



Univerza v Mariboru

*Fakulteta za kemijo in  
kemijsko tehnologijo*

**Majda Krajnc**

**Procesne bilance**

**Naloge za aktivno in sodelovalno delo**

delovni zvezek

**Maribor, 2010**

## Copyright 2010

Majda Krajnc, Procesne bilance, delovni zvezek

Avtorica: doc. dr. Majda Krajnc

Vrsta publikacije: zbrano gradivo

Založnik: FKKT Univerze v Mariboru

Naklada: On-line

Dostopno na naslovu: <http://www.fkkt.uni-mb.si/egradiva>

Dostopno tudi na univerzitetnem portalu Moodle pri predmetih Procesne bilance in Kemijsko računanje II.

Gradiva iz publikacije, brez dovoljenja avtorice, ni dovoljeno kopirati, reproducirati, objavljati ali prevajati v druge jezike.

ISBN 978-961-248-267-1



CIP - Kataložni zapis o publikaciji  
Univerzitetna knjižnica Maribor

66.01:519.61/.64(075.8)(076.1/.2)

KRAJNC, Majda

Procesne bilance [Elektronski vir] : naloge za aktivno in sodelovalno delo : delovni zvezek / Majda Krajnc. - El. učbenik. - Maribor : Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2011

Način dostopa (URL):  
<http://www.fkkt.uni-mb.si/egradiva>

ISBN 978-961-248-267-1

COBISS.SI-ID 66653953

# VSEBINA

## Predgovor

### 1. Uvod

1. Naloga: Kemijski proces	1
2. Naloga: Preračunavanje enot temperature I	1
3. Naloga: Preračunavanje enot temperature II	2
4. Naloga: Enote različnih veličin	2
5. Naloga: Pretvarjanje enot I	2
6. Naloga: Pretvarjanje enot II	3
7. Naloga: Pretvarjanje enot III	3
8. Naloga: Atmosferski tlak	3
9. Naloga: Pretvarjanje enot v enačbi	4
<b>2. Masne bilance procesnih enot brez kemijske reakcije</b>	<b>5</b>
1. Naloga: Procesne enote	5
2. Naloga: Pridobivanje amoniaka	5
3. Naloga: Delni ali parcialni kondenzator	6
4. Naloga: Mešanje dveh raztopin	9
<b>3. Masne bilance sistemov procesnih enot brez kemijske reakcije</b>	<b>11</b>
1. Naloga: Sistem procesnih enot	11
<b>4. Masne bilance za kemijske reaktorje</b>	<b>14</b>
1. Naloga: Zgorevanje butena	14
2. Naloga: Proizvodnja amoniaka I	15
3. Naloga: Pridobivanje amoniaka II	18
4. Naloga: Pridobivanje dušikove kisline	19
5. Naloga: Proizvodnja akrilonitrila	21
<b>5. Transformacija koordinat, linearna regresija, interpolacija</b>	<b>24</b>
1. Naloga: Transformacija koordinat nelinearnih funkcij.	24
2. Naloga: Transformacija koordinat, linearna regresija	24
3. Naloga: Linearna interpolacija	27
4. Naloga: Linearna in kvadratna interpolacija	28
<b>6. Osnove numeričnih metod</b>	<b>30</b>
1. Naloga: Nelinearna enačba	30
a) Grafična metoda	30
b) Metoda zaporedne substitucije	31
c) Wegsteinova metoda	33
d) Newtonova metoda	34
e) Metoda polovičnega intervala	36
<b>7. Reševanje sistemov enačb</b>	<b>38</b>
1. Naloga: Sistem linearnih enačb	38

## Predgovor

Pri predmetu Procesne bilance, v drugem letniku UNI programa, je bil že nekaj let pri predavanjih vpeljan aktivni in sodelovalni način dela. V ta namen je bilo izdelano gradivo, neke vrste delovni zvezek, ki omogoča in vzpodbuja kreativno delo.

Ker se je v študijskem letu 2009/2010 s pričetkom bolonjskega programa, »preselil« predmet v 1. letnik, bo zvezek še pridobil na vrednosti, saj bodo študentje imeli pred seboj pripomoček, ki jim bo pomagal razrešiti kakšen trd oreh ali zagato. Zvezek je primeren tudi za študente, ki poslušajo predmet Kemijsko računanje II.

Delovni zvezek nosite na predavanja, če jih boste redno obiskovali in želeli usvajati znanje sproti. Vsebina Delovnega zvezka se navezuje na vsebino skripte Procesne bilance avtorjev M. Krajnc, S. Oreški in F. Purkeljca.

Študentje, ki so že pred vami sodelovali pri predavanjih, so povedali, da jim takšno delo ustreza iz različnih vzrokov:

- predavanja so bolj zanimiva in hitreje minejo,
- naučijo se sodelovanja s kolegi,
- naučijo se upoštevanja mnenj in kritike kolegov,
- pomagajo drug drugemu,
- sproti rešujejo nastale probleme,
- doma porabijo manj časa za učenje in utrjevanje snovi.

Ker aktivni in sodelovalni način dela prinaša številne prednosti, bomo s takim delom nadaljevali tudi v prihodnje. Če boste v Delovnem zvezku naleteli na pomanjkljivosti in napake, mi sporočite, saj bom lahko le v tem primeru pripravila prihodnjim generacijam kvalitetno gradivo.

Majda Krajnc

V Mariboru, 1. februar 2010.

# 1. Uvod

## 1. Naloga: Kemijski proces.

Pri tem predmetu se boste verjetno prvič srečali z izrazom kemijski proces. Na kaj ste pomislili, ko ste prebrali ti dve besedi? Kako si predstavljate kemijski proces?

Kaj so procesne enote?

Bi jim dali kakšno drugo ime?

Naštejte nekaj procesnih enot!

- a)
- b)
- c)
- d)
- e)

Kaj mislite, kaj se v procesnih enotah, ki ste jih našli, dogaja? Na kratko opišite!

- a)
- b)
- c)
- d)
- e)

**Opazanja:** Kar ste našli so procesne operacije in pojavi, ki se vršijo v procesnih enotah. Sedaj lahko sklepate, da so procesne enote v glavnem dobile ime po operacijah, ki se v njih vršijo.

## 2. Naloga: Preračunavanje enot temperature I.

V procesnih enotah merimo med obratovanjem razne obratovne parametre (pravimo jim tudi veličine), kot so temperatura, tlak, koncentracija ipd. Vsaka veličina je izražena z enoto. Na različnih kontinentih sveta so enote za iste veličine lahko različne in jih moramo preračunavati, kot npr. v naslednjem primeru. V takih primerih potrebujemo pretvornike, ki jih najdemo v raznih priročnikih.

Katere podatke potrebujete za reševanje naslednje naloge?  
V ZDA smo na termometru odčitali temperaturo 150 °F. Koliko °C je to?

Potrebujem:.....

Rezultat:.....

**3. Naloga: Preračunavanje enot temperature II.**

Ali bi vam bilo v vodi s temperaturo 600 °R mrzlo, toplo ali vroče?

Potrebujem:.....

Rezultat:.....

**4. Naloga: Enote različnih veličin.**

Kakšne enote lahko imajo naslednje veličine:

Temperatura: .....

Dolžina:.....

Prostornina:.....

Množina:.....

Čas:.....

**5. Naloga: Pretvarjanje enot I.**

V nalogi bodite pozorni na različne enote, ki jih ima ista veličina!

Vadimo pretvarjanje:

a)  $15 \text{ ft} - 7 \text{ cm} = \dots\dots\dots \text{ cm}$

Potrebujem:.....

b)  $(3 \text{ s})^3 = \dots\dots\dots$

c)  $\frac{75 \text{ km}}{\text{h}} \cdot 4 \text{ h} =$

d) 6 kg – 3 lb = ..... kg

Potrebujem:.....

**6. Naloga<sup>1</sup>: Pretvarjanje enot II.**

Poiščite pretvornike med naslednjimi enotami:

1 ft	m	cm
1 in	m	cm
1 Btu	cal	J
1 lb	g	kg
1 gal (angl.)	L	ft <sup>3</sup>
1 bar	N/m <sup>2</sup>	Pa
1 MPa	Pa	

**7. Naloga<sup>1</sup>: Pretvarjanje enot III.**Pretvorite  $2 \frac{\text{L}}{\text{s}} \vee \frac{\text{ft}^3}{\text{d}}$ .**8. Naloga<sup>1</sup>: Atmosferski tlak.**

Atmosferski tlak je približno:

- a) 100 Pa                                      b) 100 kPa  
c) 10 MPa                                      d) 1 GPa

<sup>1</sup>Himmeblau, D. M., Riggs, J. B. Basic principles and calculations in chemical engineering. 7<sup>th</sup> edition, Prentice Hall PTR, 2004.

**9. Naloga<sup>1</sup>: Pretvarjanje enot v enačbi.**

Molsko toplotno kapaciteto očetne kisline v J/(mol K) lahko izračunamo iz naslednje zveze:

$$C_p = 8,41 + 2,4346 \times 10^{-5} \cdot T$$

kjer je  $T$  v K. Preoblikujte enačbo tako, da bo  $C_p$  izražena v cal/(g °C), in temperatura v °C!

(Rezultat:  $C_p = 0,0335 + 9,6 \times 10^{-8} \cdot t/^{\circ}\text{C} \left[ \frac{\text{cal}}{\text{g } ^{\circ}\text{C}} \right]$  )

---

<sup>1</sup>Himmeblau, D. M., Riggs, J. B. Basic principles and calculations in chemical engineering. 7<sup>th</sup> edition, Prentice Hall PTR, 2004.



## 2. Masne bilance procesnih enot brez kemijske reakcije

### 1. Naloga: Procesne enote.

Naštejte nekaj procesnih enot v katerih **ne** poteka kemijska reakcija!

### 2. Naloga: Pridobivanje amoniaka.

Napajalna zmes, ki vteka v reaktor, kjer pridobivajo amonijak, vsebuje  $x = 75\%$   $H_2$ , ostalo je  $N_2$ . Masni pretok zmesi  $q_m = 3000$  kg/h. Izračunajte masni pretok  $H_2$ ! (Nasvet: najprej izračunajte povprečno molsko maso zmesi  $\bar{M}_{zmesi}$ !)

#### Reševanje:

$$\bar{M}_{zmesi} = \dots\dots\dots = \dots\dots\dots \frac{\text{g}}{\text{mol}} = \dots\dots\dots \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}$$

**Množinski tok:**

$$F = \dots\dots\dots = \dots\dots\dots \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

**Množinski tok  $H_2$ :**

$$F(H_2) = \dots\dots\dots = \dots\dots\dots \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

**Masni pretok  $H_2$ :**

$$q_m(H_2) = \dots\dots\dots = \dots\dots\dots \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

**Nalogo lahko rešimo še na drugi način!**

**Po izračunu povprečne molske mase izračunajte:**

**Masni delež  $H_2$**  (Nasvet: v skripti Procesne bilance (stran 31) poiščite ustrezno enačbo za pretvarjanje množinskih deležev v masne):

$$w(H_2) =$$

Sedaj lahko izračunate **masni tok  $H_2$** :

$$q_m(H_2) = \dots\dots\dots = \dots\dots\dots \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

(Rezultat:  $\bar{M}_{\text{zmesi}} = 8,5 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$ ,  $F = 353 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$ ,  $F(H_2) = 264,75 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$ ,  $q_m(H_2) = 529,5 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$  )

### 3. Naloga: Delni ali parcialni kondenzator.

Plinski tok vsebuje  $x = 18 \%$  heksana, ostalo je  $N_2$ . Zmes vteka v delni (parcialni) kondenzator, kjer se temperatura zniža, pri čemer se nekaj heksana utekočini. Množinski delež heksana v plinskem toku je  $x(C_6H_{14}) = 0,05$ . Pretok heksana v tekočem iztoku je  $q_v = 1,5 \text{ L/min}$ .

(**Namig:** Nalogo rešujte postopoma! Tako boste spoznavali kaj je delni kondenzator in kako se ločujeta komponenti. Na koncu izračunajte neznana tokova in sestave!)

#### Potek reševanja:

a) Kako deluje parcialni kondenzator?

b) Narišite procesno shemo, označite tokove in komponente ter spremenljivke!

**c) Zapišite vrelišči heksana in dušika!**

$$t_v(\text{C}_6\text{H}_{14}) = \dots\dots\dots \text{ }^\circ\text{C}$$

$$t_v(\text{N}_2) = \dots\dots\dots \text{ }^\circ\text{C}$$

Zakaj se pri danih pogojih ne utekočini dušik?

**d) Katere podatke potrebujete za pretvarjanje prostorninskega toka heksana v množinski tok? Poiščite jih!**

Izračunajte množinski tok tekočega heksana!

**e) Postavite enačbe masne bilance in pogoje za množinske deleže!**

Enačbe masne bilance:

heksan: .....

dušik: .....

Pogoji za množinske deleže:

tok 1: .....

tok 2: .....

tok 3: .....

Dodatni pogoji:

**f) Določite:**

$$N_e = \dots\dots\dots$$

$$N_s = \dots\dots\dots$$

$$N_n = \dots\dots\dots$$

**g) Izračunajte vse neznane tokove in sestavo!**

**(Rezultat:  $F_1 = 84,3 \frac{\text{mol}}{\text{min}}$ ,  $F_2 = 72,8 \frac{\text{mol}}{\text{min}}$ ,  $x_{12} = 0,82$ ,  $x_{22} = 0,95$ )**

**4. Naloga<sup>2</sup>: Mešanje dveh raztopin.**

Na voljo imamo dve raztopini metanol/voda različnih koncentracij. Prva raztopina vsebuje  $w = 40\%$  metanola, druga pa  $w = 70\%$  metanola.

- Določite  $N_s$  in  $N_n$ .
- Izračunajte maso dobljene raztopine, če zmešamo 200 g prve in 150 g druge raztopine!
- Izračunajte končno sestavo (delež posameznih komponent)!

**Potek reševanja:**

Oznaka komponent:

Procesna shema z označenimi tokovi in prikazanimi spremenljivkami:

**Enačbe masne bilance:**

metanol: .....

voda: .....

**Pogoji za masne deleže:**

tok 1: .....

tok 2: .....

tok 3: .....

---

<sup>2</sup> Felder, R. M., Rousseau, R. W. Elementary principles of chemical processes. New York, John Wiley & Sons, 1978.

Dodatni pogoji:

Število spremenljivk:  $N_s =$

Število načrtovalnih spremenljivk:  $N_n =$

Načrtovalne spremenljivke so:

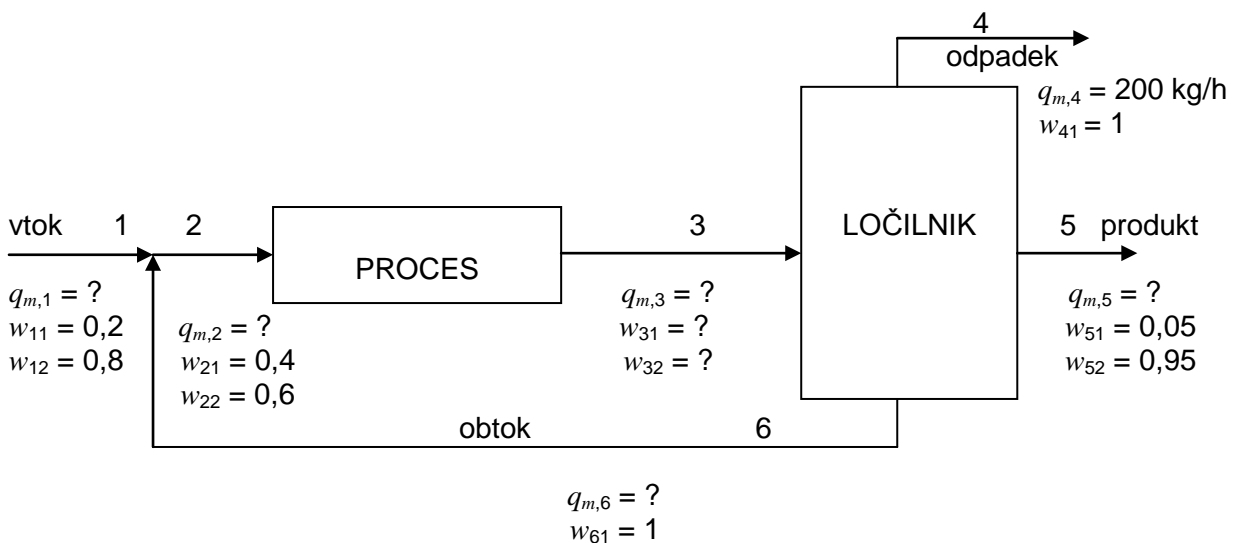
Rešimo enačbe in poiščemo rešitev za vse neznane spremenljivke:

**(Rezultat:  $m_3 = 350$  g,  $w_{31} = 0,529$ ,  $w_{32} = 0,471$ )**

### 3. Masne bilance sistemov procesnih enot brez kemijske reakcije

#### 1. Naloga<sup>3</sup>: Sistem procesnih enot.

Za proces na sliki določite neznane tokove in sestave, če je iztok odpadnega materiala (odpadek) 200 kg/h. Ostali podatki so razvidni iz procesne sheme. Iz izračunanih vrednosti določite razmerje med obtokom in vtokom! Rezultate podajte v preglednici!



**Opomba:** S simboloma  $q$  in  $q_m$  označujemo masne tokove in je po ISO standardu dovoljena uporaba obeh simbolov.

#### Potek reševanja:

a) Koliko procesnih enot je na sliki? Naštejte jih!

b) Narišite bilančne meje vsem enotam in celotnemu procesu!

<sup>3</sup> Himmeblau, D. M. Supplementary problems for basic principles and calculations in chemical engineering. 6<sup>th</sup> edition, The University of Texas, 1996.

c) Kako delujejo posamezne procesne enote, ki so na sliki?

Enačbe masne bilance:

1. enota:

2. enota:

3. enota:

Pogoji za masne deleže:

tok 1:

.  
. .  
. .  
. .  
. .

Dodatni pogoji:

Število spremenljivk:  $N_s =$

Število načrtovalnih spremenljivk:  $N_n =$

Načrtovalne spremenljivke so (naštejte jih):



Rešimo enačbe in poiščemo rešitev:

(Rezultat:  $q_{m,1} = 1266,7 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$ ,  $q_{m,2} = 1688,9 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$ ,  $q_{m,3} = 1688,9 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$ ,  $q_{m,5} = 1066,7 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$ ,  
 $q_{m,6} = 422,2 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$ ,  $w_{31} = 0,4$ ,  $w_{32} = 0,6$ ,  $\xi = 0,333$ )

## 4. Masne bilance za kemijske reaktorje

### 1. Naloga<sup>4</sup>: Zgorevanje butena.

V naslednjem primeru bomo vadili postavljanje modela masne bilance prisotnih kemijskih komponent.

Buten zgoreva po naslednji reakciji:  $C_4H_8 + 6 O_2 \rightarrow 4 CO_2 + 4 H_2O$ . V reaktor vteka 200 mol/h  $C_4H_8$ , zreagira ga samo 60 %. Kakšna je hitrost nastajanja vode ter koliko  $CO_2$  in  $H_2O$  najdemo v iztoku iz reaktorja?

#### Potek reševanja:

a) Označite komponente:

b) Narišite procesno shemo:

c) Kaj pomeni podatek »zreagira ga samo 60 %«? Napišite ustrezno enačbo za ta podatek!

---

<sup>4</sup> Krajnc, M. Oreški, S., Purkeljc F. Procesne bilance. Maribor, FKKT Univerze v Mariboru, 2012.

d) Rezultat dokažite z modelom **masne bilance komponent!**

Komp. 1:

Komp. 2:

Komp. 3:

Komp. 4:

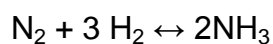
e) Kakšna je hitrost nastajanja vode?

f) Koliko CO<sub>2</sub> in H<sub>2</sub>O najdemo v iztoku iz reaktorja?

(**Rezultat:** Hitrost nastajanja vode je  $480 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$ , iztok iz reaktorja sestavljata  $480 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$  vode in prav toliko CO<sub>2</sub>.)

## 2. Naloga<sup>4</sup>: Proizvodnja amoniaka I.

Izračunati želimo masno bilanco reaktorja v katerem proizvajajo amoniak. Predpostavimo, da vteka v reaktor naslednja množina komponent: 12 mol/h N<sub>2</sub>, 40 mol/h H<sub>2</sub>. Reakcija je naslednja:

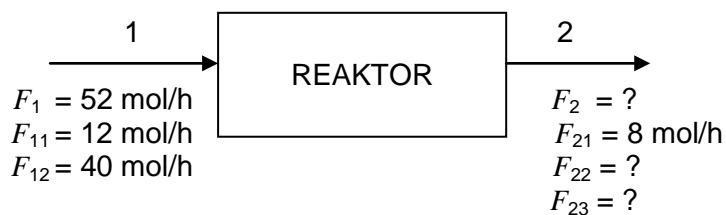


Ugotovljeno je, da pri stacionarnem obratovanju nastaja v produktu 8 mol/h N<sub>2</sub>.

---

<sup>4</sup> Krajnc, M. Oreški, S., Purkeljc F. Procesne bilance. Maribor, FKKT Univerze v Mariboru, 2012.

Slika prikazuje poenostavljeno procesno shemo:



Oznaka komponent:

- 1 – N<sub>2</sub>
- 2 – H<sub>2</sub>
- 3 – NH<sub>3</sub>

### Potek reševanja:

Enačbe, ki jih potrebujem za zapis masne bilance komponent in stopnje presnove so:

.....,

.....

a) Kolikšna je hitrost porabe N<sub>2</sub> in H<sub>2</sub> in kolikšna hitrost nastanka NH<sub>3</sub>?

b) Enačbe masne bilance:

N<sub>2</sub>:

H<sub>2</sub>:

NH<sub>3</sub>:

c) Izračun hitrosti presnove in neznanih tokov:

d) Preverite masno bilanco reaktorja! (**Namig:** Najprej izračunajte množinske deleže komponent v vtoku in iztoku, nato izračunajte  $\bar{M}$  vtoka in iztoka, ter nato masni vtok in iztok).

e) Izračunajte stopnjo presnove H<sub>2</sub> in N<sub>2</sub>!

$$X(\text{H}_2) =$$

$$X(\text{N}_2) =$$

(Rezultat:  $\frac{dn_1}{dt} = -4 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$ ,  $\frac{dn_2}{dt} = -12 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$ ,  $\frac{dn_3}{dt} = 8 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$ ,  $q_{m,1} = 416,3 \frac{\text{g}}{\text{h}}$ ,  $q_{m,2} = 416,3 \frac{\text{g}}{\text{h}}$ ,  
 $X(\text{N}_2) = 33,3 \%$ ,  $X(\text{H}_2) = 30 \%$ )

### 3. Naloga<sup>4</sup>: Pridobivanje amoniaka II.

Za primer iz prejšnje naloge izvedite masno bilanco na osnovi posameznih elementov!

Kemijska reakcija je:

Procesna shema:

#### Potek reševanja:

##### 1. Enačbe in pogoji:

a) Enačbe masne bilance:

- za elemente, ki reagirajo:

N:

H:

- za inertne elemente:

b) Pogoji za množinske deleže:

tok 1:

tok 2:

c) Pogoji za procesno enoto:

2. Število spremenljivk:  $N_s =$

3. Načrtovalne spremenljivke:  $N_n =$

---

<sup>4</sup> Krajnc, M. Oreški, S. Purkeljc F. Procesne bilance. Maribor, FKKT Univerze v Mariboru, 2012.

Načrtovalne spremenljivke so (naštejte jih in zapišite njihove vrednosti):

#### **4. Rešitev sistema enačb:**

Ali lahko enačbe poenostavite?

(Rezultat:  $F_2 = 44 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$ ,  $F_{22} = 28 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$ ,  $F_{23} = 8 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$ )

#### **4. Naloga<sup>4</sup>: Pridobivanje dušikove kisline.**

Moderen proces pridobivanja dušikove kisline temelji na oksidaciji amoniaka, ki ga sintetizirajo po Haberjevi reakciji. Prva stopnja oksidacijskega postopka je reakcija med  $\text{NH}_3$  in  $\text{O}_2$ , iz katerih v prisotnosti katalizatorja proizvedejo dušikov oksid, NO. Reakcija je naslednja:



Pri določenih pogojih je presnova  $X(\text{NH}_3) = 90\%$ . Vtok v reaktor je  $40 \text{ mol/h NH}_3$  in  $60 \text{ mol/h O}_2$ . Izračunajte iztočno sestavo in pretok ter presnovo  $\text{O}_2$ ! Enačbe masne bilance postavite na **osnovi prisotnih kemijskih komponent**.

---

<sup>4</sup> Krajnc, M. Oreški, S., Purkeljc F. Procesne bilance. Maribor, FKKT Univerze v Mariboru, 2012.

a) Označite komponente:

b) Narišite procesno shemo, označite tokove in vpišite znane podatke ter ostale spremenljivke, ki so potrebne za določitev masne bilance!

c) Enačbe masne bilance:

komp. 1:

komp. 2:

komp. 3:

komp. 4:

**Potek reševanja:**

Izračun hitrosti presnove in neznanih tokov:



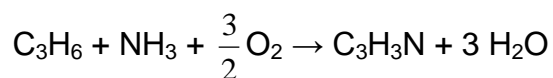
Izračun iztočne sestave:

Izračun stopnje presnove kisika:

(Rezultat: Iztočna sestava:  $x(\text{NH}_3)=0,0367$ ,  $x(\text{O}_2)=0,1376$ ,  $x(\text{NO})=0,3303$ ,  
 $x(\text{H}_2\text{O})=0,4954$ , pretok  $F_2=109 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$ ,  $X_{\text{O}_2} = 75\%$ )

#### 5. Naloga<sup>4</sup>: Proizvodnja akrilonitrila.

Akrilonitril proizvajamo po naslednji reakciji:



Sestava vtoka je naslednja:

$$x(\text{C}_3\text{H}_6) = 10 \%$$

$$x(\text{NH}_3) = 12 \%$$

$$x(\text{zrak}) = 78 \% \text{ (sestava zraka je } x(\text{O}_2) = 21 \%, x(\text{N}_2) = 79 \%)!$$

Presnova ključnega reaktanta je 30 %. Osnova je 100 kmol/h vtočne mešanice. Izračunajte sestavo iztoka iz reaktorja na osnovi proizvedenih množin komponent! Enačbe masne bilance postavite **na poenostavljen način**.

---

<sup>4</sup> Krajnc, M. Oreški, S., Purkeljc F. Procesne bilance. Maribor, FKKT Univerze v Mariboru, 2012.

**Potek reševanja:**

a) Narišite procesno shemo, označite tokove in vpišite znane podatke ter ostale spremenljivke, ki so potrebne za določitev masne bilance!

b) Izračunajte množinski tok kisika in dušika na vtoku:

c) Kateri reaktant je v prebitku in kateri je ključni reaktant?

d) Izračunajte delež prebitnih reaktantov!

e) Poraba ključnega reaktanta je: .....

f) Nezreagirana količina ključnega reaktanta je: .....

g) Kakšna je proizvodnja akrilonitrila?

h) Izračunajte pretoke ostalih komponent v produktu in celotni iztok!

i) Izračunajte sestavo (množinske deleže) iz reaktorja!

**(Rezultat:** Končna sestava:  $x(\text{C}_3\text{H}_6) = 0,0689$ ,  $x(\text{NH}_3) = 0,0887$ ,  $x(\text{O}_2) = 0,117$ ,  
 $x(\text{C}_3\text{H}_3\text{N}) = 0,0296$ ,  $x(\text{H}_2\text{O}) = 0,0887$ ,  $x(\text{N}_2) = 0,607$ ).

## 5. Transformacija koordinat, linearna regresija, interpolacija

### 1. Naloga: Transformacija koordinat nelinearnih funkcij.

Kako bi transformirali koordinate naslednjim funkcijam? Pri tem upoštevajte, da bo nova funkcija linearna, tj. premica, ki jo zapišemo:  $Y = A \cdot X + B$ .

a)  $y^2 = a \cdot e^{\frac{-b}{x}}$

$Y = \dots\dots\dots X = \dots\dots\dots A = \dots\dots\dots B = \dots\dots\dots$

b)  $\sin y = a (\cos x)^2 + b$

$Y = \dots\dots\dots X = \dots\dots\dots A = \dots\dots\dots B = \dots\dots\dots$

c)  $y^3 = a \cdot \ln x + \ln b$

$Y = \dots\dots\dots X = \dots\dots\dots A = \dots\dots\dots B = \dots\dots\dots$

d)  $E = \frac{1}{2} m \cdot u^2$   $E$  – odvisna spremenljivka,  $u$  – neodvisna spremenljivka

$Y = \dots\dots\dots X = \dots\dots\dots A = \dots\dots\dots B = \dots\dots\dots$

### 2. Naloga<sup>2</sup>: Transformacija koordinat, linearna regresija.

Hitrost, s katero substanca prehaja skozi semipermeabilno membrano, je določena z difuzivnostjo plina,  $D$  (cm<sup>2</sup>/s).  $D$  se spreminja s temperaturo membrane,  $T$  /K, kot je zapisano z Arrheniusovo enačbo:

$$D = D_0 \cdot e^{\frac{-E_a}{R \cdot T}}$$

kjer je:

$D_0$  – predeksponentni faktor,  $\frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$

<sup>2</sup> Felder, R. M., Rousseau, R. W. Elementary principles of chemical processes. New York, John Wiley & Sons, 2000.

$E_a$  – aktivacijska energija za difuzijo,  $\frac{\text{cal}}{\text{mol}}$

$R$  – splošna plinska konstanta,  $\frac{\text{cal}}{\text{mol K}}$ .

Difuzivnosti  $\text{SO}_2$  v fluorosilikonski gumijasti cevi so merjene pri različnih temperaturah. Rezultati so naslednji:

$T/\text{K}$	$D/(\text{cm}^2/\text{s}) \times 10^6$
347,0	1,34
374,2	2,50
396,2	4,55
420,7	8,52
447,7	14,07
471,2	19,99

a) Za dane podatke narišite funkcijo  $D = f(T)$ ,

b) Kako bi transformirali koordinate, da bi dobili premico?

c) Izračunajte nove koordinate!

d) Narišite funkcijo s transformiranimi koordinatami! Ali ste dobili premico?

e) Določite formulo funkcije na poenostavljen način iz grafa! Izbrani točki sta:

$$T_1 ( \quad , \quad ) \text{ in } T_2 ( \quad , \quad ).$$

$$\text{Velja: } Y = A \cdot X + B$$

$$A = \frac{Y_2 - Y_1}{X_2 - X_1} = \text{-----} = \text{.....} \quad B = \text{.....}$$

Enačba premice z izračunanima A in B:

$$Y = A \cdot X + B = \text{.....}$$

Končna formula:

f) Določite formulo z metodo najmanjših kvadratov!

$i$	$X$	$Y$	$X^2$	$X \cdot Y$
	$\Sigma$	$\Sigma$	$\Sigma$	$\Sigma$

$A =$

$B =$

Enačba premice z izračunanima A in B:

$Y = A \cdot X + B = \dots\dots\dots$

Končna formula:

(Približni rezultat: po regresiji:  $D = 0,045 \cdot e^{\frac{-3637,35}{T}}$ )

**3. Naloga<sup>4</sup>: Linearna interpolacija.**

Prikažite izpeljavo koeficientov  $a_0$  in  $a_1$  pri polinomu 1. stopnje do končne formule, ki jo uporabljamo pri linearni interpolaciji!

Izbrani točki sta:  $(x_i, y_i)$  in  $(x_{i+1}, y_{i+1})$

Enačbi polinoma 1. stopnje za izbrani točki sta:

Izpeljava:

Končna enačba za linearno interpolacijo je:

---

<sup>4</sup> Krajnc, M. Oreški, S., Purkeljc F. Procesne bilance. Maribor, FKKT Univerze v Mariboru, 2012.

#### 4. Naloga<sup>5</sup>: Linearna in kvadratna interpolacija

Parni tlak vode je pri podanih temperaturah naslednji:

$i$	$t/^\circ\text{C}$	$p^{\text{nas}}/\text{mmHg}$
1	40,0	55,32
2	60,0	149,38
3	80,0	355,10

Narišite graf funkcije nato pa določite parni tlak vode,  $p^{\text{nas}}$ , pri temperaturi  $t = 50^\circ\text{C}$  in za izračun uporabite:

- linearno in
- kvadratno interpolacijo.

Dobljena rezultata primerjajte z eksperimentalno vrednostjo  $p^{\text{nas}} = 92,51$  mmHg in podajte komentar!

#### Potek reševanja:

Graf funkcije:

Odvisno in neodvisno spremenljivko predstavljata:

$x =$

$y =$

a) Izberemo točki: .....

$i =$

$i + 1 =$

<sup>5</sup> Perry's Chemical Engineers' Handbook. Sixth Edition, McGraw-Hill Book Company, New York, 1984.



b) Izberemo točke: .....  $i =$                        $i+1=$                        $i + 2 =$

**Rezultat:**

Linearna interpolacija:

Kvadratna interpolacija:

Komentar:

(Rezultat: a)  $y \approx 102,35$  mmHg, b)  $y \approx 88,39$  mmHg)

## 6. Osnove numeričnih metod

### 1. Naloga<sup>6</sup>: Nelinearna enačba.

Najdite rešitev nelinearne enačbe z eno neznanko:

$$x^3 - 4x^2 + 7x - 5 = 0$$

Za izračun uporabite:

- grafično metodo,
- metodo zaporedne substitucije (preuredite enačbo v obliko, ki bo zagotovila konvergenco),
- Wegsteinovo metodo,
- Newtonovo metodo in
- metodo polovičnega intervala.

Pri točkah od b) do d) izvedite tri iteracije,  $x^{(1)} = 1$ . Ali dosežete konvergenčni pogoj, če je  $\varepsilon = 0,001$ ? Pri metodi polovičnega intervala sami določite začetni in končni interval, izračunajte potrebno število iteracij, ter izvedite 3 iteracije.

#### Potek reševanja:

##### a) grafična metoda:

Funkcijo pripravimo v obliko:

Izračun točk:

---

<sup>6</sup> Hanna, O. T., Sandall, O. C. Computational methods in chemical engineering. New Jersey, Prentice Hall PTR, 1995.

Narišite graf funkcije:

**Rešitev je:** ocenite jo iz grafa!

**b) metoda zaporedne substitucije**

Funkcijo pripravimo v obliko:

Ali bo oblika dala rešitev? Dokazite!

**(Opomba:** Če dokažete, da z izpeljano obliko funkcije ne boste dosegli rešitve, izpeljite novo obliko in ponovite prejšnji postopek.)

Ocenjena vrednost  $x^{(1)} =$

Tvorite iteracijsko zaporedje s »pravo« obliko funkcije!

Izračun iteracij:

**1. iteracija:**  $k = 1$

Konvergenčni pogoj:

**2. iteracija:**  $k =$

Konvergenčni pogoj:

**3. iteracija:**  $k =$

Konvergenčni pogoj:

Ali ste po 3. iteraciji dosegli rešitev?

Sedaj zapišite rezultate v preglednico:

k	$x^{(k)}$	$f(x^{(k)}) = x^{(k+1)}$	$\left  \frac{x^{(k+1)} - x^{(k)}}{x^{(k)}} \right $
1			
2			
3			
4			

**c) Wegsteinova metoda:**

Funkcijo pripravimo v obliko:

Ocenjena vrednost  $x^{(1)} =$

Izračun iteracij:

**1. iteracija:**  $k = 1$

Konvergenčni pogoj:

**2. iteracija:**  $k =$

Konvergenčni pogoj:

**3. iteracija:**  $k =$

Konvergenčni pogoj:

Ali ste po 3. iteraciji dosegli rešitev?

Sedaj zapišite rezultate v preglednico:

k	$x^{(k)}$	$f(x^{(k)})$	s	t	$x^{(k+1)}$	$\left  \frac{x^{(k+1)} - x^{(k)}}{x^{(k)}} \right $
1						
2						
3						
4						

Ali ste bližje rešitvi kot pri metodi zaporedne substitucije?

#### d) Newtonova metoda:

Funkcijo pripravimo v obliko:

Ocenjena vrednost  $x^{(1)} =$

Analitično odvajanje funkcije in vrednost odvoda pri  $x^{(1)}$ :

Numerični izraz odvoda in vrednost pri  $x^{(1)}$ :

$\delta =$

Primerjava vrednosti odvodov pri  $x^{(1)}$ :

Komentirajte vrednosti!

Izračun iteracij:

**1. iteracija:**  $k = 1$

Numerična vrednost odvoda:

Konvergenčni pogoj:

**2. iteracija:**  $k =$

Numerična vrednost odvoda:

Konvergenčni pogoj:

**3. iteracija:**  $k =$

Numerična vrednost odvoda:

Konvergenčni pogoj:

Ali ste po 3. iteraciji dosegli rešitev?

Sedaj zapišite rezultate v preglednico:

k	$x^{(k)}$	$x^{(k+1)}$	$\left  \frac{x^{(k+1)} - x^{(k)}}{x^{(k)}} \right $
1			
2			
3			
4			

Ali ste bližje rešitvi kot pri prejšnjih dveh metodah?

**e) metoda polovičnega intervala:**

Funkcijo pripravimo v obliko:

Izbrana leva in desna meja:

Velikost začetnega intervala:  $I_1 =$ Velikost končnega intervala:  $I_2 =$ 

$$\frac{1}{\beta} = \frac{\quad}{\quad} =$$

$$\beta =$$

Število iteracij:  $N =$



Izračun iteracij:

**1. iteracija:**  $k = 1$

**2. iteracija:**  $k =$

**3. iteracija:**  $k =$

Ali ste po tretji iteraciji dosegli rešitev?

Sedaj zapišite rezultate v preglednico:

k	$x_1^{(k)}$	$x_d^{(k)}$	$f(x_1^{(k)})$	$f(x_d^{(k)})$
1				
2				
3				

**(Rezultat:**  $x \approx 1,58$ )

## 7. Reševanje sistemov enačb

### 1. Naloga<sup>3</sup>: Sistem linearnih enačb.

Preverite, ali ima sistem linearnih enačb rešitev:

$$4 x_1 + 2 x_2 + x_3 = 15$$

$$20 x_1 + 5 x_2 - 7 x_3 = 0$$

$$8 x_1 - 3 x_2 + 5 x_3 = 24$$

Če je sistem rešljiv, poiščite njegovo rešitev z Gauss-Jordanovo metodo.

#### Potek reševanja:

Preverimo, če je matrika regularna (determinanta matrike  $\neq 0$ )

Izračun determinante s Sarrusovim pravilom:

Kaj pomeni dobljen rezultat?

Reševanje sistema enačb po Gauss-Jordanu:

**(Rešitev:**  $x_1 = 1$ ,  $x_2 = 3$ ,  $x_3 = 5$ )

---

<sup>3</sup> Himmeblau, D. M. Supplementary problems for basic principles and calculations in chemical engineering. 6<sup>th</sup> edition, The University of Texas, 1996.