

LLOGARITJA E BILANCIT TË MATERIES DHE ENERGJISË PËR
PROCESET ME REAKSION KIMIK

TEMA PËR GRADËN BACHELOR I SHKENCËS NË INXHINIERI
KIMIKE

NGA

ENEIDA BEKA



UNIVERSITETI "ISA BOLETINI"
FAKULTETI I TEKNOLOGJISË USHQIMORE
DEPARTAMENTI I TEKNOLOGJISË,
MITROVICË

PRILL, 2024

CALCULATION OF MATTER AND ENERGY BALANCE FOR
PROCESSES WITH CHEMICAL REACTION

THESIS FOR THE BACHELOR'S DEGREE OF SCIENCE IN
CHEMICAL ENGINEERING

BY

ENEIDA BEKA



UNIVERSITY "ISA BOLETINI"
FACULTY OF FOOD TECHNOLOGY
DEPARTMENT OF TECHNOLOGY,
MITROVICË

APRIL, 2024

LLOGARITJA E BILANCIT TË MATERIES DHE ENERGJISË PËR PROCESAT
ME REAKSION KIMIK

TEMA E PREZANTUAR

NGA

ENEIDA BEKA

NË DEPARTAMENTIN E TEKNOLOGJISË

PËR TË FITUAR GRADËN BACHELOR I SHKENCËS NË INXHINIERI KIMIKE

PRILL, 2024



UNIVERSITETI "ISA BOLETINI"
FAKULTETI I TEKNOLOGJISË USHQIMORE
DEPARTAMENTI I TEKNOLOGJISË
MITROVICË

Aprovuar prej komisionit:

_____ Kryetar
Ismet Mulliqi, Prof. asoc. dr.

_____ Mentor
Mehush Aliu, Prof. asoc. dr.

_____ Anëtar
Faruk Hajrizi, Prof. ass. dr.

Data e aprovimit: _____

—

CALCULATION OF MATTER AND ENERGY BALANCE FOR
PROCESSES WITH CHEMICAL REACTION

A THESIS PRESENTED

BY

ENEIDA BEKA

IN DEPARTMENT OF TECHNOLOGY

THESIS FOR THE BACHELOR'S DEGREE OF SCIENCE IN CHEMICAL
ENGINEERING

APRIL, 2024



UNIVERSITY "ISA BOLETINI"
FACULTY OF FOOD TECHNOLOGY
DEPARTMENT OF TECHNOLOGY
MITROVICA

Approved from Commission:

_____ Chairman
Ismet Mulliqi, Prof. asoc. dr.

_____ Mentor
Mehush Aliu, Prof. asoc. dr.

_____ Member
Faruk Hajrizi, Prof. ass. dr.

Date of approval: _____

FALËNDERIM

Një punim diplome është punim akademik, i cili ka një qëllim të caktuar dhe përmes të cilit studenti përfundon studimet në një nivel të caktuar, e në rastin tim studimet Bachelor. Për të realizuar një temë diplome duhet kohë dhe mund, prandaj mirënjohje dhe falënderim të veçantë shpreh për profesorin Mehush Aliu për vëmendjen që më ka përkushtuar, për konsulencën e nevojshme, kohën dhe suportin që ka patur ndaj meje për kontributin e tij në finalizimin e punimit tim të diplomës.

Një falënderim të veçantë për familjen time që më përkrahën më mbështetën dhe inkurajuan që studimet e mia të vazhdonin më tej duke më krijuar të gjitha kushtet e nevojshme dhe duke më ofruar ndihmën e tyre morale dhe materiale.

ABSTRAKTI I PUNIMIT

LLOGARITJA E BILANCIT TË MATERIES DHE ENERGJISË PËR PROCESET ME REAKSION KIMIK

Nga

Eneida Beka

Bachelor i shkencës në Inxhinieri Kimike

Fakulteti i Teknologjisë Ushqimore, Prill, 2024

Prof. asoc. dr. Mehush Aliu

Qëllimi kryesor i llogaritjes së bilancit të materies dhe energjisë për proceset me reaksion kimik është të sigurojë që numri i atomeve të çdo elementi dhe shuma e energjisë para dhe pas reaksionit të përputhet, duke respektuar ligjet e mbajtjes së energjisë dhe materies në një sistem të mbyllur. Kjo ndihmon në kuptimin e saktësisë së reaksioneve kimike dhe në parashikimin e rezultateve të tyre.

Në një llogaritje të zgjeruar të bilancit të materies dhe energjisë për proceset me reaksion kimik përfshihen hapat e detajuar të analizës së reaksioneve kimike. Kjo përfshin identifikimin e produkteve të reaksionit, përcaktimin e koeficientëve të reaksionit për çdo substancë pjesëmarrëse, llogaritjen e masës së çdo elementi para dhe pas reaksionit, si dhe llogaritjen e energjisë së lirë të reaksionit. Gjithashtu, përfshihet analiza e shpejtësisë së reaksionit dhe sasisë së lëndës së reaksionit për të siguruar një kuptim të plotë të procesit kimik.

ABSTRACT OF THE THESIS

CALCULATION OF MATTER AND ENERGY BALANCE FOR PROCESSES WITH CHEMICAL REACTIONS

By

Eneida Beka

Bachelor of Science in Chemical Engineering

Faculty of Food Technology, Mitrovicë, 2024

Prof.Asoc.Dr. Mehush Aliu, Mentor

The main purpose of calculating the balance of matter and energy for processes with chemical reactions is to ensure that the number of atoms of each element and the sum of energy before and after the reaction match, respecting the laws of conservation of energy and matter in a closed system. This helps in understanding the accuracy of chemical reactions and predicting their outcomes.

In an extended calculation of matter and energy balance for processes involving chemical reactions, the detailed steps of chemical reaction analysis are included. This includes identifying the products of the reaction, determining the reaction coefficients for each participating substance, calculating the mass of each element before and after the reaction, and calculating the reaction freedom energy. Also, analysis of reaction rate and amount of reactant is included to provide a complete understanding of the chemical process.

PËRMBAJTJA

ABSTRAKTI I PUNIMIT.....	ii
ABSTRACT OF THE THESIS	iii
PËRMBAJTJA	iv
LISTA E FIGURAVE.....	v
KAPITULLI I.....	1
1. HYRJE	1
KAPITULLI II.....	3
2. HISTORIKU.....	3
2.1. Bilanci i materies dhe energjisë.....	4
2.2. Ligji i ruajtjes së masës dhe energjisë	4
2.3. Llojet e problemeve të bilancit material dhe llojet e energjisë.....	4
2.4. Bilanci material i procesit me reaksion kimik.....	7
2.5. Njësitë e proceseve.....	8
2.6. Bilanci material i specieve	9
2.7. Bilanci i specieve molekulare	11
2.8. Bilanci i specieve atomike	12
2.9. Bilanci i energjisë së proceseve me reaksion kimik	14
2.10. Bilanci i energjisë në proceset reaktive	19
2.11. Rregulla fazore e Gibbsit	20
2.12. Ligji i Raulit dhe ligji i Henrit.....	21
KAPITULLI III	22
3. METODOLOGJIA.....	22
KAPITULLI IV	32
4. DISKUTIMI I REZULTATEVE.....	32
KAPITULLI V	33
5. PËRFUNDIME.....	33
CONCLUSIONS	34
BIBLIOGRAFIA	35

LISTA E FIGURAVE

Figura 2.1: Reaktori për prodhimin e amoniakut.....	10
Figura 2.2: Bllok skema e dehidrogjenimit të etanit.....	11
Figura 2.3: Nxehtësia e bartur nga procesi i djegies në gjendje të qëndrueshme për reaksionin $C_{ng} + O_2(g) \rightarrow CO_2(g)$ me reaktantët dhe produktet në 25 ⁰ C dhe 1 atm.....	17
Figura 2.4. Klasifikimi i VLN dhe VUN për një lëndë djegëse në varësi nga gjendja e ujit që ekziston në system.....	18
Figura 3.1: Metodologjia e hulumtimit.....	22

KAPITULLI I

1. HYRJE

Bilancet materiale dhe energjitike janë shumë të rëndësishme në një industri. Balancat materiale janë thelbësore për kontrollin e përpunimit, veçanërisht në kontrollin e rendimenteve të produkteve. Te bilancet e para të materialeve përcaktohen në fazat eksploruese të një procesi të ri, të përmirësuara gjatë eksperimenteve pilot të impiantit kur procesi planifikohet dhe testohet, kontrollohet kur impianti vihet në punë dhe më pas rafinohet dhe mirëmbahet si instrument kontrolli si prodhim vazhdon. Kur ndodh ndonjë ndryshim në proces, balancat materiale duhet të përcaktohen përsëri.

Rritja e kostos së energjisë ka bërë që industrinë të shqyrtojë mjetet e reduktimit të konsumit të energjisë në përpunim. Bilancet e energjisë përdoren në ekzaminimin e të ndryshimeve në fazat e një procesi, në të gjithë procesin dhe madje duke u shtrirë në të gjithë sistemin e prodhimit nga lënda e parë deri te produkti i përfunduar.

Balancat materiale dhe energjitike mund të jenë të thjeshta, ndonjëherë mund të jenë shumë të ndërlikuara, por qasja bazë është e përgjithshme. Përvojë në punën me sisteme më të thjeshta si individë. Operacionet e njësisë do të zhvillojnë lehtësinë për të shtrirë metodat në situatat më të ndërlikuara që do të lindin. Disponueshmëria në rritje e kompjuterëve ka bërë që kjo të jetë shumë e ndërlikuar bilancet e masës dhe energjisë mund të vendosen dhe manipulohen mjaft lehtë dhe për këtë arsye të përdoren në menaxhimin e përditshëm të procesit për të maksimizuar rendimentet e produktit dhe për të minimizuar kostot.

Bilanci i materisë përfshin monitorimin e hyrjeve, daljeve dhe akumulimit të materies në një sistem të mbyllur. Ndërsa, bilanci i energjisë nënvizon qëndrueshmërinë e energjisë në një sistem, duke monitoruar hyrjet, daljet dhe transformimet e energjisë në formë të ndryshme, siç janë energjia kinetike, potenciale, dhe energjia termike.

Këto dy koncepte përdoren për të analizuar dhe përshkruar proceset natyrore dhe industriale nga një perspektivë më holistike.

Bilanci i materies dhe i energjisë janë koncepte themelore në fushën e shkencës natyrore. Bilanci i materies përfshin mbajtjen e llogarisë së sasisë së materies në një sistem, ndërsa bilanci i energjisë përfshin llogaritjen e energjisë që hyjnë dhe dalin nga një sistem. Këto koncepte janë të rëndësishme për të kuptuar shkencën e proceseve natyrore dhe inxhinierinë.

Ka shumë shembuj të përdorimit të llogaritjeve në inxhinierinë kimike për të zgjidhur problemet praktike të prodhimit. [4]

KAPITULLI II

2. HISTORIKU

Zgjidhja e problemeve të bilancit material për procese të vazhdueshme në gjendje të qëndrueshme të çdo kompleksiteti dikur ishte shumë e vështirë. Nga natyra e tij, problemi është ai i zgjidhjes së një numri të madh ekuacionesh algjebrike të njëkohshme, shumë prej të cilave janë shumë jolineare. Përpara disponueshmërisë së kompjuterëve dhe softuerit të përshtatshëm, zgjidhja e modelit të bilancit të materialit për një proces kimik zakonisht kërkonte një ekip inxhinierësh kimikë duke përdorur rregullat e rrëshqitjes dhe duke shtuar makineritë ditë ose javë, nëse jo muaj. Dhe duke pasur parasysh kompleksitetin e problemit, gabimet ishin të zakonshme.

Metodat e përdorura në ato ditë për të zgjidhur problemet e bilancit material përshkruhen ku zakonisht një inxhinier filloi me specifikimet e procesit siç është prodhimi norma dhe cilësia e produktit dhe llogaritet mbrapsht gjatë procesit. Specifikimet e ndërmjetme do të përdoren si pikënisje shtesë për llogaritjet. Siç do të shihet më vonë në këto shënime, një qasje e tillë shkon kundër strukturës output-nga-input të procesit dhe mund të çojë në paqëndrueshmëri të rënda numerike.

Simulimi dinamik është një fushë që po zhvillohet më tej, veçanërisht në inxhinierinë kimike. Ndërsa simulimi në gjendje të qëndrueshme ka qenë një fokus tradicional, simulimi dinamik po merr një rëndësi të madhe për shkak të nevojës për kontroll të përmirësuar të procesit dhe për trajnimin e personelit operativ. Kompanitë po integrojnë gjithnjë e më shumë simulatorë dinamikë në linjat e tyre të produkteve për të përmbushur këto kërkesa të rritura. Kompani si ABB Simcon po ofrojnë gjithashtu simulatorë trajnimi për industrinë

e procesit për të ndihmuar në trajnimin e personelit në mjediset e simulimit me qëllim të përmirësimit të performancës dhe sigurisë së operacioneve.

2.1. Bilanci i materies dhe energjisë

Bilanci i materies është një koncept në fushën e inxhinierisë kimike dhe mjedisore që përdoret për të monitoruar dhe menaxhuar transferimin e materialeve në një sistem të caktuar. Kjo përfshin identifikimin, shqyrtimin dhe monitorimin e hyrjeve, daljeve dhe akumulimeve të materialeve në një proces të caktuar. Një bilanc materie korrekt do të tregojë se materialet hyjnë në sistem, dalin nga sistemi ose akumulohen në sistem, duke siguruar që analiza e sasisë së materies është e konsistent nëpër proces.

Bilanci i energjisë është një koncept themelor në shkencën e inxhinierisë dhe fizikës që përdoret për të analizuar transferimin e energjisë në një sistem të caktuar. Ky koncept përfshin monitorimin e hyrjeve, daljeve dhe akumulimeve të energjisë në një sistem. Në një sistem të qëndrueshëm, energjia nuk mund të krihet ose shuhet, por thjesht mund të transformohet nga një formë në tjetrën. Bilanci i energjisë siguron që energjia hyrëse dhe dalje është e konsistent dhe e qëndrueshme nëpër sistemin e analizuar

2.2. Ligji i ruajtjes së masës dhe energjisë

Ligji i ruajtjes së masës dhe energjisë thotë se masa dhe energjia nuk mund të krijohen dhe as të shkatërrohen. Mund të shndërrohet nga një formë në tjetrën. Pra, masa totale ose energjia e aplikuar në një proces mbetet e njëjtë. Nëse një kilogram tërë mango futet në tharëse, shumica e sasisë së pulpës së tharë dhe ujit të avulluar do të jetë një kilogram.

2.3. Llojet e problemeve të bilancit material dhe llojet e energjisë

Disa lloje të problemeve që mund të haseni në analizën e bilancit të materies përfshijnë:

1. Problemet e sasisë së materies-nëse ka gabime në matjet e sasisë së materies që hyjnë ose dalin nga një sistem, mund të çojë në një bilanc të pavlefshëm të materies.

2. Problemet e humbjeve të materies-në disa procese, humbjet e materies mund të mos jenë të evidentuara ose të kuptuara plotësisht, duke shkaktuar një mosgjendje të plotë të materies në bilanc.

3. Problemet e peshës ose vlerës së materies-nëse peshat ose vlerat e materies nuk janë të sakta, kjo mund të çojë në një gabim në llogaritjen e bilancit të materies.

4. Problemet e procesit të shkëputjes së materies-nëse procesi i shkëputjes së materies nuk është i plotësuar ose i dokumentuar saktësisht, kjo gjithashtu mund të ndikojë në saktësinë e bilancit të materies.

Përmirësimi i metodave të regjistrimit, monitorimit dhe llogaritjes së materies në një sistem është kyç për adresimin e këtyre problemeve në analizën e bilancit të materies.

Tani shohim edhe llojet e problemeve të balancës materiale që lindin në inxhinierinë kimike. Ekzistojnë katër lloje kryesore të problemeve:

- Modelet e bilancit të materialit të fletës së rrjedhës për proceset e vazhdueshme që funksionojnë në gjendje të qëndrueshme,

- Përzierja dhe përzierja e ekuilibrave të materialit,

- Bilancet e materialit të fletës së rrjedhës për proceset e gjendjes jo të qëndrueshme, të vazhdueshme ose grupore, dhe

- Analiza dhe rakordimi i të dhënave të procesit

Një fletë rrjedhjeje është një diagram skematik i një procesi i cili tregon në nivele të ndryshme detajesh pajisjet e përfshira dhe mënyrën se si ato janë të ndërlidhura nga tubacionet e procesit Bilanci i materialit të fletës së rrjedhës tregon shpejtësinë e rrjedhës dhe përbërjen e të gjitha rrjedhave që hyjnë dhe dalin nga çdo pajisje.

Përveç këtyre, problemet e parashikimit të performancës së procesit në bazë të të dhënave të disponueshme janë gjithashtu një sfidë e rëndësishme në analizën e bilancit material. Nëse të dhënat janë të gabuara ose të pasakta, atëherë vlerësimi i performancës së procesit mund të jetë i pavlefshëm. Është e rëndësishme të kemi të dhëna të sakta dhe të besueshme për të siguruar një analizë të saktë të performancës së procesit.

Për të përfunduar, analiza e bilancit material në industrinë kimike kërkon një përqasje të kujdesshme dhe vëmendje në monitorimin e proceseve, identifikimin e gabimeve të mundshme në të dhëna dhe korigjimin e tyre.

Duke kuptuar thellësisht proceset e vazhdueshme, përzierjet e përbërësve dhe parashikimin e performancës së procesit, mund të sigurojmë një analizë të saktë dhe të besueshme të performancës së industrisë kimike.

dhe të pavarura për të krahasuar. Kështu, në analizën e këtij lloji problemi të bilancit material, duhet të kemi një qasje të kujdesshme dhe të detajuar në të dhënat e disponueshme, si dhe të kryejmë verifikimin dhe korrigjimin e tyre në mënyrë që të sigurojmë një analizë të saktë dhe të besueshme të performancës së procesit në uzinë. Kjo kërkon një nivel të lartë të përqendrimit dhe kapacitetit analitik për të trajtuar problemet komplekse të cilat mund të dalin gjatë analizës së të dhënave të procesit në industrinë kimike

Llojet e energjisë

Nga fizika njihen këto forma të energjisë:

- a) Energjia potenciale e trupit duke patur në konsideratë pozicionin e tij në fushën e forcave;
- b) Energjia kinetike, është energjia që e posedon trupi për shkak të lëvizjes së tij;
- c) Energjia e brendshme: energjia të cilën e posedojnë molekulat dhe e cila paraqet shumën e energjive të ndryshme siç janë: energjia kinetike E_k , energjia rrotulluese E_r , energjia e vibracionit E_v , energjia e lidhjes kimike E_e lidhjes, energjia e veprimit ndërmolekular E_m , energjia e elektroneve E_e (paraqet shumën e energjive të orbitaleve të zëna) dhe energjia relativistike $E = mc^2$.
- d) Energjia termike të cilën sistemi e posedon falë temperaturës së tij;
- e) Energjia kimike: energjia të cilën e posedon substanca me strukturën e saj;
- f) Energjia nukleare: energjia e bërthamës së atomit;
- g) Energjia elektrike: energjia e burimit të rrymës elektrike;
- h) Energjia mekanike: energjia e makinave dhe motorëve;
- i) Energjia sipërfaqësore: energjia e lidhur për sipërfaqen e sistemit. [3]

2.4. Bilanci material i procesit me reaksion kimik

Reaksionet kimike luajnë një rol shumë të rëndësishëm në procesin e prodhimit. Për dizajnimin e paisjeve të proceseve, konditat operuese siç janë presioni, temperatura, përbërja dhe rrjedhat duhet të jenë të njohura.

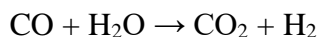
Bilanci material:

Shprehja e përgjithshme matematikore mund të shkruhet si në vijim:

Masa e përgjithshme që hyn në njësi = masa e përgjithshme e produkteve që dalin nga njësia

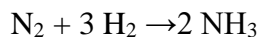
Duhet të theksohet se në reaksionet kimike masa e përgjithshme në hyrje mbetet konstante, por molet e përgjithshme mund të mbesin apo të mos mbesin konstante.

Për shembull, shqyrtojmë reaksionin:



Në këtë reaksion, mund të vërejmë se dy mole të reaktantve reagojnë me njëri tjetrin dhe prodhojnë poashtu dy mole, kështu që numri i moleve të reaktantve që hyjnë në reaksion është i barabartë me numrin e moleve të produkteve që dalin nga reaksioni.

Reaksioni i sintezës së amoniakut mund të shkruhet si në vijim:



Mund të vërehet se katër mole të reaktantve prodhojnë vetëm dy mole të amoniakut. Masa e përgjithshme e reaktantve që hyjnë dhe produkteve që dalin nga reaksioni janë të barabarta.

Për reaksionin e llojit të parë $1 \text{ mol CO} = 1 \text{ mol H}_2\text{O} = 1 \text{ mol H}_2 = 1 \text{ mol CO}_2$

Në mënyrë të ngjashme për reaksionin e dytë $1 \text{ mol N}_2 = 3 \text{ mol H}_2 = 2 \text{ mol NH}_3$

Në proceset ku përfshihen reaksionet kimike, masa e përgjithshme e komponimeve të ndryshme që hyjnë në reaksion është e barabartë me masën e përgjithshme të komponenteve të ndryshme që dalin nga reaksioni, por molet e komponenteve që hyjnë nuk është e nevojshme që të jenë të barabarta me molet e komponenteve që dalin.

Për ndonjë material të reaktantit, bilanci material mund të shkruhet si në vijim:

Materiali që hyn = materiali që ka reaguar – materiali i pa reaguar

Për produkte mund të shkruajmë:

Materiali që del = materiali i prodhuar me anë të reaksionit.

Bilanci material i procesit me reaksione kimike përfshin monitorimin e hyrjeve, daljeve dhe akumulimeve të materieve gjatë një reaksioni kimik. Kjo përfshin formulimin e shprehjeve të kushteve të bilancit material për secilën substancë të përfshirë në reaksion, duke siguruar që konsumimi dhe prodhimi i tyre janë në përputhje.

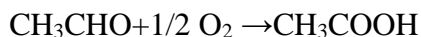
Kjo mund të përdoret për të llogaritur shpejtësinë e reaksionit, për të përcaktuar efikasitetin e procesit, dhe për të identifikuar çdo humbje ose tepkë në sistemin e reaksionit

2.5. Njësitë e proceseve

Një njësi e procesit është një hap në prodhim, në të cilin merr pjesë reaksioni kimik si për shembull oksidimi i toluenit në benzaldehid. Në vijim janë paraqitur disa shembuj të njësisve të proceseve: oksidimi, hidrogjenimi, hidroliza, neutralizimi, etj.

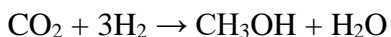
Oksidimi:

Oksidimi definohet në disa mënyra dhe një definicion më i thjeshtë i oksidimit është bashkëveprimi në mes të molekulës së oksigjenit dhe të gjitha substancave të ndryshme:



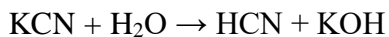
Hidrogjenimi:

Kjo njësi e procesit në mënyrë specifike i referohet reaksionit kimik të një substance me hidrogjenin molekular në prani të katalizatorit:



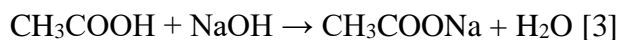
Hidroliza:

Kjo aplikohet në reaksionet në mes të ujit dhe substancave të ndryshme:



Neutralizimi:

Reaksioni që zhvillohet në mes të një acidi dhe një baze duke rezultuar në formimin e kripës dhe ujit quhet neutralizim:



Në bilancin material të proceseve me reaksion kimik, njesitë e përdorura për të shprehur sasisë e materies mund të jenë të ndryshme në varësi të situatës. Disa nga njesitë e përdorura zakonisht përfshijnë kilogramë (kg), gramë (g), mol, liter (L), metër kub (m^3), apo njesi të tjera të përshtatshme për sasinë e substancave të përfshira në reaksion. Përdorimi i njësive të saktë është i rëndësishëm për të siguruar që bilanci material është i saktë dhe i kuptueshëm.

2.6. Bilanci material i specieve

Bilanci material i moleve të species i mund të paraqitet si në vijim:

molet e i për t_2 në sistem – molet e i për t_1 në sistem = molet e i që hyjnë në sistem midis t_2 dhe t_1 – molet e i që dalin nga sistemi midis t_2 dhe t_1 + molet e i që gjenerohen me reaksion midis t_2 dhe t_1 – molet e i që konsumohen me reaksion midis t_2 dhe t_1 . Për të krijuar një ide të qartë, konsiderojmë një reaksion të mirënjohur të N_2 dhe H_2 për formimin e NH_3 .

Në figurën 2.1. është paraqitur procesi si një sistem i hapur në gjendje të qëndrueshme që operon për 1 minutë kështu që termat e akumulimit në janë zero në anën e majtë të këtij barazimi.

Të dhënat në figurën 2.1 janë dhënë në g mol. Duke shfrytëzuar barazimin 2.1. mund të llogarisim nëpërmjet një vlere në g mol për gjenerimin ose konsumimin për secilën nga tri speciet që marrin pjesë në reaksion:

NH_3 (gjenerimi): $6-0 = 6$ g mol

H_2 (konsumimi): $9-18 = -9$ g mol

N_2 (konsumimi): $12-15 = -3$ g mol

Siç e dimë nga stekiometria e barazimit të reaksioneve kimike të tre termat e gjenerimit dhe konsumimit janë të lidhura me barazimin e reaksionit.



Figura 2.1: Reaktori për prodhimin e amoniakut. [1]

Bilanci i tri specieve korrespondon me procesin në figurën 2.1.

Komponenta	Dalje	Hyrje	Gjenerimi ose konsumimi
i	n_i^{dalje}	$-n_i^{hyrje}$	$\nu_i \xi$
NH ₃	6	-0	2 (3) = 6
H ₂	9	-18	-3 (3) = -9
N ₂	12	-15	-1 (3) = -3

Me caktimin e vlerës për gjenerimin e amoniakut, mund të llogarisim vlerat e konsumimit të azotit dhe hidrogjenit duke përdorur barazimin kimik. Në përgjithësi, në qoftë se specifikoj më vlerën për gjenerimin ose konsumimin e një specie N në reaksion, do të jemi në gjendje të llogarisim vlerat e N-1 të specieve tjera nga barazimi i reaksionit kimik.

Termi $\nu_i \xi$ korrespondon me molet i që gjenerohen ose konsumohen. [1]

Bilanci material i specieve është një metodë për të monitoruar hyrjet, daljet dhe akumulimet e specieveve kimike (p.sh. elemente kimike, molekula të caktuara) gjatë një procesi të caktuar. Kjo përfshin sigurimin që sasia e çdo specie që hyjnë në një sistem është e barabartë me sasinë e çdo specie që dalin nga sistemi, duke përfshirë çdo akumulim në proces. Kjo ndihmon për të kuptuar se si ndryshojnë sasisë e secilës specie kimike gjatë një procesi specifik.

2.7. Bilanci i specieve molekulare

Në qoftë se bilanci i specieve molekulare përdoret për të përcaktuar variablat e panjohura të rrjedhave për një proces reaktiv, bilanci i specieve reaktive mund të përmbajë termat e gjenerimit dhe konsumimit.

Analiza e shkallëve të lirisë është si në vijim:

Numri i variablave të panjohura të emëtuara

+ numri i reaksioneve kimike të pavarura

- numri i specieve të pavarura molekulare të bilancit

- numri i barazimeve që lidhen me variablat e panjohura

= numri i shkallëve të lirisë

Ne do të shfrytëzojmë dehidrogjenimin e etanit (figura 2.2.), për të ilustruar procedurat e kërkuara.

Analiza e shkallëve të lirisë

2 variabla të panjohura të emëtuara (\dot{n}_1 , \dot{n}_2)

+ 1 reaksion kimik i pavarur

-3 specie molekulare të pavarura të bilancit (C_2H_6 , C_2H_4 , dhe H_2)

- 0 - numri i barazimeve që lidhen me variablat e panjohura

= 0 shkallë të lirisë

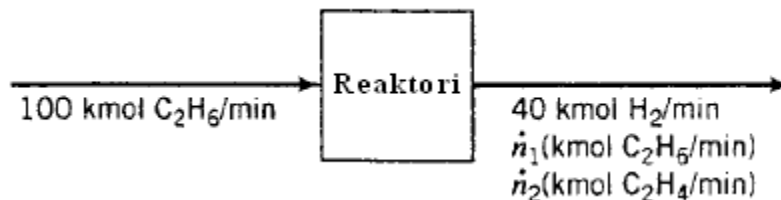


Figura 2.2: Bllok skema e dehidrogjenimit të etanit. [2]

Bilanci i hidrogjenit do të përdoret për të përcaktuar shpejtësinë e gjenerimit të hidrogjenit, ndërsa shpejtësitë e rrjedhës në dalje të etanit dhe etilenit do të llogariten nga bilanci i këtyre specieve. Termat e konsumimit të etanit dhe gjenerimit të etilenit janë përcaktuar në mënyrë direkte nga termi i gjenerimit të hidrogjenit.

Bilanci i H₂: gjenerimi = dalja

Gjenerimi i (H₂) (kmol H₂ gjeneruar/minutë) = 40 kmol H₂ /min

Bilanci i C₂H₆: hyrja = dalja + konsumimi

$$100 \frac{\text{kmol } C_2H_6}{\text{min}} = n_1 \left(\frac{\text{kmol } C_2H_6}{\text{min}} \right) + 40 \frac{\text{kmol } H_2 \text{ të gjeneruar}}{\text{min}} \cdot \frac{1 \text{ kmol } C_2H_6 \text{ të konsumuar}}{1 \text{ kmol } H_2 \text{ të gjeneruar}}$$

$$n_1 = 60 \text{ kmol } C_2H_6/\text{min}$$

Bilanci i C₂H₄: gjenerimi = dalja

$$40 \frac{\text{kmol } H_2 \text{ të gjeneruar}}{\text{min}} \cdot \frac{1 \text{ kmol } C_2H_4 \text{ të gjeneruar}}{1 \text{ kmol } H_2 \text{ të gjeneruar}} = n_2 \left(\frac{\text{kmol } C_2H_4}{\text{min}} \right)$$

$$n_2 = 40 \text{ kmol } C_2H_4/\text{min}$$

Bilanci i specieve molekulare është një proces i përdorur në kiminë e reaksioneve kimike për të siguruar që numri i atomëve të çdo elementi të jetë i barabartë në të dy anët e ekuacionit kimik. Për të bërë këtë, ju duhet të përdorni koeficientët e duhur për çdo molekulë në ekuacionin kimik. Në këtë mënyrë sigurohet që masa e përgjithshme e specieve në anët e majta dhe të djathta të jetë e barabartë.

2.8. Bilanci i specieve atomike

Numri i shkallëve të lirisë përcaktohet në mënyrë direkte me zbritjen e barazimeve nga të panjohurat e emërtuara.

numri i variablave të panjohura të emërtuara

-numri i specieve atomike të pavarura të bilancit

- numri i molekulave në speciet e pavarura jo reaktive të bilancit

- numri i ekuacioneve tjera që lidhen me variablat e panjohura

= numri i shkallëve të lirisë

Në procesin e dehidrogjenimit të etanit (figura 2.2) do të kemi:

2 variabla të panjohura të emërtuara

-2 specie atomike të pavarura të bilancit

- 0 molekula në speciet e pavarura jo reaktive të bilancit

- 0 ekuacione tjera që lidhen me variablat e panjohura

= 0 shkallë të lirisë

Në procesin e dehidrogjenimit të etanit, dy shpejtësitë e panjohura të rrjedhës do të përcaktohen nga bilanci i atomit të karbonit dhe atomit të hidrogjenit. [2]

Bilanci i karbonit: hyrja = dalja

$$\begin{array}{c} \frac{100 \text{ kmol C}_2\text{H}_6}{\text{min}} \quad \left| \quad \frac{2 \text{ kmol C}}{1 \text{ kmol C}_2\text{H}_6} \right. \\ = \frac{\dot{n}_1 (\text{kmol C}_2\text{H}_6)}{(\text{min})} \quad \left| \quad \frac{2 \text{ kmol C}}{1 \text{ kmol C}_2\text{H}_6} \right. + \frac{\dot{n}_2 (\text{kmol C}_2\text{H}_4)}{(\text{min})} \quad \left| \quad \frac{2 \text{ kmol C}}{1 \text{ kmol C}_2\text{H}_4} \right. \\ \Downarrow \\ 100 = \dot{n}_1 + \dot{n}_2 \end{array}$$

Bilanci i hidrogjenit: hyrja = dalja

$$\begin{array}{c} \frac{100 \text{ kmol C}_2\text{H}_6}{\text{min}} \quad \left| \quad \frac{6 \text{ kmol H}}{1 \text{ kmol C}_2\text{H}_6} \right. = \frac{40 \text{ kmol H}_2}{\text{min}} \quad \left| \quad \frac{2 \text{ kmol H}}{1 \text{ kmol H}_2} \right. \\ + \frac{\dot{n}_1 (\text{kmol C}_2\text{H}_6)}{(\text{min})} \quad \left| \quad \frac{6 \text{ kmol H}}{1 \text{ kmol C}_2\text{H}_6} \right. + \frac{\dot{n}_2 (\text{kmol C}_2\text{H}_4)}{(\text{min})} \quad \left| \quad \frac{4 \text{ kmol H}}{1 \text{ kmol C}_2\text{H}_4} \right. \\ \Downarrow \\ 600 \text{ mol H/min} = 80 \text{ mol H/min} + 6\dot{n}_1 + 4\dot{n}_2 \\ \dot{n}_1 = 60 \text{ kmol C}_2\text{H}_6/\text{min} \\ \dot{n}_2 = 40 \text{ kmol C}_2\text{H}_4/\text{min} \\ 100 = 60 + 40 \\ 600 = 80 + 6(60) + 4(40) \\ 600 = 80 + 360 + 160 \\ 600 = 600 \end{array}$$

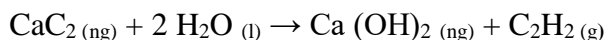
Bilanci i specieve atomike është një proces i përdorur në kiminë e reaksioneve kimike për të siguruar që numri i atomëve të çdo elementi të jetë i barabartë në të dy anët e ekuacionit kimik. Për të bërë këtë, ju duhet të përdorni koeficientët e duhur për çdo element në ekuacionin kimik, duke siguruar që numri i atomëve të secilit element të jetë i barabartë në të dy anët e ekuacionit. Kjo siguron që ligji i ruajtjes së masës dhe i ruajtjes së numrit të atomëve përmbahet në reaksionin kimik.

2.9. Bilanci i energjisë së proceseve me reaksion kimik

Bilancimi i energjisë në proceset me reaksione kimike është i rëndësishëm për të siguruar që energjia e hyrjes dhe daljes së reaksionit të jetë e barabartë. Në një reaksion kimik, energjia hyrëse në formë të energjisë termike ose energjisë së aktivizimit duhet të jetë e barabartë me energjinë dalëse, që mund të jetë në formë të energjisë së liruar si ngrohja apo energjia kimike e produkteve. Kjo mund të shpjegohet përmes ligjit të ruajtjes së energjisë, i cili thotë që energjia nuk shkatërrohet por thjesht transformohet nga një formë në tjetrën.

Nxehtësia e reaksionit

Konsiderojmë reaksionin në mes të karbidit të kalciumit në gjendje të ngurtë dhe ujit në gjendje të lëngët për të formuar hidroksidin e kalciumit në gjendje të ngurtë dhe acetilenin në gjendje të gazët:



Nxehtësia e reaksionit (ose entalpia e reaksionit)

$\Delta H_r (T, P)$ është ndryshimi i entalpisë për një proces në të cilin sasi të stekiometrike të reaktantëve në temperaturë T dhe presion P reagojnë tërësisht në një reaksion të vetëm për të formuar produktet në të njëjtën temperaturë dhe presion. Për shembull, nxehtësia e reaksionit të karbidit të kalciumit në 25⁰C dhe 1 atm është:

$$\Delta H_r (25^0\text{C}, 1 \text{ atm}) = -125,4 \text{ kJ/mol}$$

Barazimet e lartëshënuara së bashku tregojnë se 1 mol i karbidit të kalciumit në gjendje të ngurtë reagon tërësisht me 2 mol ujë të lëngët për të formuar 1 mol hidroksid kalciumi të ngurtë dhe 1 mol acetilen të gaztë, temperatura fillestare dhe përfundimtare për reaktantët dhe produktet është 25⁰C, si dhe presioni fillestar dhe përfundimtar është 1 atm për reaktantët dhe produktet.

Kështu pra,

$$H_{\text{produktet}} - H_{\text{reaktantët}} = -125,4 \text{ kJ}$$

Në qoftë se A është koeficienti stekiometrik i reaktantit apo produktit të reaksionit (pozitive është nëse A është një produkt, negative nëse ajo është një reaktant) dhe $n_{A,r}$ mole të A janë konsumuar ose gjeneruar në $T = T_0$ dhe $P = P_0$, kështu që ndryshimi i entalpisë është:

$$\Delta H = \frac{\Delta \hat{H}_r(T_0, P_0)}{|\nu_A|} n_{A,r}$$

Për një proces të vazhdueshëm, $n_{A,r}$ (mol) do të zëvendësohet me $n_{A,r}$ (mol/s),

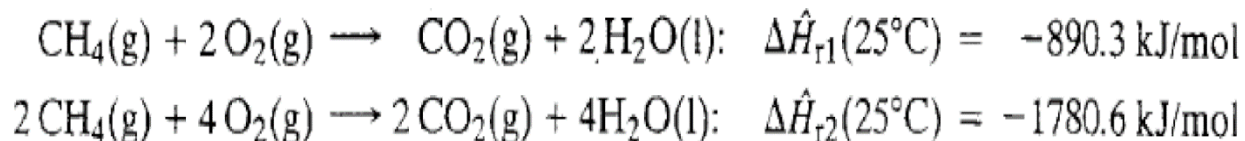
(mol) do të zëvendësohet me (mol/s), dhe ΔH (kJ) do të zëvendësohet me H (kJ/s).

Në vijim janë dhënë disa terma dhe vrojtime të rëndësishme në lidhje me nxehtësinë e reaksionit.

Në qoftë se $\Delta H_r(T, P)$ ka vlerë negative, reaksioni është ekzotermik në temperaturën T dhe presionin P , dhe në qoftë se $\Delta H_r(T, P)$ është pozitive reaksioni është endotermik në T dhe P .

Në presione të ulëta dhe mesatare, $\Delta H_r(T, P)$ është pothuajse i pavarur nga presioni.

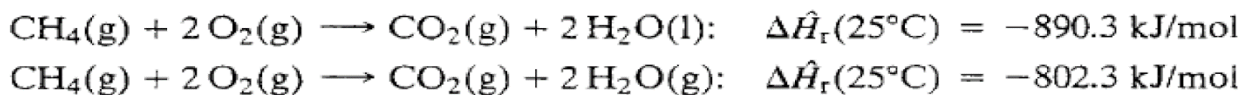
Vlera e nxehtësisë së një reaksioni varet nga shkruarja e barazimit stekiometrik, për shembull:



Nga këto dy barazime mund të shihet se me dyfishimin e sasisë së reaktantëve në kushtet e dhëna, dyfishohet entalpia e përgjithshme e reaktantëve dhe në mynyrë të njëjtë edhe për produktet.

Ndryshimi në mes të entalpisë së produkteve dhe reaktantëve në reaksionin e dytë duhet të jetë dyfish më e lartë se sa ndryshimi i entalpisë në reaksionin e parë.

Vlera e nxehtësisë së reaksionit varet nga gjendja agregate (gaz, lëngë apo ngurtë) të reaktantëve dhe produkteve, për shembull:



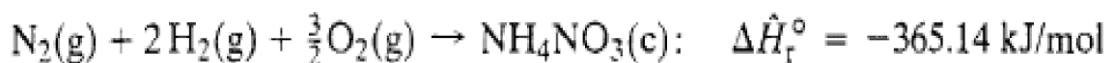
Ndryshimi i vetëm në mes të këtyre reaksioneve është se uji që formohet është një lëng në reaksionin e parë dhe avull në të dytin.

Nxehtësia standarde e reaksionit, ΔH_r^0 , është nxehtësia e reaksionit kur edhe reaktantët edhe produktet ndodhen në një temperaturë dhe presion specifik referent, zakonisht 25°C dhe 1 atm.

Reaksionet e formimit dhe nxehtësia e formimit

Reaksioni i formimit të një komponimi është reaksioni në të cilin komponimi formohet nga përbërësit e elementeve. Ndryshimi i entalpisë i cili shoqërohet me formimin e një mol komponimi në temperaturë dhe presion referent (zakonisht 25°C dhe 1 atm) është nxehtësia standarde e formimit të komponimit, ΔH_{f0} .

Për shembull ΔH_{f0} për nitratin e amonit kristalor është -365.14 kJ/mol .



Nxehtësia e formimit të një specie elementare (për shembull O_2) është zero.

Në qoftë se i është koeficienti stekiometrik i specieve i të cilat marrin pjesë në reaksion (+ për produktet, - për reaktantët) dhe H_{f0} është nxehtësia standarde e formimit të këtyre specieve, kështu që nxehtësia standarde e reaksionit është:

$$\Delta\hat{H}_r^\circ = \sum_i \nu_i \Delta\hat{H}_{fi}^\circ = \sum_{\text{produkteve}} |\nu_i| \Delta\hat{H}_{fi}^\circ - \sum_{\text{reaktantve}} |\nu_i| \Delta\hat{H}_{fi}^\circ$$

Për një reaksion ekzotermik, energjia e nevojshme për të mbajtur produktet e reaksionit së bashku është më e vogël se sa ajo që kërkohet për të mbajtur reaktantët së bashku, dhe nxehtësia del nga sistemi. E kundërta ndodh për një reaksion endotermik. Të rikujtojmë se vlerat e nxehtësisë standarde të formimit janë negative për reaksionet ekzotermike.

Për të përfshirë ndryshimet e energjisë të cilat shkaktohen nga një reaksion në bilancin e energjisë, ne do të përdorim një madhësi që quhet nxehtësia (entalpia) standarde e formimit, që shpesh quhet vetëm nxehtësia e formimit, ΔH_{f0} . Indeksi i sipërm ⁰ tregon gjendjen standarde të reaksionit në 25 °C dhe 1 atm, ndërsa indeksi i poshtëm *f* tregon “formimin”.

Nxehtësia standarde e formimit është emër i dhënë për ndryshimin e entalpisë së veçantë, të shoqëruar me formimin e një mol të komponimit nga elementet e tij përbërëse në gjendjen e tyre standarde.

Një shembull është ndryshimi i entalpisë, i cili ndodhë në reaksionin në mes të karbonit dhe oksigjenit për të formuar dioksidin e karbonit në 25 °C dhe 1 atm, siç është paraqitur në figurën 2.3.

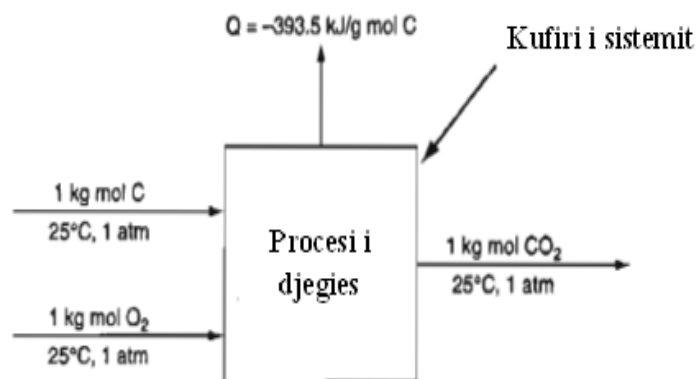


Figura 2.3: Nxehtësia e bartur nga procesi i djegies në gjendje të qëndrueshme për reaksionin



Nxehtësia e djegies

Një metodë e vjetër e llogaritjes së ndryshimit të entalpisë është kur reaksionet kimike ndodhin nëpërmes nxehtësisë (entalpisë) standarde të djegies, $\Delta\hat{H}_{dj}^0$.

Karakteristikat të cilat përdoren te nxehtësia standarde e djegies janë:

- Komponimi oksidohet me oksigjen ose me disa substanca të tjera në produkte CO_2 (g), H_2O (l), e kështu me radhë,
- Kushtet referente janë 25°C dhe 1 atm,
- Sasitë stekiometrike supozohet se reagojnë tërësisht,
- Nëse substancat tjera oksiduese janë prezente, siç janë S, N_2 ose Cl_2 , është e nevojshme të sigurohemi se gjendjet e produkteve janë specifikuar me kujdes dhe janë identike me kushtet (konditat) që përcaktojnë gjendjen standarde.

Llogaritja e nxehtësisë standarde të reaksionit duke përdorur nxehtësinë e djegies, shprehet me barazimin vijues:

$$\Delta H_r^0 = -\left(\sum_{\text{produkte}} n_i \Delta\hat{H}_{dj,i}^0 - \sum_{\text{reaktant}} n_i \Delta\hat{H}_{dj,i}^0 \right)$$

Për lëndët djegëse, siç janë qymyri ose vaji, vlera negative e nxehtësisë standarde të djegies është e njohur si vlera e nxehtësisë (ose kalorike) e lëndës djegëse.

Që të dyja edhe vlera e ulët e nxehtësisë (VUN) edhe vlera e lartë e nxehtësisë (VLN) ekzistojnë, në varësi nga ajo se nëse uji në produktet e djegies është në formë të avullit (për VUN) ose si lëng (për VLN).

$\text{VLN} = \text{VUN} + (n_{\text{H}_2\text{O(g)}} \text{ në produkt} \cdot \Delta\hat{H}_{av} \text{ në } 25^\circ\text{C} \text{ dhe } 1 \text{ atm}).$

Në figurën 2.4 është paraqitur klasifikimi i vlerës së lartë të nxehtësisë dhe vlerës së ulët të nxehtësisë për një lëndë djegëse në varësi nga gjendja e ujit.

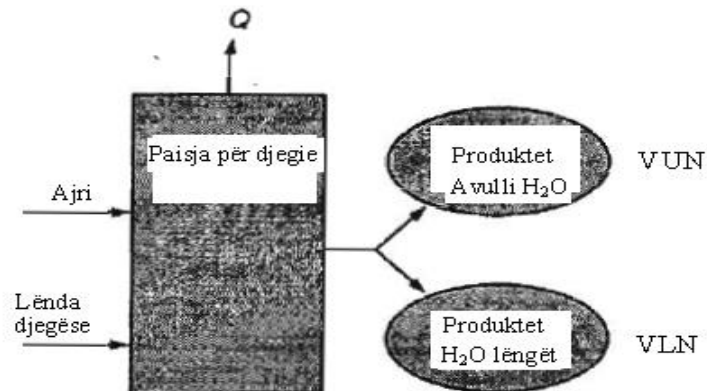


Figura 2.4. Klasifikimi i VLN dhe VUN për një lëndë djegëse në varësi nga gjendja e ujit që ekziston në sistem.

Për lëndët djegëse, siç janë qymyri ose vaji, vlera negative e nxehtësisë standarde të djegies është e njohur si vlera e nxehtësisë (ose kalorike) e lëndës djegëse.

Që të dyja edhe vlera e ulët e nxehtësisë (VUN) edhe vlera e lartë e nxehtësisë (VLN) ekzistojnë, në varësi nga ajo se nëse uji në produktet e djegies është në formë të avullit (për VUN) ose si lëng (për VLN). [3]

2.10. Bilanci i energjisë në proceset reaktive

Në proceset reaktive, siç janë reaksionet kimike, energjia ndryshon nga një formë në tjetrën. Bilancimi i energjisë është i rëndësishëm për të siguruar që energjia hyrëse të jetë e barabartë me energjinë dalëse. Në një sistem të mbyllur, ligji i ruajtjes së energjisë aplikohet, duke thënë se energjia nuk mund të shkatërrohet por thjesht transformohet. Prandaj, në një reaksion kimik, energjia e hyrjes duhet të jetë e barabartë me energjinë e dalëse, duke përfshirë energjinë termike, energjinë potenciale dhe energjinë kimike.

Për të llogaritur bilancin e energjisë në proces me reaksion kimik duhet të veprojme si në vijim:

- a) paraqitja dhe emërtimi i bllok skemës,
- b) përdorimi i bilancit material dhe lidhshmëria me barazimin e ekuilibrit për të përcaktuar sasi të disa komponenteve të rrjedhave apo shpejtësisë së rrjedhës.
- c) zgjedhim një gjendje referente për llogaritjen e entalpinë specifike (ose energjisë së brendshme)
- d) llogaritjet ΔH (ose ΔU ose ΔH), zëvendësohen vlerat e llogaritura në një formë të përshtatshme në barazimin e bilancit të energjisë dhe kompletimin e llogaritjeve të kërkuara.

2.11. Rregulla fazore e Gibbsit

Kur dy faza vijnë në kontakt me njëra tjetrën, një rishpërndarje e komponenteve të secilës fazë zë vend normalisht-speciet avullohen, kondenzohen, treten apo precipitojnë gjersa të arrihet një gjendje e ekuilibrit në të cilën temperaturat dhe presionet e të dy fazave janë të njëjta dhe përbërja e secilës fazë nuk ndryshon me kohën.

Supozojmë se kemi një enë të mbyllur e cila përmban tri komponente A, B dhe C të shpërndara në mes të fazës së gazët dhe të lëngët.

Variablat që përshkruajnë konditat e sistemit të një procesi ndahen në dy kategori: variablat ekstensive të cilat varen nga madhësia e sistemit dhe variablat intensive të cilat nuk varen nga madhësia e sistemit. Masa dhe vëllimi janë shembuj të variablave ekstensive, ndërsa variablat intensive përfshijnë temperaturën, presionin, dendësinë dhe vëllimin specifik, si dhe fraksionin masor dhe molar të komponenteve të sistemit individual të çdo faze.

Numri i variablave intensive të cilat mund të specifikohen në mënyrë të pavarur për një sistem në ekuilibër quhet shkalla e lirisë së sistemit.

Le të jetë:

Π -numri i fazave në një sistem në ekuilibër

c -numri i specieve kimike

SHL-shkallët e lirisë

Lidhshmëria në mes të Π , c dhe SHL ipet me rregullën fazore të Gibbsit. Në qoftë se nuk ndodhin reaksione në mes të komponenteve të sistemit, rregulla e fazave është:

$$\text{SHL} = 2 + c - \Pi$$

Kuptimi i termit shkallët e lirisë në rregullën fazore të Gibbsit është i ngjashëm me atë të analizës së shkallëve të lirisë. Në këtë analizë shkallët e lirisë përfaqësojnë numrin e variablave të procesit të cilat duhet të specifikohen për një sistem të procesit para se variablat e mbetura të mund të llogariten. Në rregullën fazore të Gibbsit, shkallët e lirisë janë të barabarta me numrin e variablave intensive të cilat duhet të specifikohen për një sistem në ekuilibër para se variablat intensive të mbetura të mund të llogariten.

2.12. Ligji i Raulit dhe ligji i Henrit

Në qoftë se aplikojmë rregullën fazore të Gibbsit te sistemet shumë komponentëshe gaz-lëng në ekuilibër, ne do të zbulojmë se përbërjet e dy fazave në temperaturën dhe presionin e dhënë janë të pavarura. Përbërja e njërës fazë është e specifikuar (në termat e fraksioneve molare, fraksioneve masore, përqendrimeve, ose për fazën e avullit, presionet parciale), përbërja e fazës tjetër në parim mund të përcaktohet nga vetitë fizike të komponenteve të sistemit.

Supozojmë se A është një substancë që ndodhet në sistemin gaz-lëng në ekuilibër në temperaturë

T dhe presion P. Dy shprehjet e thjeshta – ligji i Raulit dhe ligji i Henrit japin lidhshmëritë midis p_A , presionit parcial të A në fazën e gaztë, dhe X_A , fraksionit molar të A në fazën e lëngët.

Ligji i Raulit: $p_A = y_A P = X_A p_A(T)$

Ku p_A është tensioni i avullit i lëngut të pastër A në temperaturën T dhe y_A është fraksioni molar i A në fazën e gaztë.

Ligji i Raulit është një aproksimim i cili në mënyrë të përgjithshme është i vlefshëm kur x_A i afrohet vlerës 1, kur lëngu A është pothuajse i pastër.

Ligji i Henrit: $p_A = y_A P = X_A H_A(T)$

Ku H_A është konstanta e Henrit për A në një tretës specifik.

Ligji i Henrit në përgjithësi është i vlefshëm për tretësirat në të cilat x_A i ofrohet zeros (tretësirat e holluara të A) me kusht që A të mos shpërbashkohet, jonizohet, ose të reagojë në fazën e lëngët. Ky ligj aplikohet në tretësirat e gazeve që nuk kondenzohen. [3]

KAPITULLI III

3. METODOLOGJIA

Gjate këtij punimi fillimisht do bëhet një vështrim në literaturë adekuate për gjendjen në lëmi, literaturë kjo e cila do të na sigurojë njohuri të mjaftueshme për të vënë bazat e një hulumtimi që do rezultojë me përmbushjen e qëllimit të punimit. Gjatë punimit do të përdoren metodat e përshkrimit ku përmes kësaj metode do të përshkruajmë përkatësisht bilancin e materies dhe energjise të cilat do të na ndihmojnë në përshkrimin e gjendjes. Te dhënat e grumbulluara ngahulumtimi janë prezantuar të detyrave të cilat pas krahasimit me informacionet e mbledhura nga analiza e literaturës që kanë shërbyer si baze e mirë për nxjerrjen e konstatimeve.

Në bazë të gjeturave nga hulumtimi i literaturës dhe nga hulumtimi kuantitativ më tej janë ndërtuar disa konkluzione të cilat e mbështesin qëllimin dhe rezultatet e hulumtimit.

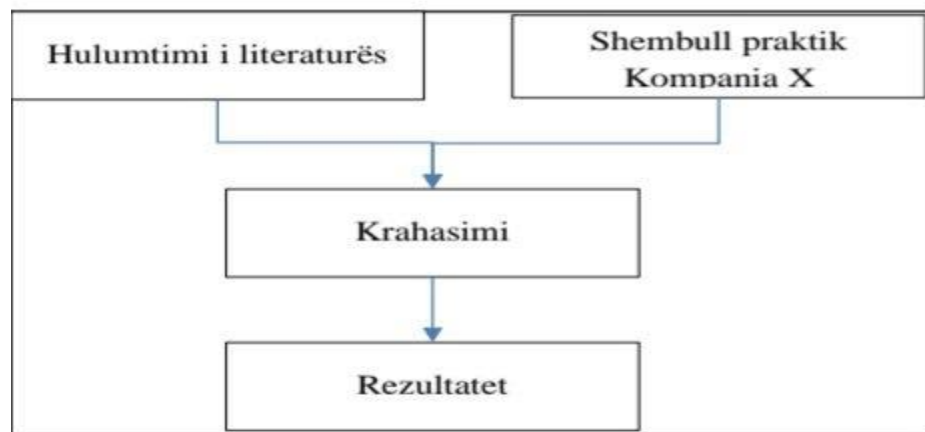


Figura 3.1: Metodologjia e hulumtimit.

Ecuria e bilancit material

Hapi i parë është t'i shiqojmë tri kategoritë bazike: materialet në hyrje, materialet në dalje dhe materialet e ruajtura.

Hapat tipik janë paraqitur në vijim:

- Baza dhe njësitë: Në mënyrë që të zhvillojmë një bilanc material, duhet të përcaktohet një bazë për bilancin si dhe për sistemin që analizohet.
- Paraqitni bllok diagramin: duhet të vendoset kufiri, ashtu që mund të përcaktohen rrymat e rrjedhës në hyrje dhe në dalje.
- Bëni analizën e shkallëve të lirisë: kjo ofron një mekanizëm për të kontrolluar nëse ekuacionet (barazimet) e bilancit material janë të zgjidhshme. Në mënyrë tipike ekuacionet janë të zgjidhshme në qoftë se shkalla e lirisë është 1. Shkalla e lirisë definohet sipas barazimit:

Shkallët e lirisë = Të panjohurat – Ekuacionet

Në qoftë se shkalla e lirisë është zero, atëherë problemi thuhet që është i përcaktuar drejtë-numri i të panjohurave është i barabartë me ekuacionet e pavarura dhe problemi mund të zgjidhet.

Rregull: Problemi është i zgjidhshëm, në qoftë se numri i ekuacioneve është i barabartë me numrin e të panjohurave, për shembull kur shkalla e lirisë është zero.

- Në qoftë se shkalla e lirisë është pozitive, atëherë numri i të panjohurave është më i madh se sa i ekuacioneve të pavarura dhe problemi thuhet të jetë i papërcaktuar.
- Në qoftë se shkalla e lirisë është negative, atëherë nevojiten informata shtesë para se të përcaktohet një zgjidhje unike.
- Në qoftë se shkalla e lirisë është 1, ju mund të supozoni një bazë të llogaritjeve.

Hapat e interpretimit të analizës së shkallës së lirisë:

- Paraqitni, plotësoni tërësisht dhe emërtoni bllok skemën.
- Numroni variablat e pavarura në bllokë skemë.
- Numroni ekuacionet e pavarura në lidhje me këtë.
- Shiqoni nëse numri i të panjohurave dhe ekuacioneve është i barabartë.

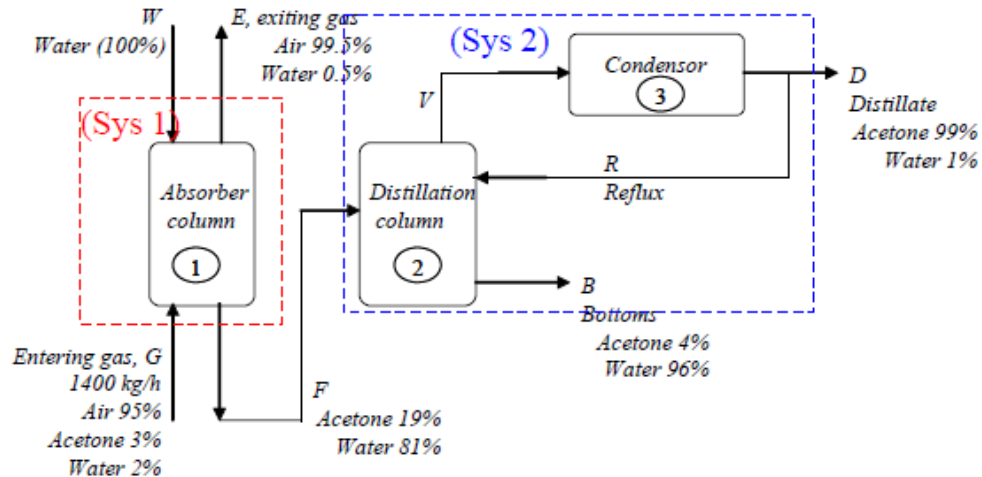
Strategjia e përgjithshme për zgjidhjen e problemeve të bilancit material

1. Lexoni dhe kuptoni formulimin e problemit.
2. Paraqitni skemën e procesit dhe specifikoni kufijtë e sistemit.
3. Paraqitni emërtimet për variablat e panjohura dhe vlerat për variablat e njohura në skemë.
4. Zgjedheni një bazë të llogaritjeve.
5. Përcaktoni numrin e të panjohurave.
6. Përcaktoni numrin e ekuacioneve të pavarura dhe analizën e shkallëve të lirisë.
7. Shkruani barazimet që do të zgjidhen.
8. Zgjidhni barazimet dhe llogaritni madhësitë e kërkuara.
9. Kontrolloni përgjigjet e juaja. [3]

Gjatë këtij hulumtimi i kemi zgjidhur 6 detyra.

Shembulli 1

Një proces me dy njësi absorbim-distilim është paraqitur në diagramin e mëposhtëm. Në kolonën e absorbimit, acetoni në përzierjen e gazit absorbohet nga uji i cili rrjedhë poshtë. Raporti i refluxit në kolonën distiluese është $R/D=1.51$. Përcaktoni shpejtësinë e rrjedhës në kg/h për W, E, F, B, D, R dhe V.



Zgjidhje

Bilanci i ajrit në kolonën absorbuese (sistemi 1):

$$G (0.95) + W (0) = E (0.995) + F (0)$$

$$1400 (0.95) + W (0) = E (0.995) + F (0)$$

$$E = 1400 \text{ kg/h} (0.95/0.995) = 1400 \text{ kg/h} 0.95477 = \mathbf{1336.7 \text{ kg/h}}$$

Bilanci i acetinit në kolonën e absorbimit (sistemi 1):

$$G (0.03) + W (0) = E (0) + F (0.19)$$

$$F = G (0.03)/0.19 = 1400 \text{ kg/h} (0.03)/0.19 = 1400 \text{ kg/h} 0.15789 = \mathbf{221.05 \text{ kg/h}}$$

Bilanci i ujit:

$$0.02 G + 1 W = 0.81 F + 0.005 E$$

$$0.02 1400 \text{ kg/h} + 1 W = 0.81 221.05 \text{ kg/h} + 0.005 1336.7 \text{ kg/h}$$

$$28 \text{ kg/h} + 1 W = 179.05 \text{ kg/h} + 6.68 \text{ kg/h}$$

$$28 \text{ kg/h} + 1 W = 185.73 \text{ kg/h}$$

$$W = 185.73 \text{ kg/h} - 28 \text{ kg/h} = \mathbf{157.75 \text{ kg/h}}$$

ose

$$W = E + F - G = 1336.7 \text{ kg/h} + 221.05 \text{ kg/h} - 1400 \text{ kg/h} = \mathbf{157.75 \text{ kg/h}}$$

Kontrollimi i bilancit material të përgjithshëm

$$\text{Hyrja} = G + W = (1400 + 157.75) \text{ kg/h} = 1557.7 \text{ kg/h}$$

$$\text{Dalja} = E + F = (1336.7 + 221.05) \text{ kg/h} = 1557.7 \text{ kg/h}$$

Bilanci në kolonën distiluese + kondenzator (sistemi 2):

$$F = B + D, \text{ nga kjo rrjedhë se}$$

$$B = F - D$$

$$F(0.19) = D(0.99) + B(0.04)$$

$$F(0.19) = D(0.99) + (F - D)(0.04)$$

$$F(0.19) = D(0.99) + 0.04F - 0.04D$$

$$F(0.19 - 0.04) = D(0.99 - 0.04)$$

$$D = F(0.19 - 0.04) / (0.99 - 0.04) = 221.5 \text{ kg/h} (0.15) / 0.95 = 221.05 \text{ kg/h} \cdot 0.15789 = \mathbf{34.90 \text{ kg/h}}$$

$$B = F - D = 221.05 \text{ kg/h} - 34.90 \text{ kg/h} = \mathbf{186.15 \text{ kg/h}}$$

$$R/D = 1.51$$

$$R = 1.51 D = 1.51 \cdot 34.90 \text{ kg/h} = \mathbf{52.70 \text{ kg/h}}$$

$$V = R + D = 52.70 \text{ kg/h} + 34.90 \text{ kg/h} = \mathbf{87.60 \text{ kg/h}}$$

Kontrollimi i bilancit material të përgjithshëm

$$\text{Hyrja} = F = 221.05 \text{ kg/h}$$

$$\text{Dalja} = D + B = (34.90 + 186.15) \text{ kg/h} = 221.05 \text{ kg/h}$$

Shembulli 2

Një tretësirë e cila përmban 10 % të komponentes A të ngurtë përzihet me 25 % tretësirë të komponentës B të ngurtë. Një dalje e vetme e cila është 20 % komponentë e ngurtë C largohet.

Në qoftë se 10 % e tretësirës hyn me rrjedhë masore $5 \frac{\text{kg}}{\text{s}}$, sa janë rrjedhat tjera (supozoni se nuk ka akumulim).

Zgjidhje

Baza:

$$\text{Tretësira A (hyrje)} = 5 \frac{\text{kg}}{\text{s}}$$

$$\text{Tretësira B (hyrje)} = X \frac{\text{kg}}{\text{s}}$$

$$\text{Tretësira C (dalje)} = X \frac{\text{kg}}{\text{s}}$$

$$A+B=C$$

Barazimi i përgjithshëm:

$$5+X=Y \dots \dots \dots (1)$$

Pasi që tretësira A përmban 10 %, tretësira B përmban 25% dhe tretësira C përmban 20 % komponente të ngurtë, barazimi mund të shkruhet si në vijim:

$$0.1 \cdot 5 + 0.25X = 0.2 Y \dots \dots \dots (2)$$

Ngjajshëm barazimi i dytë mund të shkruhet për komponenten në gjendje të lëngët:

$$0.9 \cdot 5 + 0.75X = 0.8 Y \dots \dots \dots (3)$$

Duke zëvendësuar vlerat e Y nga barazimi 1 në barazimin 2 kemi:

$$0.5 + 0.25X = 0.2 (5 + X)$$

$$0.5 + 0.25X = 1 + 0.2X$$

$$0.25X - 0.2X = 1 - 0.5$$

$$0.05X = 0.5$$

$$X = \frac{0.5}{0.05} = 10 \frac{\text{kg}}{\text{s}}$$

Me zëvendësimin e X në barazimin 1, kemi:

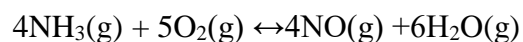
$$5+X=Y$$

$$5+10=15 \frac{\text{kg}}{\text{s}}$$

$$Y=15 \frac{\text{kg}}{\text{s}}$$

Shembulli 3

Llogaritni nxehtësinë standarde të reaksionit të mëposhtëm, duke pasur parasysh entalpitë e formimit:



Entalpitë standarde të formimit kJ/mol

NH₃(g) -46.2

NO(g) +90.3

H₂O(g) -241.6

Zgjidhje

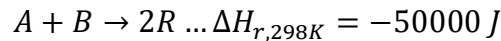
Shënim: Entalpia e formimit të O₂ është zero.

$$\begin{aligned}\Delta H_r^\circ &= \sum \Delta H_f^\circ, \text{produkt} - \sum \Delta H_f^\circ, \text{reaktant} \\ &= [(4 \cdot 90,3 + 6 \cdot (-241,6)) - [4 \cdot (-462)]] \\ &= -903,6 \text{ KJ/mol}\end{aligned}$$

Nxehtësia e reaksionit $\Delta H = -903,6 \text{ KJ/mol}$

Shembulli 4

Nxehtësia standarde e reaksionit në fazë të gaztë në temperaturë 25 °C është si në vijim:



Në temperaturë 25 °C reaksioni është mjaftë ekzotermik. Mirëpo në qoftë se ne dëshirojmë që këtë reaksion ta zhvillojmë në temperaturë 1025 °C, sa do të jetë ΔH_r në këtë temperaturë si dhe a do të mbetet reaksioni ekzotermik në këtë temperaturë?

Të dhënat: në mes të temperaturave 25 °C dhe 1025 °C, vlerat e nxehtësisë specifike mesatare në presion konstant për komponentet e ndryshme në reaksion janë:

$$\overline{C_{pA}} = 35 \text{ J/molK}$$

$$\overline{C_{pB}} = 45 \text{ J/molK}$$

$$\overline{C_{pR}} = 70 \text{ J/molK}$$

Zgjidhje

Bilanci i entalpisë për 1 mol A, 1 mol B dhe 2 mole R është:

$$\Delta H_1 = \Delta H_2 + \Delta H_3 + \Delta H_4$$

$$\Delta H_1 = (n \overline{C_p} \Delta T)_{\text{reaktantëve}} + \Delta H_{r,25^\circ\text{C}} + (n \overline{C_p} \Delta T)_{\text{produkteve}}$$

$$\begin{aligned}\Delta H_1 &= 1 (35)(298 - 1298) + 1 (45) (298 - 1298) + (-50000) + 2 (70) (1298 \\ &\quad - 298)\end{aligned}$$

$$\Delta H_1 = 35(-1000) + 45(-1000) - 50000 + 140(1000)$$

$$\Delta H_1 = -35000 - 45000 - 50000 + 140000 = -80000 - 50000 + 140000 = -130000 + 140000 = 10000$$

J=10 kJ

Pra reaksioni është ekzotermik ($-50000 J$) në temperaturë $25^\circ C$, ndërsa në temperaturë $1025^\circ C$ reaksioni është endotermik ($10000J$).

Shembulli 5

Projektimi i reaktorit me përzierje të vazhdueshme

Supozojmë një reaktor me përzierje të vazhdueshme, i cili ka një rrjedhë në hyrje dhe një në dalje, ku dendësia e fluidit është konstante përgjatë sistemit.

Në reaktor hyjnë reaktantët E dhe F me një shpejtësi vëllimore prej $\dot{V} = 432 \frac{L}{min}$ dhe këta reaktant shndërrohen në produktin J në bazë të barazimit vijues: $E+F \rightarrow J$

Barazimi i shpejtësisë së reaksionit është:

$$r_{reaksionit,E} = k_r c_E c_F^2$$

ku konstanta e shpejtësisë e ka vlerën $k_r = 6.1 L^2 g mol^{-2} s^{-1}$

Përqendrimet e specieve hyrëse dhe dalje janë dhënë në vijim

$$c_{E,hyrje} = 0.95M, c_{E,dalje} = 0.14M, c_{F,hyrje} = 2M, c_{F,dalje} = 0.38M$$

Duke u bazuar në këto kondita:

- Sa është shndërrimi fraksional i komponentës E, $X_E = ?$
- Sa është vëllimi i reaktorit, $V = ?$
- Sa është koha mesatare e qëndrimit, $\tau = ?$

Zgjidhje

- Bilanci i masës për gjendjen e qëndrueshme në reaktor është:

$$\dot{m}_{nëhyrje} = \dot{m}_{nëdalje}$$

$$\rho = m/V$$

Ose

$$(\dot{V}\rho)_{hyrje} = (\dot{V}\rho)_{dalje}$$

Shpejtësia e bilancit molar për specien E është:

$$\dot{n}_{E,hyrje} = \dot{n}_{E,dalje} + r_{konsumimit,E}$$

E cila mund të shprehet në mënyrë më të përshtatshme:

$$C = n/V$$

$$(\dot{V}c_E)_{hyrje} = (\dot{V}c_E)_{dalje} + r_{konsumimit,E}$$

Shndërrimi i E, i pet me barazimin:

$$X_E = \frac{\dot{n}_{E,hyrje} - \dot{n}_{E,dalje}}{\dot{n}_{E,hyrje}}$$

$$X_E = \frac{(\dot{V}c_E)_{hyrje} - (\dot{V}c_E)_{dalje}}{(\dot{V}c_E)_{hyrje}}$$

Ashtu siç e cekëm në tekstin e detyrës, dendësia e fluidit është konstante, kështu që ekuacioni i bilancit të masës reduktohet si në vijim:

$$(\dot{V})_{hyrje} = (\dot{V})_{dalje} = \dot{V}$$

Kështu që:

$$X_E = \frac{(c_E)_{hyrje} - (c_E)_{dalje}}{(c_E)_{hyrje}} = \frac{(0.95 - 0.14)M}{0.95M} = 0.8526 \sim 0.853$$

Shpejtësia e bilancit molar merr formën:

$$\dot{V}(c_{E,hyrje} - c_{E,dalje}) = r_{konsumimit,E}V$$

Ose

$$\dot{V}X_E c_{E,hyrje} = r_{konsumimit,E}V$$

Ne gjithashtu dijmë se:

$$r_{konsumimit,E} = r_{reaksionit,E}V$$

Barazimi i shpejtësisë së reaksionit është:

$$r_{reaksionit,E} = k \cdot c_E \cdot c_F^2$$

$$r_{reaksionit,E} = k \cdot c_{E,dalje} \cdot c_{F,dalje}^2$$

$$V = \frac{r_{konsumimit,E}}{r_{reaksionit,E}}$$

$$V = \frac{\dot{V}X_E c_{E,hyrje}}{k \cdot c_{E,dalje} \cdot c_{F,dalje}^2}$$

$$V = \frac{432 \frac{L}{min} \cdot 0.853 \cdot 0.95 \frac{gmol}{L} \cdot 1 \frac{min}{60s}}{6.1 \frac{L^2}{gmol^2s} \cdot 0.14 \frac{gmol}{L} \cdot (0.38 \frac{gmol}{L})^2}$$

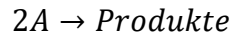
$$V = \frac{350.07}{7.398} = 47.3 L$$

Koha mesatare e qëndrimit është:

$$\tau = \frac{V}{\dot{V}} = \frac{47.3 L}{432 \frac{L}{min}} = 0.109 min = 6.54s$$

Shembulli 6

Reaktori me rrjedhë tërësishtë të përzier përdoret për të trajtuar ujërat e ndotura, të cilat kanë përqendrim prej 800 mg/L. Koha hidraulike e qëndrimit të ujërave të ndotura në reaktor është 6 orë ($\theta = 6$ orë). Reaksioni kimik është një reaksion elementar ireverzibil i rendit të dytë.



Konstanta e shpejtësisë së reaksionit, $k = 3.7 \frac{L}{mg \text{ ditë}}$

Përcaktoni shkallën e shndërrimit në këtë proces.

Zgjidhje

Hapi i parë është të përcaktojmë bilancin e masës së reaktorit dhe shprehjen kinetike.

Reaksioni është i rendit të dytë dhe ireverzibil, kështu që shprehja kinetike ipet me barazimin:

$$r_A = k \cdot C_A^2$$

Bilanci i masës është

$$r_A = \frac{C_{A0} - C_A}{\theta}$$

Nga këto dy barazime kemi:

$$\frac{C_{A0} - C_A}{\theta} = k \cdot C_A^2$$

$$k \cdot \theta \cdot C_A^2 = C_{A0} - C_A$$

$$k \cdot \theta \cdot C_A^2 + C_A - C_{A0} = 0$$

Pra kemi fituar ekuacion kuadratik të formës:

$$ax^2 + bx - c = 0,$$

ku x është e panjohur, a, b, c janë konstante, ku $a \neq 0$

në rastin tonë

$$a=0.925, b=1, c=-800, x=C_A$$

$$\theta = 6h = \frac{6}{24} = 0.25 \text{ ditë}$$

$$1 \text{ ditë} = 24 \text{ h}$$

Ekuacioni kuadratik:

$$x_{1/2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4 \cdot a \cdot c}}{2 \cdot a}$$

$$x_{1/2} = \frac{-1 \pm \sqrt{1^2 - 4 \cdot 3.7 \frac{L}{mg \text{ ditë}} \cdot 0.25 \text{ ditë} \cdot (-800 \frac{mg}{L})}}{2 \cdot 3.7 \frac{L}{mg \text{ ditë}} \cdot 0.25 \text{ ditë}}$$

$$x_{1/2} = \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 2960 \frac{mg}{L}}}{1.85}$$

$$x_{1/2} = \frac{-1 \pm \sqrt{2961 \frac{mg}{L}}}{1.85}$$

E marrim për vlerën pozitive (x_1):

$$x_1 = \frac{-1 \pm 54.415 \frac{mg}{L}}{1.85}$$

$$x_1 = \frac{-1 + 54.415 \frac{mg}{L}}{1.85}$$

$$x_1 = \frac{53.415 \frac{mg}{L}}{1.85} = 28.87 \frac{mg}{L} \sim 29 \frac{mg}{L}$$

$$C_A = 29 \frac{mg}{L}$$

$$X = \frac{(C_{A0} - C_A)}{C_{A0}} = \frac{(800 - 29) \frac{mg}{L}}{800 \frac{mg}{L}} = 0.96375 \cdot 100 = 96.375 \%$$

KAPITULLI IV

4. DISKUTIMI I REZULTATEVE

Llogaritja e bilancit të materies dhe energjisë për proceset me reaksion kimik janë esenciale në fushën e inxhinierisë kimike dhe në proceset e ndryshme të industrisë kimike.

Nga shembujt e zgjidhur shihet rëndësia e bilancit të materies dhe energjisë në llogaritjet e parametrave të ndryshëm, si për shembull, përcaktimi i shpejtësisë së rrjedhës, bilanci i komponenteve të ndryshme në paisjet përkatëse industriale, projektimi i reaktorëve, etj.

Në një reaksion kimik, llogaritja e bilancit të materies dhe energjisë është e rëndësishme për të siguruar që të gjitha substancat hyrëse dhe dalëse janë të përcaktuara saktësisht dhe që energjia është e ruajtur gjatë procesit. Për të llogaritur bilancin e materies në një reaksion kimik, duhet të sigurohemi që numri i atomeve të çdo elementi është i barabartë në anët e majtas dhe të djathtas të reaksionit kimik duke përdorur koeficientët e duhur.

Bilancet material dhe energjetike janë bazike për kontrollin e përpunimit, veçanërisht në kontrollin e rendimenteve të produkteve.

Për bilancin e energjisë, mund të përdoren ligjet e termodinamikës për të llogaritur energjinë e lirë dhe energjinë e ngrohjes së procesit. Bilancet materiale dhe energjetike mund të përpunohen në mënyrë sasiore duke ditur sasi të materialeve që hyjnë në një proces, dhe natyrën e procesit. Energjia është një element kyç në proceset ku përfshihen reaksionet kimike. Në një reaksion kimik, energjia mund të çlirohet (reaksion ekzotermik) ose të absorbohet (reaksion endotermik). Në proceset e vazhdueshme, duhet të vendoset një ekuilibër kohor. Në llogaritjen e inxhinierisë kimike, divizioni dhe përcaktimi i sistemit të bilancit janë një lidhje e rëndësishme.

KAPITULLI V

5. PËRFUNDIME

Bilanci i materies është mjete themelor i inxhinierisë kimike. Është baza për analizën dhe projektimin e proceseve kimike. Pra, është e vetë kuptueshme se inxhinierët e kimisë duhet të zotërojnë tërësisht përdorimin e tij në formulimin dhe zgjidhjen e problemeve të përpunimit kimik. Në përpunimin kimik kemi të bëjmë me transformimin e lëndëve të para me vlerë më të ulët në produkte me vlerë më të lartë dhe, në shumë raste, në produkte të padëshiruara që duhen asgjësuar.

Proceset me reaksione kimike janë transformimet kimike në të cilat lidhjet kimike të substancave ndryshojnë për të krijuar produkte të reja. Këto reaksione ndodhin kur substancat fillimtare (reagjentët) reagojnë për të krijuar produkte të reja. Proceset me reaksione kimike janë të pranishme në shumë fusha të jetës, përfshirë kiminë, biologjinë, teknologjinë, dhe shumë fusha të tjera shkencore dhe industriale.

Përveç kësaj, shumë nga këto komponime kimike mund të jenë të rrezikshme. Bilanci material është mjete i inxhinierit kimik për të mbajtur gjurmët e asaj që hyn dhe del nga procesi si dhe çfarë ndodh brenda. Pa bilance të sakta materiale, është e pamundur të projektohet ose të funksionalizohet një fabrikë kimike në mënyrë të sigurt dhe ekonomike. Përzgjedhja e sistemit të duhur të ekuilibrit mund të thjeshtojë procesin e zgjidhjes së problemeve, reduktimin e ngarkesës së punës dhe përmirësimin e efikasitetit të llogaritjes, por gjithashtu për aq sa është e mundur për të shmangur disa gabime në procesin e llogaritjes. Prandaj, sistemi i përzgjedhjes së bilancit dhe është mjaft i rëndësishëm në llogaritjet e inxhinierisë kimike.

CONCLUSIONS

The material balance is the fundamental tool of chemical engineering. It is the basis for analysis and design of chemical processes. So it is self-evident that chemical engineers must master his skill in formulating and solving chemical processing problems. and, in many, unwanted byproducts that must be disposed of.

Processes with chemical reactions are chemical transformations in which the chemical bonds of substances are important for the creation of new products. These reactions occur when starting substances (reagents) react to create new products. Chemical reaction processes are present in many areas of life, including chemistry, biology, technology, and many other scientific and industrial fields.

In addition, many of these chemical compounds can protect crime. The material balance is the chemical engineering tool for keeping track of what goes in and out of the process as well as what goes on inside. Without accurate material balances, it is impossible to design or operate a chemical safely and economically.

Selecting the appropriate balance system can simplify the process of solving problems, reduce the workload and improve the computational efficiency, but also as far as possible to avoid some errors in the calculation process. Therefore, the balance system selection and its skills are very important in chemical engineering calculation.

BIBLIOGRAFIA

- [1] Himmelblau, D.M., Riggs, J.B., Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering, 7th edition, Prentice-Hall Inc., New Jersey, 2004.

- [2] Felder, R.M., Rousseau, R.W. Elementary Principles of Chemical Processes, 3rd edition, John Wiley & Sons, Inc., New York, 2005.

- [3] Aliu, M., Bilanci i materies dhe energjisë, Ligjerata të autorizuar, Mitrovicë 2018.

- [4] Liu, Y., Zhang, N., Discussion on the Importance of Selecting Balance System in Chemical Engineering Calculation, 3rd International Conference on Material, Mechanical and Manufacturing Engineering (IC3ME 2015).