

I. OSOBNÍ A STUDIJNÍ ÚDAJE

Příjmení: **Fernando** Jméno: **Alexander** Osobní číslo: **340629**
Fakulta/ústav: **Fakulta strojní**
Zadávací katedra/ústav: **Ústav procesní a zpracovatelské techniky**
Studijní program: **Strojní inženýrství**
Studijní obor: **Procesní technika**

II. ÚDAJE K DIPLOMOVÉ PRÁCI

Název diplomové práce:

Simulační model výroby HNO₃ v Excelu

Název diplomové práce anglicky:

Simulation model of HNO₃ production in Excel

Pokyny pro vypracování:

1. Formulujte teoretické zásady stavby modelů výrobních linek.
2. Doplňte text dle bodu 1 demonstračními příklady.
3. Prostudujte výpočtové postupy výroby HNO₃.
4. Vypracujte simulační program v Excelu.
5. Ověřte výpočet dle modelu na předaných datech.
6. Práce bude sepsána v ruském jazyce.

Seznam doporučené literatury:

Jméno a pracoviště vedoucí(ho) diplomové práce:

prof. Ing. Pavel Dítl DrSc., ústav procesní a zpracovatelské techniky FS

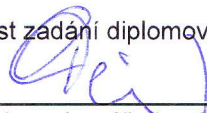
Jméno a pracoviště druhé(ho) vedoucí(ho) nebo konzultanta(ky) diplomové práce:

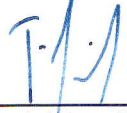
,

Datum zadání diplomové práce: **21.10.2016**

Termín odevzdání diplomové práce: **27.01.2017**

Platnost zadání diplomové práce: _____


Podpis vedoucí(ho) práce

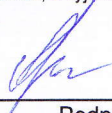

Podpis vedoucí(ho) ústavu/katedry


Podpis děkana(ky)

III. PŘEVZETÍ ZADÁNÍ

Diplomant bere na vědomí, že je povinen vypracovat diplomovou práci samostatně, bez cizí pomoci, s výjimkou poskytnutých konzultací. Seznam použité literatury, jiných pramenů a jmen konzultantů je třeba uvést v diplomové práci.


Datum převzetí zadání


Podpis studenta

České vysoké učení technické v Praze
Fakulta strojní

DIPLOMOVÁ PRÁCE

2017

Alexander FERNANDO

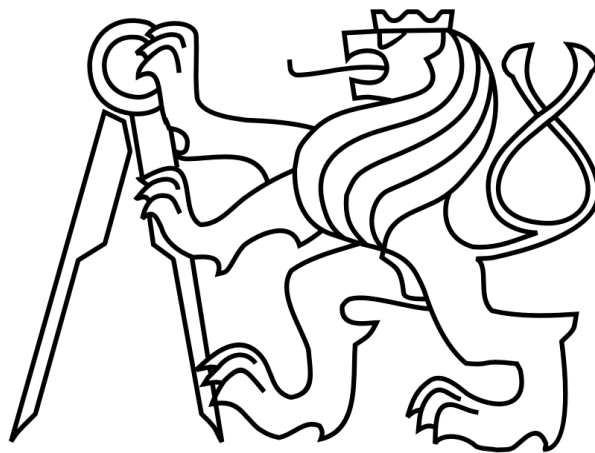


Simulační model výroby HNO_3 v EXCELU

České vysoké učení technické v Praze

Fakulta strojní

**Ústav procesní a zpracovatelské
techniky**



**SIMULAČNÍ MODEL VÝROBY HNO_3
V EXCELU.**

Autor diplomové práce: Alexander FERNANDO

Vedoucí diplomové práce: prof. Ing, Pavel DITL, DrSc

Rok obhajobý: 2017



ČESTNÉ PROHLÁŠENÍ

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci na téma „Simulační model výroby HNO_3 v Excelu“ vypracoval samostatně a veškerou použitou literaturu a další prameny jsem řádně označil v příloženém seznamu.

V Praze 27. 01. 2017



PODĚKOVANÍ

Na tomto místě chci poděkovat prof. Ing. Pavlu DITLOVI, DrSc. za jeho odborné vedení a pomoc při zpracování této diplomové práce.



Anotační list

Jméno autora: Alexander

Příjmení autora: Fernando

Název práce česky: Simulační model výroby HNO₃ v EXCELU

Název práce anglicky: Simulation model of HNO₃ production in EXCEL

Rozsah práce: počet stran: 31

počet obrázků: 21

počet tabulek: 3

počet příloh: 3

Akademický rok: 2016/2017

Jazyk práce: český

Ústav: 12118 - Ústav procesní a zpracovatelské techniky

Studijní program: Strojirenství

Vedoucí práce: prof. Ing. Pavel DITL, DrSc.

Oponent: doc.Ing. Radek ŠULC, PhD.

Konzultant práce: N/A

Zadavatel: : prof. Ing.Pavel DITL, DrSc.

Anotace česky: Cílem práce je simulovat proces výroby HNO₃ v programu Microsoft EXCEL

Anotace anglicky: The goal of this Diploma Thesis is to simulate HNO₃ production, using Microsoft EXCEL.

Klíčová slova: Výměník, kolona, kyselina, dusičná, Microsoft Excel, simulace.

Využití: Simulace procesních linek.



OBSAH

| | | |
|--------|---|----|
| 1. | Úvod..... | 7 |
| 2. | Stručný výklad metody. | 7 |
| 3. | Kyselina dusičná HNO_3 | 9 |
| 3.1 | Historie kyseliny dusičné. | 10 |
| 3.2 | Fyzikální vlastností HNO_3 | 11 |
| 3.3 | Chemické vlastnosti..... | 11 |
| 4. | Simulace výroby HNO_3 v programu Microsoft Excel. | 12 |
| 4.1 | Výrobní linka..... | 13 |
| 4.2. | Výpočty aparátů..... | 16 |
| 4.2.1. | Směšovač S1 a reaktor R. | 16 |
| 4.2.2 | Výměník E 8406 a výměník E 8407..... | 18 |
| 4.2.3 | Trubkový reaktor RP1. | 20 |
| 4.2.4 | Výměník E8411C. | 21 |
| 4.2.5 | Trubkový reaktor RP2. | 22 |
| 4.2.6 | Výměník E8408..... | 23 |
| 4.2.7 | Trubkový reaktor RP3. | 25 |
| 4.2.8 | Kondezační výměník E8418..... | 26 |
| 4.2.9 | Separator S2..... | 28 |
| 5. | Porovnání vypočtených a dostupných ověřených dat. | 29 |
| 6. | Závěry..... | 30 |
| 7. | Požité zdroje:..... | 31 |
| 8. | Použité jednotky:..... | 31 |

Přílohy

tvoří separátní přílohu

Příloha 1: Технологический план для расчёта производственной линии в Microsoft OFFICE Excel.

Příloha 2: Разобранные примеры для обучения.

Příloha 3: CDROM s diplomovou prací a výpočty

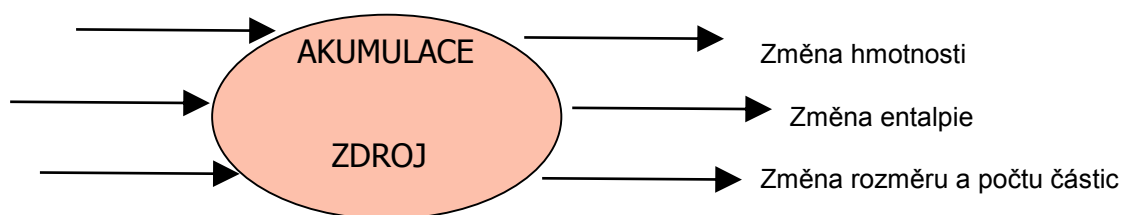


1. Úvod.

Simulační modely jsou založené na hmotnostních a entalpických bilancích. Tuto metodiku vytvořili prof. Pavel DITL a prof. Jaroslav SKŘIVÁNEK a aplikovali ji v programu Microsoft Excel. Výklad této metodiky jsem přeložil do ruského jazyka a hlavní výsledky jsem úspěšně prezentoval na konferencích v Krakově (2016) a Ostravě (2016). Mým cílem bylo rovněž upravit existující českou verzi podle posledních přednášek a vlastního přístupu tak, aby byla co nejvíc propracována. Tato část práce obsahuje poslední verze pedagogických textů a to jak učebního textu, tak i vhodných výukových příkladů, které byly vytvořeny pro zvládnutí metodiky výpočtu. Tuto část jsem vypracoval v ruském jazyce a z důvodu kontaktu katedry s univerzitou v Ivanově a jejím prostřednictvím dalších kontaktů s výrobními podniky. Z důvodu jazykové homogenity jsou texty v ruštině uvedeny v Příloze 1 a 2. Získané znalosti jsem aplikoval na formulaci simulačního modelu výroby HNO_3 v programu Microsoft Excel.

Původně zamýšlený komplexní model výroby HNO_3 se kvůli komplikovanosti probíhajících chemických reakcí a tím i výpočet především absorpční kolony nepodařilo dokončit. Po dohodě s vedoucím mé práce bylo rozhodnuto práci soustředit na výpočtové modely jednotlivých aparátů. Tyto výpočty jsem ověřil dle dostupných dat výroby HNO_3 o koncentraci 68% a kapacity linky 660 MTPD. Tyto moduly umožňují postupný výpočet linky, avšak zatím neřeší automatický výpočet s recyklací proudů v lince.

2. Stručný výklad metody.



Obrázek 2 – 1: Schéma simulační metody

Simulace výrobní linky v Microsoft Excel vychází z hmotnostních a entalpických bilancí a je zaměřená na výpočet linek v ustáleném stavu (to znamená, že neuvažujeme akumulace a přítomnost vnitřních zdrojů). Bilanční rovnice musí být upravené do snadno řešitelné formy pomocí Microsoft Excel, který obsahuje moduly pro řešení soustavy lineárních rovnic. Dělá se to tak, že se sestaví Incidenční matice, pak tzv. Tabulka dat, dále



tice bilančních rovnic a nakonec Matice koeficientů. Počet proměnných a rovnic musí být stejný, aby matice byla čtvercová. Metodika rovněž umožňuje originálním způsobem provádět výpočet linek, využívajících chemické reaktory a bioreaktory.

Metodika umožňuje dva přístupy a to buď bilancování pomocí toků jednotlivých složek v jednotlivých proudech či bilancování, vycházející z celkového toku hmoty a ze znalostí koncentrace složek, obsažených v proudu ($\sum x=1$). Pokud počet bilancí jednotlivých složek je menší, než je počet neznámých parametrů, je nutné tyto bilanční rovnice doplnit dodatečnými podmínkami, které můžeme rozdělit do následujících skupin:

a) Koncentrace nebo velikost proudů

V každém případě musí být definován tzv. referenční proud, který umožňuje specifikaci výkonu či kapacity linky.

Znamé koncentrace musíme přepsat do tvarů bilančních rovnic tak, aby jejich koeficienty bylo možné zapsat do matice koeficientů

b) Poměry toků složek

Tyto poměry jsou vypočteny ze zadaných procesních parametrů, jakými jsou např. konverze, přebytek vzduchu, fyzikální a chemické rovnováhy atd.

Pomocí uvedených podmínek doplníme soustavu lineárních rovnic a tu pak řešíme výše zmíněnou metodou, vyžadující výpočet Incidenční matice a Matice koeficientů této soustavy.

Řešení je pak velmi jednoduché a výklad metodiky je uveden v Příloze 1 v ruštině.

Pro lepší chápání a osvojení této metody prof. Dítl vypracoval systematickou sérii příkladů, která po mém dopracování a překladu je uvedená v Příloze 2. Jedná se o následující ilustrativní příklady.

1) Houby

Příklad, který popisuje základní hmotnostní bilanci.

2) Výroba sody

Příklad, který popisuje model linky, kde probíhá chemická reakce.

3) Železo

Příklad demonstruje řešení nelineárních rovnic v programu Microsoft Excel.



4) Kotel

Je to složitější příklad, který ukazuje současné použití hmotnostní a entalpické bilance. Přitom, se ukazuje, že entalpická bilance je jedním z dodatečných vztahů. Kromě toho je k tomuto příkladu uveden výklad termodynamického výpočtu v programu Microsoft Excel. Fyzikální data jsou čerpána ze seznamu cca 400 složek, kde jsou uvedeny term fyzikální vlastnosti látek (soubor Termodata.xls). Využívání souboru Termodata.xls vyžaduje jeho současné otevření a jeho správné propojení v Excelu. Autoři této metodiky využili popsané postupy pro simulaci cca deseti průmyslových linek. Současně v příkladu „Kotel“ je uvedeno převzetí fyzikálních dat a výpočet všech potřebných konstant ze všeobecné uznávané databáze www.nist.gov (Web of Science).

Mým dalším úkolem bylo využít navrženou metodiku pro simulaci výroby HNO_3 . Tato výroba je považována za výpočtově jednu z nejobtížnějších chemických výrob.

3. Kyselina dusičná HNO_3 .

Kyselina dusičná HNO_3 je chemikálie, která se nejčastěji používá jako čisticí prostředek pro potraviny, také se používá pro výrobu výbušnin, hnojiv, kapalných paliv a laboratorního oksličovadla. Je to velice škodlivá látka a práce s ní vyžaduje použití speciálních ochranných prostředků.

Jako silné oksličovadlo se HNO_3 využívá pro výrobu mnoha chemických látek, jako jsou například léčiva, barviva atd., ale nejvíc se používá pro výrobu dusičnanu amonného jako hlavní komponenta pro hnojiva.

Kyselina dusičná patří do skupiny anorganických kyselin. Je známá jako „Aqua fortis“, což znamená silná voda, nebo jako „Aqua valens“, což znamená mocná voda. Je to kyselina, která je nejenom korozivní ale i toxická. Přímý kontakt s ní způsobuje vážné popáleniny. Za standardních podmínek je to bezbarvá kapalina, pokud je čistá, ale dosahuje žluté barvy, když stárne z důvodu hromadění dusíku. Při destilaci čistá HNO_3 se při atmosférickém tlaku vaří při teplotě $83,48\text{ }^\circ\text{C}$.

Prvním historickým záznamem v historii HNO_3 je pokus alchymisty, který se jmenoval Jabir ibn Hayyan. Tento vědec popsal syntézu HNO_3 jako první. Mnozí ho považují za otce chemie. Jeho výzkumy umožnily vynalézt syntézu kyseliny dusičné jako první. Rovněž se pokládá za vynálezce syntézy chlorovodíkové. Později ve středověku, když alchymisti se snažili o kámen mudrců, proměňující kov v zlato, zjistili, že vynalezli aqua fortis, která byla schopná rozpustit zlato a platinu ve vodě.



Kyselina dusičná je nebezpečná, protože je vysoce korozivní a má takové oxidační vlastnosti, že vyžaduje velice pečlivé zacházení. Při práci s touto kyselinou je třeba používat speciální pracovní oděv a brýle, protože kyselina může způsobit těžké popáleniny. Ve směsi s kovy nebo organickými sloučeninami, kyselina dusičná produkuje silné výpary, které mohou poškodit plíce a měkké tkáně nosu a dýchacích cest. Silně koncentrovaná kyselina může způsobit i smrtelné popáleniny.

V laboratořích se nejčastěji používá kyselina dusičná o koncentraci 68%. To odpovídá směsi, vroucí při teplotě $121,9\text{ }^\circ\text{C}$ při atmosférickém tlaku.

Pokud se pracuje s kyselinou dusičnou, která je vysoce koncentrovaná, nebo která se nachází v plynné fázi, je nezbytné použití odsavače, protože výpary jsou velice nebezpečné obzvláště pro měkké tkáně. V případě nepřítomnosti odsavače, je nutné použít ochranné prostředky pro dýchací cesty. HNO_3 je stabilní, ale velice korozivní materiál a musí se uskláňovat v dostatečné vzdálenosti od organických materiálů.

Vzhledem ke všem vlastnostem kyseliny, její výroba, prodej a skladování se řídí přísnými právními předpisy. Velké úniky kyseliny se musí zasypat pískem, jílem nebo jiným inertním materiálem a ten pak správně zlikvidovat. Příslušné služby, které se starají o životní prostředí, se musí včas informovat o únicích, aby zabránily průniku kyseliny do vodních toků. Může to mít vážný vliv na vodní pH, což může zničit vodní organismy. Malé množství HNO_3 může být bezpečně spláchnuto do obyčejného odpadu s velkým množstvím vodovodní vody.

3.1 Historie kyseliny dusičné.

První zprávy o vynálezu kyseliny dusičné se připisují arabským alchymistům z 18. století. Ve středověku se kyselina dusičná nazývala "Asaqua fortis" (silná voda), nebo "Aqua valens" (mocná voda). Od té doby se kyselina produkovala především z dusičnanu draselného a kyseliny sírové. V devatenáctém století, dusičnan draselný byl nahrazen dusičnanem sodným, který dováželi z Jižní Ameriky. Ve 20. století byly zavedeny nové technologie. V Norsku, kde existovala levná elektrická energie, se používaly elektrické obloukové pece na produkce oxidů dusíku a kyseliny dusičné přímo ze vzduchu. Komerční život této metody byl poměrně krátký a pece byly kompletně odstaveny v roce 1930.

V roce 1902 získal patent Wilhelm Ostwald (Bochum, Německo), kterému se podařilo vyrábět kyselinu dusičnou pomocí katalytické oxidace čpavku a vzduchu. Díky ekonomické a hospodářské výhodě katalytické oxidace čpavku, byla tato metoda průmyslově využita. Industriální vývoj pokračoval a tato metoda našla využití v Evropě a



USA, kde společnost Chemical Construction Company postavila první průmyslový závod v roce 1917 (Muscle Shoals, Alabama). Proces probíhal při atmosferickém tlaku a používal vícestupňovou oxidace amoniaku. Od té doby katalytická oxidace se stala základem pro výrobu HNO_3 a do dnešní doby neproběhlo mnoho velkých změn, které by se výroby této kyseliny týkaly.

V moderních procesech katalytické oxidace se vyrábí hodně slabé kyseliny o koncentraci 50 až 65%. Metody, které používají konstantní vysoký tlak minimalizují kapitálové investice, zatímco dvoustupňové metody umožňují optimalizaci konverze amoniaku a použití katalyzátoru. Slabá kyselina je vhodná pro výrobu hnojiv, silná (až 99%) je nutná pro řádu organických průmyslových reakcí.

3.2 Fyzikální vlastností HNO_3 .

Po ztuhnutí krystaly čisté kyseliny dusičné jsou bezbarvé a jsou stabilní. Nad bodem tání ($-41,68\text{ }^\circ\text{C}$), je kyselina bezbarvou kapalinou a má tendenci k vypařování na vlhkém vzduchu a k rozkladu za vzniku oxidu dusíku. Rychlost rozkladu se zvyšuje za přítomnosti světla a se zvýšením teploty. V závislosti na koncentraci rozpuštěného oxidu dusičitého, barva se může měnit od žluté až do červené. Normální teplota varu kyseliny je $83,48\text{ }^\circ\text{C}$, ale zahřátá směs se postupně rozkládá až do vzniku ametropické směsi, vroucí při $1208\text{ }^\circ\text{C}$.

Kyselina dusičná je kompletně mísitelná s vodou. Křivka bodu tuhnutí pro její vodní roztok má dvě maxima, odpovídající také bodům tání mono hydrátu (77,8 % hm) při $37,63\text{ }^\circ\text{C}$ a tří hydrátu (53,83 %) při $18,48\text{ }^\circ\text{C}$. Lokální minima se vyskytují při $32\text{ }^\circ\text{C}$, $71\text{ }^\circ\text{C}$ a 91% hm. Existuje určitá variabilita dat, závislá na parciálních tlacích kyseliny a vodní páry. Je to nejvíc patrné při měření parciálních tlaků složek směsi, jejíž koncentrace je velmi malá. Rozklad kyseliny dusičné při vysokých teplotách a koncentracích může způsobit nepřesnosti ve stanovení parciálních tlaků par.

3.3 Chemické vlastnosti.

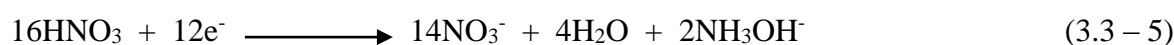
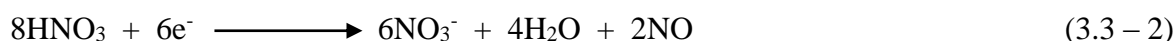
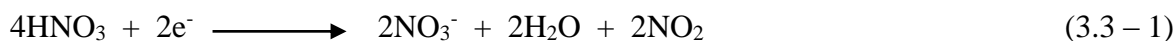
Kyselina dusičná je silná jednosytná kyselina, mocné okysličovadlo a slouží pro získání mnoha organických sloučenin.

Jako typická kyselina, snadno reaguje s alkáliemi, základními oxidy a uhličitany za vzniku soli. Z průmyslového hlediska, hlavní využitelnost kyseliny spočívá v její reakci se čpavkem, přičemž produktem reakce je ledek amonný.



Jelikož HNO₃ je velmi mocné oxidační činidlo a reaguje se spoustou organických sloučenin, její vysoce koncentrovaný roztok explozivně reaguje s metanolem. Tato vlastnost se naplno využívá ve vojenském průmyslu – například při výrobě raketového paliva.

V závislosti na koncentraci HNO₃ v roztoku, teplotě a redukčního prostředí, může nastat jedna z následníků oxidací.



Koncentrovaná kyselina dusičná podporuje tvorbu peroxidu dusíku, zatímco slabě koncentrovaná kyselina podporuje tvorbu oxidu dusnatého. V podstatě, vysoce koncentrovaná kyselina převádí oxidy, sulfidy a jiné látky, které mají nízký oxidační stupeň na vyšší. Například se dá provést oxidace oxidu siřičitého na kyselinu sírovou. Při tom platí hlavní pravidlo, že vodík může být nahrazen kovem s vyšší valencí.

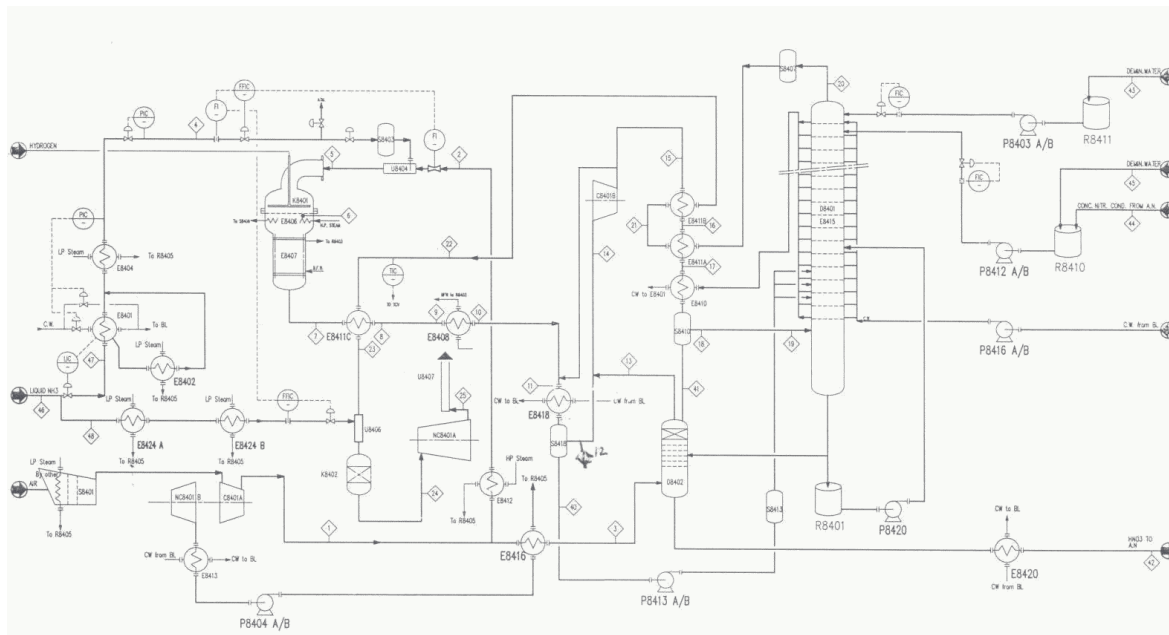
4. Simulace výroby HNO₃ v programu Microsoft Excel.

Jak už bylo řečeno, nejprve byl proveden pokus o výpočet celé linky včetně všech její aparátů. Jedná se o tzv. dvoustupňovou metodu, která využívá práce dvou kompresorů. Musela se vytvořit velká matice koeficientů, která měla 146 řádku a sloupců. Její řešení se nepodařilo dopočítat, a proto bylo rozhodnuto, aby výpočet probíhal aparát po aparátu. Základ výpočtu byl zvolen v kmol/h.



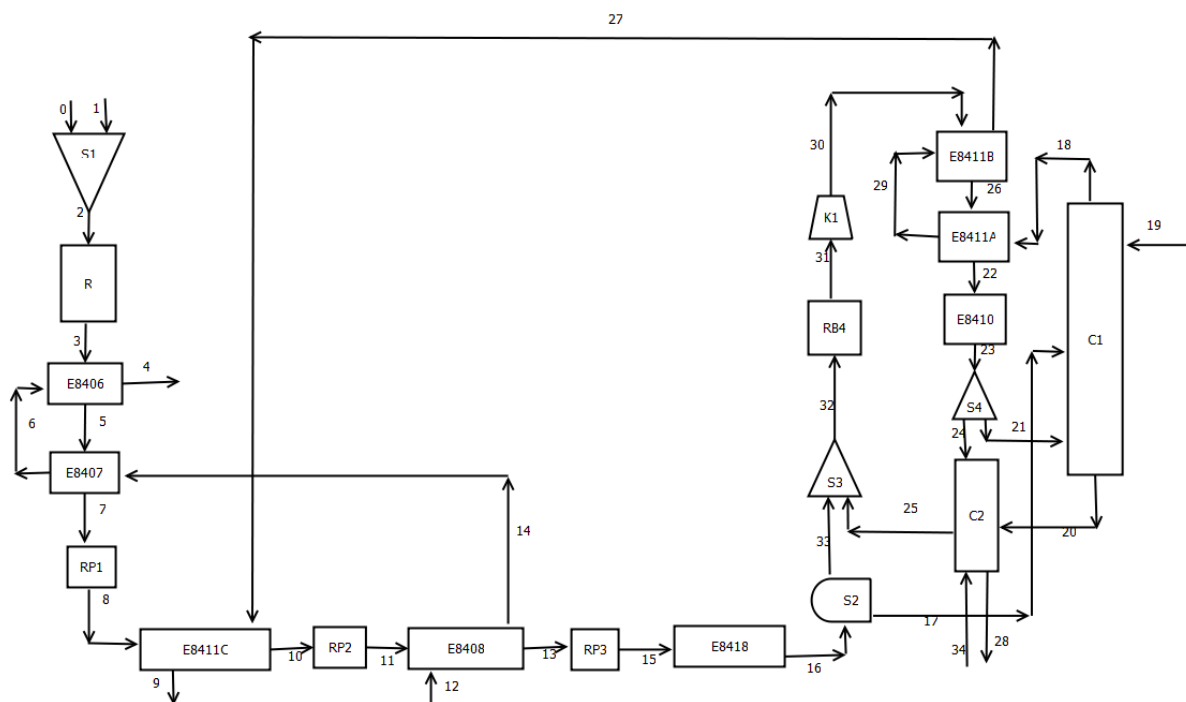
4.1 Výrobní linka.

Výrobní linka, seje zobrazena následujícím obrázkem:



Obrázek 4.1 – 1 : Schéma řešené linky na výrobu HNO_3 .

Toto výrobní schéma bylo převedeno do výpočtového schématu znázorněného na následujícím obrázkem.



Obrázek 4.1 – 2: Blokové schéma pro výpočet linky na výrobu HNO_3 .



Na obrázku 4.1-2 jsou znázorněny všechny jednotlivé aparáty, které jsou důležité pro výpočet. Bilanční veličiny, které se počítaly, jsou molové toky jednotlivých komponentů (kmol/h). Označení a očíslování všech toků a složek, které tyto proudy tvoří, jsou, přehledně uvedeny v následujících tabulkách:

| Bilanční číslo složky | Chemický vzorec |
|-----------------------|-------------------------------|
| 1 | NH ₃ |
| 2 | O ₂ |
| 3 | NO |
| 4 | N ₂ |
| 5 | H ₂ O |
| 6 | NO ₂ |
| 7 | N ₂ O ₄ |
| 8 | HNO ₃ |

Tabulka 4.1 – 1: Pořadová čísla složek.

| Proud | Složky |
|-------|---|
| 0 | O ₂ , N ₂ |
| 1 | NH ₃ |
| 2 | NH ₃ , O ₂ , N ₂ |
| 3 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O |
| 4 | H ₂ O |
| 5 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ |
| 6 | H ₂ O |
| 7 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ |
| 8 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ |
| 9 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ |
| 10 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ |
| 11 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ |
| 12 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ |
| 13 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ |

Tabulka 4.1 – 2: Seznam proudů a složek, které tyto proudy tvoří



Simulační model výroby HNO₃ v EXCELU

| | |
|----|--|
| 14 | H ₂ O |
| 15 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ , N ₂ O ₄ |
| 16 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ , N ₂ O ₄ , HNO ₃ |
| 17 | H ₂ O, HNO ₃ |
| 18 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ |
| 19 | H ₂ O |
| 20 | H ₂ O, N ₂ O ₄ , HNO ₃ |
| 21 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ , N ₂ O ₄ |
| 22 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ , N ₂ O ₄ |
| 23 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ , N ₂ O ₄ |
| 24 | H ₂ O, HNO ₃ |
| 25 | O ₂ , N ₂ , H ₂ O, N ₂ O ₄ |
| 26 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ , N ₂ O ₄ |
| 27 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ |
| 28 | H ₂ O, HNO ₃ |
| 29 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ |
| 30 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ , N ₂ O ₄ |
| 31 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ , N ₂ O ₄ |
| 32 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ , N ₂ O ₄ |
| 33 | O ₂ , NO, N ₂ , H ₂ O, NO ₂ , N ₂ O ₄ |
| 34 | NH ₃ |

Tabulka 4.1 – 2: Seznam proudů a složek, které tyto proudy tvoří (pokračování)

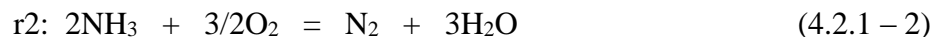
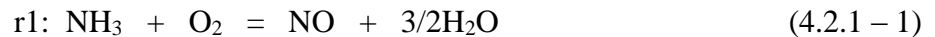


4.2. Výpočty aparátů.

Výpočty jednotlivých, vybraných aparátů vypadají takto:

4.2.1. Směšovač S1 a reaktor R.

Do směšovače S1 se přivede amoniak a vzduch, kde se složky smísí a jejich směs je přiváděna do reaktoru R, kde proběhnou při teplotě cca 890°C a tlaku 8 bar následující reakce:



V této části jsem rozhodl, že se směšovač a reaktor budou počítat dohromady. Na následujícím obrázku a na dalších obrázcích matic koeficientů **A** jsou vstupující proudy označeny zelenou barvou a proudy vystupující barvou červenou. Referenční proud bude vždy zvýrazněn žlutou barvou, stechiometrické koeficienty jsou vyznačeny světlou – hnědou. Vektor pravých stran **B** je zvýrazněn růžovou barvou.

| proud složka toky složek | A | 0 | 0 | 1 | 2 | 2 | 2 | 3 | 3 | 3 | 3 | r1 | r2 | B |
|---------------------------------------|---|-------|-------|------|------|------|------|---------|--------|--------|--------|-----|------|-----|
| | | 2 | 4 | 1 | 1 | 2 | 4 | 2 | 3 | 4 | 5 | | | |
| | | n0;2 | n0;4 | n1;1 | n2;1 | n2;2 | n2;4 | n3;2 | n3;3 | n3;4 | n3;5 | | | |
| S1 | 1 | 0 | 0 | 1 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| S1 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| S1 | 4 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| R | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | -2 | 0 |
| R | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | -1 | -1,5 | 0 |
| R | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| R | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 1 | 0 |
| R | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 1,5 | 3 | 0 |
| Koncentrace O ₂ v proudu 3 | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -0,9347 | 0,0653 | 0,0653 | 0,0653 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace O ₂ v proudu 0 | | 0,79 | -0,21 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Referenční proud | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 997 |
| Přebytek vzduchu | | -2,38 | 0 | 3,6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

Obrázek 4.2.1-1: Matice koeficientů A a vektor pravých stran B pro soustavu rovnic S1 + R.

Jako dodatečné podmínky byly zvoleny koncentrace kyslíku O₂ v proudech 0 a 3 a přebytek vzduchu, který byl známý. Jako referenční proud jsem zvolil tok složky 3 (NO), která je nutná pro další procesy.

1) Referenční proud:

$$n_{3;3} = 997 \text{ kmol/h} \quad (4.2.1 - 3)$$



2) Vztahy pro výpočet koncentrací:

Koncentrace O₂ v proudu 0 je známa, protože proud 0 je vstupující vzduch. Počítáme se s tím, že koncentrace kyslíku ve vzduchu je 21% a koncentrace N₂ činí 79%.

Koncentrace O₂ v proudu 3 se spočítá dle následujícího vztahu:

$$0,0653 = \frac{n_{3;2}}{n_{3;2} + n_{3;3} + n_{3;4} + n_{3;5}} \quad (4.2.1 - 4)$$

Který po úpravě přejde na tvar:

$$(0,0653 - 1) \cdot n_{3;2} + 0,0653 \cdot n_{3;3} + 0,0653 \cdot n_{3;4} + 0,0653 \cdot n_{3;5} = 0 \quad (4.2.1 - 5)$$

Koeficienty jednotlivých toků jsem zapsal do matice koeficientů a stejným způsobem jsem to provedl i u dalších aparátů.

3) Dále byla ověřena řešitelnost této soustavy pomocí výpočtu determinantu, jehož hodnota musí být nenulová.

$$\text{DET} = 0,21 \quad (4.2.1 - 6)$$

4) Soustavu rovnic je možno výhodně řešit v Microsoft Exel jako součin dvou matic, inverzní matice koeficientů a vektoru pravých stran:

$$\mathbf{X} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{B} \quad (4.2.1 - 7)$$

Takto jsem získal následující výsledky (jsou zaokrouhleny na celá čísla):

| toky složek | n0;2 | n0;4 | n1;1 | n2;1 | n2;2 | n2;4 | n3;2 | n3;3 | n3;4 | n3;5 |
|-------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| kmol/h | 1907 | 7173 | 1261 | 1261 | 1907 | 7173 | 712 | 997 | 7305 | 1891 |

Obrázek 4.1 - 4: Výsledky řešení soustavy rovnic pro S1+R.



4.2.2 Výměník E 8406 a výměník E 8407.

Dále jsem spojil výpočet výměníků E8406 (předehřivač) a E8407 (výparník) pod názvem E8406. Neuvažoval jsem o průtok chladící vody mezi nimi. Počítal jsem se vstupem (n_{14;9}) a výstupem (n_{4;9}). V těchto výměnících probíhá oxidace NO:



| proud | složka | toky složek | A | | | | | | | | | | | r3 | B |
|---|--------|-------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|---------|---------|---------|---------|-------|---------|--------|
| | | | 3 | 3 | 3 | 3 | 4 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 14 | | |
| | | | 2 | 3 | 4 | 5 | 9 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 9 | | |
| | | | n3;2 | n3;3 | n3;4 | n3;5 | n4;9 | n7;2 | n7;3 | n7;4 | n7;5 | n7;6 | n14;9 | | |
| E8406+E8407 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 |
| E8406+E8407 | 3 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -2 | 0 |
| E8406+E8407 | 4 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| E8406+E8407 | 5 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| E8406+E8407 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 2 | 0 |
| E8406+E8407 | 9 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| Referenční proud | | | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 997 |
| entalpická bilance | | | 28,443 | 27,834 | 26,864 | 32,895 | -6,678 | -4,941 | -13,463 | -13,045 | -15,545 | -18,983 | 2,360 | 122,686 | 50 892 |
| Koncentrace O ₂ v proudě 3 | | | 0,935 | -0,065 | -0,065 | -0,065 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace N ₂ v proudě 3 | | | -0,670 | -0,670 | 0,330 | -0,670 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace H ₂ O v proudě 3 | | | -0,173 | -0,173 | -0,173 | 0,827 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Konverze NO | | | 0 | 0,9795 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

Obrázek 4.2.2 – 1: Matice koeficientů A a vektor pravých stran B pro soustavu rovnic E8406 + E 8407.

Dodatečné podmínky byly: referenční proud (molový průtok NO ve vstupujícím proudě), entalpická bilance náhradního výměníku (E 8406 + E 8407) a koncentrace složek O₂, N₂, H₂O v proudě 3.

- 1) Referenční proud (tok NO v proudě 3):

$$n_{3;3} = 997 \text{ kmol/h} \quad (4.2.2 - 2)$$

- 2) Entalpickou bilance jsem počítal dle známých parametrů (celkový výkon výměníků), entalpii jednotlivých komponentů jsem počítal dle údajů z www.nist.gov a pak se musela zohlednit orientace proudů (+1 v případě, že se jedná o vstup a -1, když se jedná o výstup).
- 3) Koncentrace složek O₂, N₂, H₂O v proudě 3 byly vypočteny dle následujících vztahů:

$$C_{3;2}^n = \frac{n_{3;2}}{\sum n_3} = 0,065 \quad (4.2.2 - 3)$$

$$C_{3;4}^n = \frac{n_{3;4}}{\sum n_3} = 0,670 \quad (4.2.2 - 4)$$

$$C_{3;5}^n = \frac{n_{3;5}}{\sum n_3} = 0,173 \quad (4.2.2 - 5)$$

$$\sum_{k=2}^5 n_{3;k} = n_{3;2} + n_{3;3} + n_{3;4} + n_{3;5} = 10905 \text{ kmol/h}, \quad (4.2.2 - 6)$$



Tyto rovnice jsem upravil a koeficienty proměných jsem zpsal do matice koeficientů.

- 4) Použil jsem vedoucím práce sdělené údaje o konverzi NO na tomto zařízení, která činí 0,0205.

$$X = \frac{n_{7;3} - n_{3;3}}{n_{3;3}} = 0,0205 \quad (4.2.2 - 7)$$

- 5) Řešitelnost soustavy testuje hodnota determinantu:

$$DET = 0,789 \quad (4.2.1 - 8)$$

- 6) Řešení soustavy rovnic přineslo následující výsledky:

| | | | | | | | | | | | |
|-------------|------|------|------|------|-------|------|------|------|------|------|-------|
| toky složek | n3;2 | n3;3 | n3;4 | n3;5 | n4;9 | n7;2 | n7;3 | n7;4 | n7;5 | n7;6 | n14;9 |
| kmol/h | 712 | 997 | 7305 | 1891 | 26657 | 702 | 977 | 7305 | 1891 | 20 | 26657 |

Obrázek 4.2.2 – 2: Výsledky řešení soustavy rovnic pro E8406 + E8407.



4.2.3 Trubkový reaktor RP1.

V tomto výměníku probíhá stejná reakce jako v předchozích při teplotě 462,9 °C.



| proud | A | | | | | | | | | | | r3 | B |
|---|---------|--------|---------|---------|---------|------|------|------|------|------|----|-----|---|
| složka | | | | | | | | | | | | | |
| toky složek | | | | | | | | | | | | | |
| | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | | | |
| | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | | | |
| | n7;2 | n7;3 | n7;4 | n7;5 | n7;6 | n8;2 | n8;3 | n8;4 | n8;5 | n8;6 | | | |
| RP1 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | |
| RP1 | 3 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | -2 | 0 | |
| RP1 | 4 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| RP1 | 5 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | |
| RP1 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | -1 | 2 | 0 | |
| Referenční proud | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 977 | |
| Konverze NO | 0 | 0,7072 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| Koncentrace O ₂ v proudu 7 | -0,9356 | 0,0644 | 0,0644 | 0,0644 | 0,0644 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| Koncentrace NO ₂ v proudu 7 | 0,0019 | 0,0019 | 0,0019 | 0,0019 | -0,9981 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| Koncentrace N ₂ v proudu 7 | 0,6705 | 0,6705 | -0,3295 | 0,6705 | 0,6705 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| Koncentrace H ₂ O v proudu 7 | 0,1736 | 0,1736 | 0,1736 | -0,8264 | 0,1736 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |

Obrázek 4.2.3 – 1: Matice koeficientů A a vektor pravých stran B soustavy rovnic RP1.

Dodatečné podmínky jsou referenční proud, koncentrace a konverze:

- 1) Referenční proud (tok NO v proudu 7):

$$n_{7;3} = 977 \text{ kmol/h} \quad (4.2.3 - 2)$$

- 2) Konverze NO:

$$X = \frac{n_{8;3} - n_{7;3}}{n_{7;3}} = 0,2928 \quad (4.2.3 - 3)$$

- 3) Koncentrace složek:

$$C_{7;2}^n = \frac{n_{7;2}}{\sum n_7} = 0,0644 \quad (4.2.3 - 4)$$

$$C_{7;4}^n = \frac{n_{7;4}}{\sum n_7} = 0,0019 \quad (4.2.3 - 5)$$

$$C_{7;5}^n = \frac{n_{7;5}}{\sum n_7} = 0,6705 \quad (4.2.3 - 6)$$

$$C_{7;6}^n = \frac{n_{7;6}}{\sum n_7} = 0,1736 \quad (4.2.3 - 7)$$

$$\sum_{k=2}^6 n_{7;k} = n_{7;2} + n_{7;3} + n_{7;4} + n_{7;5} + n_{7;6} = 10895 \text{ kmol/h}, \quad (4.2.3 - 8)$$

- 4) Ověříme řešitelnost soustavy pomocí determinantu:

$$\text{DET} = -0,179 \quad (4.2.3 - 9)$$



5) Výsledky řešení jsou uvedeny v následující tabulce:

| | | | | | | | | | | |
|-------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| toky složek | n7;2 | n7;3 | n7;4 | n7;5 | n7;6 | n8;2 | n8;3 | n8;4 | n8;5 | n8;6 |
| kmol/h | 702 | 977 | 7305 | 1891 | 20 | 559 | 691 | 7305 | 1891 | 306 |

Obrázek 4.2.3 – 2: Výsledky řešení soustavy rovnic pro RP1.

4.2.4 Výměník E8411C.

V tomto aparátu probíhá rychle ochlazení složek na 243 °C a také reakce r3.



| proud | A | | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 10 | 10 | 10 | 10 | 10 | r3 | B |
|---|---|--|--------|---------|--------|--------|--------|-------|-------|-------|-------|-------|----|-----|
| složka | | | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | | |
| toky složek | | | n8;2 | n8;3 | n8;4 | n8;5 | n8;6 | n10;2 | n10;3 | n10;4 | n10;5 | n10;6 | | |
| E8411C | 2 | | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 |
| E8411C | 3 | | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | -2 | 0 |
| E8411C | 4 | | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| E8411C | 5 | | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 |
| E8411C | 6 | | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 2 | 0 |
| Referenční proud | | | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 691 |
| Konverze NO | | | 0 | 0,9177 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace O ₂ v proudu 8 | | | -0,948 | 0,052 | 0,052 | 0,052 | 0,052 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace NO v proudu 8 | | | 0,0642 | -0,9358 | 0,0642 | 0,0642 | 0,0642 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0,0 |
| Koncentrace N ₂ v proudu 8 | | | 0,679 | 0,679 | -0,321 | 0,679 | 0,679 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace H ₂ O v proudu 8 | | | 0,176 | 0,176 | 0,176 | -0,824 | 0,176 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

Obrázek 4.2.4 – 1: Matice koeficientů A a vektor pravých stran B soustavy rovnic pro E8411C.

Dodatečné podmínky jsou následující:

- 1) Referenční proud – tok NO v proudu 8

$$n_{8;3} = 691 \text{ kmol/h} \quad (4.2.4 - 2)$$

- 2) Koncentrace složek:

$$C_{8;2}^n = \frac{n_{8;2}}{\sum n_8} = 0,0520 \quad (4.2.4 - 3)$$

$$C_{8;3}^n = \frac{n_{7;3}}{\sum n_8} = 0,0642 \quad (4.2.4 - 4)$$

$$C_{8;4}^n = \frac{n_{8;4}}{\sum n_8} = 0,6790 \quad (4.2.4 - 5)$$

$$C_{8;5}^n = \frac{n_{8;5}}{\sum n_8} = 0,1760 \quad (4.2.4 - 6)$$

$$\sum_{k=2}^6 n_{8;k} = n_{8;2} + n_{8;3} + n_{8;4} + n_{8;5} + n_{8;6} = 10752 \text{ kmol/h}, \quad (4.2.4 - 7)$$



3) Konverze NO:

$$X = \frac{n_{8;3} - n_{7;3}}{n_{7;3}} = 0,0823 \quad (4.2.4 - 8)$$

4) Vypočet determinantu matice A:

$$DET = 0,1285 \quad (4.2.4 - 9)$$

5) Spočítáme řešení soustavy rovnic pro E8411C:

| toky složek | n8;2 | n8;3 | n8;4 | n8;5 | n8;6 | n10;2 | n10;3 | n10;4 | n10;5 | n10;6 |
|-------------|------|------|------|------|------|-------|-------|-------|-------|-------|
| kmol/h | 559 | 691 | 7305 | 1891 | 306 | 530 | 634 | 7305 | 1891 | 363 |

Obrázek 4.2.4 – 2: Výsledky řešení soustavy rovnic pro E8411C.

4.2.5 Trubkový reaktor RP2.

V reaktoru RP2 stále probíhá reakce r3 při vyšší teplotě než v předchozím aparátu:

(T=290 °C).



| proud | složka | toky složek | A | | | | | | | | | | r3 | B |
|--|--------|-------------|-------|--------|--------|--------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-----|---|
| | | | 10 | 10 | 10 | 10 | 10 | 11 | 11 | 11 | 11 | 11 | | |
| | | | n10;2 | n10;3 | n10;4 | n10;5 | n10;6 | n11;2 | n11;3 | n11;4 | n11;5 | n11;6 | | |
| RP2 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | |
| RP2 | 3 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | -2 | 0 | |
| RP2 | 4 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| RP2 | 5 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | |
| RP2 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 2 | 0 | |
| Referenční proud | | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 634 | |
| Konverze NO | | 0 | 0,538 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| Koncentrace O ₂ v proudu 10 | | -0,951 | 0,049 | 0,049 | 0,049 | 0,049 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| Koncentrace N ₂ v proudu 10 | | 0,681 | 0,681 | -0,319 | 0,681 | 0,681 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| Koncentrace H ₂ O v proudu 10 | | 0,176 | 0,176 | 0,176 | -0,824 | 0,176 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| Koncentrace NO ₂ v proudu 10 | | 0,034 | 0,034 | 0,034 | 0,034 | -0,966 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |

Obrázek 4.2.5 – 1: Matice koeficientů A a vektor pravých stran B soustavy rovnic pro RP2.

Dodatečné podmínky jsou referenční proud, koncentrace a konverze:

1) Referenční proud – tok NO v proudu 10:

$$n_{10;3} = 634 \text{ kmol/h} \quad (4.2.5 - 2)$$



2) Koncentrace složek:

$$C_{10;2}^n = \frac{n_{10;2}}{\Sigma n_{10}} = 0,049 \quad (4.2.5 - 3)$$

$$C_{10;4}^n = \frac{n_{10;4}}{\Sigma n_{10}} = 0,681 \quad (4.2.5 - 4)$$

$$C_{10;5}^n = \frac{n_{10;5}}{\Sigma n_{10}} = 0,176 \quad (4.2.5 - 5)$$

$$C_{10;6}^n = \frac{n_{10;6}}{\Sigma n_{10}} = 0,034 \quad (4.2.5 - 6)$$

$$\Sigma_{k=2}^6 n_{10;k} = n_{10;2} + n_{10;3} + n_{10;4} + n_{10;5} + n_{10;6} = 10723 \text{ kmol/h}, \quad (4.2.5 - 7)$$

3) Konverze NO:

$$X = \frac{n_{11;3} - n_{10;3}}{n_{10;3}} = 0,462 \quad (4.2.5 - 8)$$

4) Vypočet determinantu matice A:

$$\text{DET} = -0,1 \quad (4.2.5 - 9)$$

5) Výsledky pro RP 2 jsou následující:

| toky složek | n10;2 | n10;3 | n10;4 | n10;5 | n10;6 | n11;2 | n11;3 | n11;4 | n11;5 | n11;6 |
|-------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| kmol/h | 530 | 634 | 7305 | 1891 | 363 | 384 | 341 | 7305 | 1891 | 656 |

Obrázek 4.2.5 – 2: Výsledky řešení soustavy rovnic pro RP 2.

4.2.6 Výměník E8408.

V tomto výměníku také probíhá ochlazení z 290 °C na 160 °C a pokračuje reakce r3:



| proud složka toky složek | A | | | | | | | | | | | r3 | B |
|--|--------|--------|--------|--------|--------|-------|-------|-------|-------|-------|----|----|-----|
| | 11 | 11 | 11 | 11 | 11 | 11 | 13 | 13 | 13 | 13 | 13 | | |
| | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | | | |
| | n11;2 | n11;3 | n11;4 | n11;5 | n11;6 | n13;2 | n13;3 | n13;4 | n13;5 | n13;6 | | | |
| E8408 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 |
| E8408 | 3 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | -2 | 0 |
| E8408 | 4 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| E8408 | 5 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 |
| E8408 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 2 | 0 |
| Referenční proud | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 341 |
| Konverze NO | 0 | 0,9795 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace O ₂ v proudu 11 | -0,964 | 0,036 | 0,036 | 0,036 | 0,036 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace N ₂ v proudu 11 | 0,691 | 0,691 | -0,309 | 0,691 | 0,691 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace H ₂ O v proudu 11 | 0,179 | 0,179 | 0,179 | -0,821 | 0,179 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace NO ₂ v proudu 11 | 0,062 | 0,062 | 0,062 | 0,062 | -0,938 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

Obrázek 4.2.6 – 1: Matice koeficientů A a vektor pravých stran B soustavy rovnic pro E8408.



Dodatečné podmínky:

- 1) Referenční proud – tok NO v proudu 11:

$$n_{11;3} = 341 \text{ kmol/h} \quad (4.2.6 - 2)$$

- 2) Koncentrace složek:

$$C_{11;2}^n = \frac{n_{11;2}}{\sum n_{11}} = 0,036 \quad (4.2.6 - 3)$$

$$C_{11;4}^n = \frac{n_{11;4}}{\sum n_{11}} = 0,691 \quad (4.2.6 - 4)$$

$$C_{11;5}^n = \frac{n_{11;5}}{\sum n_{11}} = 0,179 \quad (4.2.6 - 5)$$

$$C_{11;6}^n = \frac{n_{11;6}}{\sum n_{11}} = 0,062 \quad (4.2.6 - 6)$$

$$\sum_{k=2}^6 n_{11;k} = n_{11;2} + n_{11;3} + n_{11;4} + n_{11;5} + n_{11;6} = 10723 \text{ kmol/h} \quad (4.2.6 - 7)$$

- 3) Konverze NO:

$$X = \frac{n_{13;3} - n_{11;3}}{n_{11;3}} = 0,0205 \quad (4.2.6 - 8)$$

- 4) Vypočet determinantu matice A:

$$\text{DET} = -0,064 \quad (4.2.6 - 9)$$

- 5) Výsledky pro E8408 jsou v následující tabulce:

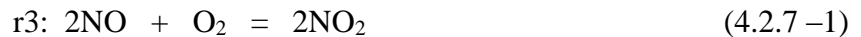
| toky složek | n11;2 | n11;3 | n11;4 | n11;5 | n11;6 | n13;2 | n13;3 | n13;4 | n13;5 | n13;6 |
|-------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| kmol/h | 384 | 341 | 7305 | 1891 | 656 | 381 | 334 | 7305 | 1891 | 663 |

Obrázek 4.2.5 – 2: Výsledky řešení soustavy rovnic pro E8408.



4.2.7 Trubkový reaktor RP3.

V tomto aparátu probíhají reakce r3 a r4 při teplotě 160 °C:



| proud složka | A | 13 | 13 | 13 | 13 | 13 | 13 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | r3 | r4 | B | |
|--|---|--------|--------|--------|--------|--------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|----|----|-----|
| | | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | | | | 7 |
| toky složek | | n13;2 | n13;3 | n13;4 | n13;5 | n13;6 | n13;7 | n15;2 | n15;3 | n15;4 | n15;5 | n15;6 | n15;7 | | | |
| RP3 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 |
| RP3 | 3 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -2 | 0 | 0 |
| RP3 | 4 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| RP3 | 5 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| RP3 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 2 | -2 | 0 |
| RP3 | 7 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 1 | 0 |
| Referenční proud | | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 334 |
| Koncentrace O ₂ v proudě 13 | | -0,964 | 0,036 | 0,036 | 0,036 | 0,036 | 0,036 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace NO v proudě 13 | | 0,032 | -0,968 | 0,032 | 0,032 | 0,032 | 0,032 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace N ₂ v proudě 13 | | 0,691 | 0,691 | -0,309 | 0,691 | 0,691 | 0,691 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace H ₂ O v proudě 13 | | 0,179 | 0,179 | 0,179 | -0,821 | 0,179 | 0,179 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace NO ₂ v proudě 13 | | 0,063 | 0,063 | 0,063 | 0,063 | -0,937 | 0,063 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Konverze NO ₂ | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0,9966 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Konverze NO | | 0 | 0,903 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

Obrázek 4.2.7 – 1: Matice koeficientů A a vektor pravých stran B soustavy rovnic pro RP3.

Dodatečné podmínky

- 1) Referenční proud – tok NO v proudě 13:

$$n_{13;3} = 334 \text{ kmol/h} \quad (4.2.7 - 3)$$

- 2) Koncentrace složek

$$C_{13;2}^n = \frac{n_{13;2}}{\sum n_{13}} = 0,036 \quad (4.2.7 - 4)$$

$$C_{13;3}^n = \frac{n_{13;3}}{\sum n_{13}} = 0,032 \quad (4.2.7 - 5)$$

$$C_{13;4}^n = \frac{n_{13;4}}{\sum n_{13}} = 0,691 \quad (4.2.7 - 6)$$

$$C_{13;5}^n = \frac{n_{13;5}}{\sum n_{13}} = 0,179 \quad (4.2.7 - 7)$$

$$C_{13;6}^n = \frac{n_{13;6}}{\sum n_{13}} = 0,063 \quad (4.2.7 - 8)$$

$$\sum_{k=2}^7 n_{13;k} = n_{13;2} + n_{13;3} + n_{13;4} + n_{13;5} + n_{13;6} + n_{13;7} = 10574 \text{ kmol/h}, \quad (4.2.7 - 9)$$



3) Konverze NO a konverze NO₂:

$$X_{NO} = \frac{n_{15;3} - n_{13;3}}{n_{13;3}} = 0,097 \quad (4.2.7 - 10)$$

$$X_{NO_2} = \frac{n_{15;6} - n_{13;6}}{n_{13;6}} = 0,034 \quad (4.2.7 - 11)$$

4) Vypočet determinantu matice A:

$$DET = - 0,1264 \quad (4.2.7 - 12)$$

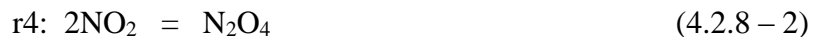
5) Výsledky pro RP3 jsou v následující tabulce:

| toky složek | n13;2 | n13;3 | n13;4 | n13;5 | n13;6 | n13;7 | n15;2 | n15;3 | n15;4 | n15;5 | n15;6 | n15;7 |
|-------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| kmol/h | 381 | 334 | 7305 | 1891 | 663 | 0 | 364 | 302 | 7305 | 1891 | 661 | 17 |

Obrázek 4.2.7 – 2: Výsledky řešení soustavy rovnic pro RP3.

4.2.8 Kondenzační výměník E8418.

Kondenzační výměník je výpočtově složité zařízení. Vstupující plyny se ochlazují na kondenzační teplotu a stékají po stěně směrem dolů. Přitom se v kapalném filmu rozpouští N₂O₄ vznikající v plynné fázi reakcí r4. V kapalném filmu dochází k reakci r5 a vznikající NO se desorbuje zpět do plynu nad kapalným filmem. Produktem této reakce je slabá HNO₃. Tento proces je simulován na dvou aparátech a to na E8414 a separátoru S2.



| proud | složka | A | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 16 | 16 | 16 | 16 | 16 | 16 | r3 | r4 | r5 | B | |
|--|--------|---|--------|--------|--------|--------|--------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|----|----|------|------|
| | | | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | | | | | 8 |
| toky složek | | | n15;2 | n15;3 | n15;4 | n15;5 | n15;6 | n15;7 | n15;8 | n16;2 | n16;3 | n16;4 | n16;5 | n16;6 | n16;7 | n16;8 | | | | |
| E8418 | 2 | | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | |
| E8418 | 3 | | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -2 | 0 | 1 | |
| E8418 | 4 | | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| E8418 | 5 | | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | |
| E8418 | 6 | | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 2 | -2 | 0 | |
| E8418 | 7 | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 1 | -1,5 | |
| E8418 | 8 | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 2 | |
| Referenční proud | | | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 7305 |
| Koncentrace O ₂ v proudě 15 | | | -0,965 | 0,035 | 0,035 | 0,035 | 0,035 | 0,035 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace NO v proudě 15 | | | 0,029 | -0,971 | 0,029 | 0,029 | 0,029 | 0,029 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace N ₂ v proudě 15 | | | 0,693 | 0,693 | -0,307 | 0,693 | 0,693 | 0,693 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace H ₂ O v proudě 15 | | | 0,179 | 0,179 | 0,179 | -0,821 | 0,179 | 0,179 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace NO ₂ v proudě 15 | | | 0,063 | 0,063 | 0,063 | 0,063 | -0,937 | 0,063 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace HNO ₃ v proudě 15 | | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Konverze NO | | | 0 | 1,4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Konverze NO ₂ | | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0,3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Konverze N ₂ O ₄ | | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0,1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

Obrázek 4.2.8-1: Matice koeficientů A a vektor pravých stran B soustavy rovnic pro E8418.

Dodatečné podmínky:



- 1) Referenční proud – tok N
- ₂
- v proudu 15:

$$n_{15;4} = 7305 \text{ kmol/h} \quad (4.2.8 - 4)$$

- 2) Koncentrace složek:

$$C_{15;2}^n = \frac{n_{15;2}}{\sum n_{15}} = 0,035 \quad (4.2.8 - 5)$$

$$C_{15;3}^n = \frac{n_{15;3}}{\sum n_{15}} = 0,029 \quad (4.2.8 - 6)$$

$$C_{15;4}^n = \frac{n_{15;4}}{\sum n_{15}} = 0,693 \quad (4.2.8 - 7)$$

$$C_{15;5}^n = \frac{n_{15;5}}{\sum n_{15}} = 0,179 \quad (4.2.8 - 8)$$

$$C_{15;6}^n = \frac{n_{15;6}}{\sum n_{15}} = 0,063 \quad (4.2.8 - 9)$$

$$\sum_{k=2}^7 n_{15;k} = n_{15;2} + n_{15;3} + n_{15;4} + n_{15;5} + n_{15;6} + n_{15;7} + n_{15;8} = 10540 \text{ kmol/h}, \quad (4.2.8 - 10)$$

- 3) Konverze NO, konverze NO
- ₂
- , konverze N
- ₂
- O
- ₄
- :

$$X_{\text{NO}} = \frac{2n_{16;3} - n_{15;3}}{n_{15;3}} = 0,60 \quad (4.2.8 - 11)$$

$$X_{\text{NO}_2} = \frac{n_{16;6} - n_{15;6}}{n_{15;6}} = 0,67 \quad (4.2.8 - 12)$$

$$X_{\text{N}_2\text{O}_4} = \frac{n_{16;7} - n_{15;7}}{n_{15;7}} = 0,90 \quad (4.2.8 - 13)$$

Při výpočtu konverze NO je nutné uvažovat, že v aparátu běží dvě reakce, přičemž NO je výchozí složkou v reakci r₃, která probíhá v plynné fázi, kdežto v reakci r₅ probíhající v kapalně fázi je NO produktem, který se z kapaliny uvolňuje a desorbuje se zpět do plynu, kde opětovně reaguje.

- 4) Vypočet determinantu matice A:

$$\text{DET} = 2,603 \quad (4.2.8 - 14)$$

- 5) Výsledky pro E8418 jsou v následující tabulce:

| tok složky | n _{15;2} | n _{15;3} | n _{15;4} | n _{15;5} | n _{15;6} | n _{15;7} | n _{15;8} | n _{16;2} | n _{16;3} | n _{16;4} | n _{16;5} | n _{16;6} | n _{16;7} | n _{16;8} |
|------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|
| kmol/h | 364 | 302 | 7305 | 1891 | 661 | 17 | 0 | 337 | 422 | 7305 | 1714 | 218 | 2 | 353 |

Obrázek 4.2.8 – 2: Výsledky řešení soustavy rovnic pro E8418.



4.2.9 Separator S2

V tomto fiktivním aparátu pokračují reakce r3 a r4 a separace fází. n_{17;9} je označení toku kapalné vody



| proud | | | 16 | 16 | 16 | 16 | 16 | 16 | 16 | 17 | 17 | 33 | 33 | 33 | 33 | 33 | 33 | r3 | r4 | B |
|--|---|--|--------|--------|--------|--------|--------|-------|--------|--------|-------|-------|-------|-------|--------|-------|-------|----|----|------|
| složka | A | | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 8 | 9 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | | | |
| toky složek | | | n16;2 | n16;3 | n16;4 | n16;5 | n16;6 | n16;7 | n16;8 | n17;8 | n17;9 | n33;2 | n33;3 | n33;4 | n33;5 | n33;6 | n33;7 | | | |
| S2 | 2 | | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 |
| S2 | 3 | | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -2 | 0 | 0 |
| S2 | 4 | | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| S2 | 5 | | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 |
| S2 | 6 | | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 2 | 0 | 0 |
| S2 | 7 | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 |
| S2 | 8 | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| S2 | 9 | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 |
| Referenční proud | | | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 7305 |
| Koncentrace O ₂ v proudě 16 | | | -0,967 | 0,033 | 0,033 | 0,033 | 0,033 | 0,033 | 0,033 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace NO v proudě 16 | | | 0,041 | -0,959 | 0,041 | 0,041 | 0,041 | 0,041 | 0,041 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace N ₂ v proudě 16 | | | 0,706 | 0,706 | -0,294 | 0,706 | 0,706 | 0,706 | 0,706 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace H ₂ O v proudě 16 | | | 0,166 | 0,166 | 0,166 | -0,834 | 0,166 | 0,166 | 0,166 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace NO ₂ v proudě 16 | | | 0,021 | 0,021 | 0,021 | 0,021 | -0,979 | 0,021 | 0,021 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Koncentrace HNO ₃ v proudě 16 | | | 0,034 | 0,034 | 0,034 | 0,034 | 0,034 | 0,034 | -0,966 | -0,829 | 0,171 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| Konverze NO | | | 0 | 0,930 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| tenze par | | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0,015 | 0,015 | 0,015 | -0,985 | 0,015 | 0,015 | 0 | 0 | |

Obrázek 4.2.9 – 1: Matice koeficientů A a vektor pravých stran B soustavy rovnic pro S2.

Dodatečné podmínky:

- 1) Referenční proud – tok N₂ v proudě 16:

$$n_{16;4} = 7305 \text{ kmol/h} \quad (4.2.9 - 3)$$

- 2) Koncentrace vstupujících složek:

$$C_{16;2}^n = \frac{n_{16;2}}{\sum n_{16}} = 0,032 \quad (4.2.9 - 4)$$

$$C_{16;3}^n = \frac{n_{16;3}}{\sum n_{16}} = 0,041 \quad (4.2.9 - 5)$$

$$C_{16;4}^n = \frac{n_{16;4}}{\sum n_{16}} = 0,706 \quad (4.2.9 - 6)$$

$$C_{16;5}^n = \frac{n_{16;5}}{\sum n_{16}} = 0,166 \quad (4.2.9 - 7)$$

$$C_{16;5}^n = \frac{n_{16;5}}{\sum n_{16}} = 0,166 \quad (4.2.9 - 8)$$

$$C_{16;6}^n = \frac{n_{16;6}}{\sum n_{16}} = 0,021 \quad (4.2.9 - 9)$$

$$C_{16;8}^n = \frac{n_{16;8}}{\sum n_{16}} = 0,034 \quad (4.2.9 - 10)$$

$$\sum_{k=2}^7 n_{16;k} = n_{16;2} + n_{16;3} + n_{16;4} + n_{16;5} + n_{16;6} + n_{16;7} + n_{16;8} = 10351 \text{ kmol/h}, \quad (4.2.9 - 11)$$



Z koncentrací vystupujících plynných složek v proudu 33 bude zadán pouze molový podíl vody $C_{16;8}^n=0,015$. Ten se vypočte z rovnováhy HNO₃ - H₂O pro koncentraci slabé kyseliny $C_{16;8}^n = 0,17$. Tento údaj byl převzat ze soukromého sdělení prof. Ditlovi z TU Ivanovo.

3) Konverze NO:

$$X_{NO} = \frac{2n_{33;3} - n_{16;3}}{n_{16;3}} = 0,07 \quad (4.2.9 - 12)$$

Při výpočtu konverze NO je nutné uvažovat, že v aparátu běží dvě reakce, jejíž produktem je NO.

4) Vypočet determinantu matice A:

$$DET = - 2,538 \quad (4.2.9 - 13)$$

5) Výsledky řešení:

| tok složky | n16;2 | n16;3 | n16;4 | n16;5 | n16;6 | n16;7 | n16;8 | n17;8 | n17,9 | n33;2 | n33;3 | n33;4 | n33;5 | n33;6 | n33;7 |
|------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| kmol/h | 336 | 422 | 7305 | 1714 | 218 | 14 | 343 | 343 | 1588 | 321 | 393 | 7305 | 126 | 247 | 14 |

Obrázek 4.2.8 – 2: Výsledky řešení soustavy rovnic pro S2.

5. Porovnání vypočtených a dostupných ověřených dat.

V následující tabulce je shrnuta část dat, které byly vypočtené a data, které jsem získal od vedoucího své diplomové práce. Je patrné, že se od sebe moc neliší. Toky jsou uvedené v [kmol/h].

| | | 3 | 8 | 10 | 11 | 13 | 15 | 16 | 33 |
|----------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| WÝPOČTENÁ DATA | NH3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| | O2 | 712 | 559 | 530 | 384 | 381 | 364 | 337 | 321 |
| | NO | 997 | 691 | 634 | 341 | 334 | 302 | 422 | 393 |
| | N2 | 7305 | 7305 | 7305 | 7305 | 7305 | 7305 | 7305 | 7305 |
| | H2O | 1891 | 1891 | 1891 | 1891 | 1891 | 1891 | 1714 | 126 |
| | NO2 | 0 | 306 | 363 | 656 | 663 | 661 | 218 | 247 |
| | N2O4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 17 | 2 | 14 |
| | HNO3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 353 | 0 |
| OVĚŘENÁ DATA | NH3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| | O2 | 712 | 557 | 529 | 383 | 380 | 364 | 316 | 293 |
| | NO | 997 | 688 | 632 | 340 | 333 | 301 | 350 | 305 |
| | N2 | 7537 | 7537 | 7537 | 7537 | 7537 | 7537 | 7537 | 7537 |
| | H2O | 1657 | 1657 | 1657 | 1657 | 1657 | 1657 | 1511 | 127 |
| | NO2 | 0 | 309 | 365 | 657 | 664 | 694 | 225 | 318 |
| | N2O4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 51 | 42 |
| | HNO3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 291 | 0 |

Tabulka 5 – 1. Porovnání dat v [kmol/h].



6. Závěry

Hlavní výsledky mé diplomové práce lze shrnout takto:

1. Zpracoval jsem přednášky prof. Ditla do pedagogického textu pro výuku simulaci výrobních linek. Výukový text je v ruském jazyce a obsahuje mnou navržená doplnění pro snadnější pochopení problematiky.
2. Stejným způsobem byly zpracovány výukové příklady k osvojení metodiky simulace – viz Příloha 2
3. Výsledky, uvedené v bodech 1 a 2 jsem přednesl na mezinárodní konferenci v Krakově a na konferenci, konané v rámci grantu seskupit na Vysoké škole báňské — Technické univerzitě v Ostravě. Referáty byly kladně přijaty.
4. Osvojenou problematiku jsem aplikoval na výpočtech linky pro výrobu kyseliny dusičné o výkonu 660 MTPD a hmotové koncentraci 68%.
5. Hlavní pozornost jsem soustředil na výpočet jednotlivých vybraných aparátů.
6. Vypočtené výsledky byly porovnány s ověřenými daty, která mi poskytl vedoucí práce. Obojí data vykazovala dobrou shodu, což prokázalo možnost simulovat linku na výrobu HNO_3 uvedenou metodikou v EXCELU.
7. Řešení absorpční kolony se zatím nepodařilo touto metodikou provést z důvodu komplikovanosti probíhajících reakcí. Z tohoto důvodu nebylo možné dokončit ani simulační model celé linky.

V Praze 27. 01. 2017



7. Požité zdroje:

- 1) Spravočník chimika – autor Nikosky B.P.
- 2) Soikromé materialy a stúdiijní materialy – prof. Ing, Pavel DITL,DrSc

8. Použité jednotky:

[°C] - stupně celsia

[% hm] – hmotnostní podíl

[kmol/h] – kilomol za hodinu