

**ĐẠI HỌC QUỐC GIA TP. HỒ CHÍ MINH**  
**TRƯỜNG ĐẠI HỌC BÁCH KHOA**

**MÔ HÌNH HÓA–MÔ PHỎNG–TỐI ƯU HÓA**  
**TRONG CÔNG NGHỆ HÓA HỌC**

**BÀI TOÁN CÂN BẰNG VẬT CHẤT**  
**CÂN BẰNG NĂNG LƯỢNG**

**TS. Nguyễn Đình Thọ**

**Bộ môn: Quá trình và thiết bị CN Hóa – Sinh học – Thực phẩm**

# **MÔ HÌNH HÓA–MÔ PHỎNG–TỐI ƯU HÓA**

---

## **TRONG CÔNG NGHỆ HÓA HỌC**

### **BÀI TOÁN CÂN BẰNG VẬT CHẤT CÂN BẰNG NĂNG LƯỢNG**

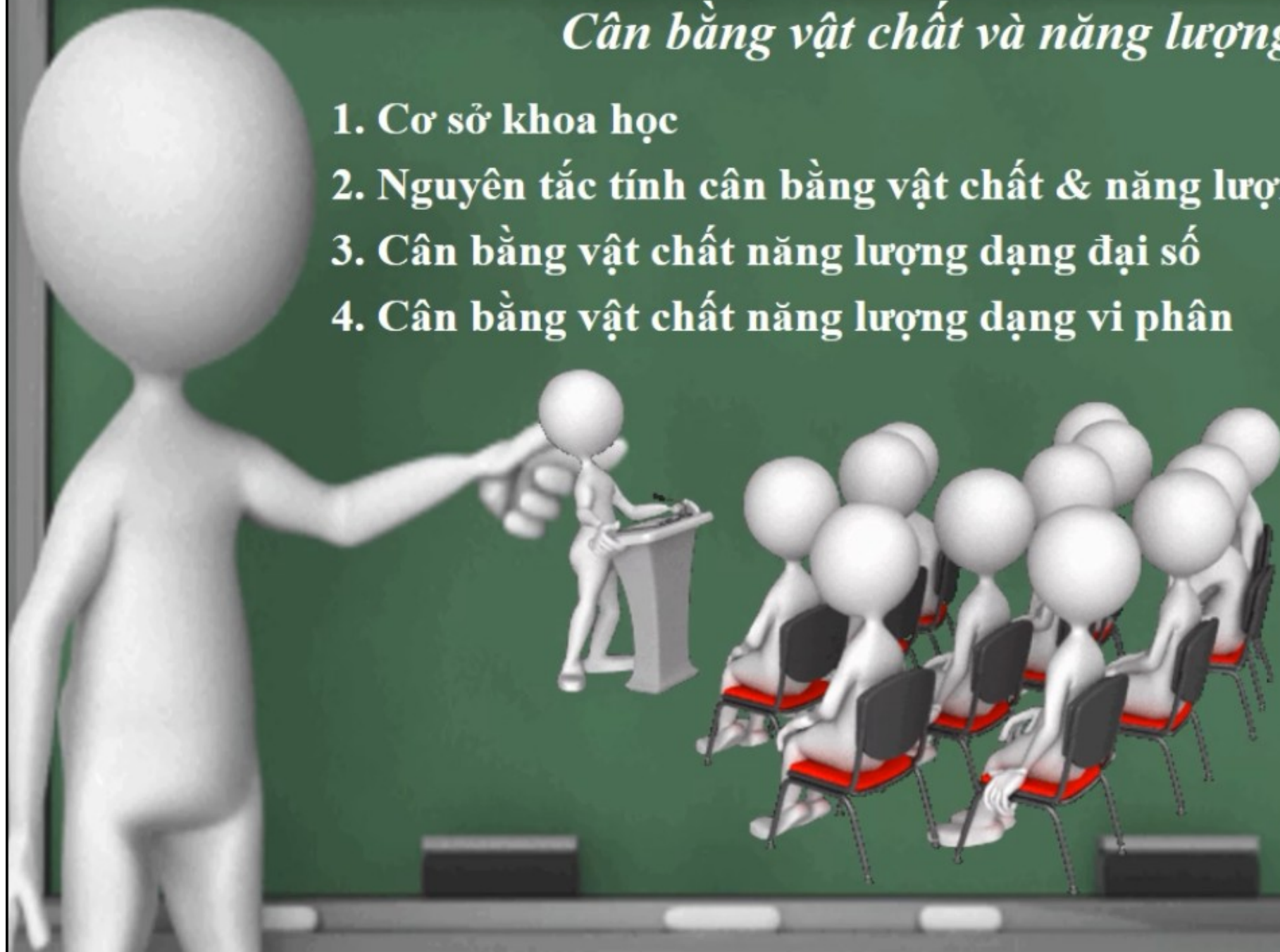
**1) Trình bày cơ sở, nguyên tắc tính cân bằng vật chất, năng lượng của hệ nhiều cấu tử, nhiều thiết bị.**

**2) Minh họa thông qua ví dụ:**

- Tính cân bằng vật chất để lập phương trình tỷ lệ của hệ nhiều cấu tử.**
- Cân bằng vật chất hệ thống nhiều thiết bị.**

# *Cân bằng vật chất và năng lượng*

1. Cơ sở khoa học
2. Nguyên tắc tính cân bằng vật chất & năng lượng
3. Cân bằng vật chất năng lượng dạng đại số
4. Cân bằng vật chất năng lượng dạng vi phân

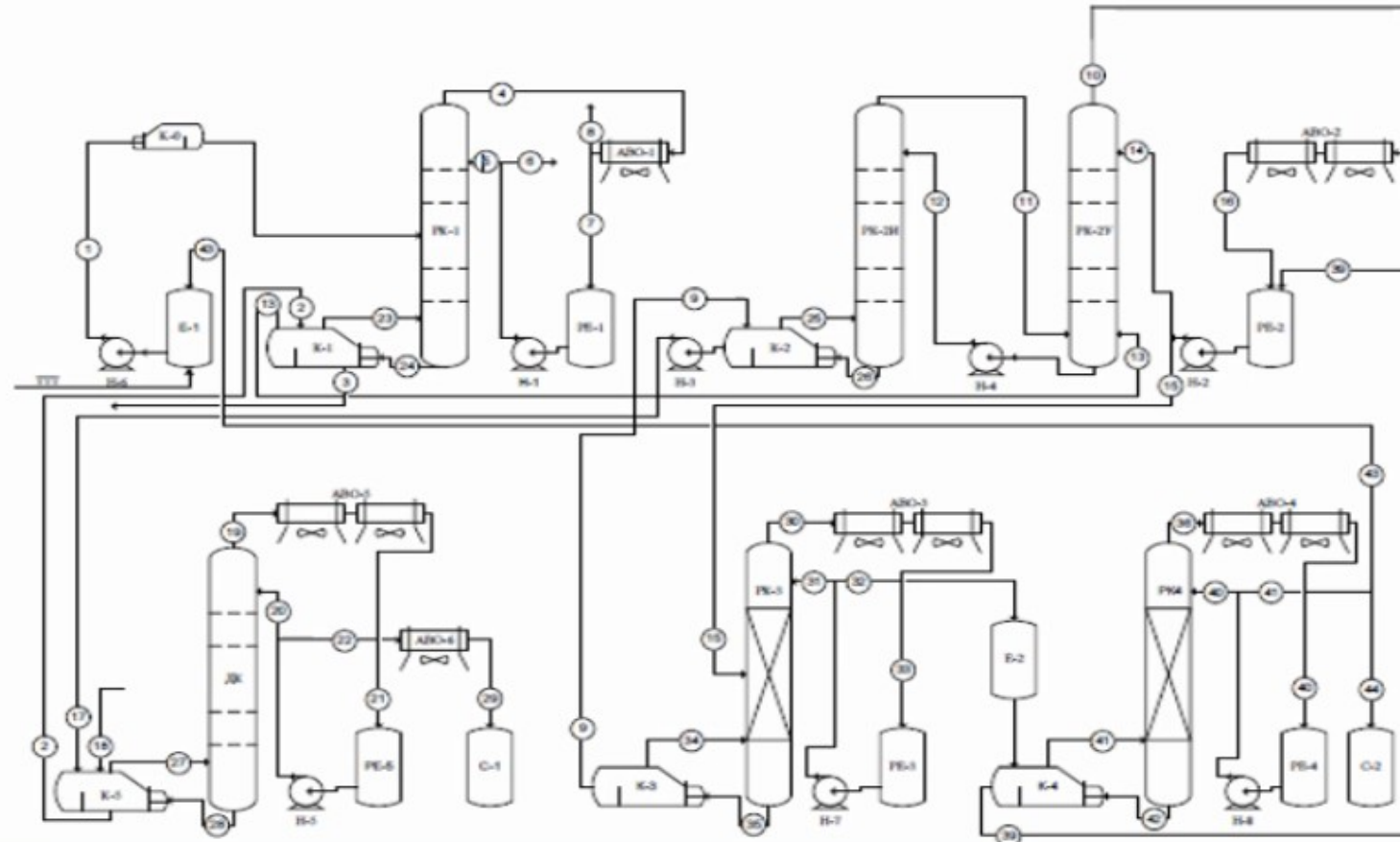




## 1. Cơ sở khoa học

**Tính cân bằng vật chất và năng lượng dựa trên cơ sở nào?**

**Cơ sở: Định luật bảo toàn vật chất và năng lượng**





## 1. Cơ sở khoa học

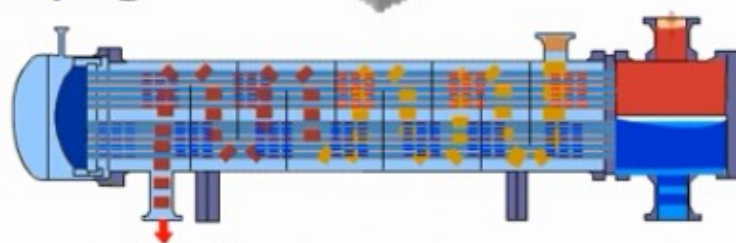
Các thông số cần đưa vào mô hình:

1. Thông số về kết cấu thiết bị: hình dáng, kích thước

2. Thông số hóa lý: trạng thái, tính chất các cấu tử

3. Thông số thủy động lực học: tốc độ, lưu lượng

4. Thông số động học: tốc độ truyền nhiệt, truyền khối, phản ứng



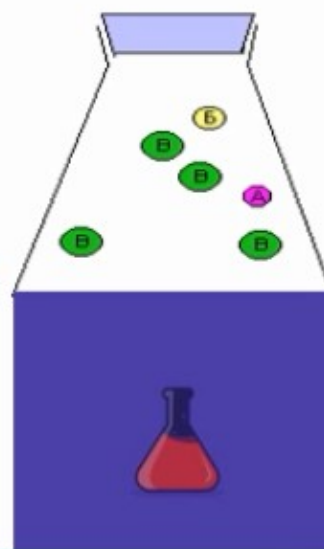
5. Thông số động học phản ứng: số phản ứng độc lập

số cấu tử đặc trưng

bậc phản ứng

hằng số tốc độ phản ứng

năng lượng hoạt hóa

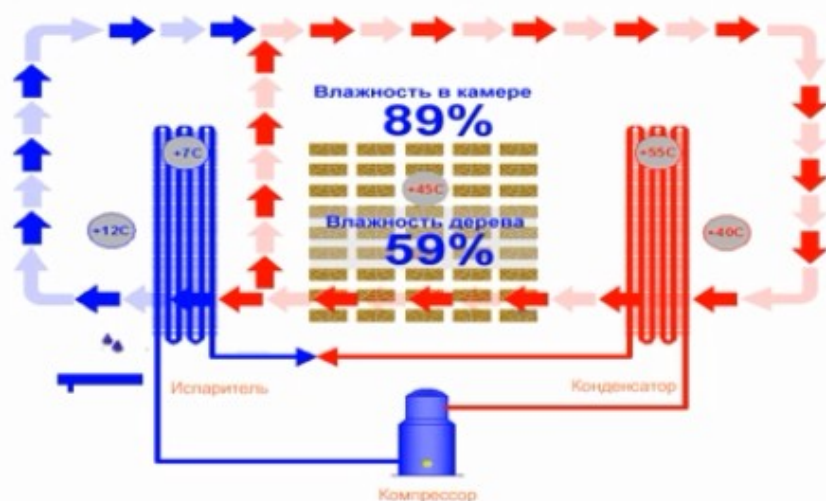






## 2. Nguyên tắc chung

Cấp độ tính cân bằng vật chất: vi phân



tích phân

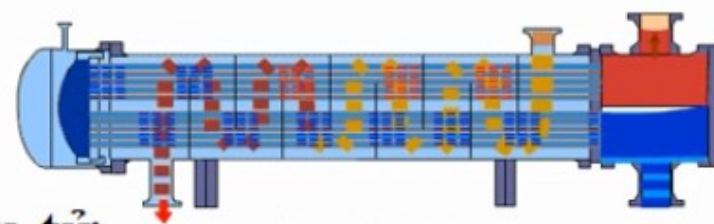
cho một cấu tử

cho tất cả các cấu tử

trong một pha, nhiều pha

cho một đoạn hay cả thiết bị

cho một phân xưởng, nhà máy ...

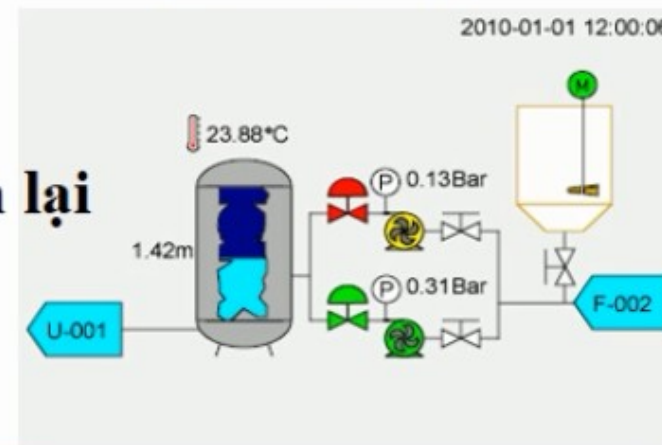


Nguyên tắc chung:

$$\Sigma \text{lượng vào} + \Sigma \text{có sẵn} = \Sigma \text{lượng ra} + \Sigma \text{còn lại}$$

$$\text{Khi: } \Sigma \text{có sẵn} = \Sigma \text{còn lại}$$

$$\text{Thì: } \Sigma \text{lượng vào} = \Sigma \text{lượng ra}$$



31.03.2020

14:12

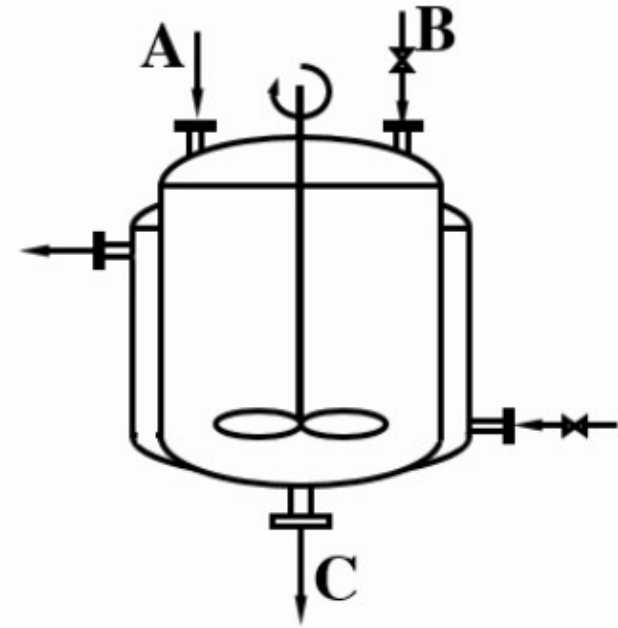




### 3. Cân bằng dạng hệ phương trình đại số

Khi tiến hành mô hình hóa trong kỹ thuật hóa học, bài toán cân bằng vật chất, năng lượng:

- Được tiến hành đầu tiên
- Nó được giải ở nhiều cấp độ



Trong thiết bị phản ứng

Phân tích một hỗn hợp (C) phản ứng cho thấy gồm 7 cấu tử:  
 $\text{ZnCl}_2$ ,  $\text{BaS}$ ,  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{ZnS}$ ,  $\text{BaCl}_2$ ,  $\text{NaCl}$ ,  $\text{BaSO}_4$ .

Hãy lập phương trình tỷ lượng của các phản ứng trong thiết bị?







## 3.1 Cân bằng dạng hệ phương trình đại số



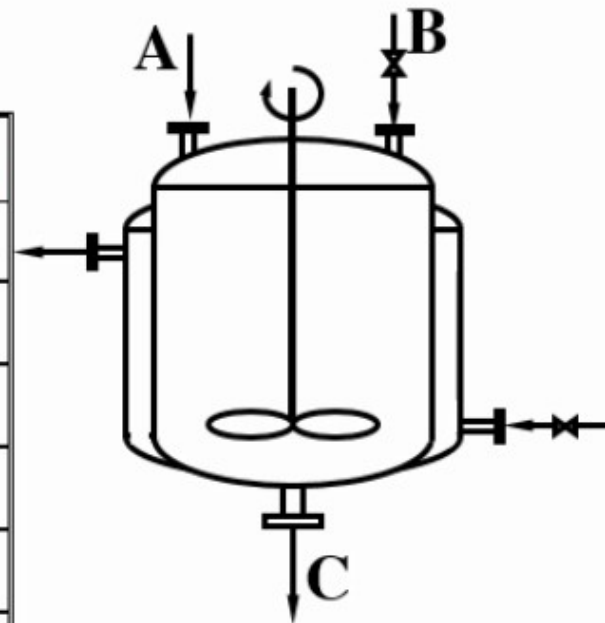
**Khi viết phương trình phản ứng (tỷ lệ) dưới dạng:**



**Trong đó:  $x_i$  ( $i = 1,7$ ) hệ số của phương trình tỷ lệ cần tìm.**

**Lập cân bằng vật chất theo ion dạng bảng:**

Chất \	ZnCl <sub>2</sub>	BaS	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	ZnS	BaCl <sub>2</sub>	NaCl	BaSO <sub>4</sub>
Cân bằng theo	x <sub>1</sub>	x <sub>2</sub>	x <sub>3</sub>	x <sub>4</sub>	x <sub>5</sub>	x <sub>6</sub>	x <sub>7</sub>
Kẽm (Zn)							
Clo (Cl)							
Bari (Ba)							
Sunfit (S)							
Sunfat (SO <sub>4</sub> )							
Natri (Na)							







### 3.1 Cân bằng đại số

Khi viết phương trình phản ứng (tỷ lệ) dưới dạng:



Cân bằng vật chất theo ion dạng:

Đối với kẽm (Zn):  $x_1 + x_4 = 0$ ;

Đối với Clo (Cl):  $2x_1 + 2x_5 + x_6 = 0$ ;

Đối với Bari (Ba):  $x_2 + x_5 + x_7 = 0$ ;

Đối với Sulfua (S):  $x_2 + x_4 = 0$ ;

Đối với Natri (Na):  $2x_3 + x_6 = 0$ ;

Đối với Sunfat ( $\text{SO}_4$ ):  $x_3 + x_7 = 0$ ;

Chất	ZnCl <sub>2</sub>	BaS	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	ZnS	BaCl <sub>2</sub>	NaCl	BaSO <sub>4</sub>
Cân bằng theo	x <sub>1</sub>	x <sub>2</sub>	x <sub>3</sub>	x <sub>4</sub>	x <sub>5</sub>	x <sub>6</sub>	x <sub>7</sub>
Kẽm (Zn)	1	0	0	1	0	0	0
Clo (Cl)	2	0	0	0	2	1	0
Bari (Ba)	0	1	0	0	1	0	1
Sulfua (S)	0	1	0	1	0	0	0
Sulfat (SO <sub>4</sub> )	0	0	1	0	0	0	1
Natri (Na)	0	0	2	0	0	1	0

Số ẩn bằng 7

Số phương trình bằng 6 → hệ phương trình vô định

Hạng ma trận bằng 5 → Chỉ giải được hệ 5 phương trình độc lập tìm 5 nghiệm (hệ số tỷ lệ) → chọn trước 2 ẩn

Phương pháp: chọn một ẩn bằng 0, một ẩn bằng 1





## 3.1 Cân bằng đại số

Chọn trước 2 ẩn

Chọn một ẩn bằng  $x_7 = 0$ , một ẩn bằng  $x_5 = 1$

$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_6$		$x_5$
1	0	0	1	0		0
2	0	0	0	1		-2
0	1	0	0	0		-1
0	1	0	1	0		0
0	0	1	0	0		0
0	0	2	0	1		0
$x_i = -1$	-1	0	1	0		1

Ta có phản ứng:  $\text{BaCl} + \text{ZnS} \rightleftharpoons \text{ZnCl}_2 + \text{BaS}$  (1)







## 3.1 Cân bằng đại số

Chọn trước 2 ẩn

Chọn một ẩn bằng  $x_5 = 0$ , một ẩn bằng  $x_7 = 1$

$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_6$		$x_7$
1	0	0	1	0		0
2	0	0	0	1		0
0	1	0	0	0		-1
0	1	0	1	0		0
0	0	1	0	0		-1
0	0	2	0	1		0
$x_i =$	-1	-1	-1	1	2	1

Ta có:  $\text{ZnS} + 2\text{NaCl} + \text{BaSO}_4 \rightleftharpoons \text{ZnCl}_2 + \text{BaS} + \text{Na}_2\text{SO}_4$  (2)

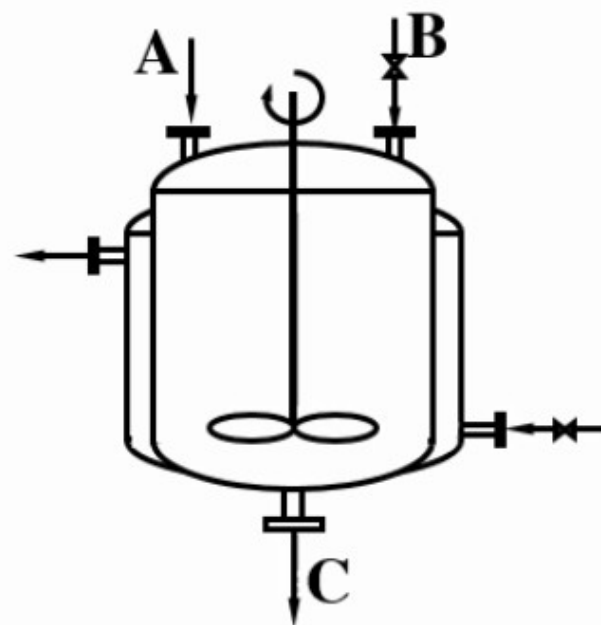
Lấy (1) trừ (2) ta có phản ứng:

$\text{Na}_2\text{SO}_4 + \text{BaCl}_2 \rightleftharpoons 2\text{NaCl} + \text{BaSO}_4$  (3)





### 3. Cân bằng dạng hệ phương trình đại số



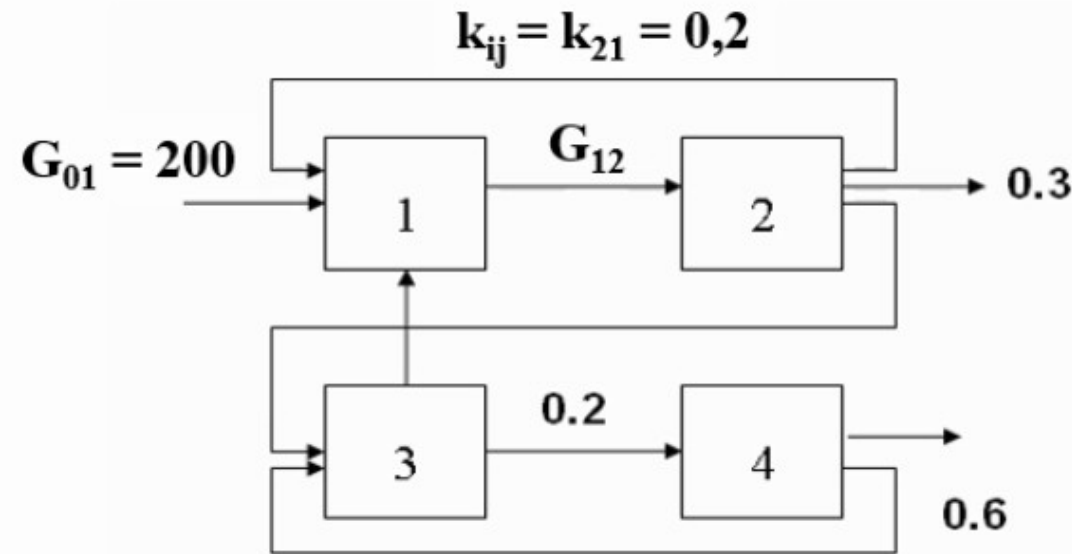
Ta có phản ứng (1):  $\text{BaCl} + \text{ZnS} \rightleftharpoons \text{ZnCl}_2 + \text{BaS}$  (1)

Phản ứng (2):  $\text{ZnS} + 2\text{NaCl} + \text{BaSO}_4 \rightleftharpoons \text{ZnCl}_2 + \text{BaS} + \text{Na}_2\text{SO}_4$  (2)

Hay phản ứng (3):

$\text{Na}_2\text{SO}_4 + \text{BaCl}_2 \rightleftharpoons 2\text{NaCl} + \text{BaSO}_4$  (3)

Cho hệ thống 4 thiết bị nối với nhau theo sơ đồ:



Với:

$G_{ij}$ : dòng đi từ thiết bị  $i$  sang  $j$  (Bên ngoài: 0)

$k_{ij}$ : hệ số tỷ lệ của dòng so với: dòng  $i$  đi vào thiết bị  $j$

Tính các dòng còn lại trong hệ thống



## 3.2 Cân bằng đại số

Thu được hệ phương trình dạng ma trận:

Dòng Phương trình	$G_{01}$	$G_{21}$	$G_{31}$	$G_{12}$	$G_{20}$	$G_{23}$	$G_{43}$	$G_{34}$	$G_{40}$		B
1	1	1	1	-1	0	0	0	0	0	=	0
2	0	-1	0	1	-1	-1	0	0	0		0
3	0	0	-1	0	0	1	1	-1	0		0
4	0	0	0	0	0	0	-1	1	-1		0
5	0	1	0	-0,2	0	0	0	0	0		0
6	0	0	0	-0,3	1	0	0	0	0		0
7	0	0	0	0	0	-0,2	-0,2	1	0		0
8	0	0	0	0	0	0	1	-0,6	0		0
9	1	0	0	0	0	0	0	0	0		200
G=	200	115,8	263,2	578,9	173,7	289,5	39,47	65,79	26,32		

Giải hệ phương trình bằng phép tính ma trận, hay Solver trên Excel:  
Dạng ma trận:  $X=(A^{-1}B)^T=TRANSPOSE(MMULT(MINVER(A);B))$







## 3.2 Cân bằng dạng đại số

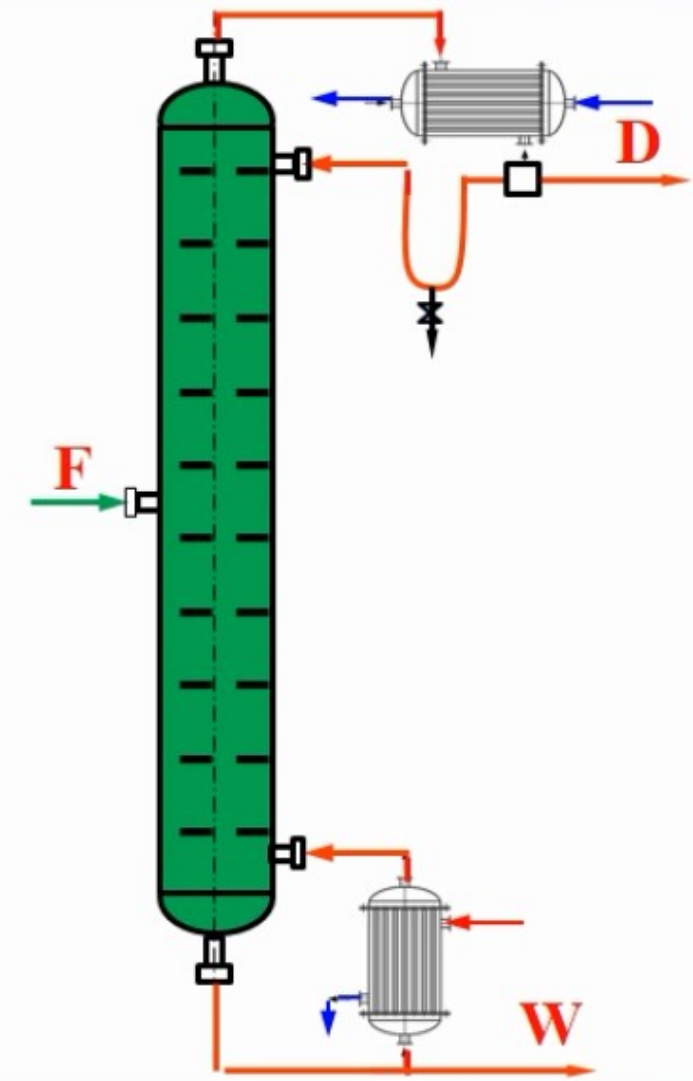
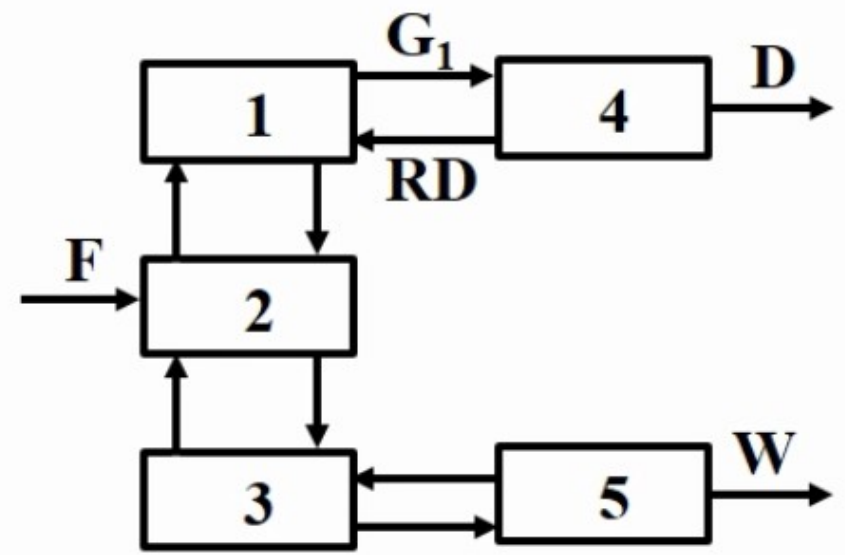
**Giải hệ phương trình bằng phép tính ma trận trên Mathdcad:**

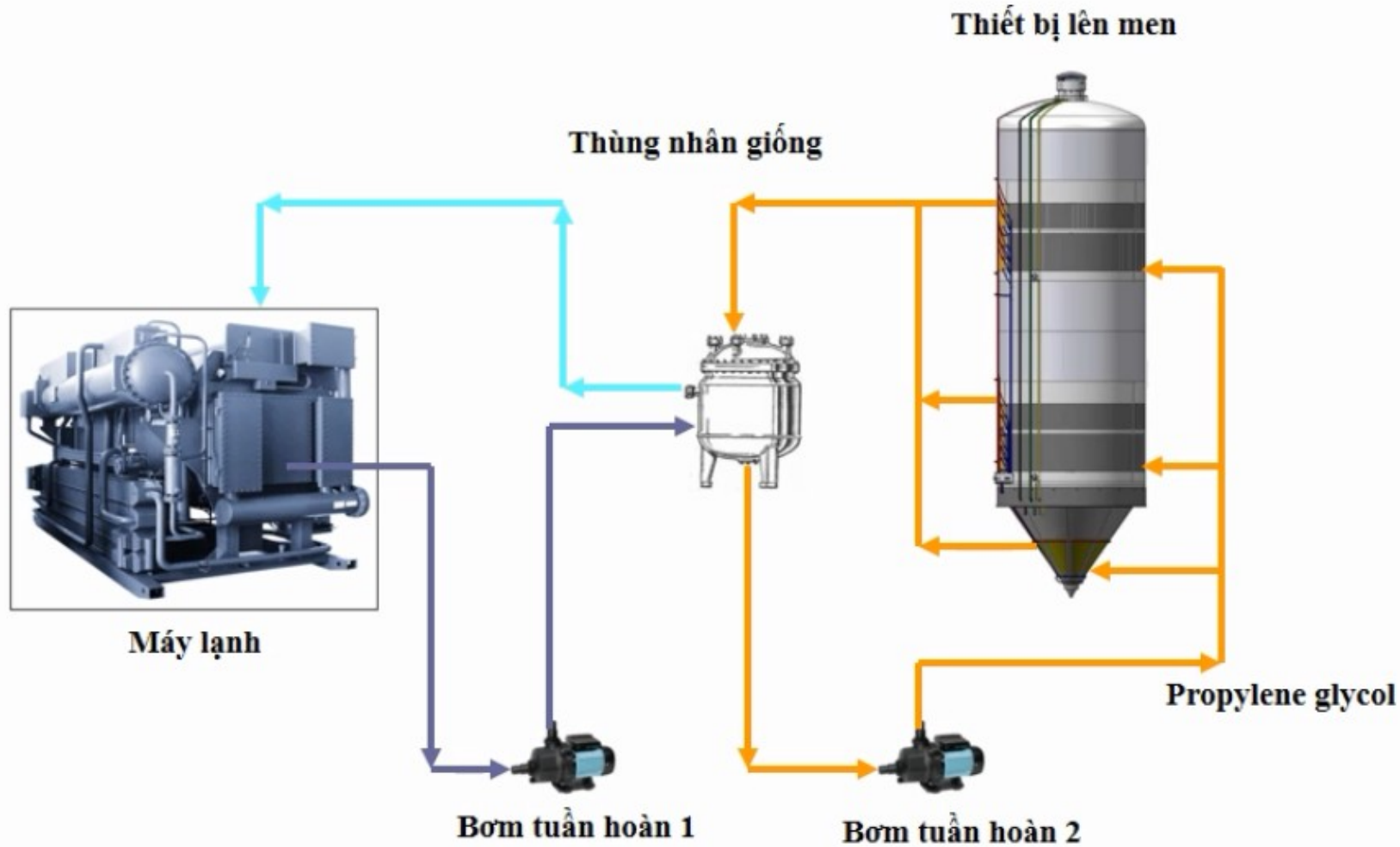
**Dạng ma trận:  $X = (A^{-1}B)^T$**

$$A := \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & -0.2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.3 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.2 & -0.2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -0.6 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad B := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 200 \end{pmatrix}$$

$$X := (A^{-1} \cdot B)^T = (200 \quad 115.789 \quad 263.158 \quad 578.947 \quad 173.684 \quad 289.474 \quad 39.474 \quad 65.789 \quad 26.316)$$











## 4. Cân bằng dạng vi phân

**Cân bằng vật chất vi phân:**

**Kèm theo cân bằng vật chất dạng tích phân**

**Động học phản ứng của hệ nhiều cấu tử**

**nhiều phản ứng**

**Khảo sát cùng động học phản ứng hệ thực**

**Dẫn đến giải hệ phương trình vi phân thường**

