



Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών
Ελληνικό Μεσογειακό Πανεπιστήμιο

Χημική και Περιβαλλοντική Τεχνολογία

Διάλεξη 2^η: Δείκτες Απόδοσης-Ισοζύγια Μάζας

Νικόλαος Γ. Σαββάκης

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών

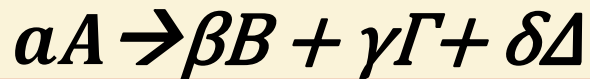
ΕΛΜΕΠΑ

Ακαδημαϊκό Έτος 2022-2023

Δείκτες απόδοσης διεργασιών

- Οι δείκτες απόδοσης μίας χημικής διεργασίας ορίζονται με βάση τη χημική εξίσωση της αντίδρασης που λαμβάνει χώρα

- Έστω η χημική εξίσωση



όπου A το αντιδρών συστατικό, και B, Γ, Δ τα προϊόντα της αντίδρασης, και α, β, γ, δ συντελεστές της χημικής εξίσωσης.

- Οι δείκτες απόδοσης που χρησιμοποιούνται είναι:

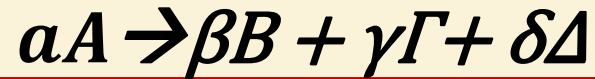
→ % μετατροπή (Percentage conversion), εκφράζει την ποσοστιαία μετατροπή του αντιδρώντος σε προϊόντα:

$$X_A = 100 \cdot \frac{Q_A - Q'_A}{Q_A}$$

Q_A : Η αρχική ποσότητα του συστατικού A

Q'_A : Η ποσότητα του συστατικού A μετά το τέλος της αντίδρασης

Δείκτες απόδοσης διεργασιών



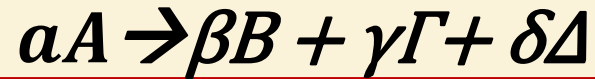
→ % απόδοση (Percentage yield): n_B εκφράζει την ποσοστιαία απόδοση της αντίδρασης σε ένα από τα προϊόντα.

$$n_B = 100 \cdot \frac{M_B}{M_{B,max}}$$

M_B : Η ποσότητα του προϊόντος που παράγεται

$M_{B,max}$: Η θεωρητικά μέγιστη ποσότητα που παράγεται

Δείκτες απόδοσης διεργασιών

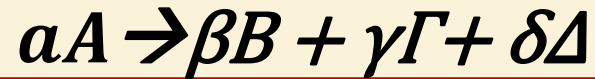


→ % επιλεκτικότητα (Percentage selectivity): F_B εκφράζει την ποσοστιαία αναλογία ενός εκ των προϊόντων σε σχέση με τη συνολική ποσότητά τους .

$$F_B = 100 \cdot \frac{P_B}{P_B + P_\Gamma + P_\Delta}$$

$P_{B,\Gamma,\Delta}$: Η ποσότητα του προϊόντος που παράγεται

Δείκτες απόδοσης διεργασιών

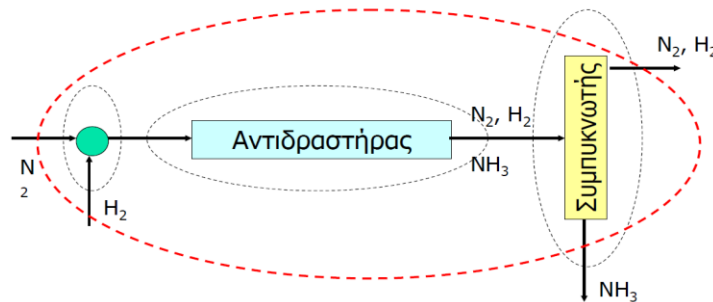


→ % περίσσεια (Excess Percentage) αντιδρώντος συστατικού, E.

$$E = 100 \cdot \frac{\text{Παρεχόμενη ποσότητα} - \text{Στοιχειομετρική ποσότητα}}{\text{Στοιχειομετρική ποσότητα}}$$

Ισοζύγια Μάζας

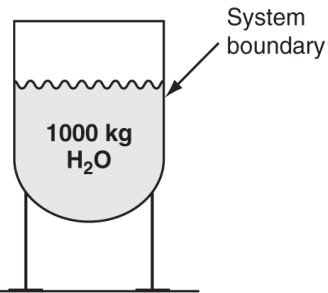
- Τα **ισοζύγια μάζας** αποτελούν ένα **χρήσιμο εργαλείο για την κατανόηση** της λειτουργίας και της επίδοσης μιας **βιομηχανικής μονάδας** και για τον **εντοπισμό πιθανών λειτουργικών προβλημάτων**.
- Τα **ισοζύγια μάζας πιλοτικών μονάδων** αποτελούν βασικά στοιχεία για τη **μελέτη** και το **σχεδιασμό μιας διεργασίας** πριν από την εγκατάστασή της.
- Επίσης, **επιτρέπουν τον έλεγχο βαθμονόμησης των οργάνων μέτρησης** και στον **εντοπισμό πιθανών σημείων απώλειες υλικών**.
- **Ισοζύγιο μάζας:** Ισολογισμός ποσοτήτων μάζας που υφίστανται αλλαγές ή ρέουν μέσα από κάποιο σύστημα (έκφραση του γενικευμένου νόμου διατήρησης της μάζας).



Ισοζύγια Μάζας

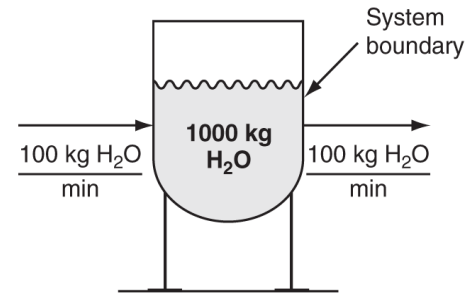
ΙΣΟΖΥΓΙΑ ΜΑΖΑΣ – Κλειστό/Ανοιχτό σύστημα

Closed system: No material enters or leaves the system



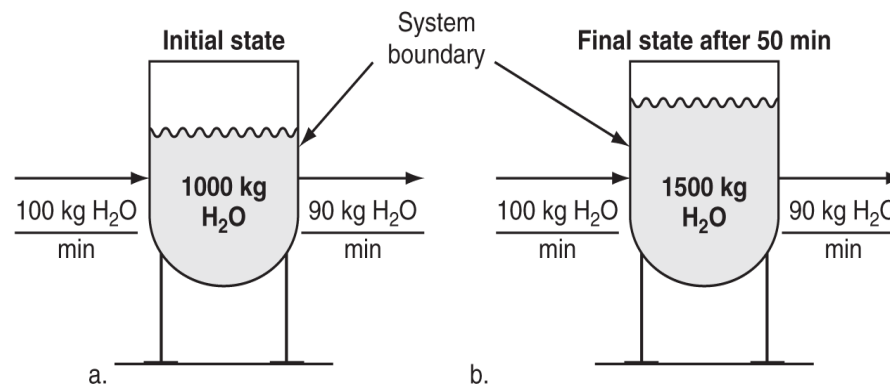
Κλειστό σύστημα
(διαλείποντος έργου - batch)

Open system (also called a **flow system**): Material enters and leaves the system



Ανοιχτό σύστημα
(συνεχούς έργου - continuous)

ΙΣΟΖΥΓΙΑ ΜΑΖΑΣ - ΜΗ ΜΟΝΙΜΗ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗ



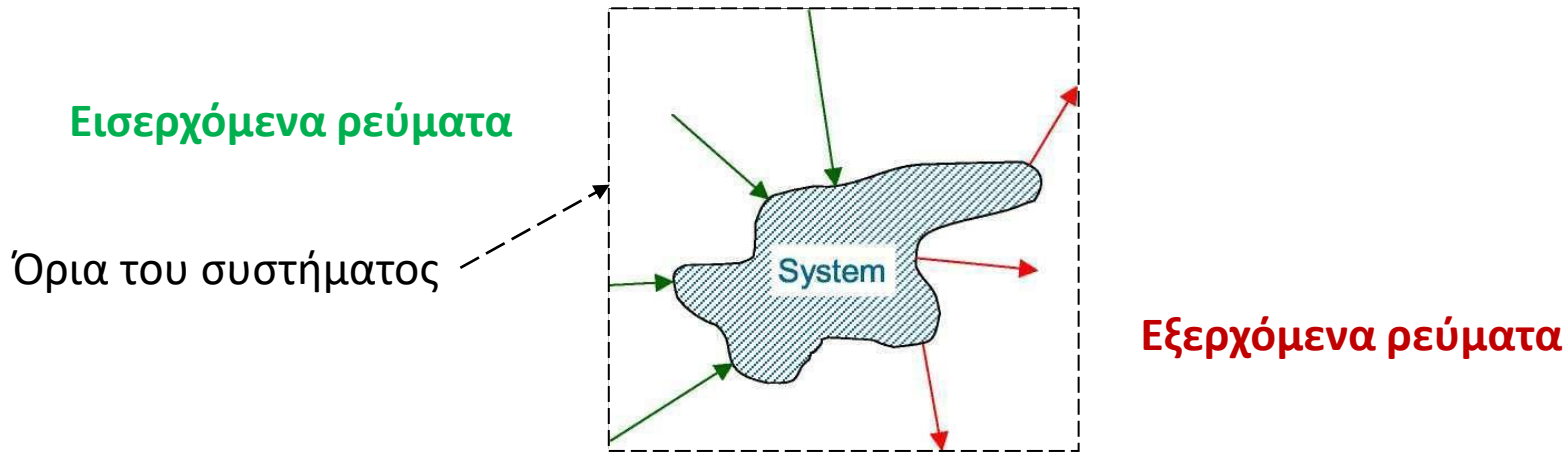
Αρχική κατάσταση

Τελική κατάσταση

Όρια συστήματος (System boundaries)

- Η εξίσωση του ισοζυγίου μάζας εφαρμόζεται είτε σε ολόκληρο σύστημα είτε σε επιμέρους διεργασίες του συστήματος.
- Τα όρια μιας διεργασίας / συστήματος καθορίζουν το υπό εξέταση τμήμα της διεργασίας / σύστημα.
- Η επιλογή των κατάλληλων ορίων στο μοντέλο μάζας διευκολύνει και απλουστεύει τους υπολογισμούς.
- Δεν υπάρχουν κανόνες επιλογής ορίων αλλά στη βιβλιογραφία προτείνονται οι ακόλουθες γενικές αρχές
 - Ως *όρια συστήματος* λαμβάνονται εκείνα που *περικλείουν ολόκληρο το σύστημα, όσο πολύπλοκες και αν είναι οι επιμέρους διεργασίες του*. Η *εξίσωση ισοζυγίου μάζας* περιλαμβάνει τις βασικές *ροές εισόδου και εξόδου* από το σύστημα.
 - Η *επιλογή ορίων* ενός συστήματος γίνεται κατά τρόπο ώστε *η πολύπλοκη συνολική διεργασία να υποδιαιρείται* σε απλές διεργασίες. Σε κάθε απλή διεργασία εφαρμόζεται το ισοζύγιο μάζας.
 - Η *επιλογή ορίων* γίνεται έτσι ώστε να *μειώνεται* κατά το δυνατόν *ο αριθμός των άγνωστων ροών*

Ισοζύγια Μάζας



- Η γενική εξίσωση διατήρησης της μάζας για κάθε σύστημα μιας ή περισσότερων διεργασιών είναι:

$$\text{Συσσώρευση μάζας μέσα στο σύστημα} = \text{Εισερχόμενη μάζα μέσα στα όρια του συστήματος} - \text{Εξερχόμενη μάζα από τα όρια του συστήματος} + \text{Παραγωγή μάζας μέσα στο σύστημα} - \text{Κατανάλωση μάζας μέσα στο σύστημα}$$

Ισοζύγια Μάζας

- Οι όροι **παραγωγή και κατανάλωση** υποδηλώνουν τη μεταβολή της χημικής σύστασης λόγω χημικής αντίδρασης που συμβαίνει στο σύστημα.
- **Όταν** στο σύστημα που εξετάζουμε **δεν λαμβάνει χώρα χημική αντίδραση** το ισοζύγιο μάζας γίνεται:

$$\begin{array}{|c|} \hline \text{Συσώρευση μάζας} \\ \text{μέσα στο σύστημα} \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline \text{Εισερχόμενη μάζα} \\ \text{μέσα στα όρια του} \\ \text{συστήματος} \\ \hline \end{array} - \begin{array}{|c|} \hline \text{Εξερχόμενη μάζα} \\ \text{από τα όρια του} \\ \text{συστήματος} \\ \hline \end{array}$$

Ισοζύγια Μάζας

- Σε διεργασίες οι οποίες βρίσκονται σε **μόνιμη σταθερή κατάσταση** δηλαδή σε διεργασίες που δεν έχουμε συσσώρευση στο σύστημα, η εξίσωση του ισοζυγίου μάζας γίνεται:

$$\begin{array}{|c|} \hline \text{Εισερχόμενη μάζα} \\ \text{μέσα στα όρια του} \\ \text{συστήματος} \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline \text{Εξερχόμενη μάζα} \\ \text{από τα όρια του} \\ \text{συστήματος} \\ \hline \end{array}$$

Ισοζύγια Μάζας - Χρόνος

▪ Διαφορικά ισοζύγια

- Σε διεργασίες μόνιμης κατάστασης
- Τι γίνεται μια συγκεκριμένη στιγμή στο σύστημα
- Οι όροι των ισοζυγίων είναι ροές

▪ Ολοκληρωτικά ισοζύγια

- Σε διεργασίες μη μόνιμης κατάστασης
- Τι γίνεται μεταξύ δύο χρονικών στιγμών στο σύστημα
- Οι όροι των ισοζυγίων είναι ποσότητες.

- **Ισοζύγια μάζας καταστρώνονται για κάθε συστατικό που συμμετέχει στη διεργασία καθώς και για το σύνολο αυτών!!!**

Ισοζύγια Μάζας – Βαθμοί Ελευθερίας

$$\begin{array}{|c|} \hline \text{Βαθμοί Ελευθερίας} \\ \text{(df)} \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline \text{Άγνωστες μεταβλητές} \\ \text{(n}_x\text{)} \\ \hline \end{array} - \begin{array}{|c|} \hline \text{Ανεξάρτητες} \\ \text{Εξισώσεις (n}_{eq}\text{)} \\ \hline \end{array}$$

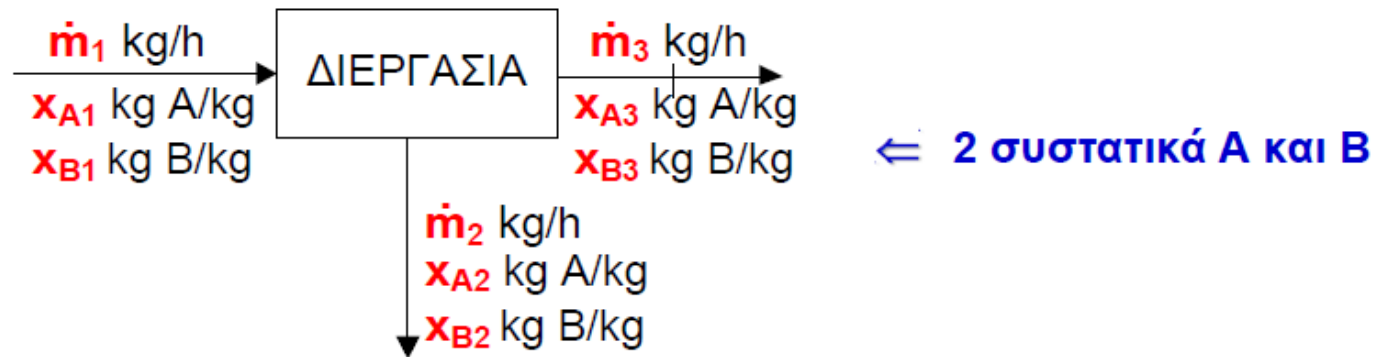
- Το ισοζύγιο έχει μοναδική (μονοσήμαντη) λύση όταν $df=0$
- Αν $n_x - n_{eq} > 0$ τότε το σύστημα είναι υπο-καθορισμένο (άπειρες λύσεις). Για να λυθεί μονοσήμαντα πρέπει να βρεθούν κι άλλες ανεξάρτητες εξισώσεις ή να δώσουμε τιμή σε κάποιες άγνωστες μεταβλητές.
- Αν $n_x - n_{eq} < 0$ τότε το σύστημα είναι υπερκαθορισμένο (συνήθως καμία λύση).

Μεθοδολογία ανάλυσης προβλημάτων ισοζυγίων μάζας

- Σχεδίαση διαγράμματος σχεδίαση διαγράμματος διεργασίας
- Αναγραφή όλων των δεδομένων στο διάγραμμα
- Προσδιορισμός των συστάσεων που είναι γνωστές ή μπορούν να υπολογιστούν άμεσα για κάθε ρεύμα
- Εκλογή κατάλληλης βάσης αναφοράς στον υπολογισμό
- Καθορισμός όγκου ελέγχου και επιφάνειας ελέγχου
- Κατάστρωση εξισώσεων ισοζυγίων μάζας ολικό ισοζύγιο ισοζύγια συστατικών
- Προσδιορισμός βαθμών ελευθερίας (df)
- Αν $df=0$ τότε επίλυση συστήματος για τον προσδιορισμό των άγνωστων μεταβλητών
- Επαλήθευση αποτελεσμάτων

Χρήσιμοι Κανόνες

- Σε μια διεργασία χωρίς χημική αντίδραση, μπορούν να γραφούν τόσα ανεξάρτητα ισοζύγια μάζας (εξισώσεις δηλαδή) όσα είναι και τα συστατικά που συμμετέχουν στη διαδικασία



$$\text{Ισοζύγιο A: } \dot{m}_1 * x_{A1} = \dot{m}_2 * x_{A2} + \dot{m}_3 * x_{A3} \quad (1)$$

$$\text{Ισοζύγιο B: } \dot{m}_1 * x_{B1} = \dot{m}_2 * x_{B2} + \dot{m}_3 * x_{B3} \quad (2)$$

$$\text{Συνολικό ισοζύγιο: } \dot{m}_1 = \dot{m}_2 + \dot{m}_3 \quad (3)$$

*Η (3) δεν είναι ανεξάρτητη εξίσωση, αφού προκύπτει από την άθροιση των (1) και (2) μιας και $x_{Ai} + x_{Bi} = 1$

Χρήσιμοι Κανόνες

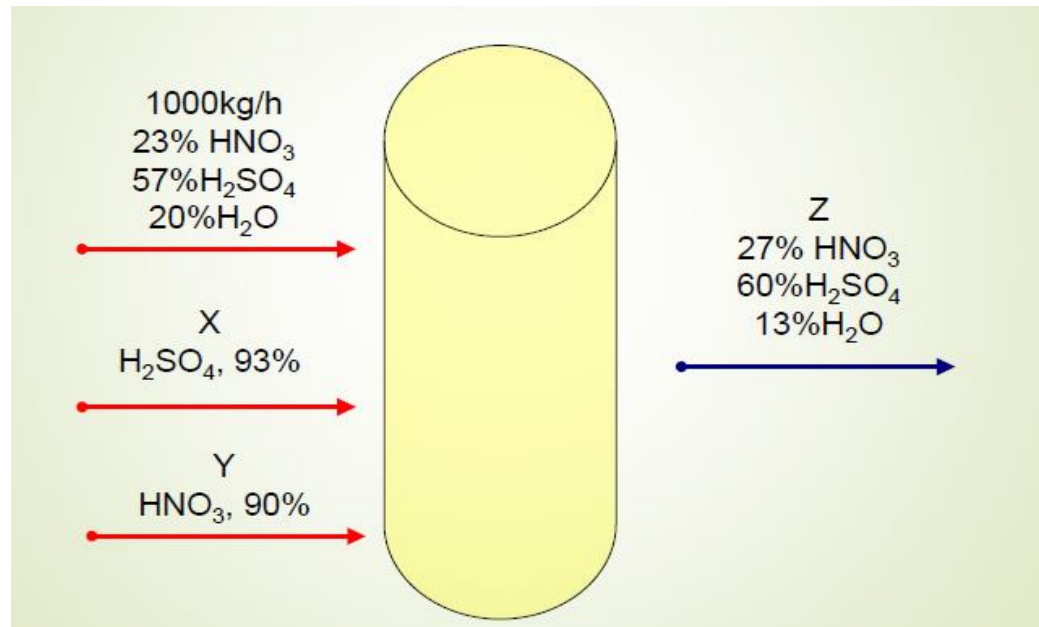
- Εκμετάλλευση άμεσου υπολογισμού μεταβλητών (βάζουμε τις υπολογιζόμενες τιμές απ' ευθείας στο διάγραμμα ροής).
- Τα ισοζύγια μάζας αφορούν ροές μάζας ή mol. Αν δίνονται ή ζητούνται ογκομετρικές μεταβλητές χρησιμοποιούμε την πυκνότητα ή και το M.B. Μετατροπές:

$$\text{Όγκος} \xrightleftharpoons{\rho} \text{Μάζα} \xrightleftharpoons{M.B.} \text{Mol}$$

- Αν έχουμε κλάσματα μάζας και μοριακά κλάσματα τα μετατρέπουμε όλα σε κοινή βάση.
- Αν $df > 0$ κάποια εξίσωση έχουμε ξεχάσει.
- Για την επίλυση του συστήματος εξισώσεων ξεκινάμε από τα προφανή (εξισώσεις με έναν άγνωστο) και αντικαθιστούμε στις επόμενες.

Ισοζύγια Μάζας - Ασκήσεις

ΑΣΚΗΣΗ 1: Διάλυμα οξέων βγαίνει από μια διεργασία νιτρώσεως με παροχή 1000 kg/h και περιέχει κατά βάρος 23% HNO_3 , 57% H_2SO_4 και 20% H_2O . Στο διάλυμα αυτό προστίθεται σε ένα δοχείο ανάμιξης συνεχούς λειτουργίας, πυκνό νιτρικό οξύ (90% HNO_3 κ.β.) και πυκνό θειικό οξύ (93% H_2SO_4 κ.β.), ώστε το τελικό προϊόν να περιέχει 27% HNO_3 και 60% H_2SO_4 κ.β.. Να υπολογιστούν οι ροές των πυκνών οξέων και του τελικού προϊόντος.



Ισοζύγια Μάζας - Ασκήσεις

- Η διεργασία είναι συνεχούς λειτουργίας και θεωρείται ότι γίνεται σε μόνιμη κατάσταση (δηλ. η στάθμη στο δοχείο ανάμιξης είναι σταθερή, όπως επίσης σταθερές είναι και οι παροχές /συστάσεις όλων των ρευμάτων στα σημεία εισόδου ή εξόδου τους).
- Η μάζα του συστήματος μέσα στον ΟΕ που εξετάζουμε είναι σταθερή καθ' όλη τη διάρκεια της διεργασίας.
- Έστω
 - X (kg/h) η παροχή του πυκνού θειικού οξέος
 - Y (kg/h) η παροχή του πυκνού νιτρικού οξέος
 - Z (kg/h) η παροχή του προϊόντος
- Ως βάση στους υπολογισμούς παίρνουμε την 1hr
- Ολικό Ισοζύγιο Μάζας:

Εισερχόμενη μάζα μέσα
στα όρια του συστήματος

=

Εξερχόμενη μάζα από
τα όρια του συστήματος

ή

$$X+Y+1000=Z$$

(1)

Ισοζύγια Μάζας - Ασκήσεις

- **ΙΣΟΖΥΓΙΟ H_2SO_4 :** $0,93 X + 0,57 \cdot 1000 = 0,6 \cdot Z$ (2)

- **ΙΣΟΖΥΓΙΟ HNO_3 :** $0,9 Y + 0,23 \cdot 1000 = 0,27 \cdot Z$ (3)

- Επιλύοντας το σύστημα των εξισώσεων (1), (2) και (3) βρίσκουμε:

$$X=933 \text{ kg/h, } Y=459 \text{ kg/h, } Z=2392 \text{ kg/h.}$$

- Μπορούμε ακόμη να γράψουμε το ισοζύγιο του νερού. Η εξίσωση αυτή δε χρησιμοποιήθηκε γιατί δεν είναι ανεξάρτητη από τις άλλες τρεις. Θα πρέπει όμως να επαληθεύεται και αυτό το χρησιμοποιούμε για έλεγχο των πράξεων.

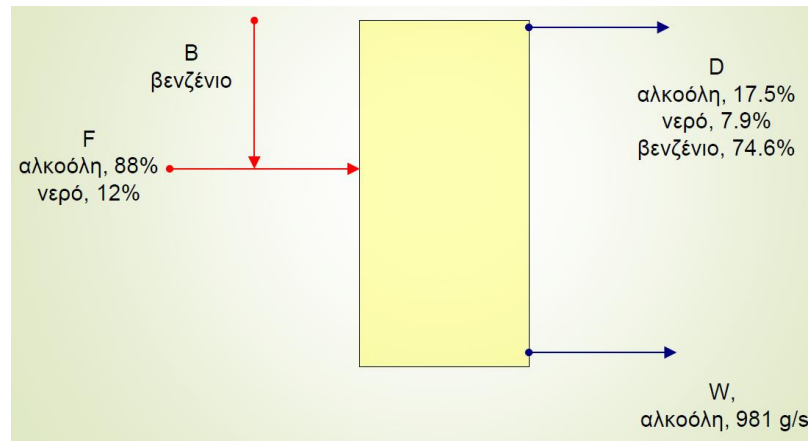
- **ΙΣΟΖΥΓΙΟ H_2O :** $0,07 \cdot 933 \text{ kg/h} + 0,1 \cdot 459 \text{ kg/h} + 0,2 \cdot 1000 \text{ kg/h} = 0,13 \cdot 2392 \text{ kg/h}$
(4)

Ισοζύγια Μάζας - Ασκήσεις

ΑΣΚΗΣΗ 2: Για το διαχωρισμό καθαρής αιθυλικής αλκοόλης από μίγμα αλκοόλης-νερού με απόσταξη, είναι απαραίτητη η προσθήκη ενός τρίτου συστατικού όπως π.χ. βενζενίου, το οποίο μειώνει την πτητικότητα της αλκοόλης.

Με τον τρόπο αυτό παίρνουμε **καθαρή αιθυλική αλκοόλη από τον πυθμένα της αποστακτικής στήλης και μίγμα νερού - βενζενίου με μέρος της αλκοόλης από την κορυφή** (αζεοτροπική απόσταξη). Σε μια τέτοια διεργασία, μίγμα αλκοόλης-νερού (**12% νερό και 88% αλκοόλη κ.β.**) τροφοδοτείται στην αποστακτική στήλη αφού αναμιχθεί με ποσότητα βενζενίου.

Το προϊόν της κορυφής περιέχει **17.5% κ.β. αλκοόλη, 7.9% κ.β. νερό και 74.6 % κ.β. βενζένιο**. Ζητούνται η **ποσότητα μίγματος αλκοόλης-νερού** και η **ποσότητα βενζενίου** που πρέπει να τροφοδοτούνται στην αποστακτική στήλη ώστε να παράγονται από τη βάση της στήλης **981 g/s καθαρής αλκοόλης**.



Ισοζύγια Μάζας - Ασκήσεις

- Παραδοχές:
 - Η διεργασία είναι συνεχούς λειτουργίας και θεωρείται ότι γίνεται σε μόνιμη κατάσταση \rightarrow συσσώρευση = 0
 - Φυσική διεργασία (χωρίς Χημ. Αντίδραση) \rightarrow Παραγωγή = Κατανάλωση = 0
- Ολικό Ισοζύγιο Μάζας:

Εισερχόμενη μάζα μέσα
στα όρια του συστήματος

=

Εξερχόμενη μάζα από
τα όρια του συστήματος

- Έστω **F**: το τροφοδοτούμενο μίγμα αλκοόλης νερού (g/s)
B: το τροφοδοτούμενο βενζένιο (g/s)
D: το προϊόν κορυφής της αποστακτικής στήλης (g/s)
W: η παραγόμενη καθαρή αλκοόλη (g/s)

Ισοζύγια Μάζας - Ασκήσεις

- **ΟΛΙΚΟ ΙΣΟΖΥΓΙΟ:** $F+B=D+W$ (1)

- **ΙΣΟΖΥΓΙΟ H_2O :** $0,12 * F = 0,079 * D$ (2)

- **ΙΣΟΖΥΓΙΟ benzene:** $B = 0,746 * D$ (3)

- Επιλύοντας το σύστημα των εξισώσεων (1), (2) και (3) βρίσκουμε:

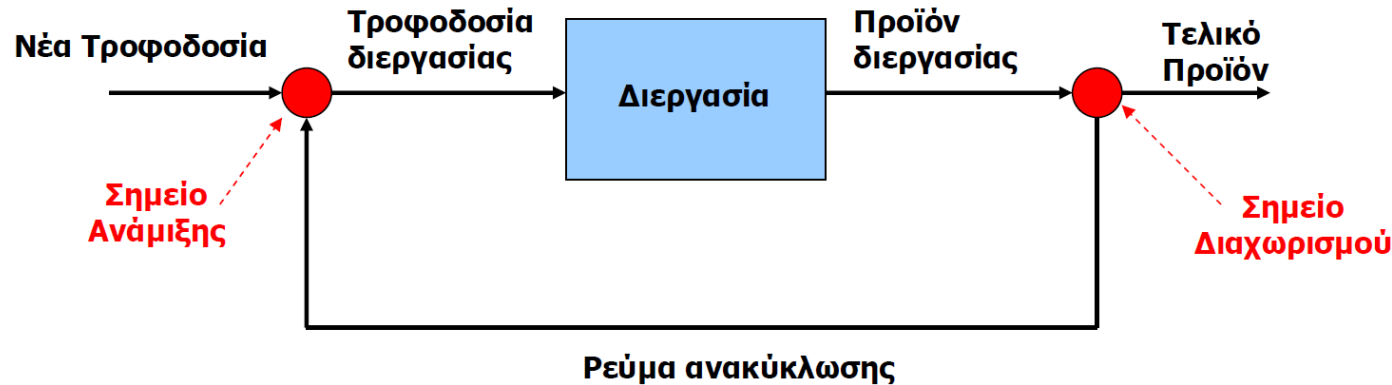
$$F=1598 \text{ g/s}, B=1811 \text{ g/s}, D=2428 \text{ g/s}$$

- Το ισοζύγιο της αλκοόλης θα πρέπει να επαληθεύει τις πράξεις:

- **ΙΣΟΖΥΓΙΟ Αλκοόλης:** $0,88 * 1598 \text{ g/s} = 0,175 * 2428 \text{ g/s} + 981 \text{ g/s}$ (4)

Ισοζύγια μάζας: Διεργασίες με ανακύκλωση

Χωρίς χημική
αντίδραση

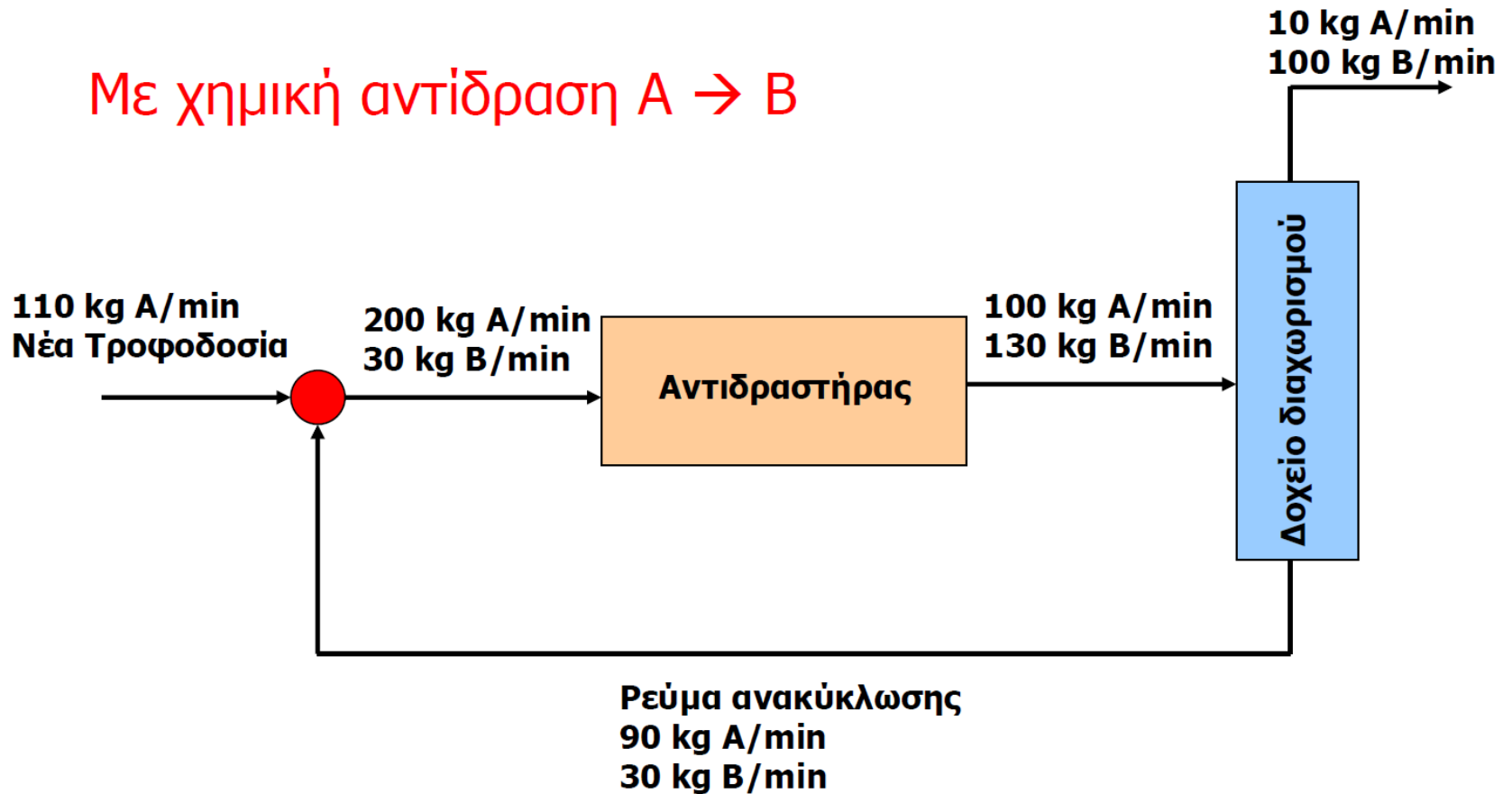


Διεργασίες με ανακύκλωση ενός μέρους του προϊόντος συναντώνται συχνά στη βιομηχανία καθώς και στην τεχνολογία περιβάλλοντος:

- Η υγρασία του αέρα σε διεργασίες ξήρανσης ελέγχεται ανακυκλώνοντας ένα μέρος του αέρα από την έξοδο του ξηραντήρα.
- Σε χημικές αντιδράσεις το υλικό που δεν αντέδρασε μπορεί να διαχωριστεί από το προϊόν και να ανακυκλωθεί
- Ένα μέρος του αποστάγματος στις αποστακτικές στήλες ανακυκλώνεται για να διατηρηθεί σταθερή η ποσότητα του υγρού μέσα στη στήλη.
- Στους βιολογικούς καθαρισμούς που λειτουργούν με το σύστημα της ενεργού ιλύος, ένα μέρος της ενεργού ιλύος (λάσπης) που καθιζάνει στις δεξαμενές τελικής καθίζησης ανακυκλώνεται στη δεξαμενή αερισμού.

Ισοζύγια μάζας: Διεργασίες με ανακύκλωση

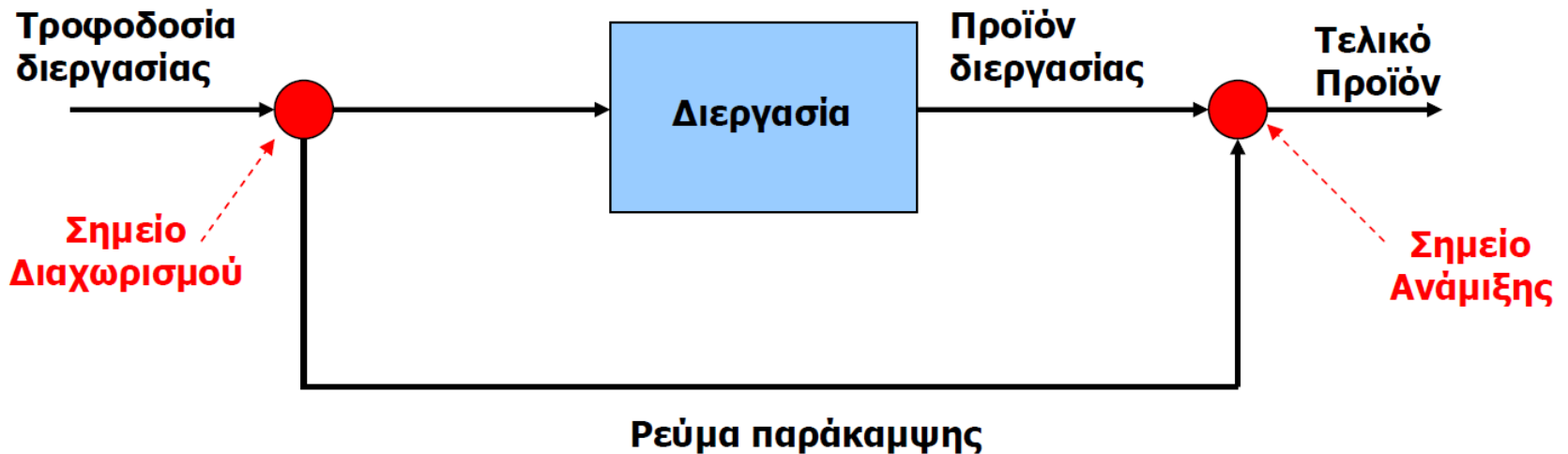
Με χημική αντίδραση $A \rightarrow B$



Ισοζύγια μάζας: Διεργασίες με ανακύκλωση

Ρεύμα παράκαμψης

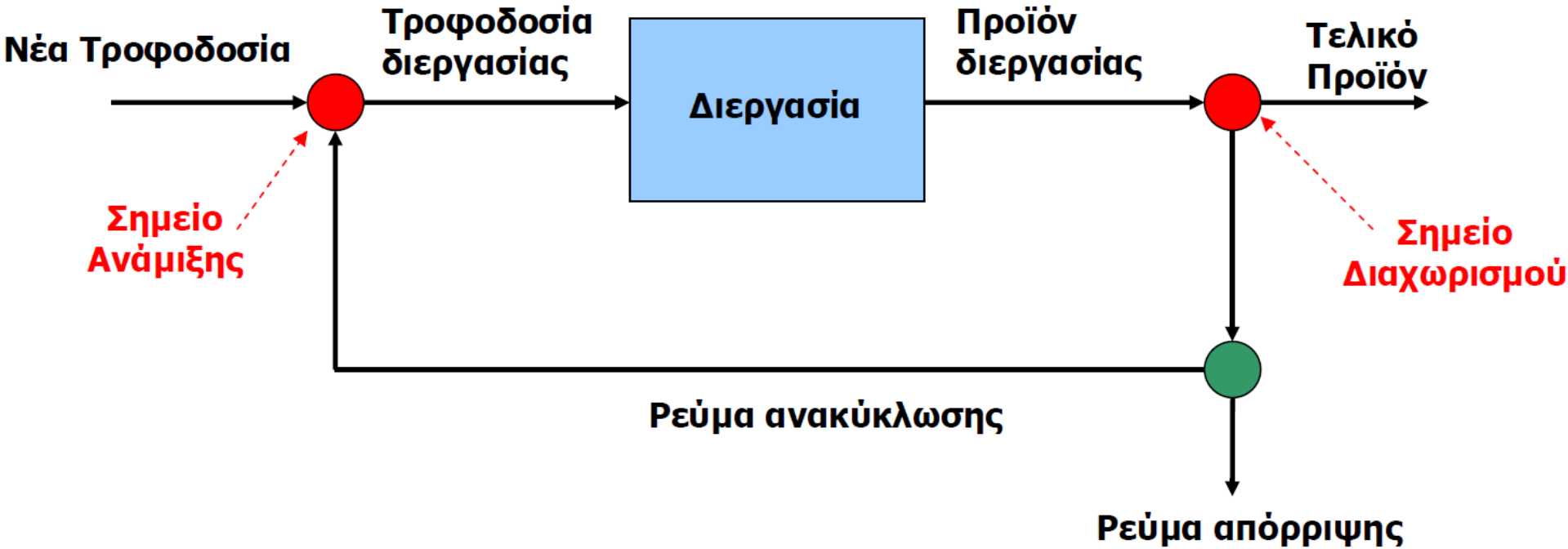
Χρησιμοποιείται κυρίως για να ρυθμίζεται η σύσταση του προϊόντος



Ισοζύγια μάζας: Διεργασίες με ανακύκλωση

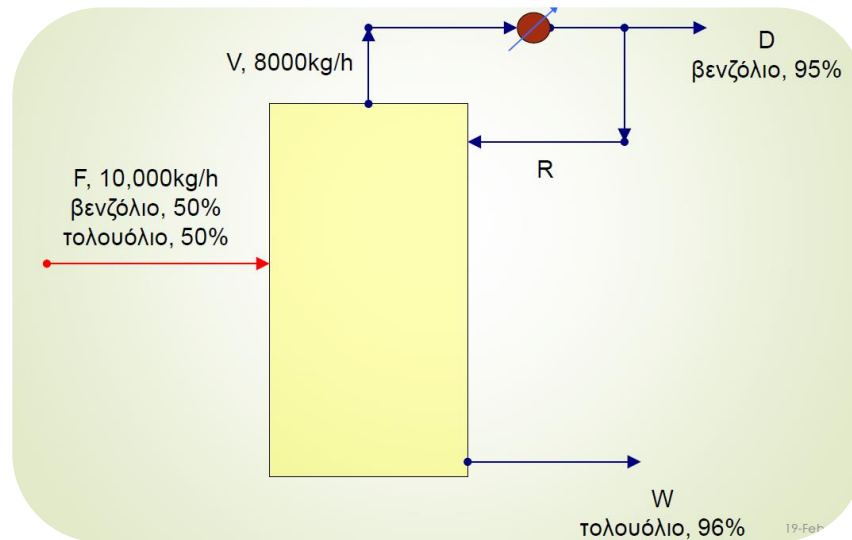
Ρεύμα απόρριψης (απομάκρυνσης)

Βοηθάει στην αποτροπή της συσσώρευσης αδρανών ή ανεπιθύμητων ουσιών στο σύστημα



Ισοζύγια Μάζας με Ανακύκλωση - Ασκήσεις

- Μία αποστακτική στήλη διαχωρίζει 10,000 kg/h ενός μίγματος 50% βενζολίου/ 50% τολουολίου. Το προϊόν που λαμβάνεται από το συμπυκνωτή στην κορυφή της στήλης περιέχει 95% βενζόλιο και το προϊόν στον πυθμένα της στήλης περιέχει 96% τολουόλιο. Το ρεύμα ατμών που εισέρχεται στο συμπυκνωτή από την κορυφή της στήλης είναι 8000 kg/h. Ένα μέρος του προϊόντος επιστρέφει στη στήλη και το υπόλοιπο απομακρύνεται από τη διεργασία. **Αν οι συστάσεις των ρευμάτων στην κορυφή της στήλης (V), στο απομακρυνόμενο προϊόν (D) και στην ανακύκλωση (R) είναι οι ίδιες, να υπολογιστεί ο λόγος του ποσού που ανακυκλώνεται προς το ποσό προϊόντος που απομακρύνεται.**



Ισοζύγια Μάζας - Ασκήσεις

- Παραδοχές:
 - Η διεργασία είναι συνεχούς λειτουργίας και θεωρείται ότι γίνεται σε μόνιμη κατάσταση \rightarrow συσσώρευση = 0
 - Φυσική διεργασία (χωρίς Χημ. Αντίδραση) \rightarrow Παραγωγή = Κατανάλωση = 0
- Ολικό Ισοζύγιο Μάζας:

Εισερχόμενη μάζα μέσα
στα όρια του συστήματος

=

Εξερχόμενη μάζα από
τα όρια του συστήματος

$$F = D + W \Rightarrow 10000 = D + W \quad (1)$$

Ισοζύγια Μάζας - Ασκήσεις

- **ΙΣΟΖΥΓΙΟ BENZOLΙΟΥ:** $0,5 * F = 0,95 * D + 0,04 W$ (2)
- Επιλύοντας το σύστημα των εξισώσεων (1) και (2) βρίσκουμε:
 $D=5050 \text{ kg/h}$ και $W= 4950 \text{ kg/h}$
- **ΙΣΟΖΥΓΙΟ ολικής μάζας:** $V = R + D \Rightarrow 8000 \text{ kg/h} = R+5050 \text{ kg/h} \Rightarrow R=2950 \text{ kg/h}$
- Άρα, $R/D= 2950 \text{ kg/h} / 5050 \text{ kg/h} = 0,584$ ή 58,4%