитать $Q_{x,p}^T$ для процесса разложения 100 моль метана при температуре $T_1=1000\text{K}$ по реакции $CH_4 = C + 2H_2$ при $X_{CH_4} = 0,70$.

Решение

1. Используя Приложение 1, находим теплофизические характеристики веществ (табл.2.1):

Таблица 2.1.

Теплофизические характеристики веществ

B-во	v_j'	v_j''	A	$b \cdot 10^3$	$c \cdot 10^6$	$c' \cdot 10^{-5}$	$d \cdot 10^9$
CH ₄		1	4,750	12,00	3,03	0	-2,63
C	1		4,100	1,02	0	-2,10	0
H ₂	2		6,952	-0,4576	0,9563	0	-0,2079

2. По формулам (2.12):

$$\Delta a = 2 \cdot 6,952 + 4,11 - 4,750 = 13,264; \quad \Delta b = 2 \cdot (-0,4576) + 1,02 - 12,0 = 11,8952 \cdot 10^{-3};$$

$$\Delta c = -1,1174 \cdot 10^{-6}; \Delta c' = -2,10 \cdot 10^5; \Delta d = 2,2142 \cdot 10^{-9};$$

- По (2.10) рассчитываем $q_{xp}^{298} = 74955$ (Дж/ моль).

Подставляя эти величины в (2.11), получаем:

- $q_{xp}^{1000} = 74955 + 14986,6 = 89941,6$ (Дж/ моль).

3. При $v_{CH_4} = 1$, $X_{CH_4} = 0,70$, $N_{CH_4,0} = 100$ моль по формуле (2.13), получаем:

$$Q_{xp}^{1000} = 89941,6 \cdot 100 \cdot 0,70 = 6295906,065 \text{ (Дж)}.$$

Задача 2

Рассчитать тепловой баланс контактного аппарата для реакции $SO_2 + 0,5O_2 \rightleftharpoons SO_3 + q_{xp}^{T_0}$; объемный расход газовой смеси на входе $V_0 = 25000 \text{ м}^3/\text{ч}$; состав: $n_{SO_2} = 0,09$; $n_{O_2} = 0,11$; $n_{N_2} = 0,80$. $X_{SO_2} = 0,88$; Температура входящего газа $T_{вх} = 450^\circ\text{C}$. Потери в окружающую среду - 5% от прихода теплоты. Расчет провести для политермического, изотермического и адиабатического режимов при условиях:

1. Политермический режим (принять коэффициент теплопередачи через стенку реактора $k_{to} = 0,03 \text{ кДж}/\text{м}^2 \cdot \text{град} \cdot \text{с}$; температуру теплоносителя $T_x = 14^\circ\text{C}$):

- рассчитать поверхность трубчатого теплообменника F_{to} , если температура выходящей смеси $T_{вых.} = 450^\circ\text{C}$;
- определить температуру на выходе из реактора $T_{вых.}$, если известна поверхность трубчатого теплообменника ($F_{to} = 100 \text{ м}^2$).

2. Изотермический режим:

- рассчитать поверхность трубчатого теплообменника F_{to} ;

3. Адиабатический режим:

- рассчитать температуру газа на выходе из реактора.

Составим материальный баланс процесса:

$$N = V/22,4 = 11160,7 \text{ кмоль/ч}$$

В-во	М, кг/кмоль	ПРИХОД		ХР		РАСХОД	
		ni	Ni, кмоль/ч	mi, кг/ч	vi	Ni, кмоль/ч	ni, кмоль/ч
SO ₂	64	0,09	1004,46	64285,7	2	883,929	120,536
O ₂	32	0,11	1227,68	39285,7	1	441,964	785,714
SO ₃	80	0	0	0	-2	-883,93	883,929
N ₂	28	0,8	8928,57	250000		8928,57	250000
ВСЕГО		1	11160,7	353571		10718,8	353571

Таблица 2.3

Теплофизические характеристики веществ

В-во	n _{i,0}	n _i	v' _j	v'' _j	A	b 10 ⁻³	c 10 ⁻⁶	c' 10 ⁵	d 10 ⁻⁹	ΔH ₂₉₈ кал/моль	c _p кал/моль·К
											693 К
											723 К
SO ₂	0,2	0,021978022		1	6,157	13,84	-9,103	0	2,057	-70960	10,894
O ₂	0,1	0,010989011		0,5	8,643	0,202	0	1,03	0	0	7,402
SO ₃	0,1	0,307692308	1		13,7	6,42	0	3,12	0	-94450	13,86
N ₂	0,6	0,659340659			6,903	-0,375	1,93	0	-0,686	0	7,102
											7,12

1. По данным табл.2.3 рассчитаем среднюю мольную теплоемкость газовой смеси:

На вхो-

де: $c_p = 10,89 \cdot 0,2 + 7,402 \cdot 0,1 + 13,86 \cdot 0,1 + 7,102 \cdot 0,6 = 8,5662$ кал/моль·К

Пересчитаем в Дж/моль·К: $c_p = 8,5662 \cdot 4,186 = 35,8581132$ Дж/моль·К

2. $Q_{\text{пп прих.}} = 35,8581132 \cdot 2941,176471 \cdot 1000 \cdot 693 = 73087271905$ Дж/ч

3. По уравнению (2.11) тепловой эффект химической реакции при 693 К :

Δa=	3,2215	Δa(T ₁ -T ₀)=	1272,4925	$\Delta H = -23490$ $\text{кал/моль} = 4,186 \cdot -23490 = -98329,1$ Дж/моль	$q^{693} \text{ x.p.} = 22376,2631$ $\text{кал/моль} = 4,186 \cdot 22376,2631 = 93667,0371$ Дж/моль
Δb=	-0,007521	Δb/2(T ₁ ² -T ₀ ²)=	1472,028923		
Δc=	0,000009103	Δc/3(T ₁ ³ -T ₀ ³)=	929,5648761		
Δc'=	-260500	Δc'* (1/T ₁ -1/T ₀)=	498,2591979		
Δd=	-2·10 ⁻⁹	Δd/4*(T ₁ ⁴ -T ₀ ⁴)=	114,5507054		

4. По (2.13)

$$Q^{693} \text{ x.p.} = q^{693} \text{ x.p.} \cdot N_{\text{SO}_2} \cdot X_{\text{SO}_2} = 93667,0371 \cdot 588,2352941 \cdot 1000 \cdot 0,9 = 49588431429 \text{ Дж/ч}$$

Так как реакция экзотермическая, относим эту величину в приход.

5. Суммарное тепло в приходной части баланса составит:

$$Q_{\text{прих.}} = 73087271905 + 49588431429 = 122676000000 \text{ Дж/ч}$$

6. Потери тепла всегда относят к расходной части баланса:

$$Q_{t.\text{потерь}} = Q_{\text{прих}} \cdot 0,05 = 122676000000 \cdot 0,05 = 6133785167 \text{ Дж/ч};$$

Для политермического режима при температуре на выходе реактора 450°C :

- теплоемкость смеси $c_p = 10,975 \cdot 0,021978022 + 7,435 \cdot 0,010989011 + 13,965 \cdot 0,307692308 + 7,12 \cdot 0,659340659 = 9,31434066 \text{ кал/моль}\cdot\text{К} = 9,31434066 \cdot 4,186 = 38,98983 \text{ Дж/моль}\cdot\text{К};$

$$Q_{\text{мп расх.}} = 9,31434066 \cdot 2676,47059 \cdot 1000 \cdot 723 = 18024000 \text{ ккал/ч} = 75448761329 \text{ Дж/ч.}$$

Рассчитываем $Q_{\text{то}}$ по разности между суммой прихода и расхода:

Статья	ПРИХОД	РАСХОД
	$Q, \text{кДж/ч}$	$Q, \text{кДж/ч}$
$Q_{\text{м.п.}}$	73087271,9	75448761,33
$Q_{\text{x.p.}}$	49588431,43	0
$Q_{\text{т.потерь}}$	0	6133785,167
ВСЕГО	122675703,3	81582546,5

$$\begin{aligned} k_{\text{то}}, \text{Дж}/\text{м}^2 \cdot \text{град} \cdot \text{с} &= 0,03 \\ T_x, \text{K} &= 287 \\ T_{\text{вых}}, \text{K} &= 723 \end{aligned}$$

$$Q_{\text{то}} = \Delta Q = Q_{\text{прих}} - Q_{\text{расх}} = 122675703,3 - 81582546,5 = 41093156,84 \text{ кДж/ч}$$

- **Расчет поверхности теплообмена**

Из уравнения $\Delta Q = Q_{\text{то}} = F_{\text{то}} \cdot k_{\text{то}}(T_{\text{вых}} - T_x)$ рассчитаем $F_{\text{то}}$:

$$F_{\text{то}} = Q_{\text{то}} / (k_{\text{то}}(T_{\text{вых}} - T_x)) = 41093156,84 / (0,03 \cdot 3600 \cdot (723 - 287)) = 872,6885159 \text{ м}^2$$

Сводная таблица теплового баланса:

Статья	ПРИХОД	РАСХОД
	$Q, \text{кДж/ч}$	$Q, \text{кДж/ч}$
$Q_{\text{м.п.}}$	73087271,9	75448761,33
$Q_{\text{x.p.}}$	49588431,43	0
$Q_{\text{т.потерь}}$	0	6133785,167
$Q_{\text{то}}$	0	41093156,84
ВСЕГО	122675703,3	122675703,3

- **Расчет температуры на выходе из реактора**

При заданной поверхности теплообмена ($F_{\text{то}} = 100 \text{ м}^2$) для расчета температуры на выходе из реактора необходимо решить систему из двух уравнений:

$$Q_{to} = k_{to} F_{to} (T_{вых} - T_x);$$

$$Q_{to} = Q_{расх} - Q_{прих} = c_{p,вых} \cdot N_{расх} \cdot T_{вых} - Q_{прих}.$$

$$\left. \begin{array}{l} Q_{to} = k_{to} F_{to} (T_{вых} - T_x), \\ Q_{to} = Q_{дл.н} - Q_{и.н} = \tilde{n}_d \cdot N_{дл.н} \cdot \dot{O}_{дл.н} - Q_{и.н} \end{array} \right\}$$

$$\text{Отсюда } c_{p,вых} \cdot N_{расх} \cdot T_{вых} - Q_{прих} = k_{to} F_{to} (T_{вых} - T_x);$$

$$c_{p,вых} \cdot N_{расх} \cdot T_{вых} - Q_{прих} = k_{to} F_{to} T_{вых} - k_{to} F_{to} T_x;$$

$$\begin{aligned} T_{вых} &= (Q_{прих} - k_{to} F_{to} T_x) / (C_{p,вых} N_{вых} - k_{to} F_{to}) = (122675703,3 - 0,03 \cdot 3600 \cdot 100 \cdot 287) / \\ &(38,98983 \cdot 2676,47 - 0,03 \cdot 3600 \cdot 100) = 1278,13514 \text{ К}. \end{aligned}$$

Для изотермического режима $T_{вх} = T_{вых}$

Рассчитываем Q_{to} по разности между суммой приходной и расходной частями баланса :

Статья	ПРИХОД	РАСХОД
	$Q, \text{кДж/ч}$	$Q, \text{кДж/ч}$
$Q_{м.п.}$	73087271,9	72318107332
$Q_{x.p.}$	49588431,43	0
$Q_{т.потерь}$	0	6133785,167
ВСЕГО	122675703,3	72324241117

$$Q_{to} = 72324241117 - 122675703,3 = 72201565414 \text{ кДж/ч}$$

$$F_{to} = Q_{to} / (k_{to} (T_{вых} - T_x)) = 72201565414 / (0,03 * 3600 (723 - 287)) = 1533332,599 \text{ м}^2$$

Окончательная таблица теплового баланса:

Статья	ПРИХОД	РАСХОД
	$Q, \text{кДж/ч}$	$Q, \text{кДж/ч}$
$Q_{м.п.}$	73087271,9	72318107332
$Q_{x.p.}$	49588431,43	0
$Q_{т.потерь}$	0	6133785,167
Q_{to}	0	-72201565414
ВСЕГО	122675703,3	122675703,3

Для адиабатического режима $Q_{to}=0$

Для расчета $T_{вых}$ необходимо определить $Q_{м.п.}$ в расходной части баланса :

Статья	ПРИХОД	РАСХОД
	Q, кДж/ч	Q, кДж/ч
Q_{м.п.}	73087271,9	?
Q_{х.р.}	49588431,43	0
Q_{т.потерь}	0	6133785,167
Q_{то}	0	0
ВСЕГО	122675703,3	6133785,167

$$Q_{\text{м.п.}} = Q_{\text{прих}} - Q_{\text{т.потерь}} = 122675703,3 - 6133785,167 = 116541918,2 \text{ кДж/ч.}$$

Отсюда $T_{\text{вых}} = Q_{\text{м.п.расх}} / c_p * N_{\text{расх.}}$

Принимаем усредненное значение теплоемкости выходной смеси:

$$c_{p,ср} = (35,8581132 + 38,98983) / 2 = 37,4239716 \text{ Дж/моль.К ,а}$$

$$T_{\text{вых}} = 116541918,2 / (37,4239716 \cdot 2676,4706) = 1163,509173 \text{ К.}$$

3. РАСЧЕТ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ

3.1. Основные расчетные соотношения

Химическим реактором называется аппарат, в котором осуществляется ХТП или отдельные его стадии, включающие химические превращения.

По кинематике потоков на входе и выходе (режиму подачи реакционной смеси) различают реакторы периодического ($W_{\text{вх}}=W_{\text{вых}}=0$), непрерывного ($W_{\text{вх}}=W_{\text{вых}}>0$) и полупериодического ($W_{\text{вх}}>0$; $W_{\text{вых}}=0$ или $W_{\text{вх}}=0$; $W_{\text{вых}}>0$) действия.

Процессы, протекающие в таких реакторах, соответственно называют периодическими, непрерывными и полупериодическими. Все периодические и полупериодические процессы нестационарны, т.е. характеризуются изменением во времени параметров реакционной смеси.

Если время полного обмена реакционной смеси в реакторе назвать временем цикла $\tau_{\text{ц}}$, то при любой кинематике потока

$$\tau_{\text{ц}} = \tau_{\text{загр}} + \tau_{\text{хим.р.}} + \tau_{\text{выгр}}, \quad (3.9)$$

где $\tau_{\text{загр.}}$ и $\tau_{\text{выгр.}}$ - время загрузки и выгрузки; $\tau_{\text{хим.р.}}$ - продолжительность реакции, приводящей к заданной степени превращения. Если интервалы времени $\tau_{\text{загр.}}$, $\tau_{\text{хим.р.}}$ и $\tau_{\text{выгр.}}$ совпадают, процесс непрерывный и $\tau_{\text{ц}} = \tau_{\text{хим.р.}}$. Если эти интервалы не совпадают и следуют один за другим - процесс периодический и $\tau_{\text{ц}}$ находят по формуле (3.9). Если один из интервалов $\tau_{\text{загр.}}$ или $\tau_{\text{выгр.}}$ совпадает с $\tau_{\text{хим.р.}}$ - процесс полупериодический и $\tau_{\text{ц}} = \tau_{\text{загр.}} + \tau_{\text{хим.р.}}$ или $\tau_{\text{ц}} = \tau_{\text{хим.р.}} + \tau_{\text{выгр.}}$.

Однако во всех случаях с помощью характеристических уравнений находят время пребывания, равное $\tau_{\text{хим.р.}}$.

Для реакторов непрерывного действия связь времени пребывания реагентов с размерами реактора и скоростью потока выражается уравнением

$$\tau_y = V/W_1, \quad (3.1)$$

где τ_y - условное время полного обмена реакционной смеси в реакторе; V - объем реактора, м^3 ; W_1 - объемный расход реакционной смеси на входе, $\text{м}^3/\text{ч}$.

Для реактора с постоянным сечением

$$\tau_y = h/\omega_1, \quad (3.2)$$

где h – высота реактора, м; ω_1 - линейная скорость потока на входе, м/ч.

Связь времени пребывания реагентов с факторами технологического режима (концентрацией реагентов, температурой, давлением, степенью превращения и др.) описывается выражением

$$\tau_d = V/W_2 = f(C_{A,0}, X_A, T, P \dots). \quad (3.3)$$

Здесь τ_d - время, необходимое для достижения заданной степени превращения; W_2 - объемный расход реакционной смеси на выходе, $m^3/ч$. В общем случае

$$W_1 = W_0(1 + \xi_A X_{A,1}) \text{ и } W_2 = W_0(1 + \xi_A X_{A,2}), \quad (3.3')$$

где W_0 - расход потока при $X_A=0$; $X_{A,1}=\alpha_{x,1}X_A^*$; $X_{A,2}=\alpha_{x,2}X_A^*$ - степень превращения реагента A в потоках на входе и на выходе из реактора соответственно.

Здесь α_x – степень приближения к равновесной степени превращения.

Математическая модель или характеристическое уравнение реактора получается, если $\tau_y = \tau_d$ для реакций, протекающих без изменения объема, когда $\xi_A = 0$, т.е. при $W_1 = W_2 = W_0$:

$$\tau_d = V/W_0 = \tau_y = f(C_{A,0}, X_{A,1}, T, P, \dots). \quad (3.4)$$

$$\text{Если } \xi_A \neq 0, \tau_y = V/W_1 = \frac{V}{W_0(1 + \xi_A X_{A,1})} = f(C_{A,0}, X_{A,1}, T, P, \dots) \quad (3.5)$$

Умножив (3.5) на отношение приращений расходов при $X_{A,1}$ и $X_{A,2}$, получим:

$$\frac{V}{W_0(1 + \xi_A X_{A,1})} \frac{(1 + \xi_A X_{A,1})}{(1 + \xi_A X_{A,2})} = \frac{(1 + \xi_A X_{A,1})}{(1 + \xi_A X_{A,2})} f(C_{A,0}, X_{A,1}, T, P, \dots). \quad (3.6)$$

Так как $\tau_d = \frac{V}{W_0(1 + \xi_A X_{A,2})}$, окончательное выражение примет вид:

$$\tau_d = \frac{(1 + \xi_A X_{A,1})}{(1 + \xi_A X_{A,2})} f(C_{A,0}, X_{A,1}, T, P, \dots). \quad (3.7)$$

Определяя время пребывания по расходу при $X_A=0$, получаем выражение, позволяющее упростить совместное решение уравнений материального и теплового балансов реактора:

$$\tau_0 = \frac{V}{W_0} = (1 + \xi_A X_{A,1}) f(C_{A,0}, X_A, T, P...) . \quad (3.8)$$

По характеру движения технологических потоков, определяющему эффективность контакта между реагентами, различают гидродинамические режимы смешения и вытеснения.

Режим полного (идеального) смешения характеризуется одинаковым составом и, как следствие, одинаковыми значениями любых параметров реакционной смеси во всех точках занимаемого ею пространства. Изменения возможны только во времени.

Режим полного (идеального) вытеснения характеризуется максимально возможными различиями состава и всех параметров реакционной смеси как в пространстве, так и во времени.

Между этими предельными гидродинамическими режимами лежат промежуточные, близость которых к одному из идеальных режимов определяется по распределению времени пребывания отдельных компонентов реакционной смеси в реакторе. Однако при любом гидродинамическом режиме массообмен, сопровождающий химические превращения, описывается уравнениями материального баланса элементарного объема реакционной зоны (режим вытеснения) или всего реакционного объема (режим смешения).

В наиболее общей форме они имеют следующий вид:

- общая модель режима смешения:

$$\frac{d(C_A V)}{d\tau} = W_1 C_{A,1} - W_2 C_{A,2} - r_A V , \quad (3.10)$$

- общая модель режима вытеснения:

$$\frac{\partial C_A}{\partial \tau} = -\omega_x \frac{\partial C_A}{\partial x} - \omega_y \frac{\partial C_A}{\partial y} - \omega_z \frac{\partial C_A}{\partial z} + D \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right) - r_A . \quad (3.11)$$

Здесь x, y, z - расстояния по направлениям трехмерной системы координат, м; r_A - скорость реакции по компоненту A, кмоль/м³с; D - коэффициент молекулярной диффузии, м²/с, r – скорость химической реакции.

Для реакций различных порядков расчет скорости проводят по уравнениям:

$$r_A = k C_A^n \quad (3.12)$$

- реакция первого порядка: $n=1$: $r_A = k C_{A,0} (1-X_A);$
- реакция нулевого порядка: $n=0$: $r_A = k;$
- реакция n -го порядка: $n=n$ $r_A = k C_{A,0}^n (1-X_A)^n.$

Тепловая обстановка в реакторе определяется балансом теплоты материальных потоков на входе и выходе, экзо- и эндотермических фазовых переходов и химических превращений, принудительного нагрева и охлаждения реакционной смеси и естественного теплообмена с окружающей средой.

В наиболее общей форме тепловые режимы описываются уравнениями:

- при переносе массы смешением:

$$\frac{d(TV)}{d\tau} = (T_1 W_1 - T_2 W_2) \pm \frac{q_{x,p.}}{\rho c_p} r_A V \pm \frac{k_{0,i.}}{\rho c_p} \Delta T F \quad (3.13)$$

- при переносе массы вытеснением:

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = -\omega_x \frac{\partial T}{\partial x} - \omega_y \frac{\partial T}{\partial y} - \omega_z \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\lambda}{\rho c_p} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \pm \frac{q_{x,p.}}{\rho c_p} r_A \pm \frac{k_{0,i.}}{\rho c_p} \frac{\Delta T dF}{dV}. \quad (3.14)$$

Здесь $q_{x,p.}$ - тепловой эффект химической реакции, кДж/кмоль; ρ и c_p - средние плотность (кмоль/м³) и теплоемкость (кДж/кмоль·К); λ - коэффициент теплопроводности кДж/м·с·К; F - поверхность теплообмена, м²; ΔT - разность температур реакционной смеси и внешней среды, К; $k_{t,o.}$ – коэффициент теплообмена, кДж/м²·К·с.

Система уравнений (3.10) и (3.12) - это математическая модель всех типов реакторов смешения, а система уравнений (3.11) и (3.13) - всех типов реакторов вытеснения. При этом, если в (3.10) и (3.12) $D=0$ и $\lambda=0$, то эта система становится моделью реактора идеального вытеснения, а при $D \neq 0$ и $\lambda \neq 0$ - это модель реактора с гидродинамическим режимом вытеснения с частичным перемешиванием (реактор с промежуточным режимом). В последнем случае коэффициенты D и λ заменяются на $D_{\text{эфф.}}$ и $\lambda_{\text{эфф.}}$.

При построении моделей реакторов для упрощения принимаем, что ρC_p - величина постоянная, равная произведению средних значений плотности ρ и теплопроводности C_p реакционной смеси: $\rho c_p = 0,1204 \frac{P}{T_1} \sum c_{p,i} n_i$.

Реактор идеального смешения непрерывного действия

- реактор идеального смешения непрерывного действия с политермическим тепловым режимом (РИС-Н-П)

$$\tau_o = \frac{V}{W} = \frac{C_{A,0} X_A}{r_A}; \quad (3.15)$$

При изменении объема реакционной среды:

$$W_1(T_2 \frac{1 + \xi_A X_{A,2}}{1 + \xi_A X_{A,1}} - T_1) = \frac{q_{x,p,2}}{(\rho c_p)_2} r_{A,2} V - \frac{k_{\partial i}}{(\rho c_p)_2} (T_2 - T_c) F; \quad (3.16)$$

- реактор идеального смешения непрерывного действия с изотермическим тепловым режимом (РИС-Н-И)

$$\tau_o = \frac{V}{W_1} = \frac{C_{A,0} (X_{A,2} - X_{A,1})}{(1 - X_{A,1}) r_{A,1}}, \quad (3.17)$$

$$W_1 T_1 \xi_A \frac{(X_{A,2} - X_{A,1})}{(1 + \xi_A X_{A,1})} = \frac{q_{x,p,1}}{(\rho c_p)_1} r_{A,1} V - \frac{k_{\partial i}}{(\rho c_p)_1} (T_1 - T_c) F \quad (3.18)$$

- реактор идеального смешения непрерывного действия с адиабатическим тепловым режимом (РИС-Н-А)

$$\tau_o = \frac{V}{W_1} = \frac{C_{A,0} (X_{A,2} - X_{A,1})}{(1 - X_{A,1}) r_{A,2}}; \quad (3.19)$$

$$W_1 (T_2 \frac{1 + \xi_A X_{A,2}}{1 + \xi_A X_{A,1}} - T_1) = \frac{q_{x,p,2}}{(\rho c_p)_2} r_{A,2} V \quad (3.20)$$

Реактор идеального смешения периодического действия

- реактор идеального смешения периодического действия с политермическим тепловым режимом (РИС-П-П)

$$\tau_d = \tau_y = \tau, \quad (3.21)$$

$$d\tau = C_{A,0} \frac{d(X_A)}{(1 + \xi_A X_A^*) r_A} \quad (3.22)$$

$$\frac{dT}{d\tau} + \frac{\xi_A X_A}{1 + \xi_A X_A^* \alpha_x} T \frac{d\alpha_x}{d\tau} = \frac{q_{x,p.}}{\rho c_p} r_A - \frac{k_{t.o.}}{\rho c_p} \frac{(T - T_c)}{(1 + \xi_A X_A^* \alpha_x)} \frac{F}{V} \quad (3.20)$$

- реактор идеального смешения периодического действия с изотермическим тепловым режимом (РИС-П-И)

$$d\tau = C_{A,0} \frac{d(X_A^* \alpha_X)}{(1 + \xi_A X_A^* \alpha_X) r_A}; \quad (3.21)$$

$$\frac{\xi_A X_A^*}{1 + \xi_A X_A^* \alpha_x} T_1 \frac{d\alpha_x}{d\tau} = \frac{q_{x,p.}}{\rho c_p} r_A - \frac{k_{t.o.}}{\rho c_p} \frac{(T_1 - T_c)}{(1 + \xi_A X_A^* \alpha_x)} \frac{F}{V} \quad (3.22)$$

- реактор идеального смешения периодического действия с адиабатическим тепловым режимом (РИС-П-А)

$$d\tau = C_{A,0} \frac{d(X_A^* \alpha_X)}{(1 + \xi_A X_A^* \alpha_X) r_A}; \quad (3.23)$$

$$\frac{dT}{d\tau} + \frac{\xi_A X_A^*}{1 + \xi_A X_A^* \alpha_x} T \frac{d\alpha_x}{d\tau} = \frac{q_{x,p.}}{\rho c_p} r_A \quad (3.24)$$

Реактор идеального вытеснения

- реактор идеального вытеснения с политермическим тепловым режимом:

$$d\tau_y = \frac{dV}{W_0} = \frac{C_{A,0}(1 + \xi_A)d(X_A^* \alpha_X)}{(1 + \xi_A X_A^* \alpha_X)r_A} \quad (3.25)$$

$$\frac{dT}{d\tau_y} = \frac{1}{1 + \xi_A X_A^* \alpha_X} \left[\frac{q_{x,p.}}{\rho c_p} r_A - \frac{k_{d,i.}}{\rho c_p} (T - T_c) \frac{dF}{dV} \right]; \quad (3.26)$$

- реактор идеального вытеснения с изотермическим тепловым режимом:

$$d\tau_y = \frac{dV}{W_0} = \frac{C_{A,0}(1 + \xi_A)d(X_A^* \alpha_X)}{(1 + \xi_A X_A^* \alpha_X)r_A} \quad (3.27)$$

$$q_{xp}r_A = k_{\hat{o}\hat{i}}(T_1 - T_c) \frac{dF}{dV} \quad (3.28)$$

- реактор идеального вытеснения с адиабатическим тепловым режимом:

$$\frac{d\tau_y}{dV} = \frac{C_{A,0}(1 + \xi_A)d(X_A)}{W_0} \quad (3.29)$$

$$\frac{dT}{d\tau_y} = \frac{1}{1 + \xi_A X_A} \frac{q_{xp}}{\rho c_p} r_A \quad (3.30)$$

Приведенные модели описывают стационарные режимы работы РИС-Н и РИВ и нестационарные режимы РИС-П.

При выборе изотермического режима следует учитывать, что для его реализации в РИС-П и РИВ необходимо организовать переменный во времени (для РИС-П) и в пространстве (для РИВ) теплообмен с внешней средой.

Для РИС-П время пребывания не связано с объемом V и расходами W_1 и W_2 - здесь эти величины определяют время загрузки и выгрузки реакционной смеси:

$$\tau_{загр.} = V/W_1 \quad \text{и} \quad \tau_{выгр.} = V/W_2. \quad (3.31)$$

Характеристическое уравнение РИС-П дает «чистое» время реакции, необходимое для достижения заданной степени превращения реагентов ($X_{A,2}$). При $\xi=0$:

$$\tau_{\hat{a}} = C_{A,0} \int_{X_{A,1}}^{X_{A,2}} \frac{dX_A}{r_A}. \quad (3.32)$$

Чтобы определить объем такого реактора, кроме концентрации $C_{A,0}$, $X_{A,1}$ и $X_{A,2}$ задают еще и количество продукта N_R , которое требуется получить за один цикл:

$$V = \frac{N_R}{\frac{\nu_R}{\nu_A} C_{A,0} (X_{A,2} - X_{A,1})} . \quad (3.33)$$

Производительность РИС-П, кмоль/ч:

$$\Pi_R = \frac{V \frac{\nu_R}{\nu_A} C_{A,0} (X_{A,2} - X_{A,1})}{\tau_{\xi} + \tau_{xp} + \tau_{\hat{a}}} = \frac{V \frac{\nu_R}{\nu_A} C_{A,0} (X_{A,2} - X_{A,1})}{\frac{V}{W_1} + C_{A,0} \int_{X_{A,1}}^{X_{A,2}} \frac{dX_A}{r_A} + \frac{V}{W_2}} . \quad (3.34)$$

3.2. Примеры решения задач

Задача 1

Найти объем РИВ-И, необходимый для достижения степени превращения $X_{A,1} = 0,85$ для реакции $A \rightarrow R$ с константой скорости $k = 0,45 \text{ мин}^{-1}$. Объемный расход потока на входе $W_0 = 32 \text{ л/мин}$ при $C_{A,0} = 1 \text{ моль/л}$.

Решение

$$1. \text{Характеристическое уравнение} \quad \tau = \frac{V}{W_0} = C_{A,0} \int_{X_{A,0}}^{X_A} \frac{dX_A}{r_A}$$

$$2. \text{Кинетическое уравнение: } r_A = kC_{A,0}(1-X_A);$$

$$3. V = W_0 C_{A,0} \int_{X_{A,0}}^{X_{A,1}} \frac{dX_A}{kC_{A,0}(1-X_A)} = - \frac{W_0}{k} \ln(1-X_A) \Big|_{X_{A,0}}^{X_{A,1}}$$

$$V = - \frac{32}{0,45} \ln(1-0,85) = 135 \text{ л.}$$

Задача 2

Найти объем РИС-Н, необходимый для достижения степени превращения $X_{A,1} = 0,85$ для реакции $A \rightarrow R$ с константой скорости $k = 0,45 \text{ мин}^{-1}$. Объемный расход потока на входе $W_0 = 32 \text{ л/мин}$ при $C_{A,0} = 1 \text{ моль/л}$.

Решение

$$1. \text{Характеристическое уравнение} \quad \tau = \frac{V}{W_0} = C_{A,0} \frac{X_{A,1} - X_{A,0}}{r_A}$$

$$2. \text{Кинетическое уравнение: } r_A = kC_{A,0}(1-X_{A,1});$$

$$3. V = W_0 \frac{X_{A,1} - X_{A,0}}{k(1-X_{A,1})};$$

$$4. V = \frac{32 \cdot 0,85}{0,45(1-0,85)} = 402,96 \text{ (л.)}$$

Задача 3

Найти объем двухступенчатого каскада К-РИС-И, необходимый для достижения в первой ступени $X_{A,1} = 0,55$ и во второй $X_{A,2} = 0,85$ для реакции $A \rightarrow R$ с константами
©УГХТУ, кафедра общей химической технологии

скоростей $k_1 = k_2 = 0,45 \text{ мин}^{-1}$. Объемный расход потока на входе $W_0 = 32 \text{ л/мин}$ при $C_{A,0} = 1 \text{ моль/л}$.

Решение

1. Модель 1-й ступени: $\tau_1 = C_{A,0}(X_{A,1} - X_{A,0})/r_{A,1}$;
2. Модель 2-й ступени: $\tau_2 = C_{A,0}(X_{A,2} - X_{A,1})/r_{A,2}$.
3. Учитывая, что $r_{A,1} = k_1 C_{A,0}(1 - X_{A,1})$ и $r_{A,2} = k_2 C_{A,0}(1 - X_{A,2})$, запишем модель К-РИС:

$$\tau = \tau_1 + \tau_2 = \frac{C_{A,0}(X_{A,1} - X_{A,0})}{k_1 C_{A,0}(1 - X_{A,1})} + \frac{C_{A,0}(X_{A,2} - X_{A,1})}{k_2 C_{A,0}(1 - X_{A,2})}$$

4. Выразим объем К-РИС этого уравнения при $X_{A,0}=0$:

$$V = W_0 \left[\frac{X_{A,1} - X_{A,0}}{k_1(1 - X_{A,1})} + \frac{X_{A,2} - X_{A,1}}{k_2(1 - X_{A,2})} \right] = 32 \left[\frac{0,55}{0,45(1 - 0,55)} + \frac{0,3}{0,45(1 - 0,85)} \right] = 229,14 \text{ (л)}$$

Задача 4

Определить конечную температуру T_2 и степень превращения $X_{A,2}$, которые могут быть достигнуты в РИС-Н-А для реакции $A \rightarrow R+Q$.

Условия проведения ХТП:

- объем реакционного пространства $V=1 \text{ м}^3$;
- расход реакционной смеси $W_0 = 0,25 \text{ м}^3/\text{мин}$;
- температура потока на входе $T_1=300 \text{ K}$;
- начальная концентрация компонента А $C_{A,0}=2 \text{ кмоль/м}^3$;
- начальная степень превращения $X_{A,0}=0$;
- теплота химической реакции $q_{xp}=40000 \text{ кДж/кмоль}$;
- удельная теплоемкость реакционной смеси $c_p=0,8 \text{ кДж/кг K}$;
- плотность реакционной смеси $\rho=1110 \text{ кг/м}^3$;
- константа скорости реакции при $T_2 \text{ } k=0,5 \text{ мин}^{-1}$;

Решение

Используя приведенные выше соотношения, получим:

$V/W_0 = C_{A,0}X_{A,1}/[k C_{A,0}(1 - X_{A,1})]$. Отсюда $X_{A,1} = kV/(kV+W_0) = 0,5 \cdot 1 / (0,5 \cdot 1 + 0,25) = 0,667$ и

$$T_2 = T_1 - [q_{xp}C_{A,0}/\rho c_p] \cdot [kV/(kV+W_0)] = 300 - [-40000 \cdot 2 / 1110 \cdot 0,8] \cdot [0,5 \cdot 1 / (0,5 \cdot 1 + 0,25)] =$$

= 360 К.

Задача 5

Найти X_A для реакции $A \rightarrow R$ в РИС-Н-И, если объем реактора $V = 2 \text{ м}^3$, расход реакционной смеси $W = 0,5 \text{ м}^3/\text{мин}$, $X_{A,0} = 0$ и константа скорости $k = 0,5 \text{ мин}^{-1}$.

Решение

Получим выражение для степени превращения:

$X_{A,1} = (W_0 X_{A,0} + kV) / (kV + W_0)$. При $X_{A,0}=0$ это выражение преобразуется в

$$X_{A,1} = kV / (kV + W_0) = 0,5 \cdot 2 / (0,5 + 0,5 \cdot 2) = 0,667.$$

Задача 6

Найти X_A для реакции $A \rightarrow R$ в РИВ-И, если объем реактора $V = 2 \text{ м}^3$, расход реакционной смеси $W_0 = 0,5 \text{ м}^3/\text{мин}$, $X_{A,0} = 0$ и константа скорости $k=0,5 \text{ мин}^{-1}$.

Решение

$$\frac{V}{W_0} = \frac{1}{k} \int_{X_{A,0}}^{X_{A,1}} \frac{dX_A}{1-X_A} = -k^{-1} \ln(1-X_{A,k}) + k^{-1} \ln(1-X_{A,0}), \text{ откуда}$$

$$X_{A,1} = 1 - (1 - X_{A,0}) \exp(-kV/W_0). \quad \text{При } X_{A,0}=0 \quad X_{A,1} = 1 - \exp(-kV/W_0) = 1 - \exp(-0,5 \cdot 2 / 0,5) = 0,8647.$$

Задача 7

Найти объем двухступенчатого каскада реакторов К-РИВ-И, необходимый для достижения в первой ступени $X_{A,1} = 0,55$ и во второй $X_{A,2} = 0,85$, для реакции $A \rightarrow R$ с константами скоростей $k_1 = k_2 = 0,45 \text{ мин}^{-1}$. Объемный расход потока на входе $W_0 = 32 \text{ л/мин}$ при $C_{A,0} = 1 \text{ моль/л}$.

Решение

$$1. \text{ Модель первой ступени: } \tau = \frac{V}{W_0} = C_{A,0} \int_{X_{A,0}}^{X_{A,1}} \frac{dX_A}{r_{A,1}};$$

$$2. \text{ Модель второй ступени: } \tau = \frac{V}{W_0} = C_{A,1} \int_{X_{A,1}}^{X_{A,2}} \frac{dX_A}{r_{A,2}}.$$

3. Учитывая, что $r_{A,1} = k_1 C_{A,0} (1 - X_{A,1})$ и $r_{A,2} = k_2 C_{A,1} (1 - X_{A,2})$, запишем модель К-РИВ:

$$\tau = \tau_1 + \tau_2 = k_1^{-1} \int_{X_{A,0}}^{X_{A,1}} \frac{dX_A}{1-X_{A,1}} + k_2^{-1} \int_{X_{A,1}}^{X_{A,2}} \frac{dX_A}{1-X_{A,2}}$$

После интегрирования получим:

$$\tau = k_1^{-1} [\ln(1-X_{A,0})/\ln(1-X_{A,1})] + k_2^{-1} [\ln(1-X_{A,1})/\ln(1-X_{A,2})].$$

При $k_1 = k_2 = k$ и подстановке численных значений получим выражение вида:

$$V = W_0 \cdot \tau = W_0 k^{-1} \cdot \ln[(1-X_{A,0}) \cdot (1-X_{A,1}) / (1-X_{A,1}) \cdot (1-X_{A,2})] = \\ = 32 \cdot 0,45^{-1} \cdot \ln[(1-0) \cdot (1-0,55) / (1-0,55) \cdot (1-0,85)] = 134,90 \text{ л.}$$

При этом $V_1 = 56,78$ и $V_2 = 78,12$ л.

Задача 8

Определить объём V реактора РИС-Н –И для реакции $2A \rightleftharpoons R$. Расход реакционной смеси $W_0 = 2,832 \text{ м}^3/\text{ч}$, концентрация вещества A - $C_{A,0} = 24 \text{ кмоль}/\text{м}^3$. Константа скорости прямой реакции $k_1 = 0,625 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{ч})$, константа равновесия $K_C = 16 \text{ м}^3/\text{кмоль}\cdot\text{ч}$. Заданная степень превращения $X_A = \alpha_x \cdot X_A^*$ при $\alpha_x = 0,8..$

Решение

1. Из характеристического уравнения РИС-Н $V = W_0 \cdot C_{A,0} X_A / r_A$. Конечная концентрация вещества A:

$$C_A = C_{A,0} (1 - \alpha_x X_A^*) / (1 + \xi \alpha_x X_A^*), \text{ где } \xi - \text{коэффициент изменения объема:}$$

$$2. \xi = \frac{\nu_R}{\nu_A} - 1 = \frac{1}{2} - 1 = -\frac{1}{2}.$$

3. Конечная концентрация продукта R:

$$C_R = C_{R,0} + \frac{\frac{\nu_R}{\nu_A} C_{A,0} X_A^*}{1 + \xi X_A^*} = \frac{1}{2} C_{A,0} \alpha_x X_A^* / (1 + \alpha_x \xi X_A^*).$$

$$4. K_c = (2 - X_A^*) \cdot X_A^* / 4 C_{A,0} (1 - X_A^*)^2, \text{ откуда}$$

$$X_A^* = 1 - \sqrt{\frac{1}{1 + 4 C_{A,0} K_c}} = 1 - \sqrt{\frac{1}{1 + 4 \cdot 24 \cdot 16}} = 0,975$$

5. Запишем уравнение для скорости химической реакции:

$$r_A = k_1 C_{A,0}^2 \left(\frac{1 - \alpha_x X_A^*}{1 + \xi \alpha_x X_A^*} \right)^2 - \frac{1}{K_c} C_{A,0} \frac{\alpha_x X_A^*}{2(1 + \xi \alpha_x X_A^*)}$$

После преобразований и подстановки численных значений получим:

$$r_A = 2,79 \text{ кмоль/м}^3 \text{ и } V = 2,832 \cdot 24 \cdot 0,8 \cdot 0,975 = 19,0 \text{ м}^3.$$

4. РАСЧЕТЫ НА ПЕРСОНАЛЬНЫХ КОМПЬЮТЕРАХ

С помощью программы STR, использующей встроенные программы и банк данных, а также стандартных пакетов Excel и Mathcad рассчитывают:

- константу равновесия по термодинамическим данным;
- равновесную степень превращения X_A^* ;
- теплофизические параметры смеси при заданных условиях ХТП;
- тепловые эффекты реакций;
- материальные и тепловые балансы процессов;
- основные параметры реакторов при различных условиях теплообмена.

Порядок работы

- * На диске Е выбрать директорию STR. Запустить программу файлом <1.bat>;
- * после запуска программы на экране появится меню системы, каждый пункт которого содержит ряд подпрограмм, соответствующий тому или иному виду расчетных задачий.

4.1. Расчет K_p

В пункте меню <Расчет констант химического равновесия> ввести условия задачи, а именно:

- * в режиме <Реакция> записать соответствующее стехиометрическое уравнение и после нажатия клавиши <Enter> ввести данные о потоке и среде в соответствии с условием задачи (рис.4.1, 4.2 Приложения 4);
- * получить результат расчета в виде таблицы данных (рис.4.3 Приложения 4);

Задача 1

Получить зависимости $K_p=f(T,P)$ для процесса окисления сернистого ангидрида $2SO_2+O_2 \rightleftharpoons 2SO_3+Q$ и записать аппроксимацию функцию $K_p=f(T)$ при условиях:

- * температурный интервал - 400-600°C с шагом 100 градусов;
- * диапазон давлений - 1-9 атм с шагом 2 атм;
- * состав реакционной смеси (мол. доли): $SO_2-0,5536$; $O_2 - 0,2679$, $SO_3-0,1785$.

Решение

Выполнить действия по п.4.1. Получить данные в табл.4.1.

Таблица 4.1.

Расчет константы равновесия

T=400 °C		Идеальная Кр=0,27096·10 ⁶ , ат ^{-0,5}	
Состав	мол.%	P, ат	Нейд. Кр·10 ⁻⁶ , ат ^{-0,5}
SO ₂	55,36	1	0,27131
O ₂	26,79	3	0,27203
SO ₃	17,86	5	0,27275
		7	0,27348
		9	0,27420
T=500 °C		Идеальная Кр=3097,1, ат ^{-0,5}	
Состав	мол.%	P, ат	Нейд. Кр, ат ^{-0,5}
SO ₂	55,36	1	3099,8
O ₂	26,79	3	3105,0
SO ₃	17,86	5	3110,3
		7	3115,5
		9	3120,8
T=600 °C		Идеальная Кр=101,4, ат ^{-0,5}	
Состав	мол.%	P, ат	Нейд. Кр, ат ^{-0,5}
SO ₂	55,36	1	101,48
O ₂	26,79	3	101,55
SO ₃	17,86	5	101,71
		7	101,82
		9	101,93

Пример оформления результатов в программе Excel приведен ниже.

4.2. Расчет равновесной степени превращения X_A^*

Расчет X_A^* провести по уравнению (1.21). Для этого необходимо:

- вызвать программу Excel;
- ввести состав, стехиометрические коэффициенты и K_p , рассчитанную для данных Т и Р;
- ввести в свободную ячейку B24 формулу (1.29) в виде, пригодном для решения;
- выбрать в меню <Сервис> команду <Поиск решения> и указать в качестве целе-

вой функции "Y"(B24) ячейку с формулой для расчета X_A^* ;

- в режиме <Поиск решения> установить минимальное значение "0". В окно <Изменяя ячейки> ввести номер ячейки с начальным приближением (для X_A^* рекомендуется значение 0,5). В окно <Ограничения> ввести пределы изменения $0,01 \leq X_A^* \leq 0,99$.
- получить значение X_A^* . Выражение для расчета по уравнению (1.21) ввести в ячейку C10 (см. таблицу).

Реакция: $2SO_2 + O_2 = 2SO_3$							
A	B	C	D	E			
3	$n_{SO_2} =$	0,45	$v_{SO_2} =$	2	P, атм		
4	$n_{O_2} =$	0,55	$v_{O_2} =$	1	1	$T, ^\circ C =$	500
5	$n_{SO_3} =$	0	$v_{SO_3} =$	2		$K_p =$	55,652
6							
7			$\Delta v = 2 - (1+2)$	-1			
8							
9	X	Y=0					
10	0,8804	-6,4E-07					

$$K_p = \left(\frac{P}{1 + \frac{\Delta v}{v_{SO_2}} n_{SO_2} X_{SO_2}^*} \right)^{\Delta v} \frac{(n_{SO_3} + \frac{v_{SO_3}}{v_{SO_2}} n_{SO_2} X_{SO_2}^*)^{v_{SO_3}}}{n_{SO_2} (1 - X_{SO_2}^*)^{v_{SO_2}} (n_{O_2} - \frac{v_{O_2}}{v_{SO_2}} n_{SO_2} X_{SO_2}^*)^{v_{O_2}}}$$

$$55,652 = \left(\frac{1}{1 + \frac{-1}{2} 0,45 \cdot X_{SO_2}^*} \right)^{-1} \frac{(0,0 + \frac{2}{2} 0,45 \cdot X_{SO_2}^*)^2}{0,45 (1 - X_{SO_2}^*)^2 (0,55 - \frac{1}{2} 0,45 \cdot X_{SO_2}^*)^1}$$

Задача 2

Получить зависимость констант скорости k , константы равновесия K_p и равновесной степени превращения X_A^* от T и для процесса окисления сернистого ангидрида $2SO_2 + O_2 \rightleftharpoons 2SO_3 + Q$ в температурном диапазоне 400-520°C при давлении 1 ат; состав реакционной смеси: $n_{SO_2}-0,45$; $n_{O_2} - 0,55$, $n_{SO_3}-0,0$. Средствами Excel выполнить

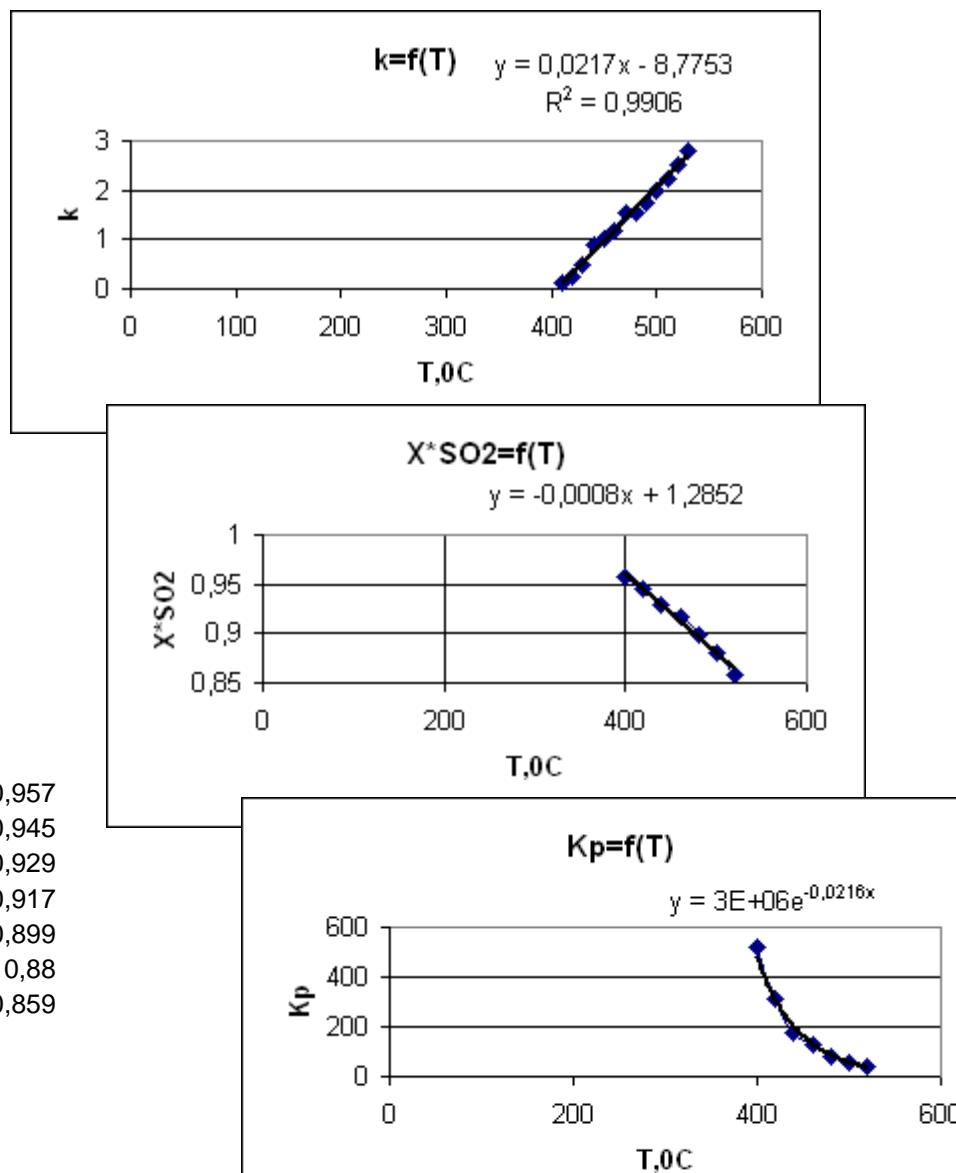
©УГХТУ, кафедра общей химической технологии

графическую обработку данных в координатах $K_p, k, X_A^* = f(T)$ и аппроксимировать зависимости соответствующими уравнениями. При построении графиков выбрать режим <Точечная диаграмма> и флажок <Вывести уравнение>.

Решение

Рассчитать значения K_p и X_A^* как показано выше. Из справочника [12] взять значения константы скорости k_1 . Пример оформления температурной зависимости константы скорости при помощи программы Excel приведен ниже.

T	k
410	0,12
420	0,26
430	0,47
440	0,89
450	1,02
460	1,18
470	1,53
480	1,54
490	1,74
500	1,97
510	2,23
520	2,5
530	2,81



T	K_p	X_A^*
400	520,74	0,957
420	315,71	0,945
440	179,05	0,929
460	126,27	0,917
480	82,89	0,899
500	55,65	0,88
520	38,14	0,859

4.3. Расчет реактора с использованием эмпирических зависимостей

При расчете реакторов основную сложность представляет установление вида кинетического уравнения. На практике, особенно для распространенных каталитических процессов, широко используют эмпирические уравнения.

Так, например, при окислении сернистого ангидрида на ванадиевом катализаторе в интервале температур 300-700⁰C для определения K_p можно пользоваться двучленным уравнением:

$$\lg K_p = \frac{495}{T} - 4,6455, \quad (4.5)$$

где 495 и 4,6455 – численные константы.

Равновесную степень превращения X_A^{*} рассчитывают по формуле [12]:

$$X_A^* = \frac{K_p}{K_p + \sqrt{\frac{100 - 0,5n_{SO_2}X_A^*}{P(n_{O_2} - 0,5n_{SO_2}X_A^*)}}} \quad (4.6)$$

Кинетика процесса окисления SO₂ на ванадиевых катализаторах наиболее точно описывается уравнением Борескова-Иванова [12]:

$$r = k_1 P_{O_2} \frac{P_{SO_2}}{P_{SO_2} + 0,8P_{SO_3}} \left[1 - \left(\frac{P_{SO_3}}{K_p P_{SO_2} \sqrt{P_{O_2}}} \right)^2 \right] \quad (4.7)$$

где k₁ – константа скорости реакции.

Расчеты с использованием эмпирических уравнений достаточно трудоемки и выполняют с использованием компьютеров.

Задача 3

Рассчитать РИС-Н и скорость реакции $SO_2 + 0,5O_2 \rightleftharpoons SO_3 + Q$ при следующих условиях: Р - 1 ат; k_{to}= 10 ккал/м²·град·ч; температура теплоносителя T_c = 15⁰C; расход потока- 50000 м³/ч; начальная температура T₁=460⁰C; состав реакционной смеси: n_{SO2}-0,09; n_{O2}-0,11; n_{N2}-0,8.

1. Политермический режим:

- рассчитать объем реактора V_r и подобрать поверхность трубчатого теплообменника F_{to} при конечной температуре T₂=700⁰C;

3. Изотермический режим:

- подобрать поверхность трубчатого теплообменника F_{to};

4. Адиабатический режим:

- рассчитать объем реактора V_r и температуру на выходе из реактора T_{ad};

Решение

Решение выполнено в программе Mathcad [13].

1. При решении дифференциального уравнения необходимо задать начальный и конечный моменты времени τ_0 и τ_1 , начальное значение X при $\tau=0$ и количество шагов расчета NS. Затем определить параметры функции «rkfixed»:

- вектор начальных значений ic_0 (индекс вводится через левую квадратную скобку "[";
- производную искомой функции $D(t, Y) = f(t, Y_0)$. Второй аргумент Y_0 должен быть вектор (индекс вводится также через "[");
- поиск r выполняется функцией «rkdixed» с указанными параметрами.

Решением является матрица, содержащая:

- количество строк равно числу заданных шагов +1 (строка начального значения);
- первый столбец содержит значение времени в заданном интервале;
- второй столбец содержит значение X.

2. При решении системы уравнений следует ввести начальные условия по искомым компонентам, команду <Given> и получить результаты командой <Find>, введя искомые величины в круглых скобках через запятую.

4.3.1. Программа расчета реактора средствами Mathcad



Данные для расчета

Абсолютная температура $T_0 := 273.15$ К

Давление $P_0 := 1.1 \cdot 10^5$ Па

$$R := 8.314 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$$

Универсальная газовая постоянная

Объем 1 моля газа при нормальных условиях

$$V_0 := 22.4 \cdot 10^{-3} \frac{\text{м}^3}{\text{моль}}$$

Стехиометрические коэффициенты в уравнении реакции

$$v_{\text{SO}_2} := 1 \quad v_{\text{O}_2} := 0.5 \quad v_{\text{SO}_3} := 1$$

Мольный состав смеси

$$n_{SO_3} := 0 \quad n_{SO_2} := 0.09 \quad n_{O_2} := 0.11 \quad n_{N_2} := 0.80$$

Доля стехиометрической смеси исходных компонентов в реальной смеси β

$$\beta := \frac{\left(n_{SO_2} + n_{SO_2} \cdot \frac{v_{O_2}}{v_{SO_2}} \right)}{n_{SO_2} + n_{O_2} + n_{SO_3} + n_{N_2}} \quad \beta = 0.135$$

Коэффициент изменения объема в системе ξ

$$\mu := 1 - \beta \cdot \left(1 - \frac{v_{SO_3}}{v_{SO_2} + v_{O_2}} \right) \quad \mu = 0.955 \quad \xi := \mu - 1 \quad \xi = -0.045$$

Молярные массы компонентов смеси

$$M_{SO_2} := 0.064 \frac{\text{кг}}{\text{моль}} \quad M_{SO_3} := 0.080 \frac{\text{кг}}{\text{моль}} \quad M_{O_2} := 0.032 \frac{\text{кг}}{\text{моль}} \quad M_{N_2} := 0.028 \frac{\text{кг}}{\text{моль}}$$

Молярная масса газовой смеси

$$M_c := M_{SO_2} \cdot n_{SO_2} + M_{O_2} \cdot n_{O_2} + M_{SO_3} \cdot n_{SO_3} + M_{N_2} \cdot n_{N_2} \frac{\text{кг}}{\text{моль}} \quad M_c = 0.032$$

$$\text{Плотность газовой смеси} \quad \rho_c := \frac{M_c}{V_0} \quad \rho_c = 1.414 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$$

$$\text{Коэффициент теплообмена} \quad k_{t0} := 11.628 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{град}}$$

Температура смеси на входе в реактор $T_1 := 693.15 \text{ К}$

$$\text{Удельная теплоемкость газовой смеси} \quad C_p := 52.819 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$$

Температура смеси на выходе из реактора $T_2 := 723.15 \text{ К}$

Температура хладагента $T_x := 288.15 \text{ К}$

$$\text{Расход реакционной смеси} \quad W_1 := 1 \frac{\text{м}^3}{\text{с}}$$

РАСЧЕТ q_{xp}

$$D := 22034.3 + 5.62 \cdot T_1 - 10.46 \cdot 10^{-3} \cdot T_1^2 + 6.42 \cdot 10^{-6} \cdot T_1^{-3} - 1.65 \cdot 10^{-9} \cdot T_1^{-4}$$

$$q_{xp} := D \cdot 4.18 \quad q_{xp} = 8.738 \times 10^4 \quad \frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$$

РАСЧЕТ Кр

$$K_p := 10^{\left(\frac{4905}{T_1}\right) - 4.6455} \quad K_p = 269.706$$

РАСЧЕТ РАВНОВЕСНОЙ СТЕПЕНИ ПРЕВРАЩЕНИЯ ПРИ 460 С

$x_{SO2} := 0.1$ – начальное приближение

Given

$$x_{SO2} = \frac{K_p}{K_p + \sqrt{100 - 0.5 \cdot n_{SO2} \cdot \frac{x_{SO2}}{P_0 \cdot (n_{O2} - n_{SO2} \cdot x_{SO2})}}}$$

$$\text{Find}(x_{SO2}) = 0.964$$

РАСЧЕТ КОНСТАНТЫ СКОРОСТИ (ДЛЯ ВАНАДИЕВОГО КАТАЛИЗАТОРА)

$$k := 0.0217 \cdot 460 - 8.7753 \quad k = 1.207$$

РАСЧЕТ СКОРОСТИ ОКИСЛЕНИЯ ПО УРАВНЕНИЮ БОРЕСКОВА-ИВАНОВА

Начальное приближение $x0 := 0.1$

$$K_p = 269.706$$

$$NS := 100$$

$$n_{O2} = 0.11 \quad n_{SO2} = 0.09$$

$$J := 1 - \frac{x_{SO2}^2 \cdot \left(1 - n_{SO2} \cdot \frac{x_{SO2}}{2}\right)}{\left(n_{O2} - n_{SO2} \cdot \frac{x_{SO2}}{2}\right) \cdot \left[K_p^2 \cdot (1 - x_{SO2})^2\right]}$$

$$\tau0 := 0 \quad \tau1 := 10$$

$$f(\tau, x_{SO2}) := k \cdot \frac{\left(n_{O2} - n_{SO2} \cdot \frac{x_{SO2}}{2}\right) \cdot (1 - x_{SO2})}{\left[n_{SO2} \cdot (1 - 0.2 \cdot x_{SO2}) \cdot \left(1 - n_{SO2} \cdot \frac{x_{SO2}}{2}\right)\right]} \cdot J$$

$$ic_0 := x0$$

$$D(t, Y) := f(t, Y_0)$$

$$r := \text{rkfixed}(ic, \tau_0, \tau_1, NS, D)$$

Начальная степень превращения $x_1 := 0.1$

Конечная степень превращения $x_2 := 0.868$

Время пребывания реакционной смеси в реакторе $\tau := 1.5$ с

Скорость реакции

	0	1
0	0	0.1
1	0.1	0.22
2	0.2	0.322
3	0.3	0.409
4	0.4	0.484
5	0.5	0.548
6	0.6	0.604
7	0.7	0.652
8	0.8	0.693
9	0.9	0.729
10	1	0.761
11	1.1	0.789
12	1.2	0.813
13	1.3	0.835
14	1.4	0.853
15	1.5	0.87

$$r_1 := \frac{(x_2 - x_1)}{\tau} \quad r_1 = 0.512 \frac{1}{\text{с}}$$

РАСЧЕТ РИС-П

1. Объем реактора

$$V_r := W_1 \cdot n_{SO2} \cdot \frac{x_2 - x_1}{(1 - x_1) \cdot r_1}$$

$$V_r = 0.15 \text{ м}^3$$

2. Поверхность теплообмена

$$F_{to} := 1$$

Given

$$W_1 \cdot \left[T_2 \cdot \frac{(1 + \xi \cdot x_2)}{(1 + \xi \cdot x_1)} - T_1 \right] - q_{xp} \cdot r_1 \cdot \frac{V_r}{\rho_c \cdot C_p} + k_{to} \cdot (T_2 - T_x) \cdot \frac{F_{to}}{\rho_c \cdot C_p} = 0$$

$$\text{Find}(F_{to}) = 1.254$$

РАСЧЕТ РИС-Н- И

1. Объем реактора

$$V_r := W_1 \cdot n_{SO2} \cdot \frac{(x_2 - x_1)}{(1 - x_1) \cdot r_1} \quad V_r = 0.15 \text{ м}^3$$

2. Поверхность теплообмена

$$W_1 \cdot T_1 \cdot \xi \cdot \frac{(x_2 - x_1)}{(1 + \xi \cdot x_1)} - q_{xp} \cdot r_1 \cdot \frac{V_r}{\rho_c \cdot C_p} + k_{to} \cdot (T_2 - T_x) \cdot \frac{F_{to}}{\rho_c \cdot C_p} = 0$$

$$\text{Find}(F_{to}) \quad F_{to} = 1.682 \text{ м}^2$$

РАСЧЕТ РИС-Н-А

$$V_r := W_1 \cdot n_{SO2} \cdot \frac{(x_2 - x_1)}{(1 - x_1) \cdot r_1}$$

1. Объем реактора

$$V_r = 0.15 \text{ м}^3$$

2. Адиабатическая температура

$$T_{ad} := \left(q_{xp} \cdot r_1 \cdot \frac{V_r}{\rho_c \cdot C_p} + T_1 \right) \cdot \frac{(1 + \xi \cdot x_1)}{W_1 \cdot (1 + \xi \cdot x_2)}$$

$$W_1 \cdot T_{ad} \cdot \frac{(1 + \xi \cdot x_2)}{(1 + \xi \cdot x_1)} - T_1 - q_{xp} \cdot r_1 \cdot \frac{V_r}{\rho_c \cdot C_p} = 1.421 \times 10^{-14}$$

$$T_{ad} = 811.145 \text{ K}$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Бретшнайдер С., Кавецкий В., Лейко Я. И др. Общие основы химической технологии. Л.: Химия, Лен.отд-е, 1977. 503 с.
2. Рабинович В.А., Хавин З.Я. Краткий химический справочник. Л.:Химия, Лен-е отд-е, 1978. 392 с.
3. Основы химической технологии //И.П.Мухленов, А.Е. Горштейн, Е.С. Тумаркина, Н.В. Кузичкин; под ред. И.П. Мухленова. - М.: Высшая школа, 1991. - 463 с.
4. Общая химическая технология// под ред. А.Г.Амелина. М.:Химия, 1977. 400 с.
5. Бесков С.Д. Технохимические расчеты. М.:Высшая школа, 1966. 520 с.
6. Кутепов А.М., Бондарева Т.И., Беренгартен М.Г. Общая химическая технология. -М.: Высшая школа, 1990. 520 с.
7. Ахметов К. Windows 95 для всех. М.: ТОО "КомпьютерПресс", 1997. 256 с.
8. Додж М., Кайнэт К. Эффективная работа с Excel 7.0 для Windows 95. Санкт-Петербург: Питер, 1996. 1000 с.
9. Гарнаев А.Ю. Использование MS Excel и VBA в экономике и финансах. СПб.:БХВ. Санкт-Петербург, 2000. 386 с.
10. Вольфович С.И., Егоров А.П., Эпштейн Д.А. Общая химическая технология. Изд-е химической литературы, М.-Л., 1953, т.1. 632 с.
11. Справочник сернокислотчика /Под. Ред К.М.Малина: М. Химия, 1971. 744 с.
12. Аладьев В.З., Гершгорн Н.А. Вычислительные задачи на персональном компьютере. К.:Тэхника, 1991. 245 с.
13. Чертов А.Г. Единицы физических величин. М.:Высшая школа, 1977. 287 с.

ПРИЛОЖЕНИЯ

Приложение 1. Термодинамические свойства веществ

Значения C_p , ΔH_{298}^0 , ΔG_{298}^0 , ΔS_{298}^0 чистых веществ (т – твердое вещество, ж – жидкость, г – газ)

Веще- ство	Мольная теплоемкость, кал/моль·К					ΔH_{298}^0 , ккал/моль	ΔG_{298}^0 , ккал/моль	ΔS_{298}^0 , ккал/(моль·К)			
	коэффициенты уравнения										
	a	$b \cdot 10^3$	$c \cdot 10^{-5}$	$c \cdot 10^6$	$d \cdot 10^9$						
1	2	3	4	5	6	7	8	9			
Al (т)	4,94	2,96	—	—	—	0	0	6,769			
C (т) - графит	4,10	1,02	-2,10	—	—	0	0	1,3609			
C ₁₂ (г)	6,8214	5,709	—	-5,107	1,547	0	0	53,286			
Fe- α (т)	3,37	7,10	-0,43	—	—	0	0	6,49			
H ₂ (г)	6,952	-0,457	—	0,9563	-0,2079	0	0	31,211			
N ₂ (г)	6,903	-0,375	—	1,930	-0,6861	0	0	45,767			
O ₂ (г)	8,643	0,202	-1,030	—	—	0	0	49,003			
S (т) ромб.	3,58	6,24	—	—	—	0	0	7,62			
Al ₂ O ₃ - α (т)	27,43	3,06	-8,47	—	—	-399,09	-376,77	12,186			
CO (г)	6,726	0,400	—	1,283	-0,5307	-26,416	-32,808	47,301			
CO ₂ (г)	10,55	2,16	-2,04	—	—	-94,052	-94,260	51,061			
CaCO ₃ - кальцит	24,98	5,24	-6,20	—	—	-288,45	-269,78	22,2			
CaO (т)	11,67	1,08	1,56	—	—	-151,9	-144,4	9,5			
CaSO ₄ (т)	18,52	21,97	-1,568	—	—	-342,42	-315,56	25,5			
Fe ₂ O ₃ (т)	233,6	17,24	-3,08	—	—	-196,5	-177,1	21,5			
HC1 (г)	6,34	1,10	0,26	—	—	-22,063	-22,769	44,17			
H ₂ O (г)	7,700	0,4594	—	2,521	-0,8587	-57,798	-54,636	45,106			
HNO ₃ (ж)	—	—	—	—	—	-41,404	-19,10	37,19			
H ₂ SO ₄ (ж)	—	—	—	—	—	-191,4	(-164,2)	37,49			
KC1 (т)	9,89	5,20	0,77	—	—	-104,175	-97,592	19,76			
NH ₃ (г)	6,5846	6,1251	—	2,3663	-1,5981	-11,04	-3,976	46,01			
NO (г)	6,461	2,358	—	-0,7705	0,08729	21,60	20,719	50,339			
NO ₂ (г)	5,48	13,65	—	-8,41	1,88	8,091	12,390	57,47			

Продолжение таблицы

1	2	3	4	5	6	7	8	9
NaCl (т)	10,98	3,90	—	—	—	-98,232	-91,785	17,30
NaOH (т)	19,2	—	—	—	—	-102,0	-91,0	15,34
Na ₂ CO ₃ (т)	—	—	—	—	—	-271,02	-251,11	32,5
SO ₂ (г)	6,157	13,84	—	-9,103	2,057	-70,96	-71,79	59,40
SO ₃ (г)	13,70	6,42	-3,12	—	—	-94,45	-88,52	61,24
SiO ₂ - α-кварц	11,22	8,20	-2,70	—	—	-205,4	-192,4	10,00
CH ₄ (г)	4,750	12,00	—	3,03	-2,63	-17,889	-12,140	44,50
C ₂ H ₂ (г)	5,21	22,00	—	-15,59	4,349	54,190	50,000	48,00
C ₂ H ₄ (г)	0,944	37,35	—	-19,93	4,220	12,498	16,295	52,45
C ₂ H ₆ (г)	1,648	41,24	—	-15,30	1,740	-20,236	-7,860	54,85
C ₃ H ₈ (г)	-0,966	72,79	—	-37,55	7,580	-24,82	-5,61	64,51
изо-C ₄ H ₁₀ (г)	-1,890	99,36	—	-54,95	11,92	-31,450	-4,300	70,42
C ₆ H ₆ (г)	-8,650	115,78	—	-75,40	18,54	19,82	30,850	64,457
C ₈ H ₁₀ (г)	-8,398	159,35	—	-100,03	23,95	-2,98	28,62	60,95
CH ₃ OH (г)	4,55	21,86	—	-2,91	-1,92	-48,08	-38,69	56,8
C ₂ H ₅ OH (г)	4,75	50,06	—	-24,79	4,790	-56,24	-40,3	67,4
CH ₃ CHO (г)	4,19	31,64	—	-5,15	-3,800	-39,76	-31,96	63,5
(CH ₃) ₂ CO (г)	1,625	66,61	—	-37,37	8,37	-51,79	-36,5	72,7
CH ₃ COOH (г)	5,20	46,16	—	-18,35	—	-104,3	-91,2	70,1
CHCl ₃ (г)	7,61	34,61	—	-26,68	7,344	-24	-16	70,62
C ₆ H ₅ Cl (ж)	—	—	—	—	—	27,80	27,8	47,2
C ₆ H ₅ NO ₂ (ж)	—	—	—	—	—	5,3	34,95	53,6
C ₆ H ₅ OH (т)	—	—	—	—	—	-37,26	-9,74	34,0
CH ₃ CHCl (т)	4,49	63,46	—	-22,53	—	-31,20	—	70,5
CH ₃ (г)								

Приложение 2. Средняя мольная теплоемкость веществ

Средняя мольная теплоемкость \tilde{C}_p (кал/моль·град) газов в интервале температур 0 – t , $^{\circ}\text{C}$

$t, ^{\circ}\text{C}$	H ₂	N ₂	O ₂	CO	NO	H ₂ O	CO ₂	N ₂ O	SO ₂	Воздух	SO ₃	CH ₄	C ₂ H ₄	C ₂ H ₂
100	6,92	6,97	7,05	6,97	7,14	8,03	9,17	9,79	9,74	6,96	12,39	8,73	11,45	11,12
200	6,95	7,00	7,15	7,00	7,17	8,12	9,65	10,12	10,15	7,01	12,92	9,48	12,64	11,79
300	6,97	7,04	7,26	7,06	7,22	8,22	10,06	10,45	10,52	7,06	13,38	10,20	13,73	12,36
400	6,98	7,09	7,38	7,12	7,30	8,34	10,40	10,74	10,84	7,13	13,79	10,88	14,76	12,81
500	6,99	7,15	7,49	7,19	7,38	8,47	10,75	11,02	11,11	7,20	14,14	11,53	15,69	13,21
600	7,01	7,21	7,59	7,27	7,46	8,60	11,03	11,24	11,35	7,27	14,44	12,15	16,52	13,58
700	7,03	7,27	7,68	7,34	7,54	8,74	11,28	11,50	11,55	7,34	14,69	12,74	17,26	13,90
800	7,06	7,35	7,77	7,43	7,62	8,89	11,50	11,71	11,72	7,42	14,91	13,28	18,07	14,22
900	7,09	7,42	7,85	7,50	7,70	9,04	11,70	11,90	11,88	7,49	15,11	13,79	18,62	14,49
1000	7,12	7,49	7,92	7,57	7,76	9,18	11,88	12,07	12,01	7,56	15,28	14,27	19,24	14,75
1100	7,15	7,56	7,98	7,64	7,83	9,32	12,05	12,21	12,13	7,62				
1200	7,20	7,62	8,04	7,70	7,89	9,45	12,19	12,35	12,23	7,68				
1300	7,24	7,67	8,11	7,76	7,94	9,58	12,32	12,48	12,33	7,73				
1400	7,28	7,73	8,16	7,81	7,99	9,72	12,45	12,60	12,41	7,78				
1500	7,32	7,78	8,20	7,85	8,03	9,84	12,56	12,69	12,48	7,84				
1600	7,36	7,82	8,24	7,90	8,08	9,96	12,66	12,78	12,55	7,88				
1700	7,40	7,86	8,28	7,94	8,12	10,09	12,75	12,88	12,61	7,92				
1800	7,45	7,91	8,33	7,98	8,15	10,20	12,84	12,95	12,67	7,96				
1900	7,49	7,94	8,38	8,02	8,19	10,30	12,92	13,01	12,71	7,99				
2000	7,53	7,98	8,42	8,05	8,22	10,41	12,99	13,09	12,77	8,03				
2100	7,57	8,01	8,45	8,09	8,26	10,52	13,06	13,17	12,81	8,06				
2200	7,62	8,05	8,48	8,12	8,29	10,61	13,13	13,21	12,85	8,08				
2300	7,66	8,08	8,52	8,15	8,31	10,71	13,19	13,28	12,89	8,12				
2400	7,70	8,10	8,56	8,18	8,34	10,79	13,24	13,33	12,93	8,14				
2500	7,74	8,14	8,59	8,21	8,36	10,87	13,30	13,38	12,96	8,18				
2600	7,78	8,17	8,63	8,24	8,38	10,96	13,34	13,42	12,99	8,20				
2700	7,81	8,19	8,65	8,26	8,40	11,03	13,39	13,46	13,02	8,23				
2800	7,85	8,22	8,68	8,28	8,42	11,11	13,43	13,51	13,04	8,25				
2900	7,89	8,24	8,72	8,30	8,44	11,18	13,48	13,55	13,07	8,27				
3000	7,92	8,26	8,76	8,32	8,45	11,23	13,52	13,59	13,10	8,29				

Приложение 3. Соотношения размерностей физических величин

Величина	Единица		
	Наименование	Обозначение	Соотношение с единицей СИ
Температура	градус цельсия	$t, ^{\circ}\text{C}$	$t=T-T_0, T_0=273,15 \text{ K}, T - \text{температура Кельвина}$
Давление	килограмм-сила на квадратный сантиметр = 1 ат	P, ат	98066,5 Па
	миллиметр водяного столба	мм вод.ст.	9,806 Па
	миллиметр ртутного столба	мм рт.ст.	133,322 Па
Количество теплоты, энталпия, теплота фазового превращения, теплота химической реакции	калория килокалория	Кал ккал	4,186 Дж 4,186·10 ³ Дж

Удельная теплота фазового превращения, удельная теплота химической реакции	килокалория на килограмм	ккал/кг	$4,1868 \cdot 10^3$ дж/кг
Удельная теплоемкость вещества	килокалория на килограмм-кельвин	ккал/(кг·К)	$4,1868 \cdot 10^3$ Дж/К
Теплоемкость системы	килокалория на кельвин	ккал/К	$4,1868 \cdot 10^3$ Дж/(кг·К)
Поверхностная плотность теплового потока	килокалория в ч на квадратный метр калория в секунду на квадратный сантиметр	ккал/(ч·м ²) кал/(с·см ²)	1,163 Вт/м ² $4,1868 \cdot 10^4$ Вт/м ²
Коэффициент теплоотдачи и теплопередачи	килокалория в ч на квадратный метр-кельвин калория в секунду на квадратный сантиметр-кельвин	ккал/(ч·м ² ·К) кал/(с·см ² ·К)	1,163 Вт/м ² $4,1868 \cdot 10^4$ Вт/м ² ·К
Теплопроводность	килокалория в ч на метр-кельвин калория в секунду на сантиметр-кельвин	ккал/(ч·м·К) кал/(с·см·К)	1,163 Вт/м·К $4,1868 \cdot 10^2$ Вт/м·К
Удельная газовая постоянная	килокалория на килограмм-кельвин калория на грамм-кельвин	ккал/(кг·К) кал/(г·К)	$4,1868 \cdot 10^3$ Дж/(кг·К) $4,1868 \cdot 10^3$ Дж/(кг·К)

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

Раздел 1

1. Обґрунтуйте класифікацію технологічних процесів за механізмом протікання реакцій. Зробіть їх порівнювальну характеристику й дайте оцінку. Наведіть приклади.
2. Проаналізуйте структурну схему хіміко-технологічного процесу (ХТП). Із яких основних підсистем вона складається? Обґрунтуйте питання, що підлягають вирішенню при вивченні ХТП.
3. Дайте визначення ступеня перетворення, виходу продукту й селективності. Наведіть необхідні визначення й формули. Який зв'язок між цими величинами?
4. Розкажіть про вихід продукту та способах його вираження. Дайте визначення ступеня перетворення (конверсії), селективності й виходу. Покажіть зв'язок між ними у вигляді математичних рівнянь та у графічній формі.
5. Проаналізуйте особливості матеріальних розрахунків в хімічній технології й методи складання матеріальних балансів ХТП, а також форми їх представлення. Наведіть приклади.
6. Дайте визначення поняттю "Технологія". Проаналізуйте, чим відрізняється "хімічна" та "механічна" технологія. Що є предметом їх вивчення? Наведіть приклади реальних виробництв.
7. Обґрунтуйте класифікацію технологічних процесів за характером протікання в чі. Зробіть їх порівнювальну характеристику й дайте оцінку. Наведіть приклади.
8. Обґрунтуйте класифікацію технологічних процесів за кратністю обробки сировини. Зробіть їх порівнювальну характеристику й дайте оцінку. Наведіть приклади.
9. Поясніть, який смисл вкладається в поняття продуктивності й потужності? Розшифруйте поняття інтенсивності процесу та представте основні технологічні методи її збільшення.
10. Дайте поняття про тепловий баланс технологічного процесу. Проаналізуйте основні статті приходу й розходу теплового балансу процесу й методи їх визначення. Для чого складається тепловий баланс?
11. Обґрунтуйте класифікацію технологічних процесів за тепловим ефектом та за тепловим режимом. Зробіть їх порівнювальну характеристику й дайте оцінку. Наведіть приклади.
12. Обґрунтуйте класифікацію технологічних процесів за направленням взаємного переміщування реагуючих матеріальних (та теплових) потоків. Зробіть їх порівнювальну характеристику й дайте оцінку (шляхом аналізу DC). Наведіть приклади.
13. Обґрунтуйте класифікацію технологічних процесів за агрегатного стану реагуючих речовин. Зробіть їх порівнювальну характеристику й дайте оцінку. Наведіть приклади.

Раздел 2

- Обґрунтуйте, як слідує змінити параметри (T , P , C), щоб збільшити селективність по R та вихід R (ΦR) в процесі з паралельними реакціями в газовій фазі: $2A+3B \rightarrow R+2D-Q$.
- Обґрунтуйте, змінюючи які параметри (і як?) можна збільшити вихід продукту R в реакції між газами $4A + 3B \rightarrow 2R + S + Q$, якщо $T_{\text{конденсації}} = 45^{\circ}\text{C}$.
- Обґрунтуйте, в якому напрямку необхідно змінити T та P для збільшення Φ_{HNO_3} при абсорбції двоокису азоту у виробництві азотної кислоти:

$$3\text{NO}_2 + \text{H}_2\text{O}(\text{р}) \rightarrow 2\text{HNO}_3(\text{р}) + \text{NO} + \text{Q}$$
. Як і в скільки разів зміниться об'єм?
- Обґрунтуйте, змінюючи які параметри (і як?) можна збільшити ступінь перетворення в реакціях $2\text{SO}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{SO}_3 + \text{Q}$; $\text{SO}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{SO}_4 + \text{Q}$.
- Проаналізуйте вплив температури на рівновагу хімічних реакцій. Наведіть графіки, рівняння та приклади. Що таке оптимальна температура? Які способи зміщення рівноваги за рахунок змінювання температури використовуються у технології і Вам відомі?
- Визначити, застосовуючи принцип Ле-Шательє, куди буде зміщуватися рівновага реакцій, що мають місце при синтезі метанолу при змінені тиску:

$$\text{CO} + 2\text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{OH} + \text{Q}$$
; $\text{CO} + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{Q}$; $\text{CO} + 3\text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} + \text{Q}$;

$$2\text{CO} + 2\text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{CO}_2 + \text{Q}$$
. Як скажеться зростання тиску на селективності ($\Phi_{\text{CH}_3\text{OH}}$)?
- Визначити, використовуючи принцип Ле-Шательє, як бути змінюватись рівноважний вихід водню при зростанні температури й тиску для реакцій

$$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O}(\text{пара}) \rightarrow \text{CO} + 3\text{H}_2 - \text{Q}$$
; $\text{CO} + \text{H}_2\text{O}(\text{пара}) \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2 + \text{Q}$.
- Визначте поняття рівноваги в технологічних процесах. Охарактеризуйте відміну оборотних реакцій від необоротних. Визначте поняття рівноважного виходу (рівноважного ступеня перетворення) й константи рівноваги.
- Визначте фактори, що оказують дію на рівновагу ХТП. Сформулюйте принцип Ле-Шательє й проілюструйте його застосування в хімічній технології на конкретних прикладах.
- Проаналізуйте вплив складу реакційної суміші (концентрації реагуючих речовин) на рівновагу хімічних реакцій. Обґрунтуйте способи зміщення рівноваги шляхом змінювання концентрації компонентів суміші (сировини та продуктів).
- Визначте, які методи зміщення рівноваги можуть бути використані для зсуву вправо рівноваги реакції в газовій фазі $nA + mB \rightarrow pR + qS - \text{Q}$ ($n+m < p+q$). Обґрунтуйте свою відповідь.
- При виробництві аміаку з природного газу послідовно здійснюються реакції:

$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O(пара)} \rightleftharpoons \text{CO} + 3\text{H}_2 - Q; \text{CO} + \text{H}_2\text{O(пара)} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}_2 + Q;$
 $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightleftharpoons 2\text{NH}_3 + Q.$ Обґрунтуйте, за рахунок яких факторів можна змістити рівновагу цих реакцій вправо, щоб збільшити вихід продуктів?

13. Обґрунтуйте, змінюючи які параметри (і як?) можна зсунути вправо рівновагу реакції між газами $\text{A} + 2\text{B} \rightleftharpoons 3\text{R} + 4\text{S}-Q$, якщо B значно дешевший за A .
14. Обґрунтуйте, як слід змінити параметри для збільшення виходу HCl при сульфатному методі виробництва та при синтезі з хлору та водню:
 $2\text{NaCl}_{(\text{T})} + \text{H}_2\text{SO}_{4(\text{p})} \rightleftharpoons \text{Na}_2\text{SO}_{4(\text{T})} + 2\text{HCl}_{(\text{г})} - Q; \text{H}_2 + \text{Cl}_2 \rightleftharpoons 2\text{HCl} + Q.$
15. Охарактеризуйте вплив тиску на рівновагу хімічних реакцій. Проаналізуйте залежність X_A , $\text{рівн.} = f(P)$ для різних випадків. Обґрунтуйте способи зміщення рівноваги за рахунок зміни тиску.
16. Обґрунтуйте, зміною яких параметрів можна компенсувати зміщення рівноваги вліво, якщо реакцію типу $\text{A}+\text{B} \rightleftharpoons \text{R} + 3\text{S}-Q$ необхідно провести при підвищенні тискові.
17. Обґрунтуйте, використовуючи які параметри (і як?) можна зсунути вправо рівновагу реакцій
 $\text{A} + \text{B} \rightleftharpoons \text{R} + 3\text{S}-Q; \text{A}+\text{B} \rightleftharpoons \text{R} + \text{S} + Q.$
18. Обґрунтуйте, як можна збільшити вихід цільового продукту (R) в реакції між газами: $n\text{A} + m\text{B} \rightleftharpoons p\text{R} + Q$, якщо $m + n > p$; концентрація A - 97%, концентрація B - 34% (в вихідних сировинних матеріалах); A значно дешевший за B .

Розділ 3

1. Сформулюйте поняття швидкості гомогенних ХТП. Проаналізуйте основне рівняння швидкості й оцініть фактори, що впливають на швидкість.
2. Сформулюйте поняття про швидкість хіміко-технологічних процесів. Складіть та проаналізуйте кінетичну модель ХТП.
3. Проаналізуйте вплив температури на кінетику реакцій. Обґрунтуйте фізичний смисл та наведіть кількісну характеристику. Проаналізуйте вплив тиску на швидкість гомогенних реакцій в системах Г-Г та Р-Р. Обґрунтуйте способи збільшення швидкості. Визначте поняття "Економічно раціональний тиск".
4. Проаналізуйте вплив складу реакційної суміші (концентрації реагуючих речовин) на швидкість гомогенних реакцій. Напишіть кінетичні рівняння для різних типів реакцій:



■ S. Які способи збільшення швидкості випливають з аналізу цих рівнянь?

5. Проаналізуйте фактори, що обмежують підвищення температури технологічного процесу. Визначте поняття оптимальної (Топт.) та економічно раціональної (Тек. рац.) температури.
6. Сформулюйте поняття енергії активації та обґрунтуйте методи її зниження при здійсненні хімічних процесів.
7. Сформулюйте поняття про рушійну силу процесу. Обґрунтуйте способи збільшення швидкості гетерогенних процесів шляхом збільшення рушійної сили.
8. Сформулюйте поняття швидкості гетерогенних процесів. Дайте поняття про стадію, що лімітує процес, та методах її визначення. Перелічіть області протикання гетерогенних процесів. Запишіть основне рівняння швидкості й проаналізуйте його.
9. Проаналізуйте залежність швидкості гетерогенних процесів від поверхні міжфазного контакту. Оцініть способи збільшення поверхні контакту реагуючих фаз для системи Г-Т.
10. Проаналізуйте, в яких областях можуть протікати гетерогенні процеси. З цією метою зробіть вивід константи швидкості для гетерогенної реакції I-го порядку в системі Г-Т $A(r) + B(t) \rightleftharpoons R(r)$.
11. Проаналізуйте вплив Т на швидкість хімічних реакцій. Визначте: що таке Топтимальна? ЛОТ? Текономічно раціональна?
12. Проведіть класифікацію каталітичних процесів. З яких елементарних стадій складається гетерогенний каталіз? Розкажіть про апаратурне оформлення процесів в системах Г-Т.
13. Проаналізуйте вплив Т на рівновагу й швидкість ХТП. Обґрунтуйте побудову оптимального температурного режиму для оборотної екзотермічної реакції $A \hat{\rightarrow} R + Q$
14. Оцініть застосування каталізу в хімічній промисловості. Сформулюйте основні положення каталізу. Визначте як впливає каталіз на оборотність хімічної реакції.
15. Відобразіть на графіках й поясніть залежність $C = f(t)$ для простих (необоротної, оборотної) та складних (послідовної, паралельної) реакцій
 $A \rightleftharpoons R$, $A \hat{\rightarrow} R$; $A \rightleftharpoons R \rightleftharpoons S$; $A \rightleftharpoons R$

■S. Які практичні висновки можна з цього зробити?

16. Відобразіть на графіках й поясніть залежності $r = f(T, X)$ та $X = f(T, t)$ для простих оборотних екзотермічних реакцій. Які оптимальні температурні умови при проведенні цих реакцій, як їх практично реалізувати?
17. Визначте поняття "активність каталізатору" та "температура запалювання". Які способи підвищення активності каталізаторів Ви знаєте?
18. Поясніть фізико-хімічну сутність каталізу. Дайте визначення селективності каталізатора та розкажіть про її використання в хімічній технології.

19. Розкажіть про швидкість гомогенного хімічного процесу. Проаналізуйте рівняння швидкості гомогенного ХТП $A + B \rightarrow 2S + Q$; оцініть фактори, що впливають на швидкість реакції.

Раздел 4

1. Дайте визначення реактору ідеального витіснення (РІВ). Покажіть характер змінювання основних параметрів в чі та просторі. Виведіть характеристичне рівняння реактору
2. Дайте визначення реактору ідеального змішування періодичної дії. Покажіть характер змінювання основних параметрів в чі та просторі. Проаналізуйте характеристичне рівняння РІЗ-П.
3. Розкажіть у чому суть реактора ідеального змішування безперервної дії. Виведіть характеристичне рівняння РІЗ-Б.
4. Розкажіть про каскад реакторів змішування. Покажіть характер змінювання основних параметрів у каскаді. Розкажіть про графічний метод визначення чу пе ребуття у каскаді.
5. Зробіть вивід рівняння теплового балансу для адіабатичних реакторів змішування й витіснення.
6. Розкажіть про вплив теплових факторів на вибір моделі реактора. Проведіть класифікацію реакторів по тепловому режиму.
7. Проведіть зрівнювання РІЗ-П та РІВ по продуктивності.
8. Проведіть вибір моделі реактору для забезпечення селективності необоротного процесу з паралельними реакціями, кожна з яких протікає з константами швидкості k_1 та k_2 та порядками реакцій n_1 та n_2 .
9. Обґрунтуйте спосіб організації технологічної схеми, що забезпечує селективність при протіканні послідовних реакцій, в залежності від величини співвідношення k_1/k_2 .
10. Наведіть графіки, які характеризують зміну концентрації реагентів в просторі та чі для різних моделей ідеальних реакторів та прокоментуйте їх.
11. Проведіть вибір моделі реактору для здійснення оборотних екзотермічних реакцій в адіабатичних умовах. Проаналізуйте способи наближення до оптимальної температурної послідовності.
12. Проведіть порівняння реакторів ідеального витіснення й ідеального змішування безперервної дії по продуктивності. Визначте співвідношення t_{RIC-B}/t_{RIV} при одержанні одного й того ж ступеня перетворення.
13. Проведіть вибір моделі реактора для забезпечення максимального виходу продукту для випадку росту селективності при збільшенні ступеня перетворення.
14. Розкажіть про способи забезпечення оптимального температурного режиму при проведенні оборотних екзотермічних реакцій в окремому реакторі й реакторних системах. Для кожного випадку зобразіть графічні залежності $X=f(T)$.
15. Проведіть вибір моделі реактора для забезпечення селективності при протіканні простих необоротних послідовних реакцій.

16. Розкажіть про каскад реакторів змішування та графічний метод визначення числа реакторів у каскаді.
17. Розкажіть про каскад реакторів змішування та алгебраїчний метод визначення числа реакторів у каскаді.
18. Здійсніть порівняння (якісне) реакторів ідеального витіснення й ідеального змішування безперервної дії по продуктивності для простих необоротних реакцій.
19. Проведіть вибір моделі реактора для проведення ендотермічних реакцій в адіабатичних умовах.
20. Проведіть вибір моделі реактора та способу організації процесу для забезпечення селективності при протіканні паралельних реакцій.

Раздел 5

1. Розкажіть, які задачі вирішуються на стадіях сухої та мокрої очистки випального газу? Які фізико-хімічні основи стадії очистки? Які методи й апарати використовуються для очистки від пилу?
2. Викладіть фізико-хімічні основи процесів окислення NO до NO₂ та абсорбції NO₂ водою. Як вибираються оптимальні параметри процесу - температура, тиск? Як визначається реакційний об'єм апаратури?
3. Викладіть фізико-хімічні основи процесу окислення аміаку на каталізаторі. Дайте характеристику каталізаторів, що застосовуються у промисловості. Намалюйте та поясніть технологічну схему окислення NH₃ на каталізаторі.
4. Викладіть фізико-хімічні основи процесу синтезу аміаку й наведіть його апаратурне оформлення. Сформулюйте вимоги, що пред'являються до колони синтезу. Як реалізується оптимальний температурний режим у колоні синтезу?
5. Як вибираються оптимальні параметри процесу синтезу аміаку - температура, тиск, об'ємна швидкість? Які каталізатори використовують?
6. Викладіть фізико-хімічні основи процесу конверсії окису вуглецю водяною парою та наведіть його апаратурне оформлення. Як реалізується оптимальний температурний режим у контактному апараті?
7. Викладіть фізико-хімічні основи процесу конверсії метану водяною парою та киснем при виробництві азото-водневої суміші. Охарактеризуйте технологічні схеми, що використовуються у промисловості та зробіть вибір.
8. Розкажіть про фізико-хімічні основи та апаратурне оформлення процесу окислення сірчистого ангідриду на каталізаторі. Як реалізується оптимальний температурний режим в контактному апараті?
9. Дайте хімічну схему виробництва сірчаної кислоти з колчедану й розкажіть про фізико-хімічні основи та апаратурне оформлення процесу окислення сірчистого ангідриду на каталізаторі.
10. Проаналізуйте вплив тиску, температури, об'ємної швидкості й характеру каталізатора, що застосовується, на процес отримання синтетичного аміаку. Намалюйте принципову та технологічну схеми.

11. Розкажіть, якими окислювачами можна здійснити конверсію метану? Напишіть рівняння й дайте фізико-хімічні основи процесу. Поясніть, якими способами підтримують необхідний температурний режим при конверсії метану?
12. Розкажіть, яке значення мають сполуки азоту? Які існують методи зв'язування (фіксації) атмосферного азоту? Дайте їх порівнювальну характеристику.
13. Сформулюйте, яким основним вимогам повинна відповідати конструкція контактних апаратів для окислення SO_2 до SO_3 ? Накресліть криву зміни температурного режиму в багатошаровому контактному апараті. Як вона погоджується з лінією оптимальних температур? Наведіть схему контактного відділення.
14. Обґрунтуйте, чому в умовах клімату України доцільно виробляти, перевозити, зберігати та використовувати сірчану кислоту з концентраціями » 75% та » 92,5%, а не 100%. Які властивості має сірчана кислота? Назвіть області її застосування.
15. Обґрунтуйте вибір температури, тиску, концентрації аміаку в аміачно-повітряній суміші, що забезпечують оптимальний вихід окису азоту на стадії контактного окислення аміаку. Яку роль відіграє каталізатор? З чим пов'язані утрати каталізатора та їх величина.
16. Поясніть, який механізм утворення азотної кислоти на стадії абсорбції нітрозних газів? Якими технологічними параметрами визначається ступінь поглинання двоокису азоту?
17. Розкажіть, в чому полягають переваги схем подвійного контактування та подвійної абсорбції (ПКПА) перед схемами з одинарним контактуванням? За рахунок чого досягається збільшення ступеня перетворення двоокису сірки при проведенні процесу по схемі ПКПА?

Розділ 6

1. Охарактеризувати основні види енергії в хімічній промисловості.
2. Охарактеризувати основні джерела енергії в хімічній промисловості.
3. Раціональне використання енергії. Пояснити дію рекуператорів, регенераторів та котлів – утілізаторів.
4. Навести приклади енерготехнологічних схем в хімічній технології.
5. Використання води у хімічній промисловості.
6. Характеристика різних вод у хімічній промисловості.
7. Якість води та методи її оцінки.
8. Промислове водопідготовання (відстоювання, коагуляція, фільтрування, пом'ягчення, обезсолювання, нейтралізація, дегазація, обеззараження).
9. Вплив виробничої діяльності людини на довкілля.
10. Поняття про гранично допустимі концентрації (ГДК) ти викиди (ГДВ).
11. Охорона природи та необхідність очистки промислових викидів від шкідливих домішок.
12. Класифікація сировини хімічної промисловості за різними ознаками.
13. Підготовання сировини у хіміко-технологічних процесах.

14. Принципи збагачення (концентрування) твердої, рідкої та газоподібної сировини.
15. Механічні засоби збагачення твердих матеріалів. Опис та принципові схеми.
16. Хімічне виробництво як складна система.
17. Види моделей (описів) ХТС: хімічна схема процеса та математична модель; функціональна, структурна, операційна, технологічна та ін.
18. Приклади опису різних конкретних технологічних процесів (бажано пов"язаних з выбраною спеціальністю).
19. Характеристика та запаси сировини у хімічній промисловості.
20. Пошук найбільш дешевих видів сировини у хімічній промисловості.
21. Компексне використання сировини та комбінування підприємств.
22. Заміна харчової сировини нехарчовою та рослинної сировини мінеральною.
23. Поняття екології.
24. Причини викнення протиріч між науково-технічною революцією та довкіллям.
25. Охорона природи на необхідність очищення промислових викидів.
26. Знешкодження стічних вод.
27. Створення водообернених циклів.
28. Утилізація та знешкодження твердих відходів.
29. Флотаційний метод збагачення сировини. Принцип дії флотаційних машин, ескізи.
30. Загальні вимоги до хіміко-технологічних систем.
31. Склад ХТС. Елементи та потоки.
32. Технологічні зв"язки елементів ХТС. Потоки. Види зв"язків.
33. Приклади застосування різних видів зв"язків в синтезі хіміко-технологічних систем.

ЗАДАЧИ

Задание 1

Сколько граммов сухого вещества (СВ) и воды (H₂O) содержится в A мл раствора В концентрацией С плотностью d?

Пара-метр	№ варианта														
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
B	KOH			NaCl			KNO ₃			(NH ₄) ₂ SO ₄			Na ₂ HPO ₄		
M, г/мо ль	56,11			58,44			101,11			132,16			141,96		
A, мл	30	25	38	42	53	62	75	87	97	100	12	13	15	8	9
C	20%	1N	0,5M	34%	2N	3M	6%	3N	1M	1%	2N	9M	22%	1N	2M
d, г/cm ³	1,176	1,192	1,175	1,336	1,442	1,554	1,052	1,155	1,056	1,0117	1,334	1,667	1,190	1,334	1,443
Пара-метр	№ варианта														
	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
B	K ₂ CO ₃			KCl			CuCl ₂			Na ₃ PO ₄			NaOH		
M, г/мо ль	138,21			74,56			134,45			163,94			40		
A, мл	20	25	38	42	53	62	75	87	97	100	11	9	7	6	3
C	20%	1N	0,5M	34%	2N	3M	6%	3N	1M	1%	7N	9M	22%	1M	2N
d, г/cm ³	1,176	1,334	1,282	1,336	1,668	1,887	1,015	1,999	1,335	1,012	1,889	1,882	1,196	1,223	1,329

Задание 2

Сколько граммов раствора F концентрацией C_F и плотностью d_F потребуется для взаимодействия с V мл раствора G концентрацией C_G плотностью d_G.

Пара-метр	# варианта														
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
F	NaOH			H ₂ SO ₄			NH ₄ OH			NaCl			HCl		
M _F , г/моль	40			98,08			35,05			58,44			36,5		
C _F	20%	1N	0,5 М	35%	2N	3 М	5%	3N	1 М	3%	2N	4 М	45%	1N	2M
d _F , г/см ³		1,043	1,021		1,066	1,219		0,982	0,992		1,155	1,226		1,018	1,038
G	HNO ₃			KOH			H ₂ SO ₄			H ₂ SO ₄			NH ₄ OH		
M _{G,,} г/моль	63,01			56,11			98,08			98,08			35,05		
V _{G,МЛ}	35	40	45	36	49	51	25	36	19	47	34	65	67	82	40
C _{G,%}	60	10	16	34	16	18	5	30	24	8	10	22	24	28	10
d _G , г/см ³	1,031	1,054	1,09	1,336	1,134	1,156	1,03	1,287	1,263	1,05	1,054	1,155	0,910	0,898	0,958
Пара-метр	# варианта														
	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
F	NaOH			H ₂ SO ₄			NH ₄ OH			NaCl			HCl		
M _F , г/моль	40			98,08			35,05			58,44			36,5		
C _F	20%	1N	0,5 М	35%	2N	3 М	5%	3N	1 М	9%	5N	4 М	32%	1N	2M
d _F г/см ³		1,043	1,021		1,066	1,219		0,982	0,992		1,155	1,226		1,018	1,038
G	CaCl ₂			K ₂ CO ₃			HNO ₃			H ₃ PO ₄			NaOH		
M _G , г/моль	110,99			138,21			63,01			98			40		
V _{G,МЛ}	35	40	45	36	49	51	25	36	19	47	34	65	67	50	60
C _{G,%}	20	30	40	34	32	15	6	16	26	8	12	18	24	20	40

$d_G \text{ г/см}^3$	1,121	1,129	1,131	1,336	1,332	1,245	1,031	1,089	1,153	1,051	1,11	1,121	1,263	1,219	1,430
----------------------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	-------

Задание 3

Привести к нормальным условиям объем газа V мл, собранного над водой при температуре $t^0\text{C}$ и давлении P , кПа. Определить степень отклонения объема от измеренного.

Пара-метр	# варианта														
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
$V, \text{мл}$	20	25	38	42	53	62	75	87	97	50	12	13	15	16	18
$t^0\text{C}$	20	30	10	50	80	60	40	70	10	80	40	10	70	30	70
$P, \text{кПа}$	105,3	112,5	103,2	132,3	106,6	204,5	115,2	146,3	200,1	120,5	200,5	103,5	110,6	102,8	110,6
Пара-метр	# варианта														
	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
$V, \text{мл}$	86	28	39	43	59	64	99	77	40	10	12	13	15	18	22
$t^0\text{C}$	20	30	45	50	55	60	65	70	73	80	40	58	70	50	60
$P, \text{ам}$	104,7	202,8	109,9	105,9	105,3	112,5	103,2	132,3	106,6	105,3	112,5	103,2	132,3	106,6	204,5

Задание 4

Составить материальный баланс в общем виде, рассчитать состав равновесной смеси (в мольных долях) и вывести формулу для расчета равновесной степени превращения X_A^* по K_p для газофазной реакции Y при нормальных условиях и начальных концентрациях веществ $N_{A,0} = N_{A,0}; N_{B,0} = N_{B,0}; N_{R,0} = N_{S,0} = 0$

Пара-метр	# варианта				
	1	2	3	4	5

Y	$A \Leftrightarrow R+S$	$A+B \Leftrightarrow 2R$	$2A \Leftrightarrow R$	$A \Leftrightarrow 2R+S$	$A \Leftrightarrow R+S$
<i>Пара- метр</i>	<i>№ варианта</i>				
	6	7	8	9	10
Y	$A+B \Leftrightarrow R+S$	$A+B \Leftrightarrow R$	$2A+B \Leftrightarrow R$	$A+2B \Leftrightarrow 2R$	$A \Leftrightarrow R+2S$
<i>Пара- метр</i>	<i>№ варианта</i>				
	11	12	13	14	15
Y	$A+B \Leftrightarrow 2R$	$2A+B \Leftrightarrow 2R$	$A \Leftrightarrow 2R$	$2A \Leftrightarrow 2R+S$	$A+2B \Leftrightarrow R$
<i>Пара- метр</i>	<i>№ варианта</i>				
	16	17	18	19	20
Y	$2A \Leftrightarrow R+2S$	$A+2B \Leftrightarrow R$	$2A \Leftrightarrow R$	$A \Leftrightarrow R+3S$	$A \Leftrightarrow 3R$
<i>Пара- метр</i>	<i>№ варианта</i>				
	21	22	23	24	25
Y	$A+B \Leftrightarrow R+3S$	$A+3B \Leftrightarrow 2R$	$2A+B \Leftrightarrow 2R$	$2A+B \Leftrightarrow 2R$	$A \Leftrightarrow R+2S$
<i>Пара-</i>	<i>№ варианта</i>				

<i>метр</i>	26	27	28	29	30
<i>Y</i>	$3A+B \rightleftharpoons 2R$	$A+B \rightleftharpoons 3R$	$3A+2B \rightleftharpoons R$	$2A \rightleftharpoons R+3S$	$A+2B \rightleftharpoons 3R$

Задание 5

Рассчитать материальный баланс процесса Y при фактической степени превращения X_A ; на вход реактора поступает вещество A в количестве W_A .

<i>Пара- метр</i>	<i>№ варианта</i>				
	1	2	3	4	5
<i>Y</i>	$2NO+O_2 \rightleftharpoons 2NO_2 +Q$	$N_2+3H_2 \rightleftharpoons 2NH_3 +Q$	$2SO_2+O_2 \rightleftharpoons 2SO_3 +Q$	$CO+2H_2 \rightleftharpoons CH_3OH +Q$	$2CO+O_2 \rightleftharpoons 2CO_2 +Q$
X_A	0,99	0,45	0,90	0,65	0,95
W_A	50000 кг/ч	3000 кмоль/ч	120000 м ³ /ч	20000 кг/ч	30000 м ³ /ч
<i>Пара- метр</i>	<i>№ варианта</i>				
	6	7	8	9	10
<i>Y</i>	$CO+H_2O \rightleftharpoons CO_2+H_2+Q$	$CH_4+H_2O \rightleftharpoons 3H_2+CO-Q$	$2H_2S+3O_2 \rightleftharpoons 2SO_2+2H_2O+Q$	$C_2H_4+H_2O \rightleftharpoons C_2H_5OH +Q$	$4NH_3+5O_2 \rightleftharpoons 4NO+6H_2O+Q$
X_A	0,99	0,45	0,90	0,65	0,95
W_A	50000 кг/ч	3000 кмоль/ч	120000 м ³ /ч	20000 кг/ч	30000 м ³ /ч
<i>Пара- метр</i>	<i>№ варианта</i>				
	11	12	13	14	15

Y	$2NO + O_2 \rightleftharpoons 2NO_2 + Q$	$N_2 + 3H_2 \rightleftharpoons 2NH_3 + Q$	$2SO_2 + O_2 \rightleftharpoons 2SO_3 + Q$	$CO + 2H_2 \rightleftharpoons CH_3OH + Q$	$2CO + O_2 \rightleftharpoons 2CO_2 + Q$
X_A	0,99	0,45	0,90	0,65	0,95
W_A	50000 кмоль/ч	3000 кг/ч	12000 кг/ч	20000 м ³ /ч	30000 кмоль/ч
<i>Параметр</i>	<i>№ варианта</i>				
	16	17	18	19	20
Y	$CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2 + Q$	$CH_4 + H_2O \rightleftharpoons 3H_2 + CO - Q$	$2H_2S + 3O_2 \rightleftharpoons 2SO_2 + 2H_2O + Q$	$C_2H_4 + H_2O \rightleftharpoons C_2H_5OH + Q$	$4NH_3 + 5O_2 \rightleftharpoons 4NO + 6H_2O + Q$
X_A	0,99	0,45	0,90	0,65	0,95
W_A	50000 м ³ /ч	3000 кмоль/ч	12000 кг/ч	20000 м ³ /ч	30000 кмоль/ч
<i>Параметр</i>	<i>№ варианта</i>				
	21	22	23	24	25
Y	$2NO + O_2 \rightleftharpoons 2NO_2 + Q$	$N_2 + 3H_2 \rightleftharpoons 2NH_3 + Q$	$2SO_2 + O_2 \rightleftharpoons 2SO_3 + Q$	$CO + 2H_2 \rightleftharpoons CH_3OH + Q$	$2CO + O_2 \rightleftharpoons 2CO_2 + Q$
X_A	0,99	0,45	0,90	0,65	0,95
W_A	54000 кмоль/ч	3500 м ³ /ч	12000 м ³ /ч	220000 м ³ /ч	350000 м ³ /ч
<i>Параметр</i>	<i>№ варианта</i>				
	26	27	28	29	30
Y	$CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2 + Q$	$CH_4 + H_2O \rightleftharpoons 3H_2 + CO - Q$	$2H_2S + 3O_2 \rightleftharpoons 2SO_2 + 2H_2O + Q$	$2C_2H_6 + O_2 \rightleftharpoons C_2H_5OH + Q$	$4NH_3 + 5O_2 \rightleftharpoons 4NO + 6H_2O + Q$
X_A	0,99	0,45	0,90	0,65	0,95

W_A	130 кг/ч	600 кмоль/ч	700 м ³ /ч	1000 кг/ч	200 кг/ч
-------	----------	-------------	-----------------------	-----------	----------

Задание 6

Рассчитать материальный баланс процесса Y при фактической степени превращения X; на вход реактора поступает поток W; состава S. Степень превращения относить к компоненту, взятыму в недостатке.

Пара-метр	№ варианта									
	1	2	3	4	5					
Y	$2NO + O_2 \rightleftharpoons 2NO_2 + Q$	$N_2 + 3H_2 \rightleftharpoons 2NH_3 + Q$	$2SO_2 + O_2 \rightleftharpoons 2SO_3 + Q$	$CO + 2H_2 \rightleftharpoons CH_3OH + Q$		$2CO + O_2 \rightleftharpoons 2CO_2 + Q$				
X	0,99	0,45	0,90	0,65	0,95					
W	50000 кг/ч	3000 кмоль/ч	120000 м ³ /ч	20000 кг/ч	30000 м ³ /ч					
S	B_{-80}	n_i	B_{-80}	g_i	B_{-80}	n_i	B_{-80}	g_i	<i>Вещест-</i> <i>во</i>	g_i
	NO	0,3	N_2	0,4	SO_2	0,2	CO	0,3	CO	0,3
	O_2	0,5	H_2	0,3	O_2	0,1	H_2	0,6	O_2	0,5
	NO_2	0,1	NH_3	0,2	SO_3	0,1	CH_3OH	0,05	CO_2	0,1
	N_2	0,1	CH_4	0,1	N_2	0,6	CH_4	0,05	N_2	0,1
	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1
Пара-метр	№ варианта									
	6	7	8	9	10					
Y	$CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2 + Q$	$CH_4 + H_2O \rightleftharpoons 3H_2 + CO - Q$	$2H_2S + 3O_2 \rightleftharpoons 2SO_2 + 2H_2O + Q$	$C_2H_4 + H_2O \rightleftharpoons C_2H_5OH + Q$		$4NH_3 + 5O_2 \rightleftharpoons 4NO + 6H_2O + Q$				
X	0,99	0,45	0,90	0,65	0,95					
W	50000 кг/ч	3000 кмоль/ч	120000 м ³ /ч	20000 кг/ч	30000 м ³ /ч					
S	B_{-80}	n_i	B_{-80}	g_i	B_{-80}	n_i	B_{-80}	g_i	<i>Вещест-</i> <i>во</i>	g_i

								<i>бо</i>	
<i>CO</i>	0,3	<i>CH₄</i>	0,4	<i>H₂S</i>	0,3	<i>C₂H₄</i>	0,4	<i>NH₃</i>	0,3
<i>H₂O</i>	0,5	<i>H₂O</i>	0,3	<i>O₂</i>	0,5	<i>H₂</i>	0,4	<i>O₂</i>	0,5
<i>CO₂</i>	0,1	<i>H₂</i>	0,2	<i>SO₂</i>	0,1	<i>C₂H₅OH</i>	0,1	<i>NO</i>	0,1
<i>H₂</i>	0,0,5	<i>CO</i>	0,05	<i>H₂O</i>	0,05	<i>CH₄</i>	0,1	<i>H₂O</i>	0,05
<i>CH₄</i>	0,05	<i>CO₂</i>	0,05	<i>N₂</i>	0,05			<i>N₂</i>	0,05
<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1
<i>\Пара- метр</i>	<i>№ варианта</i>								
	11	12	13	14	15				
<i>Y</i>	$2NO + O_2 \rightleftharpoons 2NO_2 + Q$	$N_2 + 3H_2 \rightleftharpoons 2NH_3 + Q$	$2SO_2 + O_2 \rightleftharpoons 2SO_3 + Q$	$CO + 2H_2 \rightleftharpoons CH_3OH + Q$		$2CO + O_2 \rightleftharpoons 2CO_2 + Q$			
<i>X</i>	0,99	0,45	0,90	0,65	0,95				
<i>W</i>	50000 кмоль/ч	3000 кг/ч	12000 кг/ч	20000 м ³ /ч	30000 кмоль/ч				
<i>S</i>	<i>B-бо</i>	<i>n_i</i>	<i>B-бо</i>	<i>g_i</i>	<i>B-бо</i>	<i>n_i</i>	<i>B-бо</i>	<i>g_i</i>	<i>Вещес- тво</i>
	<i>NO</i>	0,3	<i>N₂</i>	0,4	<i>SO₂</i>	0,2	<i>CO</i>	0,3	<i>CO</i>
	<i>O₂</i>	0,5	<i>H₂</i>	0,3	<i>O₂</i>	0,1	<i>H₂</i>	0,6	<i>O₂</i>
	<i>NO₂</i>	0,1	<i>NH₃</i>	0,2	<i>SO₃</i>	0,1	<i>CH₃OH</i>	0,05	<i>CO₂</i>
	<i>N₂</i>	0,1	<i>CH₄</i>	0,1	<i>N₂</i>	0,6	<i>CH₄</i>	0,05	<i>N₂</i>
	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>
<i>\Пара- метр</i>	<i>№ варианта</i>								
	16	17	18	19	20				
<i>Y</i>	$CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2 + Q$	$CH_4 + H_2O \rightleftharpoons 3H_2 + CO - Q$	$2H_2S + 3O_2 \rightleftharpoons 2SO_2 + 2H_2O + Q$	$C_2H_4 + H_2O \rightleftharpoons C_2H_5OH + Q$		$4NH_3 + 5O_2 \rightleftharpoons 4NO + 6H_2O + Q$			
<i>X</i>	0,99	0,45	0,90	0,65	0,95				

W	$50000 \text{ м}^3/\text{ч}$		$3000 \text{ кмоль}/\text{ч}$		$12000 \text{ кг}/\text{ч}$		$20000 \text{ м}^3/\text{ч}$		$30000 \text{ кмоль}/\text{ч}$	
S	$B\text{-}\delta o$	n_i	$B\text{-}\delta o$	n_i	$B\text{-}\delta o$	n_i	$B\text{-}\delta o$	g_i	<i>Вещества</i>	g_i
	CO	0,3	CH_4	0,4	H_2S	0,3	C_2H_4	0,4	NH_3	0,3
	H_2O	0,5	H_2O	0,3	O_2	0,5	H_2O	0,4	O_2	0,5
	CO_2	0,1	H_2	0,2	SO_2	0,1	C_2H_5OH	0,1	NO	0,1
	H_2	0,0,5	CO	0,05	H_2O	0,05	CH_4	0,1	H_2O	0,05
	CH_4	0,05	CO_2	0,0,5	N_2	0,05			N_2	0,05
	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1
<i>Параметр</i>	<i>№ варианта</i>									
	21		22		23		24		25	
Y	$2NO + O_2 \rightleftharpoons 2NO_2 + Q$		$N_2 + 3H_2 \rightleftharpoons 2NH_3 + Q$		$2SO_2 + O_2 \rightleftharpoons 2SO_3 + Q$		$CO + 2H_2 \rightleftharpoons CH_3OH + Q$		$2CO + O_2 \rightleftharpoons 2CO_2 + Q$	
X	0,99		0,45		0,90		0,65		0,95	
W	$54000 \text{ кмоль}/\text{ч}$		$3500 \text{ м}^3/\text{ч}$		$12000 \text{ м}^3/\text{ч}$		$220000 \text{ м}^3/\text{ч}$		$350000 \text{ м}^3/\text{ч}$	
S	$B\text{-}\delta o$	n_i	$B\text{-}\delta o$	g_i	$B\text{-}\delta o$	n_i	$B\text{-}\delta o$	g_i	<i>Вещества</i>	n_i
	NO	0,3	N_2	0,4	SO_2	0,2	CO	0,3	CO	0,3
	O_2	0,5	H_2	0,3	O_2	0,1	H_2	0,6	O_2	0,5
	NO_2	0,1	NH_3	0,2	SO_3	0,1	CH_3OH	0,05	CO_2	0,1
	N_2	0,1	CH_4	0,1	N_2	0,6	CH_4	0,05	N_2	0,1
	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1
	<i>№ варианта</i>									
<i>Параметр</i>	26		27		28		29		30	
Y	$CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2 + Q$		$CH_4 + H_2O \rightleftharpoons 3H_2 + CO - Q$		$2H_2S + 3O_2 \rightleftharpoons 2SO_2 + 2H_2O + Q$		$2C_2H_6 + O_2 \rightleftharpoons C_2H_5OH + Q$		$4NH_3 + 5O_2 \rightleftharpoons 4NO + 6H_2O + Q$	

X	0,99		0,45		0,90		0,65	
W	130 кг/ч		600 кмоль/ч		700 м ³ /ч		1000 кг/ч	
S	B- <i>so</i>	<i>n_i</i>	B- <i>so</i>	<i>g_i</i>	B- <i>so</i>	<i>g_i</i>	B- <i>so</i>	<i>n_i</i>
	CO	0,3	CH ₄	0,4	H ₂ S	0,3	C ₂ H ₆	0,4
	H ₂ O	0,5	H ₂ O	0,3	O ₂	0,5	O ₂	0,4
	CO ₂	0,1	H ₂	0,2	SO ₂	0,1	C ₂ H ₅ OH	0,1
	H ₂	0,0,5	CO	0,05	H ₂ O	0,05	CH ₄	0,1
	CH ₄	0,05	CH ₄	0,05	N ₂	0,05		N ₂
	Всего	1	Всего	1	Всего	1	Всего	1

Задание 7

Рассчитать материальный баланс процесса Y при фактической степени превращения X; на вход реактора поступает два потока: W₁ состава S₁ и W₂ состава S₂.

Параметр	№ варианта							
	1	2	3	4	5			
Y	2NO+O ₂ ↔2NO ₂ +Q	N ₂ +3H ₂ ↔2NH ₃ +Q	2SO ₂ +O ₂ ↔2SO ₃ +Q	CO+2H ₂ ↔ CH ₃ OH +Q	2CO+O ₂ ↔2CO ₂ + Q			
X	0,99	0,45	0,90	0,65	0,95			
W ₁	30000 кг/ч	2000 кмоль/ч	120000 м ³ /ч	20000 кг/ч	30000 м ³ /ч			
S ₁	B- <i>so</i>	<i>g_i</i>	B- <i>so</i>	<i>n_i</i>	B- <i>so</i>	<i>n_i</i>	B- <i>so</i>	<i>g_i</i>
	NO	0,3	N ₂	0,4	SO ₂	0,2	CO	0,3
	O ₂	0,5	H ₂	0,3	O ₂	0,1	H ₂	0,6
	NO ₂	0,1	NH ₃	0,2	SO ₃	0,1	CH ₃ OH	0,05
	N ₂	0,1	CH ₄	0,1	N ₂	0,6	CH ₄	0,05
	Всего	1	Всего	1	Всего	1	Всего	1
	W ₂	5000 кмоль/ч	40000 м ³ /ч	3000 кмоль/ч	10000 кг/ч	50000 кмоль/ч		

S_2	<i>Воздух</i>		<i>Водород</i>		<i>Воздух</i>		<i>Водород</i>		<i>Воздух</i>	
<i>Пара- метр</i>	<i>№ варианта</i>									
	6		7		8		9		10	
Y	$CH_4 + H_2O \rightleftharpoons CO + 3H_2 - Q$		$N_2 + 3H_2 \rightleftharpoons 2NH_3 + Q$		$2H_2S + 3O_2 \rightleftharpoons 2SO_2 + 2H_2O + Q$		$CO + 2H_2 \rightleftharpoons CH_3OH + Q$		$2CO + O_2 \rightleftharpoons 2CO_2 + Q$	
X	0,99		0,40		0,99		0,65		0,95	
W_I	30000 кг/ч		20000 кг/ч		160000 м ³ /ч		20000 кг/ч		30000 м ³ /ч	
S_I	$B\text{-}\sigma$	g_i	$B\text{-}\sigma$	n_i	$B\text{-}\sigma$	n_i	$B\text{-}\sigma$	g_i	<i>Вещест- во</i>	g_i
	CH_4	0,3	N_2	0,4	H_2S	0,2	CO	0,3	CO	0,5
	H_2O	0,3	H_2	0,3	O_2	0,05	H_2	0,6	O_2	0,3
	CO	0,2	NH_3	0,2	SO_2	0,05	CH_3OH	0,05	CO_2	0,1
	H_2	0,1	CH_4	0,1	H_2O	0,6	CH_4	0,05	N_2	0,1
	N_2	0,1	-	-	N_2	0,1	-	-	-	-
	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1
W_2	5000 кмоль/ч		40000 м ³ /ч		3000 кмоль/ч		10000 кг/ч		1000 кмоль/ч	
S_2	<i>Вода</i>		<i>Водород</i>		<i>Воздух</i>		<i>Водород</i>		<i>Воздух</i>	
<i>Пара- метр</i>	<i>№ варианта</i>									
	11		12		13		14		15	
Y	$CH_4 + 2O_2 \rightleftharpoons CO_2 + 2H_2O + Q$		$4NH_3 + 5O_2 \rightleftharpoons 4NO + 6H_2O + Q$		$SO_3 + H_2O \rightleftharpoons H_2SO_4 + Q$		$2C_2H_6 + O_2 \rightleftharpoons 2C_2H_5OH + Q$		$CH_4 \rightleftharpoons C + 2H_2 - Q$	
X	0,99		0,95		0,95		0,65		0,95	
W_I	30000 кг/ч		2000 кмоль/ч		120000 м ³ /ч		20000 кмоль/ч		30000 кг/ч	
S_I	$B\text{-}\sigma$	g_i	$B\text{-}\sigma$	n_i	$B\text{-}\sigma$	n_i	$B\text{-}\sigma$	n_i	<i>Вещест- во</i>	g_i

	CH_4	0,3	NH_3	0,4	SO_3	0,7	C_2H_6	0,3	CH_4	0,3
	O_2	0,5	O_2	0,3	H_2O	0,1	O_2	0,2	C	0,5
	CO_2	0,1	NO	0,2	H_2SO_4	0,1	C_2H_5OH	0,4	H_2	0,1
	H_2O	0,05	H_2O	0,1	N_2	0,1	CH_4	0,1	H_2O	0,1
	N_2	0,05	N_2	0,0	-	-	-	-	-	--
	<i>Всего</i>	<i>1</i>	<i>Всего</i>	<i>1</i>	<i>Всего</i>	<i>1</i>	<i>Всего</i>	<i>1</i>	<i>Всего</i>	<i>1</i>
W_2	90000 кг/ч		$60000 \text{ м}^3/\text{ч}$		6000 кмоль/ч		63000 кг/ч		500 кмоль/ч	
S_2	<i>Воздух</i>		<i>Воздух</i>		<i>Вода</i>		<i>Кислород</i>		<i>Воздух</i>	
<i>Пара- метр</i>	<i>№ варианта</i>									
	16		17		18		19		20	
Y	$CH_4 + H_2O \rightleftharpoons CO + 3H_2 - Q$		$O_2 + 2H_2 \rightleftharpoons 2H_2O + Q$		$2H_2S + 3O_2 \rightleftharpoons 2SO_2 + H_2O + Q$		$CO + 2H_2 \rightleftharpoons CH_3OH + Q$		$2CO + O_2 \rightleftharpoons 2CO_2 + Q$	
X	0,99		0,40		0,99		0,65		0,95	
W_1	30000 кг/ч		20000 кг/ч		160000 кг/ч		20000 кг/ч		$30000 \text{ м}^3/\text{ч}$	
S_1	$B\text{-}so$	n_i	$B\text{-}so$	n_i	$B\text{-}so$	g_i	$B\text{-}so$	g_i	<i>Вещес- тво</i>	g_i
	CH_4	0,3	H_2	0,4	H_2S	0,2	CO	0,3	CO	0,5
	H_2O	0,3	O_2	0,3	O_2	0,05	H_2	0,6	O_2	0,3
	CO	0,2	H_2O	0,2	SO_2	0,05	CH_3OH	0,05	CO_2	0,1
	H_2	0,1	N_2	0,1	H_2O	0,6	CH_4	0,05	N_2	0,1
	N_2	0,1	-	-	N_2	0,1	-	-	-	-
	<i>Всего</i>	<i>1</i>	<i>Всего</i>	<i>1</i>	<i>Всего</i>	<i>1</i>	<i>Всего</i>	<i>1</i>	<i>Всего</i>	<i>1</i>
W_2	5000 кмоль/ч		40000 кг/ч		3000 кмоль/ч		$10000 \text{ м}^3/\text{ч}$		50000 кмоль/ч	
S_2	<i>Вода</i>		<i>Воздух</i>		<i>Кислород</i>		<i>Водород</i>		<i>Кислород</i>	
<i>Пара- метр</i>	<i>№ варианта</i>									
	21		22		23		24		25	

Y	$CH_4 + 1,5O_2 \rightleftharpoons CO + 2H_2O + Q$	$4NH_3 + 5O_2 \rightleftharpoons 4NO + 6H_2O + Q$	$SO_3 + H_2O \rightleftharpoons H_2SO_4 + Q$	$CO + 2H_2 \rightleftharpoons CH_3OH + Q$	$C_2H_4 + H_2O \rightleftharpoons C_2H_5OH + Q$				
X	$0,99$		$0,95$		$0,95$		$0,65$		$0,95$
W_1	13000 кг/ч		2000 кмоль/ч		$17000 \text{ м}^3/\text{ч}$		20000 кмоль/ч		4000 кг/ч
S_I	$B\text{-}\sigma$	n_i	$B\text{-}\sigma$	n_i	$B\text{-}\sigma$	n_i	$B\text{-}\sigma$	g_i	$Весст-\sigma$
	CH_4	$0,3$	NH_3	$0,4$	SO_3	$0,7$	CO	$0,3$	C_2H_4
	O_2	$0,5$	O_2	$0,3$	H_2O	$0,1$	H_2	$0,2$	H_2O
	CO	$0,1$	NO	$0,2$	H_2SO_4	$0,1$	$CHOO$	$0,4$	C_2H_5OH
	H_2O	$0,05$	H_2O	$0,05$	N_2	$0,1$	CH_4	$0,1$	CH_3OH
	N_2	$0,05$	N_2	$0,05$	-	-	-	-	--
	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>
W_2	5000 кг/ч		$60000 \text{ м}^3/\text{ч}$		6000 кмоль/ч		10000 кг/ч		500 кмоль/ч
S_2	<i>Воздух</i>		<i>Кислород</i>		<i>Вода</i>		<i>Водород</i>		<i>Вода</i>
<i>Пара-метр</i>	<i>№ варианта</i>								
	26		27		28		29		30
Y	$3NO_2 + H_2O \rightleftharpoons 2HNO_3 + NO + Q$	$H_2 + Cl_2 \rightleftharpoons 2HCl$	$-Q$	$2SO_2 + O_2 \rightleftharpoons 2SO_3 + Q$	$2C_2H_6 + 7O_2 \rightleftharpoons 4CO_2 + 6H_2O + Q$		$2CO + O_2 \rightleftharpoons 2CO_2 + Q$		
X	$0,99$		$0,45$		$0,90$		$0,99$		$0,98$
W_1	30000 кг/ч		2000 кмоль/ч		$120000 \text{ м}^3/\text{ч}$		20000 кг/ч		$30000 \text{ м}^3/\text{ч}$
S_I	$B\text{-}\sigma$	g_i	$B\text{-}\sigma$	n_i	$B\text{-}\sigma$	g_i	$B\text{-}\sigma$	n_i	$Весст-\sigma$
	NO_2	$0,5$	H_2	$0,4$	SO_2	$0,2$	C_2H_6	$0,3$	CO
	H_2O	$0,3$	Cl_2	$0,5$	O_2	$0,1$	O_2	$0,6$	O_2
	NO	$0,1$	HCl	$0,1$	SO_3	$0,1$	CH_3OH	$0,05$	CO_2
	HNO_3	$0,05$	-	-	N_2	$0,5$	CO_2	$0,05$	N_2

	O_2	0,05	-	-	FeS_2	0,1	H_2O		-	-
	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1
W_2	5000 кмоль/ч		$40000 \text{ м}^3/\text{ч}$		3000 кмоль/ч		10000 кг/ч		50000 кмоль/ч	
S_2	<i>Вода</i>		<i>Водород</i>		<i>Воздух</i>		<i>Воздух</i>		<i>Воздух</i>	

Задание 8

Рассчитать материальный баланс процесса Y при фактической степени превращения X; производительность реактора по веществу R равна Φ_R ; состав исходного потока S.

Параметр	<i>№ варианта</i>									
	1		2		3		4		5	
Y	$2NO + O_2 \rightleftharpoons 2NO_2$ +Q		$N_2 + 3H_2 \rightleftharpoons 2NH_3$ +Q		$2SO_2 + O_2 \rightleftharpoons 2SO_3$ +Q		$CO + 2H_2 \rightleftharpoons$ $CH_3OH + Q$		$2CO + O_2 \rightleftharpoons 2CO_2 +$ Q	
X	0,99		0,45		0,90		0,65		0,95	
Φ_R	(NO_2) 30000 кг/ч		(NH_3) 2000 кмоль/ч		(SO_3) 120000 м ³ /ч		(CH_3OH) 20000 кг/ч		(CO_2) 30000 м ³ /ч	
S	$B\text{-бо}$	g_i	$B\text{-бо}$	n_i	$B\text{-бо}$	n_i	$B\text{-бо}$	n_i	$B\text{-бо}$	g_i
	NO	0,3	N_2	0,4	SO_2	0,2	CO	0,3	CO	0,3
	O_2	0,5	H_2	0,3	O_2	0,1	H_2	0,6	O_2	0,5
	NO_2	0,1	NH_3	0,2	SO_3	0,1	CH_3OH	0,05	CO_2	0,1
	N_2	0,1	CH_4	0,1	N_2	0,6	CH_4	0,05	N_2	0,1
	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1
Параметр	<i>№ варианта</i>									
	6		7		8		9		10	
Y	$CH_4 + H_2O \rightleftharpoons$ $CO + 3H_2 - Q$		$N_2 + 3H_2 \rightleftharpoons 2NH_3$ +Q		$2H_2S + 3O_2 \rightleftharpoons$ $2SO_2 + H_2O + Q$		$CO + H_2O \rightleftharpoons$ $CO_2 + H_2 + Q$		$2CO + O_2 \rightleftharpoons 2CO_2 +$ Q	

X	0,99	0,40	0,99	0,65	0,95					
Φ_R	(H_2) 30000 кг/ч	(NH_3) 20000 кг/ч	(SO_2) 160000 м ³ /ч	(H_2) 20000 кг/ч	(CO) 30000 м ³ /ч					
S	$B-60$	g_i	$B-60$	n_i	$B-60$	n_i	$B-60$	g_i	$B-60$	g_i
	CH_4	0,3	N_2	0,4	H_2S	0,2	CO	0,3	CO	0,5
	H_2O	0,3	H_2	0,3	O_2	0,05	H_2O	0,6	O_2	0,3
	CO	0,2	NH_3	0,2	SO_2	0,05	CO_2	0,05	CO_2	0,1
	H_2	0,1	CH_4	0,1	H_2O	0,6	H_2	0,05	N_2	0,1
	N_2	0,1	-	-	N_2	0,1	-	-	-	-
	Всего	1	Всего	1	Всего	1	Всего	1	Всего	1
<i>Пара- метр</i>	<i>№ варианта</i>									
	11	12	13	14	15					
X	0,99	0,95	0,95	0,65	0,95					
Φ_R	(CO) 30000 кг/ч	(NO) 2000 кмоль/ч	(SO_3) 120000 м ³ /ч	(HCl) 20000 кмоль/ч	(CH_4) 30000 кг/ч					
S	$B-60$	g_i	$B-60$	n_i	$B-60$	n_i	$B-60$	n_i	$B-60$	g_i
	CH_4	0,3	NH_3	0,4	SO_3	0,7	Cl	0,3	CH_4	0,3
	O_2	0,5	O_2	0,3	H_2O	0,1	H_2	0,2	C	0,5
	CO	0,1	NO	0,2	H_2SO_4	0,1	HCl	0,4	H_2	0,1
	H_2O	0,05	H_2O	0,05	N_2	0,1	O_2	0,1	H_2O	0,1
	N_2	0,05	N_2	0,05	-	-	-	-	-	--
	Всего	1	Всего	1	Всего	1	Всего	1	Всего	1
<i>Пара- метр</i>	<i>№ варианта</i>									
	16	17	18	19	20					
Y	$CH_4 + H_2O \Leftrightarrow$ $CO + 3H_2 - Q$	$O_2 + 2H_2 \Leftrightarrow$ $2H_2O + Q$	$2H_2S + 3O_2 \Leftrightarrow$ $2SO_2 + H_2O + Q$	$CO + 2H_2 \Leftrightarrow$ $CH_3OH + Q$	$2CO + O_2 \Leftrightarrow 2CO_2 +$ Q					
X	0,99	0,40	0,99	0,65	0,95					
Φ_R	(H_2)	(H_2)	(SO_2)	(CH_3OH)	(CO)					

	30000 кг/ч		20000 кг/ч		160000 кг/ч		20000 кг/ч		30000 м³/ч	
S_1	$B\text{-}so$	n_i	$B\text{-}so$	n_i	$B\text{-}so$	g_i	$B\text{-}so$	g_i	$B\text{-}so$	g_i
	CH_4	0,3	H_2	0,4	H_2S	0,2	CO	0,3	CO	0,5
	H_2O	0,3	O_2	0,3	O_2	0,05	H_2	0,6	O_2	0,3
	CO	0,2	H_2O	0,2	SO_2	0,05	CH_3OH	0,05	CO_2	0,1
	H_2	0,1	N_2	0,1	H_2O	0,6	CH_4	0,05	N_2	0,1
	N_2	0,1	-	-	N_2	0,1	-	-	-	-
	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1
<i>Пара-метр</i>	<i>№ варианта</i>									
	21		22		23		24		25	
Y	$CH_4+1,5O_2 \Leftrightarrow CO+2H_2O+Q$		$4NH_3+5O_2 \Leftrightarrow 4NO+6H_2O+Q$		$SO_3+H_2O \Leftrightarrow H_2SO_4+Q$		$2CH_4+O_2 \Leftrightarrow 2CO+4H_2 +Q$		$C_2H_4 +H_2O \Leftrightarrow C_2H_5OH+Q$	
X	0,99		0,95		0,95		0,65		0,95	
Φ_R	(CO) 13000 кг/ч		(NO) 2000 кмоль/ч		(SO ₃) 17000 м³/ч		(H ₂) 20000 кмоль/ч		(C ₂ H ₅ OH) 4000 кг/ч	
S	$B\text{-}so$	n_i	$B\text{-}so$	n_i	$B\text{-}so$	n_i	$B\text{-}so$	g_i	$B\text{-}so$	n_i
	CH_4	0,3	NH_3	0,4	SO_3	0,7	CH_4	0,3	C_2H_4	0,3
	O_2	0,5	O_2	0,3	H_2O	0,1	O_2	0,2	H_2O	0,5
	CO	0,1	NO	0,2	H_2SO_4	0,1	CO	0,4	C_2H_5OH	0,1
	H_2O	0,05	H_2O	0,1	N_2	0,1	H_2	0,05	CH_3OH	0,1
	N_2	0,05	N_2	0,05	-	-	N_2	0,05	-	--
	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1	<i>Всего</i>	1
<i>Пара-метр</i>	<i>№ варианта</i>									
	26		27		28		29		30	
Y	$3NO_2+H_2O \Leftrightarrow 2HNO_3+NO+Q$		$H_2+Cl_2 \Leftrightarrow 2HCl-Q$		$2SO_2+O_2 \Leftrightarrow 2SO_3+Q$		$2C_2H_6+7O_2 \Leftrightarrow CO_2+6H_2O+Q$		$2CO+O_2 \Leftrightarrow 2CO_2+Q$	

X	0,99		0,45		0,90		0,99		0,98	
Φ_R	(HNO_3) 30000 кг/ч		(HCl) 2000 кмоль/ч		(SO_3) 120000 м ³ /ч		(C_2H_6) 20000 кг/ч		(CO) 30000 м ³ /ч	
S	$B\text{-}\infty$	g_i	$B\text{-}\infty$	n_i	$B\text{-}\infty$	g_i	$B\text{-}\infty$	n_i	$B\text{-}\infty$	g_i
	NO_2	0,5	H_2	0,4	SO_2	0,3	C_2H_6	0,3	CO	0,3
	H_2O	0,3	Cl_2	0,5	O_2	0,1	O_2	0,6	O_2	0,5
	NO	0,1	HCl	0,1	SO_3	0,1	CH_3OH	0,05	CO_2	0,1
	HNO_3	0,05	-	-	N_2	0,5	CO_2	0,05	N_2	0,1
	O_2	0,05	-	-	-	-	H_2O	-	-	-
	Всего	1	Всего	1	Всего	1	Всего	1	Всего	1

Задание 9

Рассчитать материальный баланс процесса горения в воздухе газовой смеси W состава S . Избыток воздуха – B . Степень превращения $X = 1$.

Пара-метр	<i>№ варианта</i>									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$B, \%$	12		13		14		16		18	
W	30000 кг/ч		2000 кмоль/ч		120000 м ³ /ч		20000 кг/ч		30000 кг/ч	
S	$B\text{-}\infty$	g_i	$B\text{-}\infty$	n_i	$B\text{-}\infty$	n_i	$B\text{-}\infty$	n_i	$B\text{-}\infty$	g_i
	CO	0,3	CH_4	0,4	CO	0,2	CO	0,3	C	0,3
	C_2H_4	0,3	C_2H_4	0,3	CH_4	0,1	H_2	0,5	CO	0,1
	C_2H_6	0,1	C_2H_6	0,2	H_2	0,1	C_2H_6	0,05	N_2	0,1
	N_2	0,1	N_2	0,1	N_2	0,5	CO_2	0,05	O_2	0,4
	CO_2	0,2	H_2O	0,0	CO_2	0,1	H_2O	0,1	H_2O	0,1
	Всего	1	Всего	1	Всего	1	Всего	1	Всего	1
Пара-метр	<i>№ варианта</i>									
	6	7	8	9	10					
$B, \%$	20		19		18		17		16	
W	30000 кг/ч		25000 кг/ч		1000 м ³ /ч		20000 кг/ч		30000 м ³ /ч	

<i>S</i>	<i>B-60</i>	<i>n_i</i>	<i>B-60</i>	<i>n_i</i>	<i>B-60</i>	<i>g_i</i>	<i>B-60</i>	<i>n_i</i>	<i>B-60</i>	<i>g_i</i>
	<i>CO</i>	0,3	<i>CH₄</i>	0,4	<i>C₂H₆</i>	0,2	<i>CO</i>	0,3	<i>CH₄</i>	0,3
	<i>C₂H₄</i>	0,5	<i>C₂H₄</i>	0,3	<i>CH₄</i>	0,1	<i>H₂</i>	0,5	<i>CO</i>	0,1
	<i>C₂H₆</i>	0,1	<i>C₂H₆</i>	0,2	<i>H₂</i>	0,1	<i>C₂H₆</i>	0,05	<i>N₂</i>	0,1
	<i>N₂</i>	0,1	<i>CO₂</i>	0,1	<i>N₂</i>	0,5	<i>CO₂</i>	0,05	<i>O₂</i>	0,4
	<i>CO₂</i>	0,0	<i>H₂O</i>	0,0	<i>CO₂</i>	0,1	<i>H₂O</i>	0,1	<i>H₂O</i>	0,1
	<i>Всего</i>	1								
<i>Пара- метр</i>	<i>№ варианта</i>									
	11		12		13		14		15	
<i>B, %</i>	22		21		19		18		17	
<i>W</i>	<i>130000 м³/ч</i>		<i>2000 кмоль/ч</i>		<i>120000 кг³/ч</i>		<i>20000 кмоль/ч</i>		<i>30000 м³/ч</i>	
<i>S</i>	<i>B-60</i>	<i>g_i</i>	<i>B-60</i>	<i>n_i</i>	<i>B-60</i>	<i>n_i</i>	<i>B-60</i>	<i>g_i</i>	<i>B-60</i>	<i>n_i</i>
	<i>CO</i>	0,2	<i>CH₄</i>	0,4	<i>CO</i>	0,2	<i>CO</i>	0,3	<i>CH₄</i>	0,3
	<i>C₂H₄</i>	0,5	<i>H₂</i>	0,3	<i>CH₄</i>	0,1	<i>H₂</i>	0,5	<i>CO</i>	0,1
	<i>C₂H₆</i>	0,1	<i>C₂H₆</i>	0,2	<i>H₂</i>	0,1	<i>C₂H₆</i>	0,05	<i>C₂H₄</i>	0,1
	<i>N₂</i>	0,1	<i>N₂</i>	0,1	<i>N₂</i>	0,5	<i>N₂</i>	0,05	<i>O₂</i>	0,4
	<i>CO₂</i>	0,1	<i>H₂O</i>	0,0	<i>CO₂</i>	0,1	<i>H₂O</i>	0,1	<i>H₂O</i>	0,1
	<i>Всего</i>	1								
<i>Пара- метр</i>	<i>№ варианта</i>									
	16		17		18		19		20	
<i>B, %</i>	23		22		21		19		18	
<i>W</i>	<i>13000 кг/ч</i>		<i>25000 кг/ч</i>		<i>1000 м³/ч</i>		<i>20000 кг/ч</i>		<i>30000 м³/ч</i>	
<i>S</i>	<i>B-60</i>	<i>n_i</i>	<i>B-60</i>	<i>g_i</i>	<i>B-60</i>	<i>g_i</i>	<i>B-60</i>	<i>n_i</i>	<i>B-60</i>	<i>g_i</i>
	<i>CH₄</i>	0,3	<i>CO</i>	0,4	<i>C₂H₆</i>	0,2	<i>CO</i>	0,3	<i>CH₄</i>	0,3
	<i>C₂H₄</i>	0,4	<i>C₂H₄</i>	0,3	<i>CH₄</i>	0,1	<i>H₂</i>	0,5	<i>CO</i>	0,1
	<i>C₂H₆</i>	0,1	<i>C₂H₆</i>	0,2	<i>H₂</i>	0,1	<i>C₂H₆</i>	0,05	<i>N₂</i>	0,1
	<i>H₂O</i>	0,1	<i>N₂</i>	0,1	<i>N₂</i>	0,5	<i>CH₄</i>	0,05	<i>O₂</i>	0,4
	<i>CO₂</i>	0,1	<i>H₂O</i>	0,0	<i>CO₂</i>	0,1	<i>H₂O</i>	0,1	<i>H₂O</i>	0,1

	<i>Всего</i>	<i>I</i>	<i>Всего</i>	<i>I</i>	<i>Всего</i>	<i>I</i>	<i>Всего</i>	<i>I</i>	<i>Всего</i>	<i>I</i>
<i>Пара- метр</i>	<i>№ варианта</i>									
	21		22		23		24		25	
<i>B, %</i>	12		13		14		16		18	
<i>W</i>	30000 кмоль/ч		2000 м ³ /ч		300 м ³ /ч		12500 кг/ч		30000 кг/ч	
<i>S</i>	<i>B-во</i>	<i>g_i</i>	<i>B-во</i>	<i>n_i</i>	<i>B-во</i>	<i>n_i</i>	<i>B-во</i>	<i>n_i</i>	<i>B-во</i>	<i>g_i</i>
	<i>CO</i>	0,3	<i>CH₄</i>	0,4	<i>CO</i>	0,2	<i>CO</i>	0,3	<i>C</i>	0,3
	<i>C₂H₄</i>	0,3	<i>C₂H₄</i>	0,3	<i>CH₄</i>	0,1	<i>H₂</i>	0,5	<i>CO</i>	0,1
	<i>C₂H₆</i>	0,1	<i>H₂</i>	0,2	<i>H₂</i>	0,1	<i>C₂H₆</i>	0,05	<i>N₂</i>	0,1
	<i>N₂</i>	0,1	<i>N₂</i>	0,1	<i>N₂</i>	0,5	<i>O₂</i>	0,05	<i>O₂</i>	0,4
	<i>CO₂</i>	0,2	<i>H₂O</i>	0,0	<i>CO₂</i>	0,1	<i>CO₂</i>	0,1	<i>H₂O</i>	0,1
	<i>Всего</i>	<i>I</i>	<i>Всего</i>	<i>I</i>	<i>Всего</i>	<i>I</i>	<i>Всего</i>	<i>I</i>	<i>Всего</i>	<i>I</i>
<i>Пара- метр</i>	<i>№ варианта</i>									
	26		27		28		29		30	
<i>B, %</i>	10		9		8		7		6	
<i>W</i>	42000 кг/ч		125000 кг/ч		7000 м ³ /ч		110000 кмоль/ч		4000 м ³ /ч	
<i>S</i>	<i>B-во</i>	<i>n_i</i>	<i>B-во</i>	<i>n_i</i>	<i>B-во</i>	<i>g_i</i>	<i>B-во</i>	<i>n_i</i>	<i>B-во</i>	<i>g_i</i>
	<i>CO</i>	0,3	<i>CH₄</i>	0,4	<i>C₂H₆</i>	0,2	<i>CO</i>	0,3	<i>CH₄</i>	0,3
	<i>C₂H₄</i>	0,5	<i>C₂H₄</i>	0,3	<i>CH₄</i>	0,1	<i>H₂</i>	0,5	<i>CO</i>	0,1
	<i>C₂H₆</i>	0,1	<i>C₂H₆</i>	0,2	<i>H₂</i>	0,1	<i>C₂H₆</i>	0,05	<i>H₂</i>	0,1
	<i>H₂O</i>	0,1	<i>N₂</i>	0,1	<i>N₂</i>	0,5	<i>N₂</i>	0,05	<i>O₂</i>	0,4
	<i>CO₂</i>	0,0	<i>H₂O</i>	0,0	<i>CO₂</i>	0,1	<i>H₂O</i>	0,1	<i>H₂O</i>	0,1
	<i>Всего</i>	<i>I</i>	<i>Всего</i>	<i>I</i>	<i>Всего</i>	<i>I</i>	<i>Всего</i>	<i>I</i>	<i>Всего</i>	<i>I</i>

Задание 10

Рассчитать тепловой баланс процессов, указанных в задании 5, при различных условиях теплообмена.

Адиабатический режим:

- определить температуру на выходе из реактора при температуре входного потока $T_{\text{вх}}$;

Изотермический режим:

- определить поверхность трубчатого теплообменника при коэффициенте теплопередачи $k_{m.n.}$; температуре теплоносителя T_0 ; температуре изотермического процесса $T_{\text{вх}}$;

Политермический режим:

- определить поверхность теплообмена при коэффициенте теплопередачи $k_{m.n.}$; температуре входного потока $T_{\text{вх}}$, температуре теплоносителя T_0 ; температуре выходного потока $T_{\text{вых}}$.
- определить температуру на выходе из реактора при коэффициенте теплопередачи $k_{m.n.}$; температуре теплоносителя T_0 ; поверхности теплообмена F .

№ вар- та за- дания 5	Адиабати- ческий	Изотермический				Политермический			
		$T_{\text{вх}}, {}^{\circ}\text{C}$	$T_{\text{вх}}, {}^{\circ}\text{C}$	$k_{m.n.}, \frac{\text{кДж}}{\text{м}^2 \cdot \text{град}\cdot\text{ч}}$	$T_0, {}^{\circ}\text{C}$	$T_{\text{вх}}, {}^{\circ}\text{C}$	$k_{m.n.}, \frac{\text{кДж}}{\text{м}^2 \cdot \text{гра-}\cdot\text{ч}}$	$T_0, {}^{\circ}\text{C}$	$T_{\text{вых}}, {}^{\circ}\text{C}$
1	800	800	0,08	10	800	0,08	10	950	?
2	450	450	0,07	12	450	0,07	12	?	520
3	420	420	0,05	14	420	0,05	14	450	?
4	400	400	0,09	16	400	0,09	16	?	430
5	300	300	0,10	18	300	0,10	18	340	?
6	420	420	0,03	20	420	0,03	20	?	450
7	800	800	0,07	22	800	0,07	22	900	?
8	900	900	0,08	24	900	0,08	24	?	950
9	200	200	0,07	22	200	0,07	22	250	?
10	950	950	0,05	20	950	0,05	20	?	1000
11	200	200	0,09	18	200	0,09	18	250	?
12	450	450	0,10	16	450	0,10	16	?	500
13	420	420	0,03	14	420	0,03	14	450	?
14	800	800	0,07	12	800	0,07	12	?	850

15	250	250	0,02	10	250	0,02	10	270	?
16	400	400	0,03	14	400	0,03	14	?	430
17	850	850	0,09	16	850	0,09	16	900	?
18	950	950	0,08	18	950	0,08	18	?	1000
19	150	150	0,07	20	150	0,07	20	200	?
20	800	800	0,06	22	800	0,06	22	?	900
21	250	250	0,05	24	250	0,05	24	260	?
22	450	450	0,09	22	450	0,09	22	?	500
23	440	440	0,10	20	440	0,10	20	480	?
24	850	850	0,03	18	850	0,03	18	?	870
25	400	400	0,07	16	400	0,07	16	500	?
26	420	420	0,08	14	420	0,08	14	?	440
27	850	850	0,07	12	850	0,07	12	860	?
28	900	900	0,05	10	900	0,05	10	?	1000
29	500	500	0,09	13	500	0,09	13	600	?
30	800	800	0,10	15	800	0,10	15	?	870

Задание 11

Найти объем двухступенчатого каскада реакторов идеального смешения (К-РИС), необходимый для достижения в первой ступени степени превращения $X_{A,1}$ и во второй $X_{A,2}$, если в К-РИС для реакции $A \rightarrow R$ с константой скорости k . Объемный расход потока на входе W_0 при начальной концентрации компонента A $C_{A,0}$.

Параметр	# варианта									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$X_{A,1}$	0,55	0,54	0,56	0,60	0,62	0,64	0,40	0,42	0,44	0,46
$X_{A,2}$	0,85	0,78	0,81	0,86	0,88	0,98	0,99	0,95	0,93	0,87
$k, \text{мин}^{-1}$	0,45	0,34	0,24	0,44	0,51	0,52	0,55	0,58	0,60	0,70
$W_0, \text{л/мин}$	32	33	35	53	39	77	67	82	36	49
$C_{A,0}, \text{моль/л}$	1	2	3	5	8	4	9	6	9	5
Параметр	# варианта									
	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20

$X_{A,1}$	0,25	0,34	0,26	0,10	0,42	0,24	0,30	0,22	0,44	0,26
$X_{A,2}$	0,95	0,98	0,91	0,96	0,88	0,78	0,98	0,97	0,97	0,89
$k, \text{мин}^{-1}$	0,35	0,44	0,14	0,24	0,21	0,22	0,25	0,28	0,20	0,50
$W_0, \text{л/мин}$	132	133	135	153	139	177	167	182	136	149
$C_{A,0}, \text{моль/л}$	10	20	30	50	80	40	90	60	90	50
<i>Параметр</i>	<i>№ варианта</i>									
	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
$X_{A,1}$	0,25	0,24	0,26	0,20	0,22	0,24	0,21	0,22	0,24	0,26
$X_{A,2}$	0,95	0,98	0,91	0,96	0,98	0,88	0,99	0,95	0,93	0,97
$k, \text{мин}^{-1}$	0,65	0,64	0,64	0,64	0,61	0,62	0,75	0,78	0,70	0,50
$W_0, \text{л/мин}$	302	330	305	503	309	707	607	802	306	409
$C_{A,0}, \text{моль/л}$	31	32	33	35	38	34	39	36	39	35

Задание 12

Найти объем реактора идеального смешения непрерывного действия (РИС-Н) и реактора идеального вытеснения (РИВ), необходимый для достижения степени превращения X_A для реакции $A \rightarrow R$ с константой скорости k . Объемный расход потока на входе W_0 при начальной концентрации компонента А $C_{A,0}$.

<i>Параметр</i>	РИС-Н									
	<i>№ варианта</i>									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
X_A	0,85	0,78	0,81	0,86	0,88	0,98	0,99	0,95	0,93	0,87
$k, \text{мин}^{-1}$	0,45	0,34	0,24	0,44	0,51	0,52	0,55	0,58	0,60	0,70
$W_0, \text{л/мин}$	32	33	35	53	39	77	67	82	36	49
$C_{A,0}, \text{моль/л}$	1	2	3	5	8	4	9	6	9	5
<i>Параметр</i>	РИВ									
	<i>№ варианта</i>									
	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
X_A	0,95	0,98	0,91	0,96	0,88	0,78	0,98	0,97	0,97	0,89

$k, \text{мин}^{-1}$	0,35	0,44	0,14	0,24	0,21	0,22	0,25	0,28	0,20	0,50
$W_0, \text{л/мин}$	132	133	135	153	139	177	167	182	136	149
$C_{A,0}, \text{моль/л}$	10	20	30	50	80	40	90	60	90	50
<i>Параметр</i>	РИС-Н									
	№ варианта									
	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
X_A	0,95	0,98	0,91	0,96	0,98	0,88	0,99	0,95	0,93	0,97
$k, \text{мин}^{-1}$	0,65	0,64	0,64	0,64	0,61	0,62	0,75	0,78	0,70	0,50
$W_0, \text{л/мин}$	302	330	305	503	309	707	607	802	306	409
$C_{A,0}, \text{моль/л}$	31	32	33	35	38	34	39	36	39	35

Задание 13

Определить конечную температуру ТК и степень превращения $X_{A,K}$, достигаемую в адиабатическом РИС-Н для реакции $A \rightarrow R+Q$. Объем реакционного пространства V ; расход реакционной смеси W ; температура потока на входе $T_{\text{вх}}$; начальная концентрация компонента А $C_{A,0}$; начальная степень превращения $X_{A,0} = 0$; теплота химической реакции $q_{x.p.}$; удельная теплоемкость реакционной смеси c_p ; плотность ρ ; константа скорости реакции k .

<i>Параметр</i>	№ варианта									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$V, \text{м}^3$	0,55	0,54	0,56	0,60	0,62	0,64	0,40	0,42	0,44	0,46
$W, \text{м}^3/\text{мин}$	0,85	0,78	0,81	0,86	0,88	0,98	0,99	0,95	0,93	0,87
$T_{\text{вх}}, K$	300	400	500	600	350	420	330	450	460	530
$C_{A,0}, \text{моль/л}$	1	2	3	5	8	4	9	6	9	5
$q_{x.p.},$ кДж/кмоль	-400	350	200	-	244	-	400	865	-548	69
$c_p,$ $\text{кДж/(кг}\cdot\text{К)}$	0,8	0,7	0,6	0,5	0,4	0,3	0,2	0,3	0,4	0,5
$\rho, \text{кг}/\text{м}^3$	1110	700	650	750	800	850	900	790	860	1100

$k, \text{мин}^{-1}$	0,45	0,34	0,24	0,44	0,51	0,52	0,55	0,58	0,60	0,70
<i>Параметр</i>	<i>№ варианта</i>									
	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
$V, \text{м}^3$	0,15	0,14	0,16	0,10	0,12	0,14	0,40	0,22	0,24	0,26
$W, \text{м}^3/\text{мин}$	0,45	0,38	0,51	0,36	0,38	0,58	0,29	0,65	0,43	0,77
T_{ex}, K	300	400	500	600	350	420	330	450	460	530
$C_{A,0}, \text{моль/л}$	0,1	0,2	0,3	0,5	0,8	0,4	0,9	0,6	0,9	0,5
$q_{x.p.},$ кДж/кмоль	-400	350	200	-500	244	-660	4000	865	-548	69
$c_p,$ $\text{кДж/(кг}\cdot K)$	0,8	0,7	0,6	0,5	0,4	0,3	0,2	0,3	0,4	0,5
$\rho, \text{кг}/\text{м}^3$	1110	700	650	750	800	850	900	790	860	1100
$k, \text{мин}^{-1}$	0,45	0,34	0,24	0,44	0,51	0,52	0,55	0,58	0,60	0,70
<i>Параметр</i>	<i>№ варианта</i>									
	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
$V, \text{м}^3$	1	2	3	5	8	4	9	6	9	5
$W, \text{м}^3/\text{мин}$	0,32	0,33	0,35	0,53	0,39	0,77	0,67	0,82	0,36	0,49
T_{ex}, K	300	400	500	600	350	420	330	450	460	530
$C_{A,0}, \text{моль/л}$	1	2	3	5	8	4	9	6	9	5
$q_{x.p.},$ кДж/кмоль	-400	350	200	-500	244	-660	4000	865	-548	69
$c_p,$ $\text{кДж/(кг}\cdot K)$	0,8	0,7	0,6	0,5	0,4	0,3	0,2	0,3	0,4	0,5
$\rho, \text{кг}/\text{м}^3$	1110	700	650	750	800	850	900	790	860	1100
$k, \text{мин}^{-1}$	0,32	0,33	0,35	0,53	0,39	0,77	0,67	0,82	0,36	0,49

Задание 14

Найти X_A , достигаемую при реакции $A \rightarrow R$, в РИВ и в РИС-Н, если объем реактора V , расход реакционной смеси W , начальная степень превращения $X_{A,0}$ и константа скорости реакции k .

Параметр	РИВ									
	№ варианта									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$V, м^3$	1,3	2,0	1,5	2,6	1,6	1,4	1,40	1,2	1,5	1,6
$W, м^3/\text{мин}$	0,85	0,78	0,81	0,86	0,88	0,98	0,99	0,95	0,93	0,87
$k, \text{мин}^{-1}$	0,45	0,34	0,24	0,44	0,51	0,52	0,55	0,58	0,60	0,70
Параметр	РИС-Н									
	№ варианта									
	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
$V, м^3$	0,15	0,14	0,16	0,10	0,12	0,14	0,40	0,22	0,24	0,26
$W, м^3/\text{мин}$	0,45	0,38	0,51	0,36	0,38	0,58	0,29	0,65	0,43	0,77
$k, \text{мин}^{-1}$	0,45	0,34	0,24	0,44	0,51	0,52	0,55	0,58	0,60	0,70
Параметр	РИВ									
	№ варианта									
	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
$V, м^3$	1	2	3	5	8	4	9	6	9	5
$W, м^3/\text{мин}$	0,32	0,33	0,35	0,53	0,39	0,77	0,67	0,82	0,36	0,49
$k, \text{мин}^{-1}$	0,32	0,33	0,35	0,53	0,39	0,77	0,67	0,82	0,36	0,49