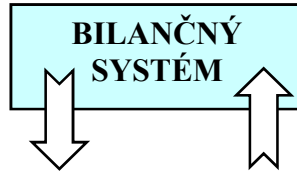


BILANCIE A BILANČNÉ ROVNICE

Bilancovať, znamená robiť súvahu (výpočet) nad určitým objektom (bilančným systémom).



Bilančný systém je časť priestoru, ktorý je oddelený od okolia hranicami a komunikuje s okolím.

Hranice (kontrolné plochy): **priepustné** (otvorený systém, uzavretý systém)
nepriepustné (izolovaný systém)

Otvorený systém – hranice umožňujú komunikáciu s okolím prostredníctvom výmeny látky a energie

Uzavretý systém – hranice umožňujú komunikáciu s okolím iba transportom neviazaným na materiál (výmena energie)

Izolovaný systém – hranice systému sú nepriepustné, znemožňujú akúkoľvek komunikáciu systému s okolím

Bilančným systémom v technologickej výrobe môže byť : podnik
závod
výrobná linka
zariadenie alebo časť zariadenia

Výsledkom bilancovania technologických procesov sú **bilančné rovnice**.

Bilančné rovnice – sú matematické vzťahy medzi fyzikálnymi veličinami a sú zostavené na princípoch zákonov zachovania hmotnosti, hybnosti a energie.

Podiel bilančných výpočtov predstavuje až 70 – 80 % z celkového množstva technických výpočtov, na základe ktorých sa uskutočňuje návrh, projekcia, realizácia a technologické riadenie výroby.

1. MATERIÁLOVÉ BILANCIE

Materiálové bilancie – sú matematické rovnice, ktorými sa vyjadrujú vzťahy medzi množstvom materiálu pred začatím a po ukončení procesu v systéme, v ktorom prebieha materiálová premena

V chemickotechnologických procesoch môže mať táto premena charakter:

fyzikálny – výsledkom je iba zmena zloženia alebo fyzikálneho stavu systému (**materiálové bilancie bez chemickej reakcie**)

chemický – výsledkom je látková zmena zložiek spracúvaného materiálu v systéme (**materiálové bilancie s chemickou reakciou**)

Pri bilancovaní hmotnosti hovoríme o **hmotnostných bilanciách**, pri bilancovaní látkového množstva o **látkových bilanciách**.

Látkové množstvo je však vhodné iba na meranie množstva látok definovaného chemického zloženia (prvky, zlúčeniny, zmesi známeho zloženia)

1.1 MATERIÁLOVÉ BILANCIE BEZ CHEMICKEJ REAKCIE

Príklad:

Do zariadenia vstupuje 5 mólov dusíka, 3 móly oxidu uhľnatého a 2 móly oxidu uhličitého pri atmosferickom tlaku a teplote 20 °C.

Vypočítajte:

- Látkové množstvo vystupujúcej plynnej zmesi a jej zloženie v mólových zlomkoch.
- Hmotnosť vystupujúcej plynnej zmesi a jej zloženie v hmotnostných zlomkoch.
- Mólovú hmotnosť vystupujúcej plynnej zmesi počítanej podľa definičného vzťahu, a pomocou mólových a hmotnostných zlomkov zmesi.
- Hmotnostný a mólový zlomok dusíka vo vystupujúcej plynnej zmesi vypočítaný z prepočtových vzťahov medzi mólovými a hmotnostnými zlomkami.
- Parciálne tlaky jednotlivých zložiek vo vystupujúcej plynnej zmesi.
- Objem vystupujúcej plynnej zmesi.

ODPORÚČANÝ POSTUP PRI BILANČNÝCH VÝPOČTOCH

Mimoriadne dôležité pre úspešný výpočet si je informácie zo zadania „živo“ **predstaviť** na svojej „mentálnej obrazovke“ v podobe trojrozmerných, farebných, pohyblivých „akčných“ obrázkov. Fantázii sa medze nekladú.

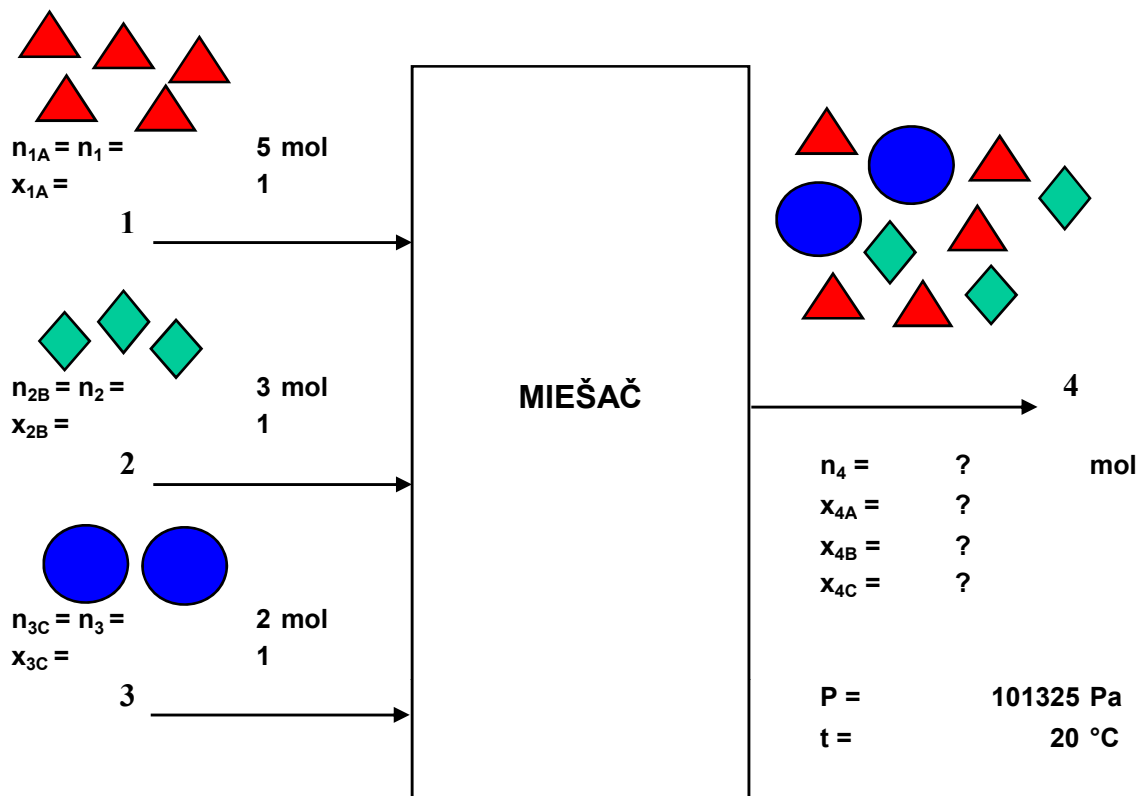
Identifikovať počet zariadení, vstupné, výstupné prúdy, bilancované zložky v bilančnom systéme a zapísať informácie zo zadania v podobe matematických symbolov a im priradených hodnôt do bilančnej schémy. Podľa možností si môžete niektoré informácie v nej aj vizuálne „sprítomniť“.

Zostavenie bilančných rovníc, formulácia pomocných vzťahov (napr. väzbové pravidlo) a riešenie systému rovníc.

Ak chcete veci vedieť, musíte ich prakticky robiť, nie sa ich len teoreticky učiť.....

Základ výpočtu je spravidla definovaný na vstupe resp. výstupe buď ako množstvo prúdu alebo zložky v prúde.
Pri materiálových bilanciách s reakciou môže byť základom výpočtu aj rozsah reakcie, resp. zdrojový člen zložky.
Vzhľadom k jeho hodnote sa dopočítavajú množstvá neznámych prúdov a zložiek.
V prípade, že základ výpočtu nie je definovaný, je nutné si ho voliť. Spravidla na vstupe alebo výstupe, kde býva navyše viac informácií o bilancovanom systéme.

Bilančná schéma (globálne a lokálne láskanie.....)



Prúdy:

- 1 - dusík
- 2 - oxid uhoľnatý
- 3 - oxid uhličitý
- 4 - plynná zmes

Zložky:

- A – dusík (N_2)
- B – oxid uhoľnatý (CO)
- C – oxid uhličitý (CO_2)



Ponúkaný príkladík sa dá počítať aj na "prštekoch".....Jeho jednoduchosť "zneužijeme" na postupné teoretické a praktické odhaľovanie prvých intímnych zakutí materiálových bilancí a jej "rezervovanej" symboliky.

a. Látkové množstvo vystupujúcej plynnej zmesi a jej zloženie v mólových zlomkoch.

Materiálová bilancia systému (látková bilancia)

Zákon zachovania látkového množstva:

$$\sum_{j=1}^n n_j = \sum_{j=1}^m n_j$$

Množstvo mólov do systému vstupujúcich sa rovná množstvu mólov zo systému vystupujúcich

Zákon zachovania látkového množstva platí v prípade, keď v bilančnom systéme prebieha dej fyzikálneho charakteru.

Zákon zachovania látkového množstva vo všeobecnosti neplatí pre bilančné systémy v ktorých prebieha chemická reakcia (reakcie).

Celková látková bilancia systému:

$$\begin{array}{rcccc} \mathbf{n_1} & + & \mathbf{n_2} & + & \mathbf{n_3} & = & \mathbf{n_4} \\ 5 & + & 3 & + & 2 & = & 10 \text{ mol} \end{array}$$

Látkové bilancie zložiek:

$$\begin{array}{rcccc} \mathbf{A:} & & \mathbf{n_{1A}} & + & 0 & + & 0 & = & \mathbf{n_{4A}} \\ & & 5 & + & 0 & + & 0 & = & 5 \end{array}$$

$$\begin{array}{rcccc} \mathbf{B:} & & 0 & + & \mathbf{n_{2B}} & + & 0 & = & \mathbf{n_{4B}} \\ & & 0 & + & 3 & + & 0 & = & 3 \end{array}$$

$$\begin{array}{rcccc} \mathbf{C:} & & 0 & + & 0 & + & \mathbf{n_{3C}} & = & \mathbf{n_{4C}} \\ & & 0 & + & 0 & + & 2 & = & 2 \end{array}$$

Výpočet mólových zlomkov zložiek v plynnej zmesi:

Mólový zlomok zložky v zmesi (v prúde) je definovaný: $x_{ji} = \frac{n_{ji}}{n_j}$

kde n_{ji} je látkové množstvo zložky **i** v zmesi (prúde) **j** a n_j je látkové množstvo zmesi (prúdu). Platí pre všetky zložky (**i** = A, B, C, ... N) v danom prúde **j**.

Aplikujúc definíciu mólového zlomku pre vystupujúcu plynnú zmes (prúd 4):

$$x_{4A} = \frac{n_{4A}}{n_4} = \frac{5}{10} = 0,5$$

$$x_{4B} = \frac{n_{4B}}{n_4} = \frac{3}{10} = 0,3$$

$$x_{4C} = \frac{n_{4C}}{n_4} = \frac{2}{10} = 0,2$$

Sčítaním jednotlivých mólových zlomkov zložiek v danej zmesi (prúde):

$$x_{4A} + x_{4B} + x_{4C} = \frac{n_{4A} + n_{4B} + n_{4C}}{n_4} = \frac{n_4}{n_4} = 1$$

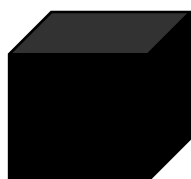
Väzbové pravidlo:

Suma mólových zlomkov všetkých zložiek v danom prúde (zmesi) sa rovná jednej \Rightarrow že aj $x_{1A} = 1, x_{2B} = 1, x_{3C} = 1$.

$$\sum_{i=A}^N x_{ji} = 1$$

Mólová hmotnosť látky (zložky)

1 mol – je množstvo látky, ktoré obsahuje práve toľko elementárnych jedincov (atómov, molekúl), koľko je atómov v 12 g (t. j. v jednom móle) nuklidu $^{12}_6\text{C}$



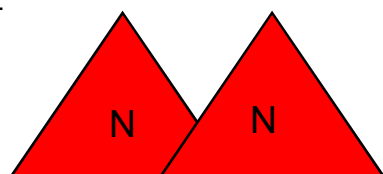
Študenti, ja som **CARBONKO**, jeden mólik uhlíka a moja hmotnosť je 12 gramíkov. Obsahujem $6,022 \cdot 10^{23}$ elementárnych jedincov, aspoň pán Avogadro to tak tvrdí.....



Mravné ponaučenie:

1 mól akejkoľvek látky definovaného zloženia obsahuje rovnaký počet elementárnych jedincov. Ich počet udáva **Avogadrova konštanta** $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$ **elementárnych jedincov/mol**

1 mól dusíka N_2 tiež obsahuje ten istý počet elementárnych jedincov. V tomto prípade však ide o molekuly.....



Molekuly molekulového dusíka N_2



Mólová hmotnosť zložky je definovaná vzťahom:

$$M_i = \frac{m_{ji}}{n_{ji}}$$

Mólové hmotnosti bilancovaných zložiek (hmotnosti jedného mólu danej látky) zistíme z chemických tabuliek, alebo z Mendelejevovej periodickej sústavy prvkov.

$$\begin{aligned}M_A &= M_{N_2} = && 28 \text{ g/mol} \\M_B &= M_{CO} = && 28 \text{ g/mol} \\M_C &= M_{CO_2} = && 44 \text{ g/mol}\end{aligned}$$

b. Hmotnosť vystupujúcej plynnej zmesi a jej zloženie v hmotnostných zlomkoch

Materiálová bilancia systému (hmotnostná bilancia)

Zákon zachovania hmotnosti:

$$\sum_{j=1}^n m_j = \sum_{j=1}^m m_j$$

Hmotnosť na vstupe do systému sa rovná hmotnosti na výstupe zo systému.

Zákon zachovania hmotnosti platí v bilančných systémoch, v ktorých prebiehajú deje fyzikálneho ako aj chemického charakteru (okrem jadrových reakcií).

Hmotnosti jednotlivých zložiek plynnej zmesi vypočítame pomocou vzťahu:

$$m_{ji} = M_i \cdot n_{ji}$$

$$m_{4A} = M_A \cdot n_{4A} = 28 \cdot 5 = 140 \text{ g}$$

$$m_{4B} = M_B \cdot n_{4B} = 28 \cdot 3 = 84 \text{ g}$$

$$m_{4C} = M_C \cdot n_{4C} = 44 \cdot 2 = 88 \text{ g}$$

Hmotnosť vystupujúcej plynnej zmesi:

$$m_4 = m_{4A} + m_{4B} + m_{4C} = 140 + 84 + 88 = 312 \text{ g}$$

Hmotnostný zlomok zložky v zmesi (v prúde) je definovaný: $w_{ji} = \frac{m_{ji}}{m_j}$

kde m_{ji} je hmotnosť zložky v zmesi (prúde) a m_j je hmotnosť zmesi (prúdu).

Platí pre všetky zložky ($i = A, B, C, \dots, N$) v danom prúde j .

Aplikujúc definíciu hmotnostného zlomku pre vystupujúcu plynnú zmes (prúd 4):

$$w_{4A} = \frac{m_{4A}}{m_4} = \frac{140}{312} = 0,449$$

$$w_{4B} = \frac{m_{4B}}{m_4} = \frac{84}{312} = 0,269$$

$$w_{4C} = \frac{m_{4C}}{m_4} = \frac{88}{312} = 0,282$$

Sčítaním jednotlivých hmotnostných zlomkov zložiek v danej zmesi (prúde):

$$w_{4A} + w_{4B} + w_{4C} = \frac{m_{4A} + m_{4B} + m_{4C}}{m_4} = \frac{m_4}{m_4} = 1$$

Väzbové pravidlo:

Suma hmotnostných zlomkov všetkých zložiek v danom prúde (zmesi) sa rovná jednej. Z väzbového pravidla vyplýva, že teraz aj $w_{1A} = 1$, $w_{2B} = 1$, $w_{3C} = 1$.

$$\sum_{i=A}^N w_{ji} = 1$$

Pri bilancovaní jednotlivých zložiek uprednostňujeme zápis, v ktorom vystupuje namiesto príslušného množstva zložky v danom prúde (n_{ji} , resp. m_{ji}), súčin množstva prúdu a daného zlomku zložky ($n_j \times x_{ji}$, resp., $m_j \times w_{ji}$).

V prípade nepretržitého procesu je nutné látkové množstvá a hmotnosti nahradiť tokmi látkových množstiev a hmotnostnými tokmi (množstvá / čas).

Celková bilancia hmotnosti systému:

$$m_1 + m_2 + m_3 = m_4$$

Hmotnostné bilancie zložiek:

$$A : m_1 \cdot w_{1A} = m_4 \cdot w_{4A}$$

$$B : m_2 \cdot w_{2B} = m_4 \cdot w_{4B}$$

$$C : m_3 \cdot w_{3C} = m_4 \cdot w_{4C}$$

Pri bilancovaní systému, najmä s viacerými zložkami, je vhodné materiálovú bilanciu kvôli prehľadnosti zostaviť do tabuľkovej formy.

Názorne si "uvidíme" neskôr vo vhodnom "chemickoinžinierskom časopriestore".....

c. Mólová hmotnosť vystupujúcej plynnej zmesi počítanej podľa definičného vzťahu, pomocou mólových a hmotnostných zlomkov zmesi.

Mólová hmotnosť zmesi počítaná cez mólové zlomky:

$$M_j = \sum_{i=A}^N M_i \cdot x_{ji}$$

$$M_4 = M_A \cdot x_{4A} + M_B \cdot x_{4B} + M_C \cdot x_{4C} = 28 \cdot 0,5 + 28 \cdot 0,3 + 44 \cdot 0,2 = \quad \quad \quad 31,2 \text{ g/mol}$$

Mólová hmotnosť zmesi počítaná cez hmotnostné zlomky:

$$M_j = \frac{1}{\sum_{i=A}^N \frac{w_{ji}}{M_i}}$$

$$M_4 = \frac{1}{\frac{w_{4A}}{M_A} + \frac{w_{4B}}{M_B} + \frac{w_{4C}}{M_C}} = \frac{1}{\frac{0,449}{28} + \frac{0,269}{28} + \frac{0,282}{44}} = 31,2 \text{ g/mol}$$

Mólová hmotnosť zmesi počítaná z definičného vzťahu:

$$M_4 = \frac{m_j}{n_j} = \frac{312}{10} = 31,2 \text{ g/mol}$$

d. Hmotnostný a mólový zlomok dusíka vo vystupujúcej plynnej zmesi vypočítaný z prepočtových vzťahov medzi mólovými a hmotnostnými zlomkami.

Prepočtový vzťah na výpočet mólového zlomku zložky zo známeho zloženia zmesi (prúdu) vyjadreného hmotnostnými zlomkami:

$$x_{ji} = \frac{w_{ji}}{M_i} \Rightarrow x_{jA} = \frac{\frac{w_{jA}}{M_A}}{\frac{w_{jA}}{M_A} + \frac{w_{jB}}{M_B} + \dots + \frac{w_{jN}}{M_N}}$$

Aplikujúc prepočtový vzťah na výpočet mólového zlomku dusíka vo vystupujúcom prúde:

$$x_{4A} = \frac{\frac{w_{4A}}{M_A}}{\frac{w_{4A}}{M_A} + \frac{w_{4B}}{M_B} + \frac{w_{4C}}{M_C}} = \frac{\frac{0,449}{28}}{\frac{0,449}{28} + \frac{0,269}{28} + \frac{0,282}{44}} = 0,5$$

Prepočtový vzťah na výpočet hmotnostného zlomku zložky zo známeho zloženia zmesi (prúdu) vyjadreného mólovými zlomkami:

$$w_{ji} = \frac{x_{ji} \cdot M_i}{\sum_{i=1}^N x_{ji} \cdot M_i} \Rightarrow w_{jA} = \frac{x_{jA} \cdot M_A}{x_{jA} \cdot M_A + x_{jB} \cdot M_B + \dots + x_{jN} \cdot M_N}$$

Aplikujúc prepočtový vzťah na výpočet hmotnostného zlomku dusíka vo vystupujúcom prúde

$$w_{4A} = \frac{x_{4A} \cdot M_A}{x_{4A} \cdot M_A + x_{4B} \cdot M_B + x_{4C} \cdot M_C} = \frac{0,5 \cdot 28}{0,5 \cdot 28 + 0,3 \cdot 28 + 0,2 \cdot 44} = 0,449$$

e. Parciálne tlaky jednotlivých zložiek vo vystupujúcej plynnej zmesi.

Predpokladajme, že môžeme aplikovať na vystupujúcu plynnú zmes **stavová rovnica ideálneho plynu**

$$P \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

kde:

P je tlak [Pa]

V je objem [m³]

n je látkové množstvo [mol]

R je univerzálna plynová konštanta [J/mol/K]

T je teplota v stupňoch Kelvina [K].

Daltonov zákon

-celkový tlak v plynnej zmesi je súčtom parciálnych tlakov jednotlivých zložiek

Stavovú rovnicu ideálneho plynu môžeme aplikovať aj na jednotlivé zložky pri konštantnom objeme systému

$$P_i \cdot V = n_i \cdot R \cdot T$$

$$P_A \cdot V = n_A \cdot R \cdot T$$

$$P_B \cdot V = n_B \cdot R \cdot T$$

$$P_C \cdot V = n_C \cdot R \cdot T$$

Podelením stavových rovníc pre jednotlivé zložky so stavovou rovnicou plynnej zmesi a úpravou dostaneme:

$$\frac{P_i}{P} = \frac{n_i}{n} = x_i \Rightarrow P_i = P \cdot x_i$$

$$P_A = P \cdot x_{A4} = 101300 \cdot 0,5 = 50650 \text{ Pa}$$

$$P_B = P \cdot x_{B4} = 101300 \cdot 0,3 = 30390 \text{ Pa}$$

$$P_C = P \cdot x_{C4} = 101300 \cdot 0,2 = 20260 \text{ Pa}$$

Mravné poučenie:

Podiel parciálneho tlaku zložky a celkového tlaku sa číselne rovná jej mólovému zlomku.	
---	--

f. Objem plynnej zmesi

Objem plynnej zmesi vypočítame zo stavovej rovnice ideálneho plynu

$$V = \frac{n_i \cdot R \cdot T}{P} = \frac{10 \cdot 8,314 \cdot 293,15}{101300} = 0,241 \text{ m}^3$$

Mravné ponaučenie:

Zo stavovej rovnice ideálneho plynu sa dá pre jednotlivé zložky plynnej zmesi, pri konštantno tlaku, dokázať, že **objemové zlomky, resp. objemové percentá sa číselne rovnajú mólovým zlomkom, resp. percentám.**

Stupeň voľnosti

Zistenie **stupňa voľnosti (SV)** nám poskytne informáciu, či je nami zostavený systém bilančných rovníc riešiteľný.

SV = Celkový počet neznámych - Celkový počet nezávislých rovníc

Ak je stupeň voľnosti rovný nule (VF = 0) je bilančný systém správne určený a má jednoznačne definované riešenie.

Ak je stupeň voľnosti väčší ako nula (DF > 0) je systém nedourčený, nemá riešenie a sú potrebné doplnujúce informácie, aby sa získalo jednoznačne definované riešenie.

Ak je stupeň voľnosti menší ako nula (DF < 0) je systém preurčený, nemá jednoznačné riešenie a nadbytočné vstupné informácie je potrebné vylúčiť, aby sa získalo jednoznačne definované riešenie.

Mohlo by sa totiž stať, že z rôznych východziech informácii sa dopracujeme k rôznym výsledkom.

Poznámka:

Materiálové (látkové) bilancie v ustálenom stave sú zvyčajne systémom lineárnych algebraických rovníc. Všetky rovnice musia byť rozmerovo homogénne, t. j. každý člen rovnice má rovnakú jednotku.

Bilančný systém nášho príkladu pozostáva zo štyroch lineárnych algebraických rovníc,

Celková materiálová bilancia:

$$n_1 + n_2 + n_3 = n_4$$

Materiálová bilancia zložiek:

$$A: n_1 \cdot x_{1A} = n_4 \cdot x_{4A}$$

$$B: n_2 \cdot x_{2B} = n_4 \cdot x_{4B}$$

$$C: n_3 \cdot x_{3C} = n_4 \cdot x_{4C}$$

z ktorých akákoľvek kombinácia troch rovníc (nezávislé rovnice) vytvorí štvrtú rovnicu (závislá rovnica).

Napríklad sčítaním materiálových bilancií zložiek dostaneme celkovú materiálovú bilanciu, ktorá je už rovnicou závislou.

$$n_1 \cdot x_{1A} + n_2 \cdot x_{2B} + n_3 \cdot x_{3C} = n_4 \cdot x_{4A} + n_4 \cdot x_{4B} + n_4 \cdot x_{4C}$$

$$x_{1A} = 1$$

$$x_{2B} = 1$$

$$n_1 + n_2 + n_3 = n_4 \cdot (x_{4A} + x_{4B} + x_{4C})$$

$$x_{3C} = 1$$

$$x_{4A} + x_{4B} + x_{4C} = 1$$

$$n_1 + n_2 + n_3 = n_4$$

Alebo odčítaním bilancií zložiek A a B od celkovej materiálovej bilancie by sme dospeli k bilancii zložky C (už závislá rovnica), atď.