

Министерство образования и науки Российской Федерации  
**Нижекамский химико-технологический институт (филиал)**  
Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения  
высшего профессионального образования  
«Казанский национальный исследовательский технологический университет»

# **МАТЕРИАЛЬНЫЕ БАЛАНСЫ ХИМИКО- ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

**МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ  
ДЛЯ ВЫПОЛНЕНИЯ ПРАКТИЧЕСКИХ РАБОТ**

по дисциплине  
«Общая химическая технология»

Нижекамск  
2012

**УДК 66.02**

**Б 14**

Печатаются по решению редакционно-издательского совета Нижнекамского химико-технологического института (филиал) ФГБОУ ВПО «КНИТУ».

**Рецензенты:**

**Сафиуллина Т.Р.**, кандидат химических наук, доцент;  
**Гарипов М.Г.**, кандидат технических наук, доцент.

**Багманова, Р.Х.**

**Б 14** Материальные балансы химико-технологических процессов : методические указания для выполнения практических работ / Р.Х. Багманова, В.П. Дорожкин. - Нижнекамск : Нижнекамский химико-технологический институт (филиал) ФГБОУ ВПО «КНИТУ», 2012. - 73 с.

Рассмотрены теоретические основы расчета материальных балансов химико-технологических процессов, а также формулы расчетов основных технологических критериев эффективности процессов. Приведены алгоритмы материальных расчетов основных процессов, протекающих в промышленном производстве.

Методические указания предназначены для студентов по направлению подготовки 240500 «Химическая технология высокомолекулярных соединений и полимерных материалов» специальностей 240501 «Химическая технология высокомолекулярных соединений», 240502 «Технология переработки пластических масс и эластомеров», а также по направлению подготовки 240100 «Химическая технология», 241000 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии».

**УДК 66.02**

© Багманова Р.Х., Дорожкин В.П., 2012  
© Нижнекамский химико-технологический институт (филиал) ФГБОУ ВПО «КНИТУ», 2012

## ВВЕДЕНИЕ

Дисциплина «Общая химическая технология» относится к циклу общепрофессиональных дисциплин.

Данная дисциплина изучается студентами специальностей 240501 и 240502, а также направления подготовки 240100, 241000.

В рамках дисциплины «Общая химическая технология» предусмотрены практические занятия, целью которых является:

- 1) получение представления о сущности материальных балансов;
- 2) изучение методики расчетов материальных балансов промышленных химико-технологических процессов;
- 3) получение навыков расчета основных критериев эффективности химико-технологических процессов.

Для достижения поставленных целей в данном методическом указании излагаются теоретические основы составления материальных балансов химико-технологических процессов, а также описываются понятия основных технологических критериев эффективности, приводятся формулы для их расчетов. Далее в методическом указании рассматриваются алгоритмы расчета материальных балансов с приведением примеров для конкретных процессов.

## 1 ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

### МАТЕРИАЛЬНЫЕ БАЛАНСЫ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Химико-технологическая система по производству промышленной продукции состоит из совокупности подсистем, в каждой из которых реализуются физические, химические и физико-химические процессы, протекающие в различных аппаратах, объединенных в технологическую схему. Совокупность операций, позволяющих получить целевой продукт из исходного сырья, представляет собой химико-технологический процесс.

При разработке химико-технологических процессов проводятся разнообразные расчеты для количественной оценки протекающих операций, способов производства одной и той же продукции, подбора реакционных и других аппаратов, а также для определения оптимальных значений параметров технологического процесса. Во всех случаях при расчетах учитываются законы гидродинамики, тепло-, массопередачи и химической кинетики, поэтому расчеты материальных потоков обычно сочетаются с энергетическими расчетами, для этого составляют материальный и энергетический (тепловой) балансы.

Материальные расчеты, наряду с тепловыми, являются основой технологических расчетов. Для любого аппарата, задействованного в химико-технологическом процессе, его части, либо совокупности аппаратов можно составить материальный и тепловой балансы. Расчеты производственного оборудования, коммуникаций производятся после определения материальных потоков сырья и продуктов синтеза, представленных в виде материального баланса процесса.

**Материальный баланс** – это вещественное выражение закона сохранения массы вещества, согласно которому во всякой замкнутой системе масса веществ, вступивших во

взаимодействие, равна массе веществ, образовавшихся в результате этого взаимодействия, т.е. приход вещества  $\Sigma G_{\text{прих}}$  равен его расходу  $\Sigma G_{\text{расх}}$ . Таким образом, уравнение материального баланса можно представить в виде:

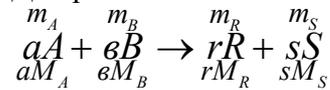
$$\Sigma G_{\text{прих}} = \Sigma G_{\text{расх}} .$$

Расчет материального баланса основан на 2 объективных законах:

1) **Закон сохранения массы** (применительно к расчету материального баланса) – общая масса всех поступающих в реактор материалов (приход) равен общей массе выходящих материалов (расходу).

2) **Закон стехиометрических соотношений**, который можно сформулировать следующим образом: если известна масса хотя бы одного участника реакции, можно определить массы всех остальных, предварительно рассчитав молярные массы всех участников реакции.

Для реакции:



$M_A, M_B, M_R, M_S$  - молекулярные массы реагентов и продуктов;

$a, b, r, s$  - стехиометрические коэффициенты;

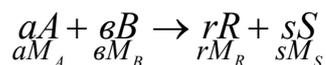
Согласно закону стехиометрических соотношений:

$$\frac{m_A}{aM_A} = \frac{m_B}{bM_B} = \frac{m_R}{rM_R} = \frac{m_S}{sM_S}$$

$m_A, m_B$  - массы реагентов  $A$  и  $B$  (без примесей),  $m_R$  - масса целевого продукта,  $m_S$  - масса побочного продукта.

**Теоретический материальный баланс** рассчитывается на основе стехиометрического уравнения реакции, предполагая, что в процессе участвуют реагенты, не содержащие примесей при их полной конверсии.

Например, для реакции



теоретический материальный баланс:

$$aM_A + bM_B = rM_R + sM_S$$

При составлении практического материального баланса учитывают состав исходного сырья и готовой продукции, степень превращения сырья, потери сырья и готового продукта и т.д.

Для периодических процессов материальный баланс составляют в расчете на одну операцию, для непрерывных процессов – за единицу времени.

Материальный баланс составляют как для физических процессов, протекающих в аппаратах (фильтрация, ректификация и др.), так и для химических реакций, проводимых в реакторах.

Первым этапом при расчете оборудования для проведения химико-технологического процесса является расчет материального баланса процесса, протекающего в химическом реакторе – основном аппарате химико-технологической системы.

Материальный баланс составляют по уравнению основной суммарной реакции с учетом параллельных и побочных реакций. Он может быть составлен для всех веществ, участвующих в процессе, или только для одного какого-либо вещества. Обычно учитываются не все протекающие реакции и получаемые побочные продукты, а лишь те, которые имеют существенное значение, таким образом, материальный баланс носит приближенный характер.

Материальный баланс составляют для процесса в целом или для отдельных его стадий.

Сырье в реальных процессах, протекающих в промышленности, подается на взаимодействие с определенной долей примесей – это сырье называется техническим. В

результате протекания химического процесса из исходного сырья образуется смесь целевого и побочного продуктов, при не полной конверсии сырья в реакторе остаются непрореагировавшие остатки сырья и его примеси.

Предположим, что в реакторе протекает необратимая реакция:

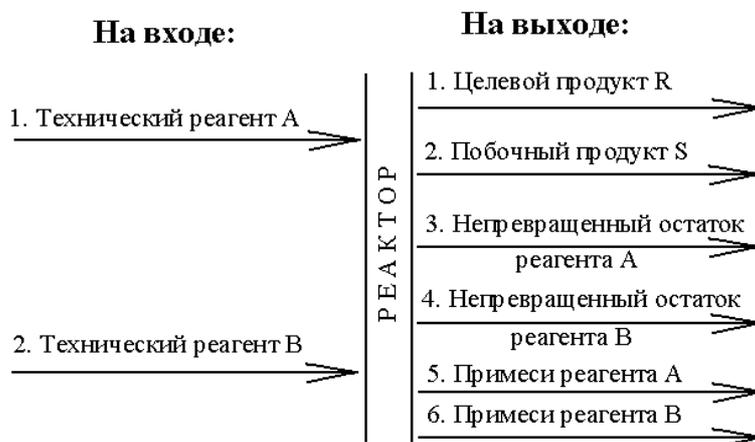


$R$  – целевой,  $S$  – побочный продукты

$A$  и  $B$  – исходные реагенты (с определенным содержанием примесей).

Если реагенты прореагируют полностью, то на выходе из реактора непревращенные остатки сырья наблюдаться не будут, но останутся нереакционноспособные примеси. В реальных условиях реакции протекают с неполной конверсией реагентов и в реакторе после химического превращения обнаруживаются непревращенные остатки сырья. Если он имеется в значительном количестве, то процесс оформляют по циркуляционной схеме, с возвратом отделенного от продуктов непревращенного сырья в химический реактор. Если возврат непревращенных остатков сырья экономически нецелесообразен, то процесс оформляют по открытой схеме.

При неполной конверсии реагентов в химическом реакторе и проведении процесса по открытой схеме **материальные потоки** на входе в реактор и после проведения химической реакции и разделения реакционной смеси будут выглядеть следующим образом:



**Материальный баланс** любого процесса, протекающего в химическом реакторе, может быть представлен как в виде уравнения, так и виде таблицы, в левой части которых суммируют массы всех видов сырья и вспомогательных материалов, поступающих на переработку (приход), а в правой – массы потоков, прошедших переработку и разделение. Если процесс протекал в химическом реакторе, то после переработки в графе расход возможны следующие потоки:

- 1) целевой продукт;
- 2) побочные продукты;
- 3) непревращенные остатки сырья;
- 4) примеси, поступающие вместе с сырьем;
- 5) производственные потери и т.д.

Для наглядности составляют схему материальных потоков поступающих в реактор потоков сырья (на входе) и выходящих потоков целевого и побочного продуктов, непревращенных остатков сырья, примесей и др.

**Методика составления материального баланса** зависит от организационной структуры производства (периодическая или непрерывная), от типа технологической схемы (открытая или циркуляционная), от технологической классификации реакции (простая необратимая, простая обратимая, сложная необратимая (параллельная, последовательная), сложная

обратимая и т.д.), и от того, как представлены исходные данные (задана производительность по продукту, либо смеси продуктов или указана пропускная способность по сырью).

После составления материального баланса производят расчет основных технологических критериев эффективности: конверсии исходных реагентов, полная селективность, расходные коэффициенты по сырью, выход готового целевого продукта.

**Конверсия (степень превращения)** исходного реагента – это доля исходного реагента, использованного на химическую реакцию – показывает, насколько полно в ХТП используется исходное сырье.

Для реакции  $aA + bB \rightarrow rR + sS$

степень превращения реагента А:

$$x_A = \frac{n_{A,0} - n_{A,f}}{n_{A,0}} = \frac{n_A}{n_{A,0}} \quad (\text{Исходное число молей реагента } A -$$

оставшееся в реакционной смеси)/Исходное число молей реагента А.

$$\text{через массы } x_A = \frac{m_{A,0} - m_{A,f}}{m_{A,0}} = \frac{m_A}{m_{A,0}}$$

Зная конверсию одного из реагентов можно, выразить конверсии других реагентов, участвующих в реакции

$$x_B = \frac{n_B}{n_{B,0}} = \frac{b \cdot n_A}{a \cdot n_{B,0}} \left\{ n_B = \frac{b}{a} n_A \right\} \left\{ n_A = n_{A,0} \cdot x_A \right\} = \frac{b \cdot n_{A,0} \cdot x_A}{a \cdot n_{B,0}} = \frac{n_{A,0} / n_{B,0}}{a/b} \cdot x_A$$

Из конечного уравнения следуют частные случаи:

а) если  $\frac{n_{A,0}}{n_{B,0}} = \frac{a}{b}$ , то реагенты взяты в стехиометрическом

количестве, т.е.  $X(A) = X(B)$ ;

б) если  $\frac{n_{A,0}}{n_{B,0}} > \frac{a}{b}$  – реагент А взят в избытке,  $X(A) < X(B)$ ;

в) если  $\frac{n_{A,0}}{n_{B,0}} < \frac{a}{b}$  – реагент В взят в избытке,  $X(A) > X(B)$ ;

Пределы конверсии:  $0 < X < 1$  (это доля от первоначального количества реагента)

В промышленности в избытке берут обычно более дешевый реагент для повышения степени использования более дорогого.

Для обратимых химических реакций предельно состояние химического равновесия. Предельно достижимая при данных условиях равновесная степень превращения

$$x_{A,e} = \frac{n_{A,0} - n_{A,e}}{n_{A,0}} = \frac{|n_{A,e}|}{n_{A,0}}$$

(Исходное число молей реагента А – Число молей реагента А в условиях равновесия)/Исходное число молей реагента А (индекс е от лат. equilibrium – "равновесие").

Степень превращения  $X_A$  характеризует процесс не полностью: даже прореагировав целиком, реагент может послужить образованию не целевого, а побочного продукта.

Для оценки сложных процессов используют такой показатель как селективность.

**Селективность** – позволяет оценить эффективность целевой реакции по сравнению с побочными.

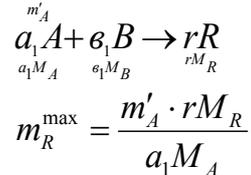
Полная, или интегральная селективность  $\varphi$  – это отношение количества исходного реагента, расходуемого на целевую реакцию, к общему количеству реагента, расходуемого на целевую и побочную реакции вместе:

$$\varphi_A = \frac{m_A^{\text{цел}}}{m_A^{\text{цел}} + m_A^{\text{поб}}};$$

$$\varphi_B = \frac{m_B^{\text{цел}}}{m_B^{\text{цел}} + m_B^{\text{поб}}}.$$

Пределы селективности:  $0 < \varphi < 1$ . Чем выше селективность, тем меньше побочных продуктов образуется в ходе процесса, тем меньше расход сырья на побочные реакции.

**Максимальный (теоретический) выход продукта по поданному сырью ( $m_R^{\text{max}}$ , кг/час)** рассчитывают из стехиометрического уравнения целевой реакции, исходя из предположения, что вся масса поданного сырья (без примесей) израсходовалась на получение только целевого продукта при полной конверсии сырья.



**Практический выход по поданному сырью** равен отношению количества реально полученного целевого продукта к максимально возможному его количеству, которое могло быть получено при данных условиях:

$$\Phi_R = \frac{m_R}{m_R^{\text{max}}}; \quad \Phi_R^{\%} = \frac{m_R \cdot 100\%}{m_R^{\text{max}}};$$

$\Phi_R$  – выход по поданному сырью;

$m_R$  – количество реально полученного целевого продукта;

$m_R^{\text{max}}$  – максимально возможное количество целевого продукта при полной конверсии сырья.

**Максимальный теоретический выход по превращенному сырью ( $m'_R^{\text{max}}$ )** рассчитывают также на основе стехиометрического уравнения целевой реакции, исходя из того что вся масса сырья, израсходованного на процесс в целом (и на целевую и на побочные реакции), должна была израсходоваться

только на целевую реакцию и, соответственно, образовать только целевой продукт:

$$a_1 A + \nu_1 B \rightarrow r R$$

$$a_1 M_A \quad \nu_1 M_B \quad r M_R$$

$$m'_R \text{max} = \frac{\Sigma m_A \cdot r M_R}{a_1 M_A}$$

*Практический выход по превращенному сырью* равен отношению количества реально полученного целевого продукта к тому максимальному количеству, которое могло бы получиться, если прореагировавшее сырье израсходовалось бы только на целевую реакцию:

$$\Phi'_R = \frac{m_R}{m'_R \text{max}}; \quad \Phi'_R \% = \frac{m_R \cdot 100\%}{m'_R \text{max}};$$

$\Phi'_R$  – выход целевого продукта по превращенному сырью.

**Расходные коэффициенты по сырью** показывают количество каждого вида сырья, израсходованного на получение единицы продукта. Единица измерения величины расходного коэффициента: кг/кг; т/т, м<sup>3</sup>/т, м<sup>3</sup>/м<sup>3</sup> и т.д.

*Теоретические расходные коэффициенты по реагентам* рассчитывают на основе стехиометрического уравнения целевой реакции, как отношение молярной массы реагента к молярной массе целевого продукта с учетом стехиометрических коэффициентов:

$$a A + \nu B \rightarrow r R$$

$$a M_A \quad \nu M_B \quad r M_R$$

$$\gamma_A^T = \frac{a \cdot M_A}{r \cdot M_R}; \quad \gamma_B^T = \frac{\nu \cdot M_B}{r \cdot M_R}$$

$\gamma_A^T, \gamma_B^T$  – теоретические расходные коэффициенты по чистым реагентам *A* и *B*.

Теоретические расходные коэффициенты показывают расход чистого реагента при полной конверсии без протекания побочных реакций и без учета потерь на получение единицы продукции.

*Фактические (практические) расходные коэффициенты* показывают расход сырья, израсходованного при проведении процесса для получения единицы целевого продукта.

Практические расходные коэффициенты рассчитывают из практических данных по материальным балансам производств.

$$\gamma_A^\phi = \frac{m_A''}{m_R}; \quad \gamma_B^\phi = \frac{m_B''}{m_R}$$

$\gamma_A^\phi, \gamma_B^\phi$  – фактические расходные коэффициенты по сырью.

$m_A'', m_B''$  – количество израсходованного технического сырья.

Сравнивая значения теоретических и практических расходных коэффициентов, можно сделать вывод о совершенстве данного процесса. Чем ближе эти значения, тем совершеннее производство.

Значение теоретического и фактического расходного коэффициента отличаются тем значительнее, чем ниже конверсия и селективность процесса, выше потери сырья и продуктов, меньше степень очистки сырья от примесей перед подачей в реактор.

Фактические расходные коэффициенты используют при расчете себестоимости продукта. Умножая  $\gamma^\phi$  по каждому виду сырья на его стоимость, получают долю затрат на этот вид сырья в себестоимости продукта.

На основании материального баланса рассчитываются расходные коэффициенты, определяются размеры аппаратов и устанавливаются оптимальные значения параметров технологического режима процесса.

## 2 АЛГОРИТМ РАСЧЕТА МАТЕРИАЛЬНЫХ БАЛАНСОВ

### 2.1 Расчет материального баланса простого необратимого процесса с заданной производительностью по целевому продукту

Рассмотрим простую необратимую реакцию, протекающую в химическом реакторе в процессе, проводимом по открытой схеме и формализованную схему расчета материального баланса для нее. Простая необратимая реакция протекает в одну стадию, описывается одним стехиометрическим уравнением, в результате образуется либо один целевой продукт, либо смесь целевого и побочного продуктов.

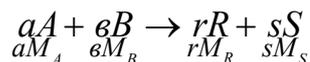
Задание для расчета выдается в виде исходных данных, где представлены производительность химического ректора по продукту, указаны концентрации реагентов, их конверсия и т.д.

Например:

#### *Исходные данные*

Производительность реактора по целевому продукту, т/сутки.....	$P_R$
Концентрация чистого реагента $A$ в техническом реагенте $A$ , % мас.....	$\omega_A, \%$
Содержание примесей в реагенте $B$ , % мас.....	$\omega_{пр.В}, \%$
Конверсия реагента $A$ .....	$X_A$
Конверсия реагента $B$ .....	$X_B$
<i>Реакция для расчета:</i> $aA + vB \rightarrow rR + sS$	

1. Рассчитывают молярные массы всех участников реакции, умножают полученные значения на соответствующие стехиометрические коэффициенты:



Проводят проверку правильности расчета:

$$aM_A + bM_B = rM_R + sM_S$$

2. Производительность установки рассчитывают в кг/час:

$$m_R = \frac{P_R \cdot 1000}{24}$$

$P$  – производительность установки, выраженная т/сутки.

3. Рассчитывают стехиометрическое количество реагента  $A$ , необходимое для получения продукта массой  $m_R$

$$m_A = \frac{aM_A m_R}{rM_R}$$

4. Находят массу чистого реагента  $A$  с учетом его конверсии, которое должно находиться в техническом реагенте  $A$ :

$$m'_A = m_A \cdot \frac{1}{X_A}$$

$m'_A$  – масса реагента  $A$  с учетом конверсии;

$X_A$  – конверсия реагента  $A$ , выраженная в долях.

5. Рассчитывают массу непревращенного остатка реагента  $A$ ,  $\Delta m'_A$ :

$$\Delta m'_A = m'_A - m_A$$

6. Находят массу технического реагента  $A$  ( $m''_A$ ) с учетом его состава:

$$m''_A = m'_A \cdot \frac{100\%}{\omega_A, \%} \quad \text{либо} \quad m''_A = m'_A \cdot \frac{100\%}{100\% - \omega_{np.A}, \%}$$

$\omega_A, \%$  – содержание основного вещества в составе технического реагента  $A$ ;

$\omega_{np.A},\%$  – содержание примесей в составе технического реагента  $A$  (% масс.).

7. Масса примесей технического реагента  $A$  ( $\Delta m''_A$ ) равна:

$$\Delta m''_A = m''_A - m'_A$$

Аналогичный расчет проводят для реагента  $B$ .

8. Находят стехиометрическую массу реагента  $B$ , необходимую для получения заданного количества продукта  $R$ :

$$m_B = \frac{eM_B m_R}{rM_R}$$

9. Масса чистого реагента  $B$  с учетом его конверсии ( $m'_B$ ), которое должно находиться в техническом реагенте  $B$ :

$$m'_B = m_B \cdot \frac{1}{X_B}$$

$X_B$  – конверсия реагента  $B$ , выраженная в долях.

10. Масса непревращенного остатка реагента  $B$  после окончания процесса:

$$\Delta m'_B = m'_B - m_B$$

11. Масса технического реагента  $B$  ( $m''_B$ ) с учетом его состава:

$$m''_B = m'_B \cdot \frac{100\%}{\omega_{B,0}\%} \quad \text{либо} \quad m''_B = m'_B \cdot \frac{100\%}{100\% - \omega_{np.B,0}\%}$$

$\omega_{B,0},\%$  – содержание основного вещества в составе технического реагента  $B$ ;

$\omega_{np.B},\%$  – содержание примесей в составе технического реагента  $B$  (% масс.).

12. Масса примесей реагента  $B$  ( $\Delta m''_B$ ) равна:

$$\Delta m''_B = m''_B - m'_B$$

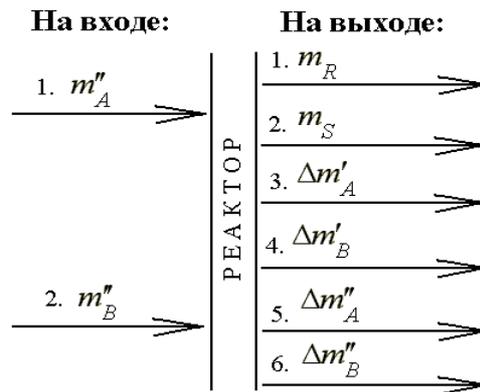
13. Если в процессе наряду с целевыми продуктами образуется побочный продукт ( $S$ ), рассчитывают его массу:

$$m_S = \frac{sM_S m_R}{rM_R}$$

14. Составляют уравнение материального баланса для данного процесса:

$$m_A'' + m_B'' = m_R + m_S + \Delta m_A' + \Delta m_B' + \Delta m_A'' + \Delta m_B''$$

15. Составляют схему материальных потоков на входе и выходе из реактора:



16. Составляют таблицу материального баланса

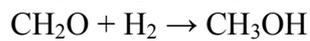
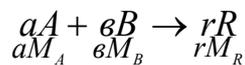
Приход			Расход		
Компонент	кг/ч	% масс	Компонент	кг/ч	% масс
1. Технический реагент, А	$m''_A$	$\frac{m''_A}{\Sigma m} \cdot 100$	1. Целевой продукт R	$m_R$	$\frac{m_R}{\Sigma m} \cdot 100$
в том числе: реагент А,	$m'_A$	$\frac{m'_A}{\Sigma m} \cdot 100$	2. Побочный продукт S	$m_S$	$\frac{m_S}{\Sigma m} \cdot 100$
примеси реагента А	$\Delta m''_A$	$\frac{\Delta m''_A}{\Sigma m} \cdot 100$	3. Непревращенный остаток А	$\Delta m'_A$	$\frac{\Delta m'_A}{\Sigma m} \cdot 100$
2. Технический реагент, В	$m''_B$	$\frac{m''_B}{\Sigma m} \cdot 100$	4. Непревращенный остаток В	$\Delta m'_B$	$\frac{\Delta m'_B}{\Sigma m} \cdot 100$
в том числе: реагент В,	$m'_B$	$\frac{m'_B}{\Sigma m} \cdot 100$	5. Примеси реагента А	$\Delta m''_A$	$\frac{\Delta m''_A}{\Sigma m} \cdot 100$
примеси реагента В	$\Delta m''_B$	$\frac{\Delta m''_B}{\Sigma m} \cdot 100$	6. Примеси реагента В	$\Delta m''_B$	$\frac{\Delta m''_B}{\Sigma m} \cdot 100$
<b>Итого:</b>	$\Sigma m = m''_A + m''_B$	<b>100%</b>	<b>Итого:</b>	$\Sigma m_{1-6}$	<b>100%</b>

**Пример 1. Расчет материального баланса простого необратимого процесса с заданной производительностью по целевому продукту**

**Исходные данные**

Производительность реактора по целевому продукту $\text{CH}_3\text{OH}$ , <i>т/сутки</i> .....	$P_{\text{CH}_3\text{OH}} = 10$ т/сут
Концентрация примесей в составе технического реагента $\text{CH}_2\text{O}$ , % <i>мас</i> .....	$\omega_{\text{пр. CH}_2\text{O}} \% = 3\%$
Содержание примесей в реагенте $\text{H}_2$ , % <i>масс</i> .....	$\omega_{\text{H}_2} \% = 4\%$
Конверсия реагента $\text{CH}_2\text{O}$ .....	$X_{\text{CH}_2\text{O}} = 0,8$
Конверсия реагента $\text{H}_2$ .....	$X_{\text{H}_2} = 0,9$
<i>Реакция для расчета:</i> $\text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}$	

1. Рассчитаем молярные массы всех участников реакции, умножаем полученные значения на соответствующие стехиометрические коэффициенты:



$$aM_{\text{CH}_2\text{O}} = 1 \cdot 30 \text{ кг} / \text{моль} = 30 \text{ кг} / \text{моль}$$

$$bM_{\text{H}_2} = 1 \cdot 2 \text{ кг} / \text{кмоль} = 2 \text{ кг} / \text{кмоль}$$

$$rM_{\text{CH}_3\text{OH}} = 1 \cdot 32 \text{ кг} / \text{кмоль} = 32 \text{ кг} / \text{кмоль},$$

где  $a, b, r$  - стехиометрические коэффициенты.

Проводим проверку правильности расчета:

$$aM_{\text{CH}_2\text{O}} + bM_{\text{H}_2} = rM_{\text{CH}_3\text{OH}}$$

$$30 \text{ кг/кмоль} + 2 \text{ кг/кмоль} = 32 \text{ кг/кмоль}$$

2. Производительность установки рассчитаем в кг/час

$$m_{CH_3OH} = \frac{P_{CH_3OH} \cdot 1000}{24} = \frac{10 \text{ т / сут} \cdot 1000}{24} = 416,67 \text{ кг / час}$$

$P$  – производительность установки, выраженная т/сутки.

3. Рассчитаем стехиометрическое количество реагента  $CH_2O$ , необходимое для получения продукта массой  $m_{CH_3OH}$

$$m_{CH_2O} = \frac{aM_{CH_2O} \cdot m_{CH_3OH}}{rM_{CH_3OH}} = \frac{1 \cdot 30 \text{ кг / кмоль} \cdot 416,67 \text{ кг / час}}{1 \cdot 32 \text{ кг / кмоль}} = 390,63 \text{ кг / час}$$

4. Находим массу чистого реагента  $CH_2O$  с учетом его конверсии, которое должно находиться в техническом реагенте  $CH_2O$ :

$$m'_{CH_2O} = m_{CH_2O} \cdot \frac{1}{X_{CH_2O}} = 390,63 \text{ кг / час} \cdot \frac{1}{0,8} = 488,28 \text{ кг / час}$$

$m'_A$  – масса реагента  $CH_2O$  с учетом конверсии;

$X_A$  – конверсия реагента  $CH_2O$ , выраженная в долях.

5. Рассчитаем массу непревращенного остатка реагента  $CH_2O$ :

$$\Delta m'_{CH_2O} = m'_{CH_2O} - m_{CH_2O} = 488,28 \text{ кг / час} - 390,63 \text{ кг / час} = 97,65 \text{ кг / час}$$

6. Находим массу технического реагента  $CH_2O$  с учетом его состава:

$$m''_{CH_2O} = m'_{CH_2O} \cdot \frac{100\%}{100\% - \omega_{np,CH_2O}\%} = 488,28 \text{ кг/час} \cdot \frac{100\%}{100\% - 3\%} = 503,38 \text{ кг/час}$$

$\omega_{CH_2O}, \%$  – содержание основного вещества в составе технического реагента  $CH_2O$ ;

$\omega_{np,CH_2O}, \%$  – содержание примесей в составе технического реагента  $CH_2O$  (% масс.).

7. Масса примесей технического реагента  $CH_2O$  равна:

$$\Delta m''_{CH_2O} = m''_{CH_2O} - m'_{CH_2O} = 503,38 \text{ кг/час} - 488,28 \text{ кг/час} = 15,10 \text{ кг/час}$$

Аналогичный расчет проводят для реагента  $H_2$ .

8. Найдем стехиометрическую массу реагента  $H_2$ , необходимую для получения заданного количества продукта  $CH_3OH$ :

$$m_{H_2} = \frac{\nu M_{H_2} m_{CH_3OH}}{r M_{CH_3OH}} = \frac{2 \text{ кг/кмоль} \cdot 416,67 \text{ кг/час}}{32 \text{ кг/кмоль}} = 26,04 \text{ кг/кмоль}$$

9. Масса чистого реагента  $H_2$  с учетом его конверсии

$$m'_{H_2} = m_{H_2} \cdot \frac{1}{X_{H_2}} = 26,04 \text{ кг/час} \cdot \frac{1}{0,9} = 28,93 \text{ кг/час}$$

$X_{H_2}$  – конверсия реагента  $H_2$ , выраженная в долях.

10. Масса непревращенного остатка реагента  $H_2$  после окончания процесса:

$$\Delta m'_{H_2} = m'_{H_2} - m_{H_2} = 28,93 \text{ кг/час} - 26,04 \text{ кг/час} = 2,89 \text{ кг/час}$$

11. Масса технического реагента  $H_2$  ( $m''_{H_2}$ ) с учетом его состава:

$$m''_{H_2} = m'_{H_2} \cdot \frac{100\%}{100\% - \omega_{H_2}, \%} = 28,93 \text{ кг/час} \cdot \frac{100\%}{100\% - 4\%} = 30,14 \text{ кг/час}$$

$\omega_{H_2}, \%$  – содержание основного вещества в составе технического реагента  $H_2$ ;

$\omega_{пр.H_2}, \%$  – содержание примесей в составе технического реагента  $H_2$  (% масс.).

12. Масса примесей реагента  $H_2$  ( $\Delta \cdot m''_{H_2}$ ) равна:

$$\Delta m''_{H_2} = m''_{H_2} - m'_{H_2} = 30,14 \text{ кг/час} - 28,93 \text{ кг/час} = 1,21 \text{ кг/час}$$

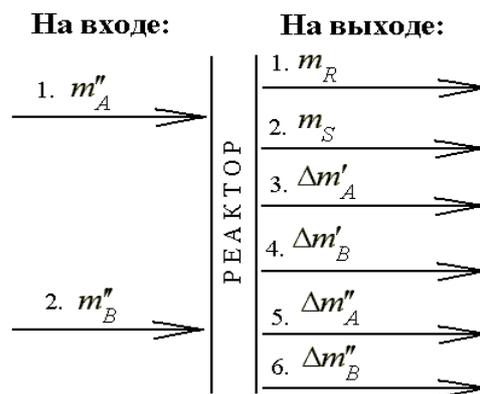
13. Составляем уравнение материального баланса для данного процесса:

$$m''_{CH_2O} + m''_{H_2} = m_{CH_3OH} + \Delta m'_{CH_2O} + \Delta m'_{H_2} + \Delta m''_{CH_2O} + \Delta m''_{H_2} =$$

$$503,38 + 30,14 = 416,67 + 97,65 + 2,89 + 15,10 + 1,21$$

$$533,52 \text{ кг/час} = 533,52 \text{ кг/час}$$

14. Составляем схему материальных потоков на входе и выходе из реактора:



### 15. Составляем таблицу материального баланса

Приход			Расход		
Компонент	кг/ч	% масс	Компонент	кг/ч	% масс
1. Технический реагент, $CH_2O$	503,38	94,35	1. Целевой продукт $CH_3OH$	416,67	78,09
в том числе:			2. Непревращенный остаток $CH_2O$	97,65	18,30
чистый $CH_2O$	488,28	91,52	3. Непревращенный остаток $H_2$	2,89	0,54
примесь $CH_2O$	15,10	2,83	4. Примеси реагента $CH_2O$	15,10	2,83
2. Технический реагент, $H_2$	30,14	5,65	5. Примеси реагента $H_2$	1,21	0,23
в том числе:					
чистый $H_2$ ,	28,93	5,42			
примеси $H_2$	1,21	0,23			
<b>Итого:</b>	533,52	100,00	<b>Итого:</b>	533,22	100,00

### 16. Рассчитаем расходные коэффициенты по сырью:

- теоретические

$$\gamma_{CH_2O}^T = \frac{a \cdot M_{CH_2O}}{r \cdot M_{CH_3OH}} = \frac{1 \cdot 30 \text{ кг} / \text{кмоль}}{1 \cdot 32 \text{ кг} / \text{кмоль}} = 0,9375 \text{ кг} / \text{кг}$$

$$\gamma_{H_2}^T = \frac{b \cdot M_{H_2}}{r \cdot M_{CH_3OH}} = \frac{1 \cdot 2 \text{ кг} / \text{кмоль}}{1 \cdot 32 \text{ кг} / \text{кмоль}} = 0,0625 \text{ кг} / \text{кг}$$

- практические

$$\gamma_{CH_2O}^\phi = \frac{m_{CH_2O}''}{m_{CH_3OH}} = \frac{503,38 \text{ кг} / \text{час}}{416,67 \text{ кг} / \text{час}} = 1,2081 \text{ кг} / \text{кг}$$

$$\gamma_{H_2}^\phi = \frac{m_{H_2}''}{m_{CH_3OH}} = \frac{30,14 \text{ кг} / \text{час}}{416,67 \text{ кг} / \text{час}} = 0,0723 \text{ кг} / \text{кг}$$

17. Рассчитаем выход продукта  $\text{CH}_3\text{OH}$

$$\Phi_{\text{CH}_3\text{OH}} = \frac{m_{\text{CH}_3\text{OH}}}{m_{\text{CH}_3\text{OH}}^{\max}} \cdot 100\%$$

$$m_{\text{CH}_3\text{OH}}^{\max} = \frac{m'_{\text{CH}_2\text{O}} \cdot r \cdot M_{\text{CH}_3\text{OH}}}{a \cdot M_{\text{CH}_2\text{O}}} = \frac{488,28 \text{ кг/час} \cdot 1 \cdot 32 \text{ кг/кмоль}}{1 \cdot 30 \text{ кг/кмоль}} = 520,83 \text{ кг/час}$$

$$\Phi_{\text{CH}_3\text{OH}} = \frac{416,67 \text{ кг/час}}{520,83 \text{ кг/час}} \cdot 100\% = 80,00\%$$

## 2.2 Расчет материального баланса простого необратимого процесса с заданной пропускной способностью установки по техническому сырью

### Исходные данные

Пропускная способность реактора по техническому реагенту А.....	$m_A''$
Содержание примесей в реагенте А .....	$\omega_{np.A}, \%$
Конверсия реагента А .....	$X_A$
Масса технического реагента В, поданного в реактор .....	$m_B''$
Содержание основного вещества $H_2$ в реагенте В	$\omega_B, \%$
<i>Реакция для расчета:</i> $aA + bB \rightarrow rR + sS$	

1. Рассчитываем массу чистого реагента А, поданного в химический реактор:

$$m'_A = m_A'' \cdot \frac{(100\% - \omega_{np.A}^{\%})}{100\%}, \text{ либо } m'_A = m_A'' \frac{\omega_A^{\%}}{100\%}$$

$\omega_A^{\%}$  – содержание основного компонента, (% масс);

$\omega_{np.A}^{\%}$  – содержание примесей в составе технического реагента А (% масс.).

2. Масса примесей технического реагента А:

$$\Delta m_A'' = m_A'' - m'_A$$

3. Находят массу реагента А, израсходованную на химическое превращение в реакторе:

$$m_A = m'_A \cdot X_A$$

$X_A$  – конверсия, выраженная в долях.

4. Рассчитывают массу непревращенного остатка реагента А после окончания процесса:

$$\Delta m'_A = m'_A - m_A$$

5. Массу реагента  $B$ , израсходованного на химическое превращение, рассчитывают по стехиометрии:

$$m_B = \frac{\nu M_B m_A}{a M_A}$$

6. Находят массу чистого реагента  $B$ , поданного в реактор:

$$m'_B = \frac{m'' \cdot (100\% - \omega_{npB}^{\%})}{100\%}, \text{ либо } m'_B = \frac{m'' \cdot \omega_B^{\%}}{100\%}$$

$\omega_{npB}^{\%}$  – содержание примесей в составе технического реагента  $B$  (% масс.);

$\omega_B^{\%}$  – содержание основного компонента, (% масс.);

7. Масса примесей в составе технического реагента  $B$ :

$$\Delta m''_B = m''_B - m'_B$$

8. Рассчитывают массу непревращенного остатка реагента  $B$  после окончания процесса:

$$\Delta m'_B = m'_B - m_B$$

9. Масса целевого продукта, образующегося в результате реакции:

$$m_R = \frac{m_A r M_R}{a M_A}$$

10. Если образуется побочный продукт ( $S$ ), находят его массу:

$$m_S = \frac{m_A s M_S}{a M_A}$$

11. Составляют уравнение материального баланса:

$$m''_A + m''_B = m_R + m_S + \Delta m'_A + \Delta m'_B + \Delta m''_A + \Delta m''_B$$

12. Составляют схему материальных потоков.

13. Составляют таблицу материального баланса.

15. Рассчитывают теоретические и практические расходные коэффициенты, конверсию реагента  $B$ , выход целевого продукта.

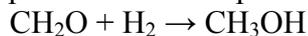
**Пример 2. Расчет материального баланса простого необратимого процесса с заданной пропускной способностью установки по техническому сырью.**

Исходные данные могут быть представлены в виде задания, где указана пропускная способность химического реактора (установки) по сырью, например, по техническому реагенту  $\text{CH}_2\text{O}$

**Исходные данные**

Пропускная способность реактора по техническому реагенту $\text{CH}_2\text{O}$ .....	$m''_{\text{CH}_2\text{O}} = 100 \text{ кг}$
Содержание основного вещества в техническом $\text{CH}_2\text{O}$ .....	$\omega_{\text{CH}_2\text{O}} = 93\% \text{ масс}$
Конверсия $\text{CH}_2\text{O}$ .....	$X_{\text{CH}_2\text{O}} = 0,85$
Масса технического $\text{H}_2$ , .....	$m''_{\text{H}_2} = 100 \text{ кг}$
Содержание чистого вещества $\text{H}_2$ в техническом.....	$\omega_{\text{H}_2} = 90\% \text{ масс}$
<i>Реакция для расчета:</i> $\text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}$	

1. Рассчитаем молярные массы всех участников процесса и составим теоретический материальный баланс



$$M_{\text{CH}_2\text{O}} = 30 \text{ кг} / \text{кмоль}$$

$$M_{\text{H}_2} = 2 \text{ кг} / \text{кмоль}$$

$$M_{\text{CH}_3\text{OH}} = 32 \text{ кг} / \text{кмоль}$$

$$M_{CH_2O} + M_{H_2} = M_{CH_3OH}$$

$$30 \text{ кг/кмоль} + 2 \text{ кг/кмоль} = 32 \text{ кг/кмоль}$$

2. Рассчитаем массу чистого реагента  $CH_2O$ , поданного в химический реактор

$$m'_{CH_2O} = m''_{CH_2O} \cdot \frac{\omega_{CH_2O}, \%}{100\%} = 100 \text{ кг} \cdot \frac{93\%}{100\%} = 93 \text{ кг}$$

$\omega_{CH_2O}, \%$  – содержание основного компонента, (% масс);

$\omega_{пр.CH_2O}$  – содержание примесей в составе технического реагента  $CH_2O$  (% масс.).

3. Масса примесей технического реагента  $CH_2O$

$$\Delta m''_{CH_2O} = m''_{CH_2O} - m'_{CH_2O} = 100 \text{ кг} - 93 \text{ кг} = 7 \text{ кг}.$$

4. Найдем массу реагента  $CH_2O$ , израсходованную на химическое превращение в реакторе:

$$m_{CH_2O} = m'_{CH_2O} \cdot X_{CH_2O} = 93 \text{ кг} \cdot 0,85 = 79,05 \text{ кг}$$

$X_{CH_2O}$  – конверсия, выраженная в долях.

5. Рассчитаем массу непревращенного остатка реагента  $CH_2O$  после окончания процесса:

$$\Delta m'_{CH_2O} = m'_{CH_2O} - m_{CH_2O} = 93 \text{ кг} - 79,05 \text{ кг} = 13,95 \text{ кг}$$

6. Найдем массу реагента  $H_2$ , израсходованного на химическое превращение, согласно стехиометрии:

$$m_{H_2} = \frac{\nu M_{H_2} m_{CH_2O}}{\alpha M_{CH_2O}} = \frac{1 \cdot 2 \text{ кг/кмоль} \cdot 79,05 \text{ кг}}{1 \cdot 30 \text{ кг/кмоль}} = 5,27 \text{ кг}$$

7. Найдем массу чистого реагента  $H_2$ , поданного в реактор:

$$m'_{H_2} = \frac{m''_{H_2} \cdot \omega_{H_2}, \%}{100\%} = \frac{100\text{кг} \cdot 90\%}{100\%} = 90\text{кг}$$

$\omega_{\text{пр. } H_2}, \%$  – содержание примесей в составе технического реагента  $H_2$ , (% масс.);

$\omega_{H_2}, \%$  – содержание основного компонента, (% масс.);

8. Рассчитаем массу примесей в составе технического реагента  $H_2$ :

$$\Delta m''_{H_2} = m''_{H_2} - m'_{H_2} = 100\text{кг} - 90\text{кг} = 10\text{кг}$$

9. Рассчитаем массу непревращенного остатка реагента  $H_2$  после окончания процесса:

$$\Delta m'_{H_2} = m'_{H_2} - m_{H_2} = 90\text{кг} - 5,27\text{кг} = 84,73\text{кг}$$

10. Масса целевого продукта, образующегося в результате реакции:

$$m_{CH_3OH} = \frac{m_{CH_2O} \cdot r \cdot M_{CH_3OH}}{a \cdot M_{CH_2O}} = \frac{79,05\text{кг} \cdot 1 \cdot 32\text{кг/кмоль}}{1 \cdot 30\text{кг/кмоль}} = 84,32\text{кг}$$

11. Составляем уравнение материального баланса:

$$m''_{CH_2O} + m''_{H_2} = m_{CH_3OH} + \Delta m'_{CH_2O} + \Delta m'_{H_2} + \Delta m''_{CH_2O} + \Delta m''_{H_2}$$

$$100\text{кг} + 100\text{кг} = 84,32\text{кг} + 13,95\text{кг} + 84,73\text{кг} + 7\text{кг} + 10\text{кг}$$

$$200\text{кг} = 200\text{кг}$$

## 12. Составляем таблицу материального баланса

Приход			Расход		
Компонент	кг	% масс	Компонент	кг	% масс
1. Технический реагент, CH <sub>2</sub> O	100,00	50,00	1. Целевой продукт CH <sub>3</sub> OH	84,32	42,16
в том числе:			2. Непревращенный остаток CH <sub>2</sub> O	13,95	6,98
чистый CH <sub>2</sub> O	93	46,50	3. Непревращенный остаток H <sub>2</sub>	84,73	42,37
примеси CH <sub>2</sub> O	7,00	3,50	4. Примеси реагента CH <sub>2</sub> O	7,00	3,50
2. Технический реагент, H <sub>2</sub>	100,00	50,00	6. Примеси реагента H <sub>2</sub>	10,00	5,00
в том числе:					
чистый H <sub>2</sub>	90,00	45,00			
примеси H <sub>2</sub>	10,00	5,00			
<b>Итого:</b>	<b>200,00</b>	<b>100,00</b>	<b>Итого:</b>	<b>200,0</b>	<b>100,00</b>

13. Рассчитаем теоретические и практические расходные коэффициенты, конверсию реагента H<sub>2</sub>, выход целевого продукта.

- теоретические:

$$\gamma_{CH_2O}^T = \frac{a \cdot M_{CH_2O}}{r \cdot M_{CH_3OH}} = \frac{1 \cdot 30 \text{ кг} / \text{кмоль}}{1 \cdot 32 \text{ кг} / \text{кмоль}} = 0,9375 \text{ кг} / \text{кг}$$

$$\gamma_{H_2}^T = \frac{в \cdot M_{H_2}}{r \cdot M_{CH_3OH}} = \frac{1 \cdot 2 \text{ кг} / \text{кмоль}}{1 \cdot 32 \text{ кг} / \text{кмоль}} = 0,0625 \text{ кг} / \text{кг}$$

- практические

$$\gamma_{CH_2O}^{\phi} = \frac{m''_{CH_2O}}{m_{CH_3OH}} = \frac{100 \text{ кг}}{84,32 \text{ кг}} = 1,186 \text{ кг} / \text{кг}$$

$$\gamma_{H_2}^{\phi} = \frac{m''_{H_2}}{m_{CH_3OH}} = \frac{100 \text{ кг}}{84,32 \text{ кг}} = 1,186 \text{ кг} / \text{кг}$$

14. Рассчитаем конверсию  $H_2$ :

$$X_{H_2} = \frac{m_{H_2}}{m'_{H_2}} = \frac{5,27 \text{ кг}}{90 \text{ кг}} = 0,058 \quad \text{или} \quad X_{H_2} = 5,8\%$$

15. Рассчитаем выход продукта  $CH_3OH$

$$\Phi_{CH_3OH} = \frac{m_{CH_3OH}}{m_{CH_3OH}^{\max}} \cdot 100\%$$

$$m_{CH_3OH}^{\max} = \frac{m'_{CH_2O} \cdot r \cdot M_{CH_3OH}}{a \cdot M_{CH_2O}} = \frac{93 \text{ кг} \cdot 1 \cdot 32 \text{ кг} / \text{кмоль}}{1 \cdot 30 \text{ кг} / \text{кмоль}} = 99,2 \text{ кг}$$

$$\Phi_{CH_3OH} = \frac{84,32 \text{ кг}}{99,2 \text{ кг}} \cdot 100\% = 85,00\%$$

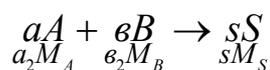
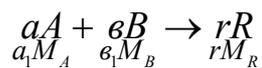
### 2.3 Расчет материального баланса сложного необратимого параллельного процесса

При протекании параллельных реакций одни и те же реагенты взаимодействуют, образуя несколько продуктов. Обычно протекает одна целевая и одна или несколько побочных реакций, в результате образуется смесь продуктов, называемая техническим продуктом, либо продуктом сырцом.

В исходных данных для расчета указываются количество и состав технического продукта (% масс. для жидких веществ, % масс. или % об. для газообразных); конверсия по реагентам, указывается наличие примесей (% масс. либо % об.), в том случае, если они имеются. В некоторых случаях соотношение реагентов, подаваемых химический реактор, задается мольным соотношением.

#### Алгоритм расчета материального баланса сложного необратимого параллельного процесса с заданной производительностью по техническому продукту

##### 1. Реакции для расчета



Определяют молекулярные массы реагентов и продуктов, умножают на соответствующие стехиометрические коэффициенты. Проверяют правильность расчета, составляя теоретические балансы:

$$a_1M_A + v_1M_B = rM_R$$

$$a_2M_A + v_2M_B = sM_S$$

2. Определяют массу каждого продукта в составе реакционной массы после протекания процесса (в техническом продукте, продукте-сырце):

$$m_R = m_{\text{техн.}} \cdot \omega_R$$

$$m_S = m_{\text{техн.}} \cdot \omega_S$$

$\omega$  – массовая доля компонента в реакционной массе;

$m_{\text{техн.}}$  – масса технического продукта (вся реакционная масса, продукт-сырец).

В том случае, когда образуется несколько продуктов:

$$m_{\text{прод.}}^1 = m_{\text{техн.}} \cdot \omega_1$$

$$m_{\text{прод.}}^2 = m_{\text{техн.}} \cdot \omega_2$$

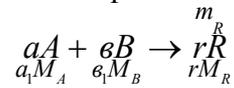
$$m_{\text{прод.}}^3 = m_{\text{техн.}} \cdot \omega_3$$

$$m_{\text{прод.}}^i = m_{\text{техн.}} \cdot \omega_i$$

Проверяют правильность расчета:

$$m_{\text{прод.}}^1 + m_{\text{прод.}}^2 + \dots + m_{\text{прод.}}^i = m_{\text{техн.}}$$

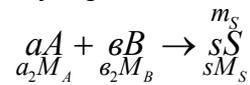
3. По массе целевого продукта  $m_R$  согласно стехиометрии определяют расход чистых реагентов  $A$  и  $B$  на целевую реакцию



$$m_A^{\text{цел}} = \frac{a_1 M_A \cdot m_R}{r M_R}$$

$$m_B^{\text{цел}} = \frac{b_1 M_B \cdot m_R}{r M_R}$$

4. Определяют расход чистых реагентов  $A$  и  $B$  на каждую побочную реакцию .



$$m_A^{\text{поб}} = \frac{a_2 M_A \cdot m_S}{s M_S}$$

$$m_B^{\text{поб}} = \frac{b_2 M_B \cdot m_S}{s M_S}$$

5. Суммируют массы каждого из реагентов, израсходованных на целевую и побочные реакции:

$$\sum m_A = m_{\text{цел}}^A + m_{\text{поб}}^A + \dots + m^i_A$$

$$\sum m_B = m_{\text{цел}}^B + m_{\text{поб}}^B + \dots + m^i_B$$

6. Учитывают конверсию реагентов:

$$m'_A = \sum m_A \cdot \frac{1}{X_A}$$

$$m'_B = \sum m_B \cdot \frac{1}{X_B}$$

В некоторых случаях в исходных данных для расчета количество реагентов  $A$  и  $B$  задается через мольные соотношения.

7. Определяют непревращенный остаток для каждого из реагентов, например для реагента  $A$ :

$$\Delta m'_A = m'_A - \sum m_A$$

8. Находят массу технического реагента  $A$  с учетом его состава:

$$m''_A = m'_A \cdot \frac{100\%}{\omega_A^{\%}} \quad \text{либо} \quad m''_A = m'_A \cdot \frac{100\%}{100\% - \omega_{\text{пр.}A}^{\%}}$$

$\omega_A^{\%}$  – содержание основного вещества в составе технического реагента  $A$ ;

$\omega_{\text{пр.}A}^{\%}$  – содержание примесей в составе технического реагента  $A$  (% масс.);

$m''_A$  – масса технического реагента подаваемого в реактор.

9. Масса примесей технического реагента  $A$  равна:

$$\Delta m''_A = m''_A - m'_A$$

$\Delta m''_A$  – масса примесей.

10. Аналогические расчеты проводят для реагента  $B$ .

11. Составляют уравнение материального баланса.

$$m''_A + m''_B = m_R + m_S + \Delta m'_A + \Delta m'_B + \Delta m''_A + \Delta m''_B$$

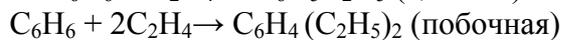
12. Составляется таблица материального баланса:

Приход			Расход		
Компонент	кг/ч	% масс	Компонент	кг/ч	% масс
1.Технический реагент, А	$m''_A$	$\frac{m''_A}{\Sigma m} \cdot 100$	1.Технический продукт	$m_{\text{тех.}}$	$\frac{m_{\text{тех.}}}{\Sigma m} \cdot 100$
в том числе: реагент А,	$m'_A$	$\frac{m'_A}{\Sigma m} \cdot 100$	в том числе: а) целевой продукт R	$m_R$	$\frac{m_R}{\Sigma m} \cdot 100$
примеси реагента А	$\Delta m''_A$	$\frac{\Delta m''_A}{\Sigma m} \cdot 100$	б) побочный продукт S	$m_S$	$\frac{m_S}{\Sigma m} \cdot 100$
2.Технический реагент, В	$m''_B$	$\frac{m''_B}{\Sigma m} \cdot 100$	2.Непревращенный остаток А	$\Delta m'_A$	$\frac{\Delta m'_A}{\Sigma m} \cdot 100$
в том числе: реагент В,	$m'_B$	$\frac{m'_B}{\Sigma m} \cdot 100$	3.Непревращенный остаток В	$\Delta m'_B$	$\frac{\Delta m'_B}{\Sigma m} \cdot 100$
примеси реагента В	$\Delta m''_B$	$\frac{\Delta m''_B}{\Sigma m} \cdot 100$	4. Примеси реагента А	$\Delta m''_A$	$\frac{\Delta m''_A}{\Sigma m} \cdot 100$
			5. Примеси реагента В	$\Delta m''_B$	$\frac{\Delta m''_B}{\Sigma m} \cdot 100$
<b>Итого:</b>	$\Sigma m = m''_A + m''_B$	<b>100%</b>	<b>Итого:</b>	$\Sigma m_{1-5}$	<b>100%</b>

13. Рассчитывают основные технические показатели эффективности процесса: селективность процесса по реагентам, выход на поданное и превращенное сырье, теоретические и практические расходные коэффициенты по сырью.

**Пример 3. Расчет материального баланса сложного необратимого параллельного процесса с заданной производительностью по техническому продукту**

1. Реакции для расчета



Производительность установки по этилбензолу-сырцу (техн.  $C_6H_5C_2H_5$ )  $P_{техн. C_6H_5C_2H_5} = 10 \text{ т / сут}$

Состав этилбензола-сырца, % масс

$$\omega_{C_6H_5C_2H_5} = 91\%$$

$$\omega_{C_6H_4(C_2H_5)_2} = 9\%$$

Концентрация бензола в техническом этилене, % масс

$$\omega_{C_6H_6} = 95\%$$

Концентрация этилена в техническом этилене, % масс

$$\omega_{C_2H_4} = 98\%$$

Конверсия, %

$$X_{C_6H_6} = 89\%$$

$$X_{C_2H_4} = 92\%$$

1. Определим молекулярные массы реагентов и продуктов. Составим теоретические балансы:

$$M(C_6H_6) = 78 \text{ кг/кмоль}$$

$$M(C_2H_4) = 28 \text{ кг/кмоль}$$

$$M(C_6H_5C_2H_5) = 106 \text{ кг/кмоль}$$

$$M(C_6H_4(C_2H_5)_2) = 134 \text{ кг/кмоль}$$

$$1 \cdot 78 \text{ кг/кмоль} + 1 \cdot 28 \text{ кг/кмоль} = 106 \text{ кг/кмоль}$$

$$1 \cdot 78 \text{ кг/кмоль} + 2 \cdot 28 \text{ кг/кмоль} = 134 \text{ кг/кмоль}$$

2. Рассчитаем производительность по этилбензолу-сырцу в кг/час:

$$m_{\text{техн. } C_6H_5C_2H_5} = \frac{P_{\text{техн. } C_6H_5C_2H_5} \cdot 1000}{24} = \frac{10 \text{ т / сут} \cdot 1000}{24} = 416,67 \text{ кг / час}$$

3. Определим массу каждого продукта в составе реакционной массы после протекания процесса (в техническом этилбензоле (этилбензоле -сырце):

$$m_{C_6H_5C_2H_5} = m_{\text{техн. } C_6H_5C_2H_5} \cdot \omega_{C_6H_5C_2H_5} = 416,67 \text{ кг / час} \cdot 0,91 = 379,17 \text{ кг / час}$$

$$m_{C_6H_4(C_2H_5)_2} = m_{\text{техн. } C_6H_5C_2H_5} \cdot \omega_{C_6H_4(C_2H_5)_2} = 416,67 \text{ кг / час} \cdot 0,09 = 37,50 \text{ кг / час}$$

Проверяем правильность расчета:

$$m_{\text{техн. } C_6H_5C_2H_5} = m_{\text{техн. } C_6H_5C_2H_5} + m_{C_6H_4(C_2H_5)_2} = 379,17 \text{ кг / час} + 37,50 \text{ кг / час} = 416,67 \text{ кг / час}$$

4. По массе целевого продукта  $m_{C_6H_5C_2H_5}$  согласно стехиометрии определяем расход чистых реагентов  $C_6H_6$  и  $C_2H_4$  на целевую реакцию

$$m_{C_6H_6}^{\text{чел}} = \frac{a_1 \cdot M_{C_6H_6} \cdot m_{C_6H_5C_2H_5}}{r \cdot M_{C_6H_5C_2H_5}} = \frac{1 \cdot 78 \text{ кг / кмоль} \cdot 379,19 \text{ кг / час}}{1 \cdot 106 \text{ кг / кмоль}} = 279,03 \text{ кг / час}$$

$$m_{C_2H_4}^{\text{чел}} = \frac{v_1 \cdot M_{C_2H_4} \cdot m_{C_6H_5C_2H_5}}{r \cdot M_{C_6H_5C_2H_5}} = \frac{1 \cdot 28 \text{ кг / кмоль} \cdot 379,19 \text{ кг / час}}{1 \cdot 106 \text{ кг / кмоль}} = 100,16 \text{ кг / час}$$

5. Определяем расход чистых реагентов  $C_6H_6$  и  $C_2H_4$  на побочную реакцию

$$m_{C_6H_6}^{\text{поб}} = \frac{a_2 M_{C_6H_6} \cdot m_{C_6H_4(C_2H_5)_2}}{s M_{C_6H_4(C_2H_5)_2}} = \frac{1 \cdot 78 \text{ кг / кмоль} \cdot 37,50 \text{ кг / час}}{1 \cdot 134 \text{ кг / кмоль}} = 21,83 \text{ кг / час}$$

$$m_{C_2H_4}^{\text{поб}} = \frac{v_2 \cdot M_{C_2H_4} \cdot m_{C_6H_4(C_2H_5)_2}}{s \cdot M_{C_6H_4(C_2H_5)_2}} = \frac{2 \cdot 28 \text{ кг / кмоль} \cdot 37,50 \text{ кг / час}}{1 \cdot 134 \text{ кг / кмоль}} = 15,67 \text{ кг / час}$$

6. Суммируем массы каждого из реагентов, израсходованных на целевую и побочные реакции:

$$\Sigma m_{C_6H_6} = m_{C_6H_6}^{цел} + m_{C_6H_6}^{ноб} = 279,03 \text{ кг/час} + 21,83 \text{ кг/час} = 300,86 \text{ кг/час}$$

$$\Sigma m_{C_2H_4} = m_{C_2H_4}^{цел} + m_{C_2H_4}^{ноб} = 100,16 \text{ кг/час} + 15,67 \text{ кг/час} = 115,83 \text{ кг/час}$$

7. Учитываем конверсию реагентов:

$$m'_{C_6H_6} = \Sigma m_{C_6H_6} \cdot \frac{1}{X_{C_6H_6}} = 300,86 \text{ кг/час} \cdot \frac{1}{0,89} = 338,04 \text{ кг/час}$$

$$m'_{C_2H_4} = \Sigma m_{C_2H_4} \cdot \frac{1}{X_{C_2H_4}} = 115,83 \text{ кг/час} \cdot \frac{1}{0,92} = 125,90 \text{ кг/час}$$

8. Определяем непревращенный остаток для каждого из реагентов,

$$\Delta m'_{C_6H_6} = m'_{C_6H_6} - \Sigma m_{C_6H_6} = 338,04 \text{ кг/час} - 300,86 \text{ кг/час} = 37,18 \text{ кг/час}$$

$$\Delta m'_{C_2H_4} = m'_{C_2H_4} - \Sigma m_{C_2H_4} = 125,90 \text{ кг/час} - 115,83 \text{ кг/час} = 10,07 \text{ кг/час}$$

9. Найдем массу технического реагента  $C_6H_6$  с учетом его состава:

$$m''_{C_6H_6} = m'_{C_6H_6} \cdot \frac{100\%}{\omega_{C_6H_6}, \%} = 338,04 \text{ кг/час} \cdot \frac{100\%}{95\%} = 355,83 \text{ кг/час}$$

Рассчитаем массу технического реагента  $C_2H_4$  с учетом его состава:

$$m''_{C_2H_4} = m'_{C_2H_4} \cdot \frac{100\%}{\omega_{C_2H_4}, \%} = 125,90 \text{ кг/час} \cdot \frac{100\%}{98\%} = 128,47 \text{ кг/час}$$

10. Масса примесей технического реагента  $C_6H_6$  равна:

$$\Delta m''_{C_6H_6} = m''_{C_6H_6} - m'_{C_6H_6} = 355,83 \text{ кг/час} - 338,04 \text{ кг/час} = 17,79 \text{ кг/час}$$

Масса примесей технического реагента  $C_2H_4$  равна:

$$\Delta m''_{C_2H_4} = m''_{C_2H_4} - m'_{C_2H_4} = 128,47 \text{ кг/час} - 125,90 \text{ кг/час} = 2,57 \text{ кг/час}$$

11. Составляем уравнение материального баланса.

$$m'_{C_6H_6} + m''_{C_2H_4} = m_{C_6H_5C_2H_5} + m_{C_6H_4(C_2H_5)_2} + \Delta m'_{C_6H_6} + \Delta m'_{C_2H_4} + \Delta m''_{C_6H_6} + \Delta m''_{C_2H_4}$$

$$355,83 + 128,47 = 379,17 + 37,50 + 37,18 + 10,07 + 17,79 + 2,57$$

$$484,30 = 484,28$$

12. Составляем таблицу материального баланса:

Приход			Расход		
Компонент	кг/ч	% масс	Компонент	кг/ч	% масс
1. Технический реагент, C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	355,83	73,47	1. Технический продукт C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	416,67	86,04
в том числе:			в том числе:		
реагент C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> ,	338,04	69,80	а) целевой продукт C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	379,17	78,30
примеси			б) побочный продукт C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> (C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> )	37,50	7,74
реагента C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	17,79	3,67	2. Непревращенный остаток C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	37,18	7,68
2. Технический реагент, C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	128,47	26,53	3. Непревращенный остаток C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	10,07	2,08
в том числе:			4. Примесь реагента C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	17,79	3,67
реагент, C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	125,90	25,99	5. Примеси реагента C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	2,57	0,53
примесь					
реагента, C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	2,57	0,53			
<b>Итого:</b>	<b>484,30</b>	<b>100%</b>	<b>Итого:</b>	<b>484,28</b>	<b>100%</b>

13. Рассчитаем селективность процесса по реагентам:

$$\varphi_{C_6H_6} = \frac{m_{C_6H_6}^{цел}}{m_{C_6H_6}^{цел} + m_{C_2H_4}^{ноб}} = \frac{279,03 \text{ кг / час}}{279,03 \text{ кг / час} + 21,83 \text{ кг / час}} = 0,93$$

$$\varphi_{C_2H_4} = \frac{m_{C_2H_4}^{цел}}{m_{C_2H_4}^{цел} + m_{C_2H_4}^{ноб}} = \frac{100,16 \text{ кг / час}}{100,16 \text{ кг / час} + 15,67 \text{ кг / час}} = 0,86$$

Выход на поданное сырье:

$$\Phi_{C_6H_5C_2H_5} = \frac{m_{C_6H_5C_2H_5}}{m_{C_6H_5C_2H_5}^{max}} \cdot 100\% = \frac{379,17 \text{ кг / час}}{459,39 \text{ кг / час}} \cdot 100\% = 82,54\%$$

$$m_{C_6H_5C_2H_5}^{max} = \frac{m'_{C_6H_6} \cdot r \cdot M_{C_6H_5C_2H_5}}{a_1 \cdot M_{C_6H_6}} = \frac{33804 \text{ кг / час} \cdot 1 \cdot 106 \text{ кг / кмоль}}{1 \cdot 78 \text{ кг / кмоль}} = 459,39 \text{ кг / час}$$

Выход на превращенное сырье:

$$\Phi_{C_6H_5C_2H_5} = \frac{m_{C_6H_5C_2H_5}}{m_{C_6H_5C_2H_5}^{max}} \cdot 100\% = \frac{379,17 \text{ кг / час}}{408,86 \text{ кг / час}} \cdot 100\% = 92,74\%$$

$$m_{C_6H_5C_2H_5}^{max} = \frac{\Sigma m_{C_6H_6} \cdot r \cdot M_{C_6H_5C_2H_5}}{a_1 \cdot M_{C_6H_6}} = \frac{300,86 \text{ кг / час} \cdot 1 \cdot 106 \text{ кг / кмоль}}{1 \cdot 78 \text{ кг / кмоль}} = 408,86 \text{ кг / час}$$

Расходные коэффициенты по сырью:

-фактические:  $\gamma_{C_6H_6}^{\Phi} = \frac{m_{C_6H_6}''}{m_{C_6H_5C_2H_5}} = \frac{355,83 \text{ кг / час}}{379,17 \text{ кг / час}} = 0,94 \text{ кг / кг}$

$$\gamma_{C_2H_4}^{\Phi} = \frac{m_{C_2H_4}''}{m_{C_6H_5C_2H_5}} = \frac{128,47 \text{ кг / час}}{379,17 \text{ кг / час}} = 0,34 \text{ кг / кг}$$

-теоретические:

$$\gamma_{C_6H_6}^T = \frac{a_1 \cdot M_{C_6H_6}}{r \cdot M_{C_6H_5C_2H_5}} = \frac{1 \cdot 78 \text{ кг / кмоль}}{1 \cdot 106 \text{ кг / кмоль}} = 0,74 \text{ кг / кг}$$

$$\gamma_{C_2H_4}^T = \frac{a_1 \cdot M_{C_2H_4}}{r \cdot M_{C_6H_5C_2H_5}} = \frac{1 \cdot 28 \text{ кг / кмоль}}{1 \cdot 106 \text{ кг / кмоль}} = 0,26 \text{ кг / кг}$$

## 2.4 Расчет материального баланса простого обратимого процесса с заданной пропускной способностью по техническому сырью

Реакция для расчета:



1. Определяют численное значение константы равновесия ( $K_p$ ) для указанной температуры процесса.

2. Рассчитывают пропускную способность установки по техническому сырью в кг/час:

$$m''_A = \frac{P \cdot 1000}{24}$$

3. Рассчитывают состав технического реагента А по компонентам (основной реагент и примесь, либо состав фракции) кг/час:

$$m'_A = m''_A \cdot \frac{(100\% - \omega_{np.A}^{\%})}{100\%}, \text{ либо } m'_A = m''_A \frac{\omega_A^{\%}}{100\%}$$

$\omega_A^{\%}$  – содержание основного компонента, (% масс);

$\omega_{np.A}^{\%}$  – содержание примесей в составе технического реагента А (% масс.).

Масса примесей технического реагента А:

$$m^{np}_A = m''_A - m'_A$$

Рассчитывают состав технического реагента А (фракции, в состав которой входит реагент А) в кмоль/час по компонентам:

$$n'_A = \frac{m'_A}{M_A}; \quad n^{np}_A = \frac{m^{np}_A}{M_{npA}}$$

4. Если в исходных данных количество второго реагента задано через мольные соотношения –  $n^*_A : n^*_B$ , то количество чистого второго реагента принимают за  $x$  кмоль/час:

$$\frac{n_A^*}{n_B^*} = \frac{n'_A}{x} ; \quad x = n'_B = \frac{n'_A \cdot n_B^*}{n_A^*}$$

5. Если второй реагент имеет примеси или разбавлен не участвующим в реакции компонентом, то находят покомпонентный состав технического второго реагента, (фракции). Если состав фракции, в которую входит второй реагент задан в % об., то составляют пропорцию, причем вся фракция в состав которой входит второй реагент принимается за 100 % об.:

$$n'_B \quad - \quad \omega_B \text{ \% об.}$$

$$n''_B = n'_B + n_B^{np} - 100 \text{ \% об.}$$

Вся фракция, в состав которой входит второй реагент:

$$n''_B = \frac{100\% \cdot n'_B}{\omega_B \text{ \% об.}}$$

$n_B^{np}$  – количество примеси реагента В.

$n''_B$  – количество технического реагента В в кмоль/час, либо количество всей фракции, в состав которой входит реагент В.

$\omega_B \text{ \% об}$  – содержание реагента В в % об.

Находят количество примеси реагента В в кмоль/час:

$$m_B^{np} = m''_B - m'_B, \text{ либо}$$

$$m_B^{np} = \frac{\omega_{np.B} \text{ \% об.} \cdot n''_B}{100\%}.$$

6. Предполагают, что в состоянии равновесия прореагировало  $x$  кмоль/час ключевого реагента (вещества А), стехиометрическое количество второго реагента (вещества В), образовалось стехиометрическое количество продукта

(вещества R). Составляют сводную таблицу состава исходной и равновесной смеси.

Таблица 1 – Состав исходной и равновесной смеси

Компонент	Состав исходной смеси, кмоль/час	Состав равновесной смеси, кмоль/час
1. Технический реагент A в том числе: чистый A примеси A	$n'_A$ $n^{np}_A$	$n'_A - x$ $n^{np}_A$
2. Технический реагент B в том числе: чистый B примесь B	$n'_B$ $n^{np}_B$ -	$n'_B - x$ $n^{np}_B$ x
3. Продукт R	$\sum n$	$\sum n^*$
<i>Итого:</i>		

$$\sum n^* = n'_A - x + n'_B - x + x + n^{np}_A + n^{np}_B$$

7. Записывают выражения парциальных давлений участников реакции в равновесной смеси согласно закону Рауля.

$$P_i^* = \frac{n_i}{\sum n^*} \cdot P$$

$$P_A^* = \frac{n'_A - x}{\sum n^*} \cdot P$$

$$P_B^* = \frac{n'_B - x}{\sum n^*} \cdot P$$

$$P_R^* = \frac{r-x}{\sum n^*} \cdot P$$

$P$  – общее давление

8. Парциальные давления реагентов и продуктов в состоянии равновесия подставляют в константу равновесия:

$$K_P = \frac{P_R^*}{P_A^* \cdot P_B^*}$$

$P_R^*$ ,  $P_A^*$ ,  $P_B^*$  – парциальные давления участников реакции в состоянии равновесия.

Решают это уравнение относительно  $x$ .

Если в результате решения получают несколько значений  $x$ , то выбирают имеющее физический смысл:

$$n'_A - x > 0$$

$$n'_B - x > 0$$

9. Пересчитывают  $x$  равновесное с учетом реальной конверсии:

$$X_P = x \cdot \alpha$$

$\alpha$  – конверсия от равновесной степени превращения.

10. Рассчитывают состав равновесной смеси в *кмоль/час* и *кг/час*. Если есть потери продукта  $R$ , то учитывают потери.

Таблица 2 – Состав равновесной смеси

Компонент	кмоль/час	кг/час
1. Технический реагент $A$ в том числе: чистый $A$ примеси $A$	$n'_A - x_P$ $n^{np}_A$	$\Delta m'_A = M_A(n'_A - x_P)$ $M_A^{np} \cdot n^{np}_A$
2. Технический реагент $B$ в том числе: чистый $B$ примеси $B$	$n'_B - x_P$ $n^{np}_B$	$\Delta m'_B = M_B(n'_B - x_P)$ $M_B^{np} \cdot n^{np}_B$
3. Продукт $R$	$x_P$	$m_R^{общ} = M_R \cdot x_P$

11. Рассчитывают массу продукта R с учетом потерь:

$$m_R = m_R^{общ} \cdot \frac{(100\% - \omega_{потерь}^{\%})}{100\%}$$

Рассчитывают массу потерь продукта R:

$$m_{потерь} = m_R^{общ} - m_R$$

12. Составляют уравнение материального баланса.

13. Составляют таблицу материального баланса.

Таблица 3 – Материальный баланс

Приход			Расход		
Компонент	кг/ч	% масс	Компонент	кг/ч	% масс
1. Технический реагент, А	$m''_A$	$\frac{m''_A}{\sum m} \cdot 100$	1. Целевой продукт R	$m_R$	$\frac{m_R}{\sum m} \cdot 100$
в том числе: реагент А,	$m'_A$	$\frac{m'_A}{\sum m} \cdot 100$	2. Побочный продукт S	$m_S$	$\frac{m_S}{\sum m} \cdot 100$
примеси реагента А	$m^{np}_A$	$\frac{\Delta m''_A}{\sum m} \cdot 100$	3. Непревращенный остаток А	$\Delta m'_A$	$\frac{\Delta m'_A}{\sum m} \cdot 100$
2. Технический реагент, В	$m''_B$	$\frac{m''_B}{\sum m} \cdot 100$	4. Непревращенный остаток В	$\Delta m'_B$	$\frac{\Delta m'_B}{\sum m} \cdot 100$
в том числе: реагент В,	$m'_B$	$\frac{m'_B}{\sum m} \cdot 100$	5. Примеси реагента А	$m^{np}_A$	$\frac{\Delta m''_A}{\sum m} \cdot 100$
примеси реагента В	$m^{np}_B$	$\frac{\Delta m''_B}{\sum m} \cdot 100$	6. Примеси реагента В	$m^{np}_B$	$\frac{\Delta m''_B}{\sum m} \cdot 100$
			7. Потери продукта	$m_{ном.}$	$\frac{m_{ном.}}{\sum m} \cdot 100$
<b>Итого:</b>	$\sum m = m''_A + m''_B$	<b>100%</b>	<b>Итого:</b>	$\sum m_{1-7}$	<b>100%</b>

**Пример 4. Расчет материального баланса простого обратимого процесса.**



(реакция обратимая, эндотермическая)

Пропускная способность установки по бутеновой фракции, т/сут  $\Pi_{\text{бут.фр.}} = 240$  т/сут.

Состав бутеновой фракции, %вес.:

- бутен  $\omega_{\text{бутен}} = 88\%$

- бутан  $\omega_{\text{бутан}} = 4\%$

- бутадиен  $\omega_{\text{бутадиен}} = 4\%$

- изобутилен  $\omega_{\text{и-бутилен}} = 4\%$

Мольное соотношение бутен-водяной пар

$$n_{\text{бутен}}^* : n_{\text{вод.пар}}^* = 1:17.$$

Температура реакции  $T = 823\text{K}$

Давление  $P = 0,1$  атм.

Значение  $K_p$  при температуре процесса  $0,019$

Степень достижения равновесия  $0,46 \alpha_p$

Потери бутадиена, % вес.  $\omega_{\text{пот.}} = 2\%$ .

1. Рассчитаем пропускную способность установки по техническому сырью (по бутеновой фракции)

$$m''_{\text{бут.фр.}} = \frac{\Pi_{\text{бут.фр.}} \cdot 1000}{24} = \frac{240 \text{ т/сут} \cdot 1000}{24} = 10000 \text{ кг/час}$$

2. Рассчитаем состав технической бутеновой фракции по компонентам, кг/час:

$$m'_{\text{бутен}} = m''_{\text{бут.фр.}} \cdot \frac{\omega_{\text{бутен}}}{100\%} = 10000 \text{ кг/час} \cdot \frac{88\%}{100\%} = 8800 \text{ кг/час}$$

$$m'_{\text{бутан}} = m''_{\text{бут.фр.}} \cdot \frac{\omega_{\text{бутан}}}{100\%} = 10000 \text{ кг/час} \cdot \frac{4\%}{100\%} = 400 \text{ кг/час}$$

$$m_{\text{бутадиен}} = m''_{\text{бут.фр.}} \cdot \frac{\omega_{\text{бутадиен}}}{100\%} = 10000 \text{ кг/час} \cdot \frac{4\%}{100\%} = 400 \text{ кг/час}$$

$$m_{\text{и-бутилен}} = m''_{\text{бут.фр.}} \cdot \frac{\omega_{\text{и-бутилен}}}{100\%} = 10000 \text{ кг/час} \cdot \frac{4\%}{100\%} = 400 \text{ кг/час}$$

Рассчитаем состав технической бутеновой фракции, в кмоль/час по компонентам:

$$n'_{\text{бутен}} = \frac{m'_{\text{бутен}}}{M_{\text{бутен}}} = \frac{8800 \text{ кг/час}}{56 \text{ кг/кмоль}} = 157,14 \text{ кмоль/час};$$

$$n'_{\text{бутан}} = \frac{m'_{\text{бутан}}}{M_{\text{бутан}}} = \frac{400 \text{ кг/час}}{58 \text{ кг/кмоль}} = 6,9 \text{ кмоль/час};$$

$$n'_{\text{бутадиен}} = \frac{m'_{\text{бутадиен}}}{M_{\text{бутадиен}}} = \frac{400 \text{ кг/час}}{54 \text{ кг/кмоль}} = 7,41 \text{ кмоль/час};$$

$$n'_{\text{и-бутилен}} = \frac{m'_{\text{и-бутилен}}}{M_{\text{и-бутилен}}} = \frac{400 \text{ кг/час}}{56 \text{ кг/кмоль}} = 7,14 \text{ кмоль/час};$$

3. Из мольного соотношения бутены - водяной пар, рассчитаем количество чистого водяного пара в кмоль/час, принятого за  $x$

$$\frac{n'_{\text{бутен}}}{x} = \frac{n^*_{\text{бутен}}}{n^*_{\text{вод.пар}}} \geq x = n'_{\text{вод.пар}} = \frac{n'_{\text{бутен}} \cdot n^*_{\text{В}}}{n^*_{\text{А}}} = 157,14 \frac{\text{кмоль}}{\text{час}} \cdot \frac{17}{1} = 2671,38 \text{ кмоль/час}$$

4. Рассчитаем массу водяного пара в кг/час

$$m'_{\text{вод.пар}} = n'_{\text{вод.пар}} \cdot M_{\text{вод.пар}} = 2671,38 \text{ кмоль / час} \cdot 18 \text{ кг / кмоль} = 48084,84 \text{ кг / час}$$

5. Предполагаем, что в состоянии равновесия прореагировало  $x$  кмоль/час бутена, при этом образовалось стехиометрическое количество бутадиена  $C_4H_6$  ( $x$  кмоль/час).

Составим таблицу состава исходной и равновесной смеси.

Компонент	Состав исходной смеси, кмоль/час	Состав равновесной смеси, кмоль/час
1.Техническая бутеновая фракция, в т.ч. бутен бутан бутадиен изобутилен	178,59 157,14 6,9 7,41 7,41	 157,14- $x$ 6,9 7,41 7,41
2.Бутадиен	-	$\frac{r}{a} \cdot x$
3.Водород	-	$\frac{s}{a} \cdot x$
Итого	$\sum n = 178,59$	$\sum^* n = 178,59 + x$

$$\sum n^* = n'_{\text{бутен}} - x + \frac{r}{a} \cdot x + \frac{s}{a} \cdot x + n_{\text{бутан}} + n_{\text{бутадиен}} + n_{\text{изобутилен}} =$$

$$= 157,14 - x + x + x + 6,9 + 7,41 + 7,41 = 178,59 + x (\text{кмоль / час})$$

$a, r, s$  – стехиометрические коэффициенты в уравнении реакции.

6. Запишем выражения парциальных давлений участников реакции в равновесной смеси согласно закону Рауля

$$P_i^* = \frac{n_i}{\sum n^*} \cdot P$$

$$P_{\text{бутен}}^* = \frac{n'_{\text{бутен}} - x}{\Sigma n^*} \cdot P = \frac{157,14 - x}{178,59 + x} \cdot 0,1$$

$$P_{\text{бутадиен}}^* = \frac{r \cdot x}{\Sigma n^*} \cdot P = \frac{x}{178,59 + x} \cdot 0,1$$

$$P_{\text{H}_2}^* = \frac{s \cdot x}{\Sigma n^*} \cdot P = \frac{x}{178,59 + x} \cdot 0,1$$

7. Парциальные давления реагента и продуктов в состоянии равновесия подставляют в константу равновесия:

$$K_p = \frac{P_{\text{бутадиен}}^{*r} \cdot H_{\text{H}_2}^{*s}}{P_{\text{бутен}}^*} = \frac{\frac{x}{178,59 + x} \cdot 0,1 \cdot \frac{x}{178,59 + x} \cdot 0,1}{\frac{157,14 - x}{178,59 + x} \cdot 0,1} =$$

$$= \frac{0,1 \cdot x^2}{(178,59 + x)(157,14 - x)}$$

$$K_p = 0,019.$$

$$0,1 \cdot x^2 = 0,019[(178,59 + x)(157,14 - x)]$$

$$0,1 \cdot x^2 = 0,019[28063,63 - 21,45x - x^2]$$

$$0,1x^2 - 533,21 + 0,41x + 0,019x^2 = 0$$

$$0,119x^2 + 0,41x - 533,21 = 0$$

$$D = b^2 - 4ac = (0,41)^2 - 4 \cdot 0,119 \cdot (-533,21) = 253,98$$

$$\sqrt{D} = 15,94$$

Найдем корни уравнения:

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{D}}{2a}$$

$$x_1 = \frac{-0,41 + 15,94}{2 \cdot 0,119} = 65,25$$

$$x_2 = \frac{-0,41 - 15,94}{2 \cdot 0,119} = -65,25$$

Выбираем положительное значение  $x$ .

8. Пересчитываем  $x$  равновесное с учетом реальной конверсии:

$$x_p = x \cdot \alpha_p = 65,25 \cdot 0,46 = 30,015 \text{ кмоль/час}$$

9. Рассчитаем состав равновесной смеси в кмоль/час и кг/час.

Компонент	кмоль/час	кг/час
1. Техническая бутеновая фракция в том числе Бутен	$n'_{\text{бутен}} - x_p = 157,14 - 30,015 = 127,125$	$\Delta m'_{\text{бутен}} = M_{\text{бутен}} (n'_{\text{бутен}} - x_p) = 56 \cdot 127,125 = 7119$
Бутан	6,9	400
Бутадиен	7,41	400
Изоо-бутилен	7,41	400
2. Бутадиен	$\frac{r}{a} \cdot x_p = 30,015$	$m_{\text{бутадиен}}^{\text{общ}} = M_{\text{бутадиен}} \cdot \frac{r}{a} \cdot x_p = 54 \cdot 30,015 = 1620,81$
3. Водород	$\frac{s}{a} \cdot x_p = 30,015$	$m_{H_2} = M_{H_2} \cdot \frac{s}{a} \cdot x_p = 2 \cdot 30,015 = 60,03$

10. Рассчитаем массу продукта с учетом потерь:

$$m_{\text{бутадиен}} = m_{\text{бутадиен}}^{\text{общ}} \cdot \frac{(100\% - \omega_{\text{пот}})}{100\%} = 1620,81 \cdot \frac{100\% - 2\%}{100\%} = 1588,39 \text{ кг/час}$$

Рассчитаем массу потерь продукта:

$$m_{\text{пот}} = m_{\text{бутадиен}}^{\text{общ}} - m_{\text{бутадиен}} = 162081 \text{ кг/час} - 158839 \text{ кг/час} = 32,42 \text{ кг/час}$$

11. Составляем уравнение материального баланса:

$$m_{\text{бут.фр.}}'' = m_{\text{бутадиен}} + m_{\text{H}_2} + \Delta m'_{\text{бутен}} + m_{\text{бутан}} + m_{\text{бутадиен}} + m_{\text{изо-бутилен}} + m_{\text{пот}}$$

$$10000 = 1588,39 + 60,03 + 7119 + 400 + 400 + 400 + 32,42$$

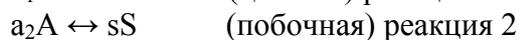
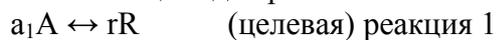
$$10000 = 9999,84$$

12. Составляем таблицу материального баланса:

Приход			Расход		
Компонент	кг/час	%масс	Компонент	кг/час	%масс
1. Техническая бутеновая фракция, в т.ч.	10000,00	17,22	1. Бутадиен	1588,39	2,73
бутен	8800,00	15,15	2. Водород	60,03	0,10
бутан	400,00	0,69	3. Непревращенный бутен	7119,00	12,26
бутадиен	400,00	0,69	4. Бутан	400,00	0,69
изобутилен	400,00	0,69	Бутадиен	400,00	0,69
2. Водяной пар	48084,84	82,78	Изобутилен	400,00	0,69
			5. Потери бутадиена	32,42	0,06
			6. Водяной пар	48084,84	82,78
<b>Итого:</b>	<b>58084,84</b>	<b>100%</b>	<b>Итого:</b>	<b>58084,84</b>	<b>100%</b>

## 2.5 Расчет материального баланса сложного обратимого процесса

Реакции для расчета:



Исходные данные:

Производительность установки

по целевому продукту R, т/сут

$\Pi_R$

Состав технического реагента А, % об.:

Чистый реагент А

$\omega_A$

Примесь в составе технического реагента А

$\omega_{прА}$

Условия реакции:

Температура

T, К

Давление

p, ата

Значение  $K_p$  при температуре процесса

реакция 1 (целевая)

$K_{p_1}$

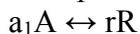
реакция 2 (побочная)

$K_{p_2}$

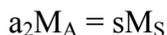
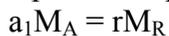
Потери продукта R, % вес.

$\omega_{номR}$

1. Рассчитывают молярные массы всех участников процесса, умножают полученные значения на соответствующие стехиометрические коэффициенты:



Проводят проверку расчета:



2. Рассчитывают производительность установки по целевому продукту R в кг/час.

$$m_R = \frac{\Pi_R \cdot 1000}{24}$$

3. Рассчитывают производительность установки с учетом потерь:

$$m_R^* = \frac{m_R}{100\% - \omega_{nom.R}, \%} \cdot 100\%$$

Находят массу потерь продукта R:

$$m_{nom.} = m_R^* - m_R$$

4. Рассчитывают количество продукта в кмоль/час:

$$n_R^* = \frac{m_R^*}{M_R}$$

5. Согласно стехиометрии на образование целевого продукта R количеством  $n_R^*$  израсходовано:

$$n_A^{цел} = \frac{a_1}{r} \cdot n_R^*$$

6. Предположим, что в состоянии равновесия на процесс было подано  $x$  кмоль/час чистого реагента A, из которого в целевую реакцию вступило реагента A, количеством  $n_A^{цел}$  (кмоль/час), а на побочную реакцию, т.е. на образование побочного продукта S, количеством  $y$  кмоль/час, вступило

$\frac{a_2}{s} \cdot y$  кмоль/час, тогда равновесный состав смеси:

Компонент	Начальный момент	В момент равновесия
	п, кмоль/час	п, кмоль/час
1.Технический реагент А, в т.ч.:		
Чистый реагент А	$x$	$x - n_A^{цел} - \frac{a_2}{s} \cdot y$
Примесь реагента А	$\frac{\omega_{np.A}}{\omega_A} \cdot x$	$\frac{\omega_{np.A}}{\omega_A} \cdot x$
2.Целевой продукт R	0	$n_R^*$
3.Побочный продукт S	0	$y$
Итого	$\Sigma n$	$\Sigma n^*$

- где примесь из состава технического реагента А рассчитывают, зная процентное содержание (об.) компонентов:

$$n_{npA} = \frac{\omega_{np.A}}{\omega_A} \cdot x$$

$$\Sigma n = x + \frac{\omega_{np.A}}{\omega_A} \cdot x + 0 + 0$$

$$\Sigma n^* = x - n_A^{цел} - \frac{a_2}{s} \cdot y + \frac{\omega_{np.A}}{\omega_A} \cdot x + n_R^* + y$$

7. Записывают выражения парциальных давлений участников реакций в равновесной смеси согласно закону Рауля:

$$P_i^* = \frac{n_i}{\Sigma n^*} \cdot P$$

- для целевой реакции:

$$P_A^{*цел} = \frac{x - n_A^{цел} - \frac{a_2}{s} \cdot y}{\Sigma n^*} \cdot P$$

$$P_R^* = \frac{n_R^*}{\Sigma n^*} \cdot P$$

- для побочной реакции:

$$P_A^{*поб} = \frac{x - n_A^{цел} - \frac{a_2}{s} \cdot y}{\Sigma n^*} \cdot P$$

$$P_S^* = \frac{y}{\Sigma n^*} \cdot P,$$

где P – общее давление

8. Парциальные давления реагентов и продуктов в состоянии равновесия подставляют в константу равновесия:

$$K_p = \frac{P_R^{*r} \cdot P_S^{*s}}{P_A^{*a} \cdot P_B^{*b}}$$

$P_A^*$ ,  $P_B^*$ ,  $P_R^*$ ,  $P_S^*$  - парциальные давления участников реакции в состоянии равновесия

- для целевой реакции:

$$K_{p_1} = \frac{P_R^{*r}}{(P_A^{*цел})^{a_1}} = \frac{\left( \frac{n_R^*}{\Sigma n^*} \cdot P \right)^r}{\left( \frac{x - n_A^{цел} - \frac{a_2}{s} \cdot y}{\Sigma n^*} \cdot P \right)^{a_1}}$$

-для побочной реакции:

$$K_{p_2} = \frac{P_S^{*s}}{(P_A^{*ноб})^{a_2}} = \frac{\left(\frac{y}{\Sigma n^*} \cdot P\right)^s}{\left(\frac{x - n_A^{цел} - \frac{a_2}{s} \cdot y}{\Sigma n^*} \cdot P\right)^{a_2}}$$

Решают полученную систему уравнений, находят корни  $x$  и  $y$ .

Если в результате решения получают несколько значений  $x$  и  $y$ , то выбирают положительное, имеющее физический смысл:

$$x - n_A^{цел} - \frac{a_2}{s} \cdot y > 0$$

9. Рассчитывают состав равновесной смеси в кмоль/час и кг/час.

Компонент	п, кмоль/час	п, кмоль/час
1.Технический реагент А, в т.ч.:		
Чистый А	$\Delta n'_A = x - n_A^{цел} - \frac{a_2}{s} \cdot y$	$\Delta m'_A = M_A \cdot \Delta n'_A$
Примеси А	$n_{np.A} \frac{\omega_{np.A}}{\omega_A} \cdot x$	$m_{np.A} = M_{np} \cdot n_{np.A}$
2.Целевой продукт R	$n_R^*$	$m_R^* = n_R^* \cdot M_R$
3.Побочный продукт S	$n_S = y$	$m_S = n_S \cdot M_S$

10. Находят массу чистого реагента А:

$$m'_A = n'_A \cdot M_A$$

где  $n'_A = x$ , найденное в ходе решения системы уравнений.

11. Составляют уравнение материального баланса:

$$m_A^{mex} = m_R + m_S + \Delta m'_A + m_{np.A} + m_{nom.R},$$

где  $m_A^{mex} = m'_A + m_{np.A}$

12. Составляют таблицу материального баланса:

приход			расход		
компонент	г/час	%масс	компонент	г/час	%масс
1.Технически й реагент А, в т.ч.:  Чистый реагент А  примесь реагента А	$m_A^{mex}$	$\frac{m_A^{mex}}{m_A^{mex}} \cdot 100$	1.Целевой продукт R	$m_R$	$\frac{m_R}{\Sigma m} \cdot 100$
			2.Побочный продукт S	$m_S$	$\frac{m_S}{\Sigma m} \cdot 100$
			3.Непревращенн ый остаток реагента А	$\Delta m'_A$	$\frac{\Delta m'_A}{\Sigma m} \cdot 100$
			4.Примесь реагента А	$m_{np.A}$	$\frac{m_{np.A}}{\Sigma m} \cdot 100$
			5.Потери продукта R	$m_{nom.R}$	$\frac{m_{nom.R}}{\Sigma m} \cdot 100$
Итого	$m_A^{mex}$	100%	Итого	$\Sigma m_{1-5}$	100%

**Пример 5. Расчет материального баланса сложного обратимого процесса**

Получение изопентана изомеризацией нормального пентана



(реакции обратимые, эндотермические)

Производительность установки по изопентану

$$P_{i-C_5H_{12}} = 90 \text{ т / сут}$$

Состав н-пентана, % об.:

$$\omega_{n-C_5H_{12}} = 98\% \text{ об}$$

$$\omega_{n-C_4H_{10}} = 2\% \text{ об}$$

Условия реакции:

Температура  $T = 700 \text{ К}$

Давление  $P = 1 \text{ ата}$

Значение  $K_p$  при температуре процесса:

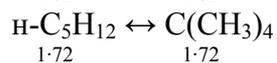
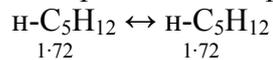
реакция 1 (целевая)  $K_{p_1} = 1,950$

реакция 2 (побочная)  $K_{p_2} = 0,125$

Потери изопентана, % вес.

$$\omega_{\text{пот. } i-C_5H_{12}} = 2,5\%$$

1. Рассчитаем молярные массы всех участников процесса, умножаем полученные значения на соответствующие стехиометрические коэффициенты:



Проводим проверку правильности расчета:

$$a_1 \cdot M_{n-C_5H_{12}} = r \cdot M_{n-C_5H_{12}}$$

$$1 \cdot 72 \text{ кг/кмоль} = 1 \cdot 72 \text{ кг/кмоль}$$

$$a_2 \cdot M_{n-C_5H_{12}} = s \cdot M_{C(CH_3)_4}$$

$$1 \cdot 72 \text{ кг/кмоль} = 1 \cdot 72 \text{ кг/кмоль}$$

2. Рассчитаем производительность установки по целевому продукту и-С<sub>5</sub>H<sub>12</sub> в кг/час.

$$m_{u-C_5H_{12}} = \frac{P_{u-C_5H_{12}} \cdot 1000}{24} = \frac{90 \text{ м / сум} \cdot 1000}{24} = 3750 \text{ кг / час}$$

3. Рассчитаем производительность установки с учетом потерь:

$$m_{u-C_5H_{12}}^* = \frac{m_{u-C_5H_{12}}}{100\% - \omega_{\text{пот.и-C}_5\text{H}_{12}}, \%} \cdot 100\% = \frac{3750 \text{ кг / час}}{100\% - 2,5\%} \cdot 100\% = 3846,15 \text{ кг / час}$$

Находим массу потерь продукта и-С<sub>5</sub>H<sub>12</sub>:

$$m_{\text{пот.и-C}_5\text{H}_{12}} = m_{u-C_5H_{12}}^* - m_{u-C_5H_{12}} = 3846,15 \text{ кг / час} - 3750 \text{ кг / час} = 96,15 \text{ кг / час}$$

4. Рассчитаем количество продукта в кмоль/час:

$$n_{u-C_5H_{12}}^* = \frac{m_{u-C_5H_{12}}^*}{M_{u-C_5H_{12}}} = \frac{3846,15 \text{ кг / час}}{72 \text{ кг / кмоль}} = 53,42 \text{ кмоль / час}$$

5. Согласно стехиометрии на образование целевого продукта и-С<sub>5</sub>H<sub>12</sub> количеством  $n_{u-C_5H_{12}}^*$  израсходовано:

$$n_{u-C_5H_{12}}^{\text{цел}} = \frac{a_1}{r} \cdot n_{u-C_5H_{12}}^* = \frac{1}{1} \cdot 53,42 \text{ кмоль / час}$$

6. Предположим, что в состоянии равновесия на процесс было подано  $x$  кмоль/час чистого реагента н-С<sub>5</sub>H<sub>12</sub>, из которого в целевую реакцию вступило реагента н-С<sub>5</sub>H<sub>12</sub>, количеством

$n_{n-C_5H_{12}}^{цел}$  (кмоль/час), а на побочную реакцию, т.е. на образование побочного продукта  $C(CH_3)_4$ , количеством  $y$  кмоль/час, вступило  $\frac{a_2}{s} \cdot y$  кмоль/час, тогда равновесный состав смеси:

Компонент	Начальный момент	В момент равновесия
	$n$ , кмоль/час	$n$ , кмоль/час
1.Технический реагент н-С <sub>5</sub> H <sub>12</sub> , в т.ч.:		
чистый реагент н-С <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	$x$	$x - 53,42 - \frac{1}{1} \cdot y$
Примесь реагента н-С <sub>5</sub> H <sub>12</sub> н-С <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	$0,02 \cdot x$	$0,02 \cdot x$
2.Целевой продукт и-С <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	0	53,42
3.Побочный продукт C(CH <sub>3</sub> ) <sub>4</sub>	0	$y$
Итого	$\Sigma n = 1,02x$	$\Sigma n^* = 1,02x$

- где примесь из состава технического реагента н-С<sub>5</sub>H<sub>12</sub> рассчитаем, зная процентное содержание (об.) компонентов:

$$n_{n-C_4H_{10}} = \frac{\omega_{n-C_4H_{10}}}{\omega_{n-C_5H_{12}}} \cdot x = \frac{2\%}{98\%} \cdot x = 0,02 \cdot x$$

$$\Sigma n = x + 0,02 \cdot x$$

$$\Sigma n^* = x - 53,42 = y + 0,02 \cdot x + 53,42 + y = 1,02 \cdot x$$

7. Запишем выражения парциальных давлений участников реакций в равновесной смеси согласно закону Рауля:

- для целевой реакции:

$$P_{n-C_5H_{12}}^{*цел} = \frac{x - 53,42 - y}{1,02 \cdot x} \cdot P, \quad \text{где } P = 1 \text{ ата}$$

$$P_{u-C_5H_{12}}^* = \frac{53,42}{1,02 \cdot x} \cdot P$$

- для побочной реакции:

$$P_{n-C_5H_{12}}^{*поб} = \frac{x - 53,42 - y}{1,02 \cdot x} \cdot P, \quad \text{где } P = 1 \text{ ата}$$

$$P_{C(CH_3)_4}^* = \frac{y}{1,02 \cdot x} \cdot P,$$

8. Парциальные давления реагентов и продуктов в состоянии равновесия подставляют в константу равновесия:

- для целевой реакции:

$$K_{p_1} = \frac{P_{u-C_5H_{12}}^*}{(P_{n-C_5H_{12}}^{*цел})^{a_1}} = \frac{\left(\frac{53,42}{1,02 \cdot x}\right)^1}{\left(\frac{x - 53,42 - y}{1,02 \cdot x}\right)^1} = 1,95$$

- для побочной реакции:

$$K_{p_2} = \frac{P_{C(CH_3)_4}^*}{(P_{n-C_5H_{12}}^{*поб})^2} = \frac{\left(\frac{y}{1,02 \cdot x} \cdot P\right)^1}{\left(\frac{x - 53,42 - y}{1,02 \cdot x} \cdot P\right)^1} = 0,125$$

Преобразуем выражения:

$$\begin{cases} \frac{53,42}{x - 53,42 - y} = 1,95 \\ \frac{y}{x - 53,42 - y} = 0,125 \end{cases}$$

Полученную систему уравнений решаем относительно  $x$  и  $y$ .

$$x = 84,23$$

$$y = 3,42, \text{ что удовлетворяет условию}$$

$$84,23 - 53,42 - 3,42 > 0$$

9. Рассчитаем состав равновесной смеси в кмоль/час и кг/час.

Компонент	$n$ , кмоль/час	$n$ , кмоль/час
1. Технический реагент $n\text{-C}_5\text{H}_{12}$ , в т.ч.:		
чистый реагент $n\text{-C}_5\text{H}_{12}$	$\Delta n'_{n\text{-C}_5\text{H}_{12}} = 84,23 - 53,42 - 3,42 = 27,39$	$\Delta m'_{n\text{-C}_5\text{H}_{12}} = 72 \cdot 27,39 = 1972,08$
Примеси реагента $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$	$n_{n\text{-C}_4\text{H}_{10}} = 0,02 \cdot 84,23 = 1,68$	$m_{n\text{-C}_4\text{H}_{10}} = 58 \cdot 1,68 = 97,44$
2. Целевой продукт $n\text{-C}_5\text{H}_{12}$	$n_{n\text{-C}_5\text{H}_{12}}^* = 53,42$	$m_{n\text{-C}_5\text{H}_{12}} = 72 \cdot 53,42 = 3846,24$
3. Побочный продукт $\text{C}(\text{CH}_3)_4$	$n_s = 3,42$	$m_s = 3,42 \cdot 72 = 246,24$

10. Найдем массу чистого реагента  $n\text{-C}_5\text{H}_{12}$ :

$$m'_{n\text{-C}_5\text{H}_{12}} = n'_{n\text{-C}_5\text{H}_{12}} \cdot M_{n\text{-C}_5\text{H}_{12}}$$

где  $n'_{n\text{-C}_5\text{H}_{12}} = x = 84,23$ , найденное в ходе решения системы уравнений.

$$m'_{n\text{-C}_5\text{H}_{12}} = 84,23 \text{ кмоль / час} \cdot 72 \text{ кг / кмоль} = 6064,56 \text{ кг / час}$$

11. Составим уравнение материального баланса:

$$m_{n-C_5H_{12}}^{mex} = m_{n-C_5H_{12}} + m_{C(CH_3)_4} + \Delta m'_{n-C_5H_{12}} + m_{n-C_4H_{10}} + m_{пот. n-C_5H_{12}}$$

$$6064,56 \text{ кг/час} + 97,44 \text{ кг/час} = 3750 \text{ кг/час} + 246,24 \text{ кг/час} +$$

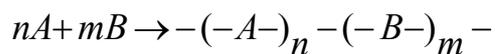
$$+ 1972,08 \text{ кг/час} + 97,44 \text{ кг/час} + 96,15 \text{ кг/час}$$

$$6162 \text{ кг/час} = 6161,91 \text{ кг/час}$$

12. Составим таблицу материального баланса

Приход			Расход		
Компонент	кг/час	%масс	Компонент	кг/час	%масс
1. Технич. реагент н-С <sub>5</sub> H <sub>12</sub> , вт.ч.	6162	100,00	1. Целевой продукт н-С <sub>5</sub> H <sub>12</sub> :	3750	60,86
чистый н-С <sub>5</sub> H <sub>12</sub> :	6064,56	98,42	2. Побочный продукт н-С(CH <sub>3</sub> ) <sub>4</sub>	246,24	3,99
Примесь н-С <sub>4</sub> H <sub>10</sub> :	97,44	1,58	3. Непревращенный остаток н-С <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	1972,08	32,00
			4. Примесь н-С <sub>4</sub> H <sub>10</sub> :	97,44	1,58
			5. Потери продукта н-С <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	96,15	1,56
Итого	6162	100,00	Итого	6161,91	100,00

## 2.6 Расчет материального баланса процесса полимеризации



Исходные данные могут быть представлены: Производительность установки по каучуку, т/сут	$P_R$
Состав шихты подаваемой на полимеризацию, % масс.:	
Мономер А	$\omega_{\text{мон.А}}^{\text{шихта}}$
Мономер В	$\omega_{\text{мон.В}}^{\text{шихта}}$
Растворитель	$\omega_{\text{раств-ль}}^{\text{шихта}}$
Состав суспензии стабилизатора, % масс.:	
Стабилизатор 1	$\omega_{\text{стаб1}}^{\text{суспензия}}$
Стабилизатор 2	$\omega_{\text{стаб2}}^{\text{суспензия}}$
Растворитель	$\omega_{\text{раств-ль}}^{\text{суспензия}}$
Состав каучука после полимеризации, % масс.:	
полимер А	$\omega_{\text{пол.А}}^{\text{каучук}}$
полимер В	$\omega_{\text{пол.В}}^{\text{каучук}}$
Стабилизатор 1	$\omega_{\text{стаб1}}^{\text{каучук}}$
Стабилизатор 2	$\omega_{\text{стаб2}}^{\text{каучук}}$
Конверсия мономера А, %	$X_A$
Потери каучука, %	$\omega_{\text{потерь}}$

1. Рассчитывают производительность установки  
рассчитывают в кг/час:

$$m_R = \frac{P_R \cdot 1000}{24}$$

2. Находят производительность с учетом потерь ( $m'$ )

$$m_R - 100 - \omega\% \text{ потерь}$$

$$m_R' - 100\%$$

$$m_R' = m_R \frac{100\%}{100 - \omega\%_{\text{потерь}}}$$

Определяют количество потерь каучука:

$$m_{\text{потерь}} = m_R' - m_R$$

3. Рассчитывают покомпонентный состав каучука после полимеризации, принимая массу каучука с учетом потерь за 100%:

$$m_{\text{полA}} = \frac{m_R' \cdot \omega_{\text{полA}}^{\text{каучук}}}{100\%}$$

$$m_{\text{полB}} = \frac{m_R' \cdot \omega_{\text{полB}}^{\text{каучук}}}{100\%}$$

$$m_{\text{стаб1}} = \frac{m_R' \cdot \omega_{\text{стаб1}}^{\text{каучук}}}{100\%}$$

$$m_{\text{стаб2}} = \frac{m_R' \cdot \omega_{\text{стаб2}}^{\text{каучук}}}{100\%}$$

4. Масса полимера равна массе мономера, вступившего в реакцию:

$$m_{\text{полA}} = m_{\text{мон.В}}$$

$$m_{\text{полB}} = m_{\text{мон.В}}$$

5. Масса мономера А с учетом конверсии

$$m_{\text{мон.А}}^{\text{шхта}} = m_{\text{мон.А}} \cdot \frac{1}{X_A}$$

6. Масса непревращенного мономера А:

$$\Delta m_{\text{мон.А}} = m_{\text{мон.А}}^{\text{шихта}} - m_{\text{мон.А}}$$

7. Массу шихты находим исходя из содержания в ней мономера:

$$m_{\text{мон.А}}^{\text{шихта}} - \omega_{\text{мон.А}}^{\text{шихта}} \%$$

$$m_{\text{шихты}} - 100\%$$

$$m_{\text{шихты}} = m_{\text{мон.А}}^{\text{шихта}} \frac{100\%}{\omega_{\text{мон.А}}^{\text{шихта}}}$$

8. Находят покомпонентный состав шихты (массу второго мономера, растворителя):

$$m_{\text{мон.В}}^{\text{шихта}} = \frac{m_{\text{шихты}} \cdot \omega_{\text{мон.В}}^{\text{шихта}}}{100\%}$$

$$m_{\text{раств-ль}}^{\text{шихта}} = \frac{m_{\text{шихты}} \cdot \omega_{\text{раств-ль}}^{\text{шихта}}}{100\%}$$

9. Рассчитывают массу непревращенного остатка второго мономера (мономер В):

$$\Delta m_{\text{мон.В}} = m_{\text{мон.В}}^{\text{шихта}} - m_{\text{мон.В}}$$

10. Исходя из массы стабилизатора и процентного содержания его в составе суспензии находят массу суспензии:

$$m_{\text{стабл}} - \omega_{\text{стабл}}^{\text{суспензия}} \%$$

$$m_{\text{суспензии}} - 100\%$$

$$m_{\text{суспензии}} = m_{\text{стабл}} \frac{100\%}{\omega_{\text{стабл}}^{\text{суспензия}}}$$

11. Находят покомпонентный состав суспензии :

$$m_{\text{суспензии}} - 100\%$$

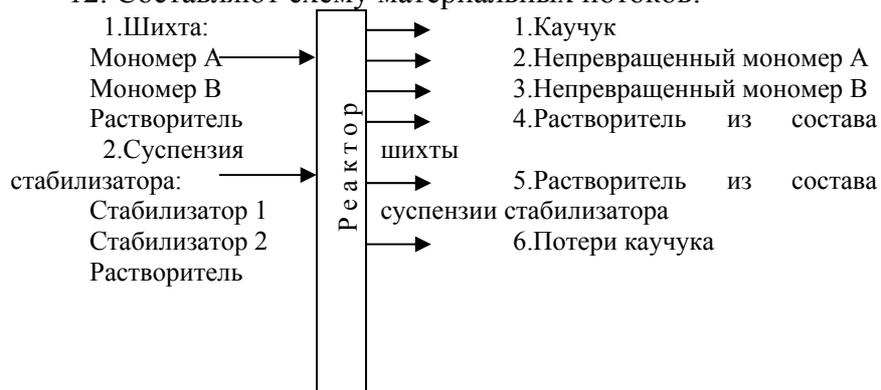
$$m_{\text{раств-ль}} - \omega_{\text{раств-ль}}^{\text{суспензия}} \%$$

$$m_{\text{раств-ль}}^{\text{суспензия}} = \frac{m_{\text{суспензии}} \cdot \omega_{\text{раств-ль}}^{\text{суспензия}}}{100\%}$$

или

$$m_{\text{раств-ль}}^{\text{суспензия}} = m_{\text{суспензии}} - (m_{\text{стаб}_1} + m_{\text{стаб}_2})$$

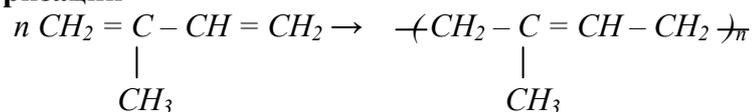
12. Составляют схему материальных потоков:



13. Составляют таблицу материального баланса:

Приход		Расход	
Компонент	кг/ч	Компонент	кг/ч
1. Шихта	$m_{\text{шихты}}$	1. Каучук	$m_R$
в том числе:		2. Непревращенный мономер А	$\Delta m_{\text{мон.А}}$
мономер А	$m_{\text{мон.А}}$	3. Непревращенный мономер В	$\Delta m_{\text{мон.В}}$
мономер В	$m_{\text{мон.В}}$	4. Растворитель из состава шихты	$m_{\text{раств-ль}}^{\text{шихта}}$
растворитель	$m_{\text{раств-ль}}^{\text{шихта}}$	5. Растворитель из состава суспензии стабилизатора	$m_{\text{раств-ль}}^{\text{суспензия}}$
2. Суспензия стабилизатора	$m_{\text{суспензии}}$	6. Потери каучука	$m_{\text{потерь}}$
в том числе:			
стабилизатор 1	$m_{\text{стаб1}}$		
стабилизатор 2	$m_{\text{стаб2}}$		
растворитель	$m_{\text{раств-ль}}^{\text{суспензия}}$		
<b>Итого:</b>	$\sum m = m_{\text{шихты}} + m_{\text{суспензии}}$	<b>Итого:</b>	$\sum_{1-6} m$

**Пример 6. Расчет материального баланса процесса полимеризации**



Исходные данные могут быть представлены:

Производительность установки по каучуку, т/сут  $\Pi_{\text{к-ка}} = 130 \text{ т/сут}$

Состав шихты подаваемой на полимеризацию, %

масс.:

изопрен

$$\omega_{\text{изопрен}}^{\text{шихта}} = 21\%$$

изопентан(растворитель)

$$\omega_{\text{изопентан}}^{\text{шихта}} = 79\%$$

Состав суспензии стабилизатора, % масс.:

ДФФД

$$\omega_{\text{ДФФД}}^{\text{суспензия}} = 1,5\%$$

Неозон-Д

$$\omega_{\text{неозон-Д}}^{\text{суспензия}} = 1,5\%$$

Вода(растворитель)

$$\omega_{\text{вода}}^{\text{суспензия}} = 97\%$$

Состав каучука после полимеризации, % масс.:

полимер изопрена

$$\omega_{\text{пол.изопрена}}^{\text{каучук}} = 98\%$$

ДФФД

$$\omega_{\text{ДФФД}}^{\text{каучук}} = 1\%$$

Неозон-Д

$$\omega_{\text{неозонД}}^{\text{каучук}} = 1\%$$

Конверсия мономера изопрена, %

$$x_{\text{изопрена}} = 87\%$$

Потери каучука, %

$$\omega_{\text{потерь}} = 2\%$$

1. Рассчитаем производительность установки в кг/час:

$$m_{\text{каучук}} = \frac{\Pi_{\text{каучук}} \cdot 1000}{24} = \frac{130 \text{ т/сут} \cdot 1000}{24} = 5416,67 \text{ кг/час}$$

2. Найдем производительность с учетом потерь ( $m'_{\text{каучук}}$ )

$$m'_{\text{каучук}} = m_{\text{каучук}} \cdot \frac{100\%}{100\% - \omega_{\text{потерь, \%}}} = 5416,67 \text{ кг/час} \cdot \frac{100\%}{100\% - 2\%} = 5527,21 \text{ кг/час}$$

Определяем количество потерь каучука:

$$m_{\text{потерь}} = m'_{\text{каучук}} - m_{\text{каучук}} = 5527,21 \text{ кг/час} - 5416,67 \text{ кг/час} = 110,54 \text{ кг/час}$$

3. Рассчитываем покомпонентный состав каучука после полимеризации, принимая массу каучука с учетом потерь за 100%:

$$m_{\text{пол.изопрен}} = \frac{m'_{\text{каучук}} \cdot \omega_{\text{пол.изопрен}}^{\text{каучук}}}{100\%} = \frac{5527,21 \text{ кг/час} \cdot 98\%}{100\%} = 5416,67 \text{ кг/час}$$

$$m_{\text{ДФФД}} = \frac{m'_{\text{каучук}} \cdot \omega_{\text{ДФФД}}^{\text{каучук}}}{100\%} = \frac{5527,21 \text{ кг/час} \cdot 1\%}{100\%} = 55,27 \text{ кг/час}$$

$$m_{\text{неозон-Д}} = \frac{m'_{\text{каучук}} \cdot \omega_{\text{неозон-Д}}^{\text{каучук}}}{100\%} = \frac{5527,21 \text{ кг/час} \cdot 1\%}{100\%} = 55,27 \text{ кг/час}$$

4. Масса полимера равна массе мономера, вступившего в реакцию:

$$m_{\text{пол.изопрена}} = m_{\text{мон.изопрена}} = 5416,67 \text{ кг/час}$$

5. Масса мономера изопрена с учетом конверсии

$$m_{\text{мон.изопрена}}^{\text{шихта}} = m_{\text{мон.изопрена}} \cdot \frac{1}{x_{\text{изопрена}}} = 5416,67 \text{ кг/час} \cdot \frac{1}{0,87} = 6226,06 \text{ кг/час}$$

6. Масса непревращенного остатка мономера изопрена:

$$\Delta m_{\text{мон.изопрена}} = m_{\text{мон.изопрена}}^{\text{шихта}} - m_{\text{мон.изопрена}} = 6226,06 \text{ кг/час} - 5416,67 \text{ кг/час} = 809,39 \text{ кг/час}$$

7. Массу шихты находим исходя из содержания в ней мономера:

$$m_{\text{шихты}} = m_{\text{мон.изопрена}} \cdot \frac{100\%}{\omega_{\text{мон.изопрена}}^{\text{шихты}}} = 6226,06 \text{ кг / час} \cdot \frac{100\%}{21\%} = 29647,90 \text{ кг / час}$$

8. Рассчитаем покомпонентный состав шихты:

$$m_{\text{изопентан}}^{\text{шихты}} = \frac{m_{\text{шихты}} \cdot \omega_{\text{изопентан}}^{\text{шихты}}}{100\%} = \frac{29647,90 \text{ кг / час} \cdot 79\%}{100\%} = 23421,84 \text{ кг / час}$$

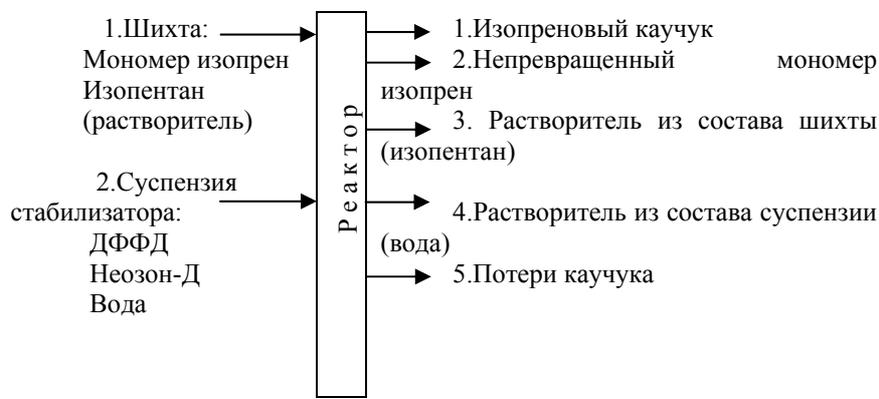
9. Исходя из массы стабилизатора и процентного содержания его в составе суспензии найдем массу суспензии:

$$m_{\text{суспензии}} = m_{\text{ДФФД}} \cdot \frac{100\%}{\omega_{\text{ДФФД}}^{\text{суспензия}}} = 55,27 \text{ кг / час} \cdot \frac{100\%}{1,5\%} = 3684,67 \text{ кг / час}$$

10. Найдем покомпонентный состав суспензии :

$$m_{\text{вода}}^{\text{суспензия}} = \frac{m_{\text{суспензии}} \cdot \omega_{\text{вода}}^{\text{суспензия}}}{100\%} = \frac{3684,67 \text{ кг / час} \cdot 97\%}{100\%} = 3574,13 \text{ кг / час}$$

11. Составляем схему материальных потоков:



12. Составляем таблицу материального баланса:

Приход		Расход	
Компонент	кг/ч	Компонент	кг/ч
1.Изопрен-изопентановая шихта	29647,90	1. Каучук	5416,67
в том числе:		2.Непревращенный мономер изопрен	809,39
мономер изопрен	6226,06	3.Растворитель из состава шихты (изопентан)	23421,84
изопентан		4.Растворитель из состава суспензии (вода)	3574,13
(растворитель)	23421,84	5.Потери каучука	110,54
2.Суспензия стабилизатора	3684,67		
в том числе:			
ДФФД	55,27		
Неозон-Д	55,27		
Вода (растворитель)	3574,13		
<b>Итого:</b>	<b>33332,57</b>	<b>Итого:</b>	<b>33332,57</b>

## СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	3
1 ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ.....	4
2 АЛГОРИТМ РАСЧЕТА МАТЕРИАЛЬНЫХ БАЛАНСОВ	14
2.1 Расчет материального баланса простого необратимого процесса с заданной производительностью по целевому продукту.....	14
Пример 1. Расчет материального баланса простого необратимого процесса с заданной производительностью по целевому продукту.....	19
2.2 Расчет материального баланса простого необратимого процесса с заданной пропускной способностью установки по техническому сырью.....	25
Пример 2. Расчет материального баланса простого необратимого процесса с заданной пропускной способностью установки по техническому сырью.....	27
2.3 Расчет материального баланса сложного необратимого параллельного процесса.....	32
Пример 3. Расчет материального баланса сложного необратимого параллельного процесса.....	36
2.4 Расчет материального баланса простого обратимого процесса с заданной пропускной способностью по техническому сырью.....	41
Пример 4. Расчет материального баланса простого обратимого процесса с заданной пропускной способностью по техническому сырью.....	46
2.5 Расчет материального баланса сложного обратимого процесса.....	52
Пример 5. Расчет материального баланса сложного обратимого процесса.....	58
2.6 Расчет материального баланса процесса полимеризации	64
Пример 6. Расчет материального баланса процесса полимеризации.....	68

Учебное издание

**Багманова Р.Х.**

**Дорожкин В.П.**

доктор химических наук, профессор

**МАТЕРИАЛЬНЫЕ БАЛАНСЫ ХИМИКО-  
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ  
ДЛЯ ВЫПОЛНЕНИЯ ПРАКТИЧЕСКИХ РАБОТ  
по дисциплине  
«Общая химическая технология»

Корректор Габдурахимова Т.М.  
Худ.редактор Федорова Л.Г.

Сдано в набор 02.05.2012  
Подписано в печать 13.06.2012.  
Бумага писчая. Гарнитура Таймс.  
Усл.печ.л. 4,5. Тираж 100.  
Заказ №35.

НХТИ (филиал) ФГОУ ВПО «КНИТУ»,  
г.Нижнекамск, 423570, ул.30 лет Победы, д.5а.

