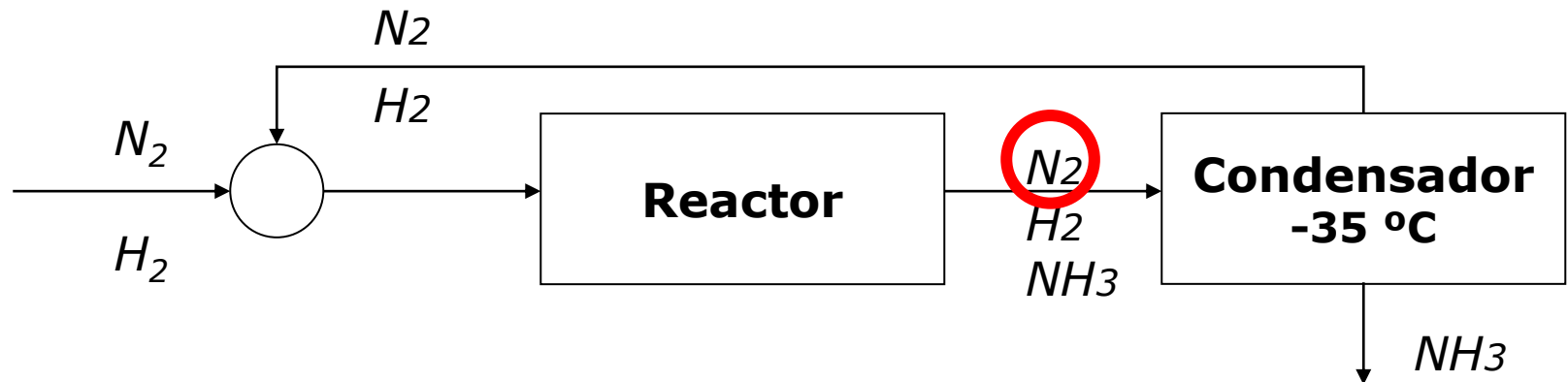


EJEMPLO

Sistema con recirculación

El siguiente proceso se alimenta con una corriente de 10 Kmol/h de N_2 y 30 Kmol de H_2 . La conversión en el reactor es del 15% y la recirculación es completa. Considerar estado estacionario. Calcular el flujo molar de Nitrógeno a la salida del reactor.



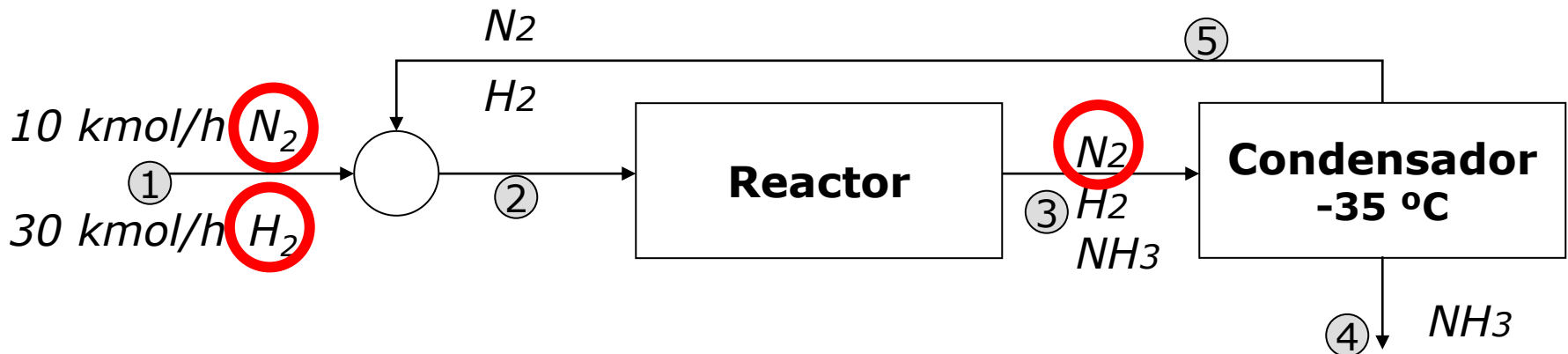
Resolución

Planteamos el diagrama de bloques

(en este caso, viene dado en el enunciado del problema)

Numeramos las corrientes (para referenciar con más facilidad)

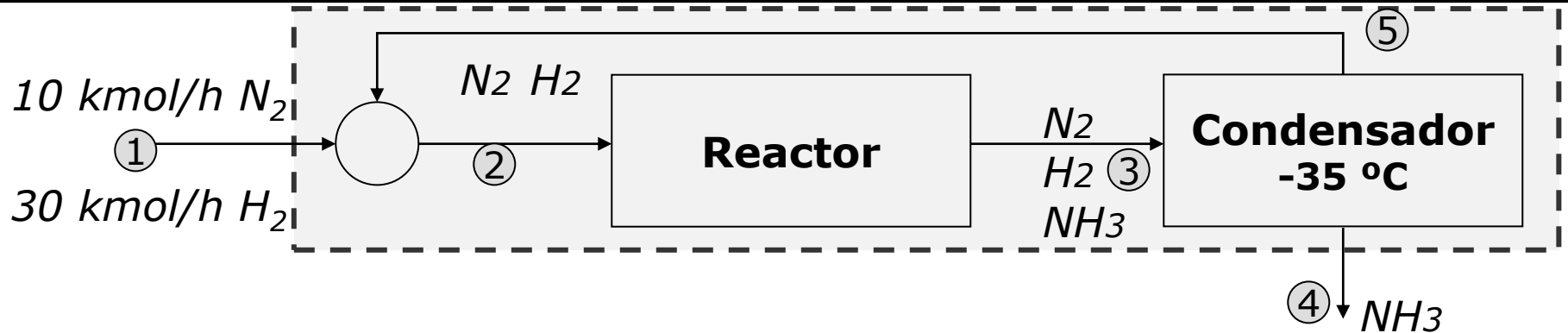
Individualizamos las corrientes con datos y las incógnitas problema



Flujos de entrada, estequiometría de la reacción, reactivo limitante, son iguales al Ejemplo anterior. Elegimos hacer balances diferenciales y usar como unidades: kmol/h

¿Qué tomamos como sistema para efectuar los balances?

Resolución



Si elegimos hacer balance en : **Sistema completo**

Ecuaciones de balance

(Balance de N₂) $0 = 10 - \text{vel cons. N}_2$

(Balance de H₂) $0 = 30 - \text{vel cons. H}_2$

(Balance de NH₃) $\omega_{4,\text{NH}_3} = \text{vel form. NH}_3$

$M = 5$

(estequiometría) $\text{vel cons. N}_2 = 1/3 \text{ vel cons. H}_2 = 1/2 \text{ vel form. NH}_3$

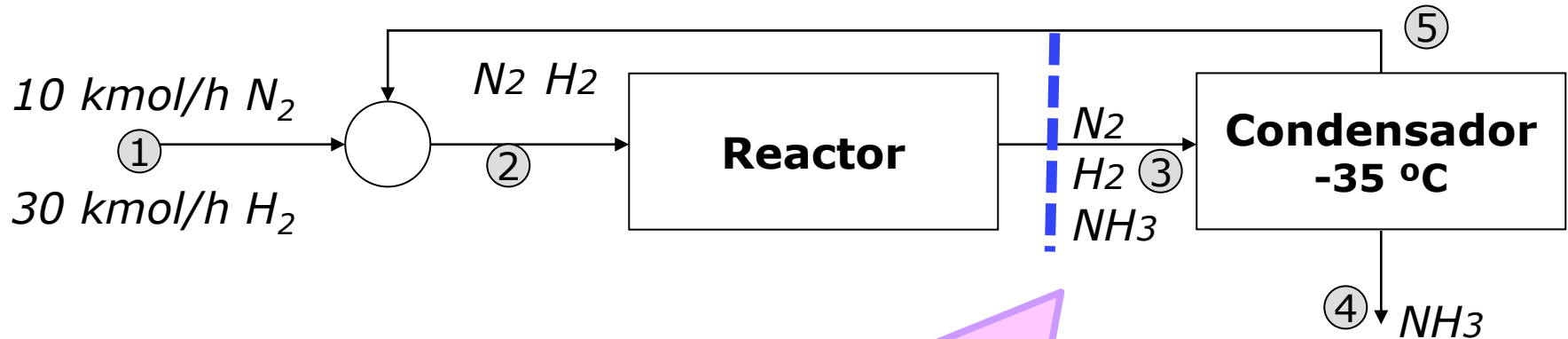
Incógnitas: ω_{4,NH_3} , vel cons. N₂ , vel cons. H₂ , vel form. NH₃

$N = 4$

$M > N$ sistema sobre definido → sobran datos

Pero... ¿y ω_{3,N_2} ?

Resolución

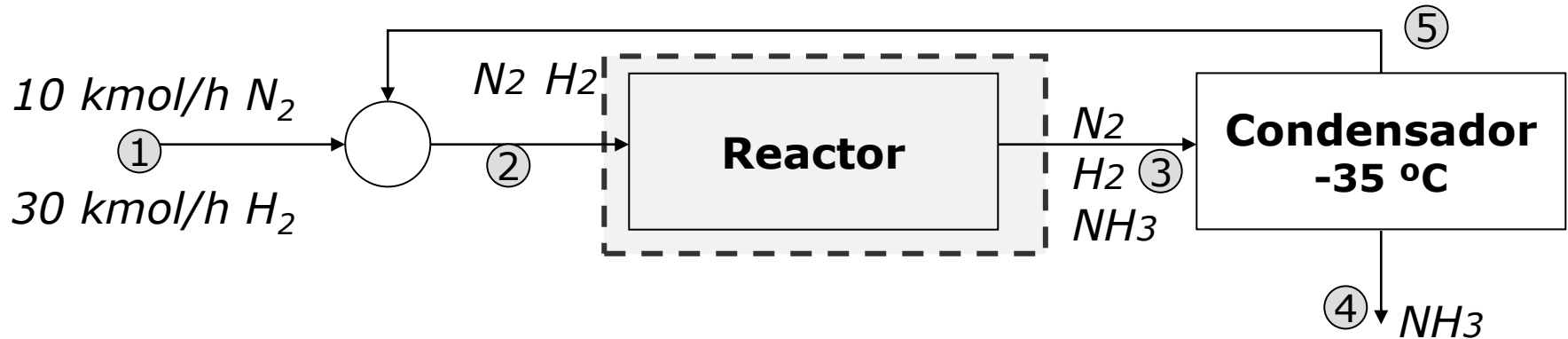


Tal vez convenga que en la elección del sistema, una de sus fronteras sea la salida del reactor.

Así de esa manera, hacemos que ω_{3,N_2} aparezca en alguna de las ecuaciones del BM.

Pero... ¿y ω_{3,N_2} ?

Resolución

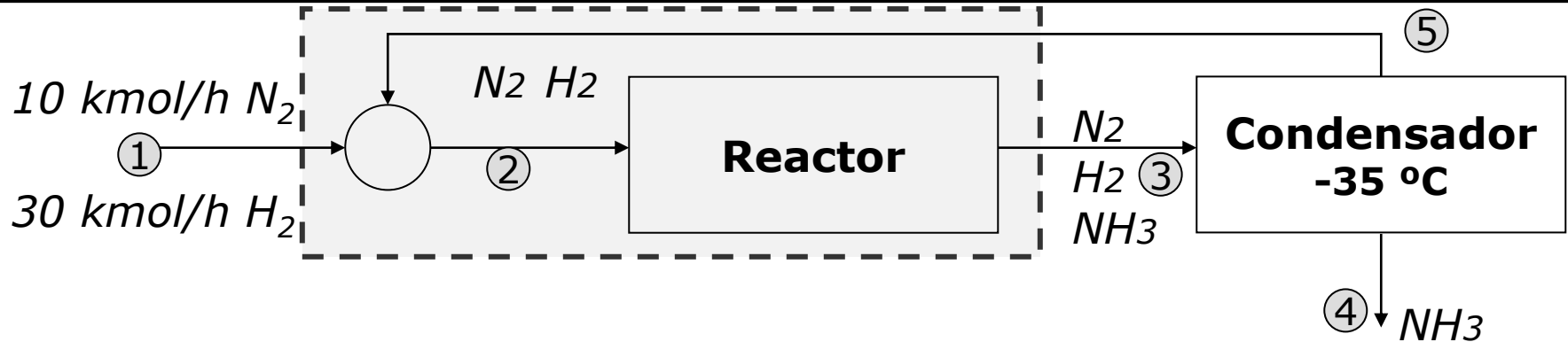


Si elegimos hacer balance en : **Reactor**

Ecuaciones de balance	(Balance de N_2)	$\omega_{3,N_2} = \omega_{2,N_2} - \text{vel cons. } N_2$	M = 6
	(Balance de H_2)	$\omega_{3,H_2} = \omega_{2,H_2} - \text{vel cons. } H_2$	
	(Balance de NH_3)	$\omega_{3,NH_3} = \text{vel form. } NH_3$	
Relaciones de conversión	(estequiometría)	$\text{vel cons. } N_2 = 1/3 \text{ vel cons. } H_2 = 1/2 \text{ vel form. } NH_3$	
	(grado de avance)	$\text{vel cons. } N_2 = 0,15 \omega_{2,N_2}$	
Incógnitas:	$\omega_{2,N_2}, \omega_{2,H_2}, \omega_{3,H_2}, \omega_{3,N_2}, \omega_{3,NH_3},$ $\text{vel cons. } N_2, \text{vel cons. } H_2, \text{vel form. } NH_3$		N = 8

M < N sistema no definido → faltan datos

Resolución



Si elegimos hacer balance en : Mezclador y Reactor

Ecuaciones balance	{	(Balance de N ₂)	$\omega_{3,N_2} = 10 + \omega_{5,N_2} - \text{vel cons } N_2$	M = 8
		(Balance de H ₂)	$\omega_{3,H_2} = 30 + \omega_{5,H_2} - \text{vel cons } H_2$	
		(Balance de NH ₃)	$\omega_{3,NH_3} = 0 + 0 + \text{vel form } NH_3$	

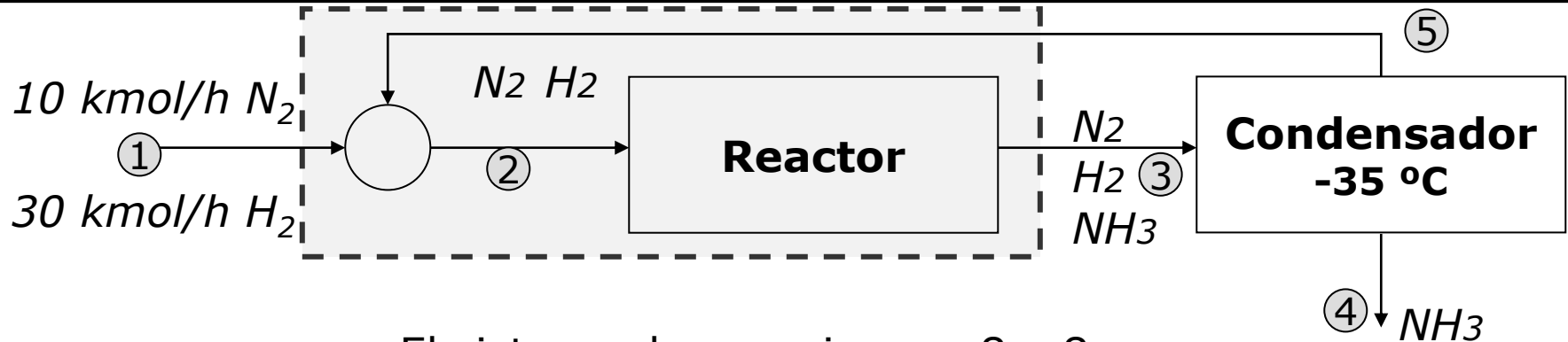
Ecuaciones por recirculación $\omega_{3,N_2} = \omega_{5,N_2}$ $\omega_{3,H_2} = \omega_{5,H_2}$

Relaciones de conversión	{	(estequiometría)	$\text{vel cons. } N_2 = 1/3 \text{ vel cons. } H_2 = 1/2 \text{ vel form. } NH_3$
		(grado de avance)	$\text{vel cons. } N_2 = 0,15 \omega_{2,N_2}$

Incógnitas:	$\omega_{5,N_2}, \omega_{5,H_2}, \omega_{3,H_2}, \omega_{3,N_2}, \omega_{3,NH_3},$	N = 8
	$\text{vel cons. } N_2, \text{ vel cons. } H_2, \text{ vel form. } NH_3$	

M = N sistema definido → **solución única** ✓

Resolución



El sistema de ecuaciones 8 x 8:

(Balance de N_2) $\omega_{3,N_2} = 10 + \omega_{5,N_2} - \text{vel cons } N_2$ (1)

(Balance de H_2) $\omega_{3,H_2} = 30 + \omega_{5,H_2} - \text{vel cons } H_2$ (2)

(Balance de NH_3) $\omega_{3,NH_3} = 0 + 0 + \text{vel form } NH_3$ (3)

Relaciones de conversión $\text{vel formación } NH_3 = 2 \times \text{vel consumo } N_2$ (4)

$\text{vel formación } NH_3 = 2/3 \times \text{vel consumo } H_2$ (5)

$\text{vel consumo } N_2 = 0,15 \times (10 + \omega_{5,N_2})$ (6)

Ecuaciones por recirculación $\omega_{3,N_2} = \omega_{5,N_2}$ (7)

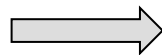
$\omega_{3,H_2} = \omega_{5,H_2}$ (8)

Resolución

Operando...

(Balance de N ₂)	$\omega_{3,N_2} = 10 + \omega_{5,N_2} - \text{vel cons N}_2$	(1)
(Balance de H ₂)	$\omega_{3,H_2} = 30 + \omega_{5,H_2} - \text{vel cons H}_2$	(2)
(Balance de NH ₃)	$\omega_{3,NH_3} = 0 + 0 + \text{vel form NH}_3$	(3)
Ecuaciones por conversión	vel formación NH ₃ = 2 x vel consumo N ₂	(4)
	vel formación NH ₃ = 2/3 x vel consumo H ₂	(5)
	vel consumo N ₂ = 0,15 x (10 + ω_{5,N_2})	(6)
Ecuaciones por recirculación	$\omega_{3,N_2} = \omega_{5,N_2}$	(7)
	$\omega_{3,H_2} = \omega_{5,H_2}$	(8)

$$\omega_{3,N_2} = 10 + \omega_{3,N_2} - 0,15 \times (10 + \omega_{3,N_2})$$



$$\omega_{3,N_2} = 56,7 \text{ kmol/h}$$

Ya hemos resuelto algunos problemas...

A esa altura podemos analizar cuáles fueron los pasos que dimos en todos los casos para resolver esos problemas

Pasos en el abordaje de los problemas que involucran balance de materia

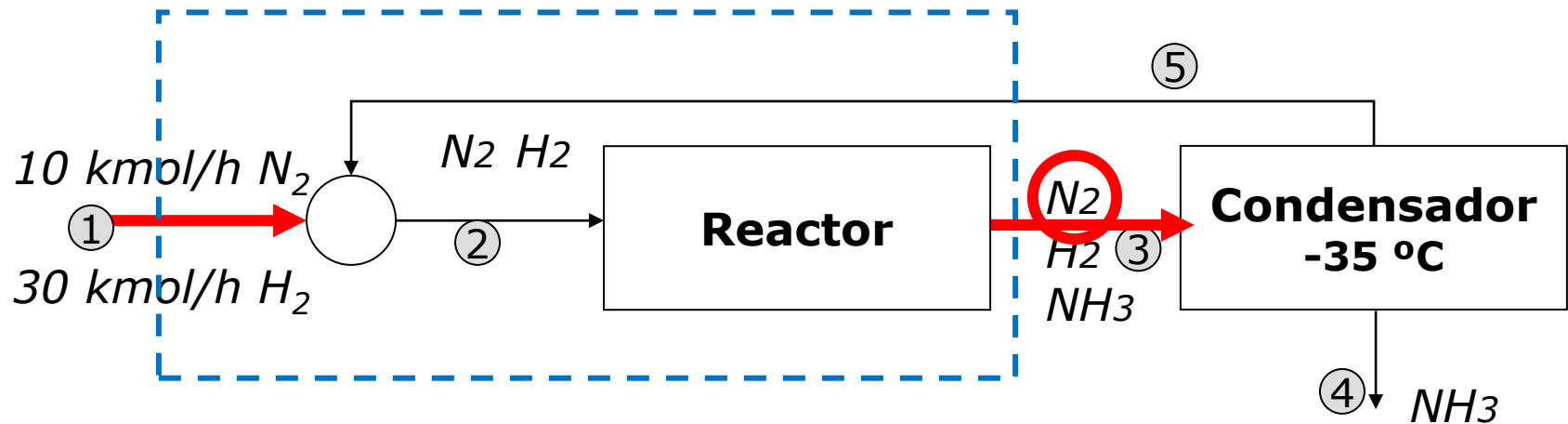
1. Dibujar el diagrama de bloques
2. Nombrar (numerar) las corrientes de materiales para mejor referencia
3. Identificar las corrientes con datos y las que tienen las incógnitas que pretendemos averiguar
4. Elegir si balance entre un Δt o balance diferencial, y transformar las unidades a masa o moles

**PASOS PRELIMINARES PARA
DEJAR BIEN CLARO EL PLANTEO
DEL PROBLEMA**

Pasos en el abordaje de los problemas que involucran balance de materia

1. Dibujar el diagrama de bloques
2. Nombrar los flujos de materiales para el sistema
3. Identificar los datos conocidos y las que tenemos que averiguar
4. Elegir si se trata de un balance entre un Δt o balance diferencial, y transformar las unidades a masa o moles
5. Elegir el sistema a analizar

LOS PASOS QUE SIGUEN SON
LOS QUE REQUIEREN MAYOR
DESTREZA



En lo posible, cualquier elección que se haga de sistema a analizar debería tener las corrientes con datos y con la(s) incógnita(s) como entradas o salidas

Otra cosa que debemos tomar en cuenta en la elección del sistema a analizar es que quede bien determinado...

Pasos en el abordaje de los problemas que involucran balance de materia

1. Dibujar el diagrama de bloques
2. Nombrar (numerar) las corrientes de materiales para mejor referencia
3. Identificar las corrientes con datos y las que tienen las incógnitas que pretendemos averiguar
4. Elegir si balance entre un Δt o balance diferencial, y transformar las unidades a masa o moles
5. Elegir el sistema a analizar
6. Plantear las ecuaciones y asegurar que el sistema queda bien determinado (de lo contrario elegir otro sistema)

¿Cuáles son las fuentes de ecuaciones?

- **Balances de materia**
Ecuaciones de balance (tantas como especies intervinientes)
- **Relaciones estequiométricas**
Ecuaciones que vinculan las conversiones de las especies que intervienen en cada reacción
- **Ecuaciones de diseño**
Ej. cantidades, composiciones, relaciones entre corrientes, grados de avance de reacciones (en general son datos)
- **Relaciones termodinámicas**
Ej. relación de equilibrio, ley de gases ideales, diagramas de fases, etc.
- **Especificación de algunas variables o restricciones particulares**
Ej. suma de todas las fracciones molares de los componentes de una mezcla = 1, etc.

Ecuaciones que se obtienen de Balances de Materia

Podemos formular una ecuación de balance por cada especie interviniente (podemos también usar la ecuación de balance de materia global pero ésta no será independiente de las anteriores)

Supongamos que intervienen n especies (A, B, N)

$$\text{Ec. 1 (Balance de A)} \quad w_{A,\text{salida}} + \dot{M}_{A,\text{acum}} = w_{A,\text{entrada}} + \dot{M}_{A,\text{formación}} - \dot{M}_{A,\text{consumo}}$$

$$\text{Ec. 2 (Balance de B)} \quad w_{B,\text{salida}} + \dot{M}_{B,\text{acum}} = w_{B,\text{entrada}} + \dot{M}_{B,\text{formación}} - \dot{M}_{B,\text{consumo}}$$

.....

.....

$$\text{Ec. n (Balance de N)} \quad w_{N,\text{salida}} + \dot{M}_{N,\text{acum}} = w_{N,\text{entrada}} + \dot{M}_{N,\text{formación}} - \dot{M}_{N,\text{consumo}}$$

$$\text{Ec. (n+1) (Balance Global)} \quad w_{\text{tot},\text{salida}} + \dot{M}_{\text{tot},\text{acum}} = w_{\text{tot},\text{entrada}} + \dot{M}_{\text{tot},\text{formación}} - \dot{M}_{\text{tot},\text{consumo}}$$

Se pueden formular (n+1) balances, pero sólo n serán independientes.

Podemos formular tantas ecuaciones de balance de materia como especies intervinientes)

Ecuaciones que se obtienen a partir de las Relaciones estequiométricas

Supongamos que tiene lugar una reacción química donde intervienen n especies según



Entonces, considerando los cambios de moles...

$$\begin{aligned} (\text{vel cons } \mathbf{A}) / a &= (\text{vel cons } \mathbf{B}) / b = \dots = (\text{vel cons } \mathbf{I}) / i = \\ &= (\text{vel form } \mathbf{J}) / j = (\text{vel form } \mathbf{K}) / k = \dots = (\text{vel form } \mathbf{N}) / n \end{aligned}$$

Una reacción química en la que intervengan n especies, aportará:

- n incógnitas (las conversiones –cantidades generadas o consumidas– de cada especie)
- $(n-1)$ ecuaciones que vinculan dichas conversiones

Cada reacción química independiente tiene como efecto el aumentar en 1 los grados de libertad del sistema de ecuaciones (agrega 1 incógnita, por ej. el grado de conversión de la reacción).

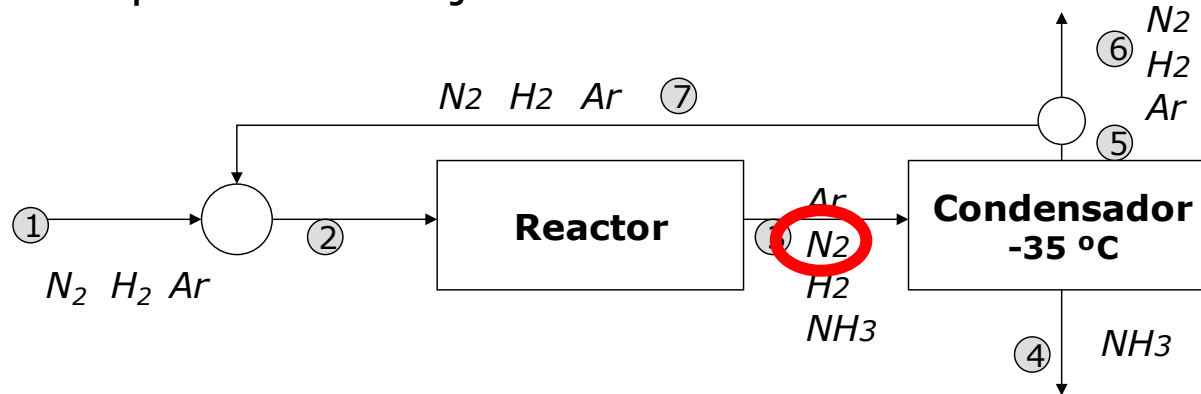
Pasos en el abordaje de los problemas de balance de materia

1. Dibujar el diagrama de bloques
2. Nombrar (numerar) las corrientes de materiales para mejor referencia
3. Identificar las corrientes con datos y las que tienen las incógnitas que pretendemos averiguar
4. Elegir si balance entre un Δt o balance diferencial, y transformar las unidades a masa o moles
5. Elegir el sistema a analizar
6. Plantear las ecuaciones y asegurar que el sistema queda bien determinado (de lo contrario elegir otro sistema)
7. Resolver las ecuaciones planteadas

EJEMPLO

Sistema con recirculación y purga

Siguiendo con el proceso del ejercicio anterior ...



Ahora se considera la entrada de Argón ($PA = 40$) en la corriente de suministro, cuyo porcentaje en peso con relación al nitrógeno es del 3% en la corriente.

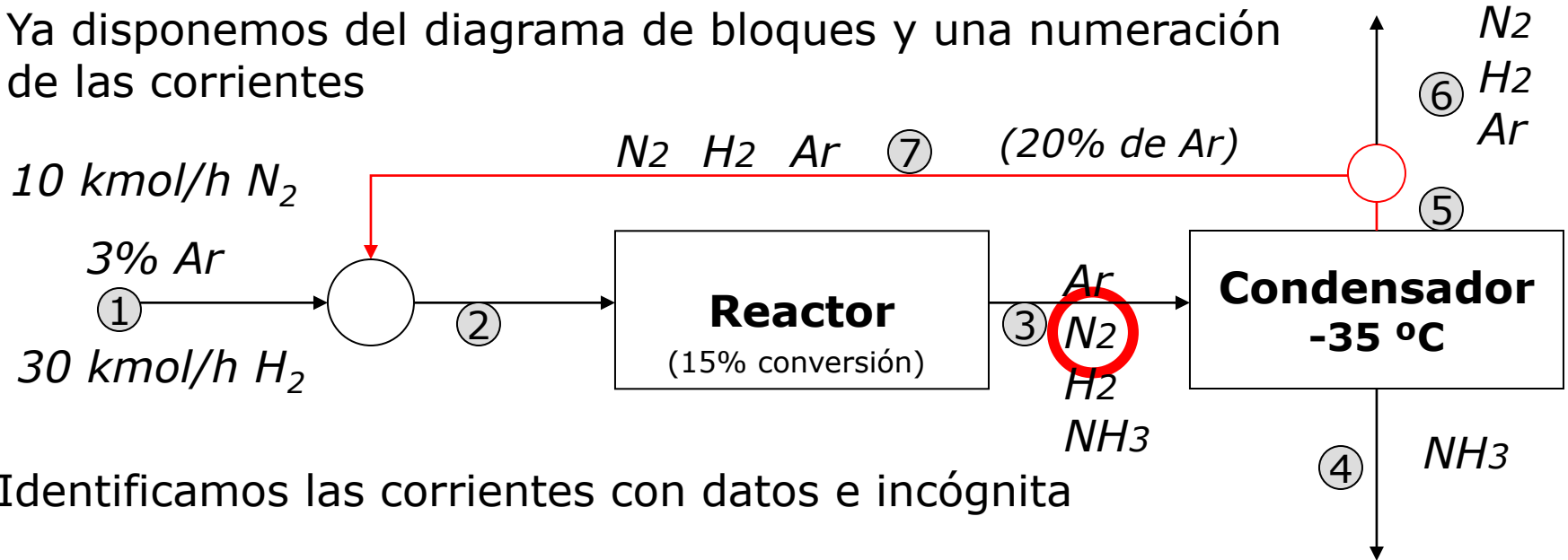
Para un buen funcionamiento del proceso la fracción molar del Argón no puede superar el valor de 0,2 en la recirculación, por lo que se agrega una purga al proceso en la recirculación luego del condensador para mantener esa fracción en 0,2.

La conversión en el reactor, expresada en Nitrógeno, es del 15%.

Calcular el caudal de la corriente de N_2 que ingresa al condensador en régimen de equilibrio.

Resolución

Ya disponemos del diagrama de bloques y una numeración de las corrientes



Identificamos las corrientes con datos e incógnita

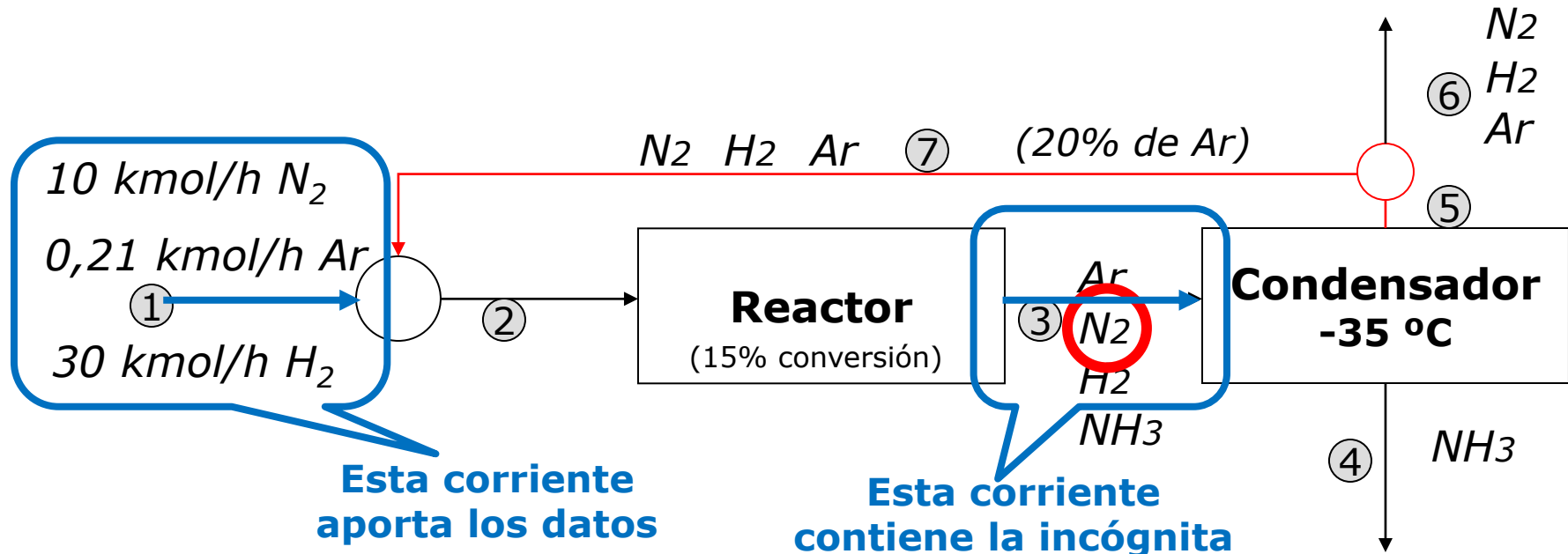
Estado estacionario + datos de flujos → haremos balance diferencial

Transformar las unidades a masa o moles: *flujos en kmoles*

3% Ar en peso del N₂ que ingresa = $0,03 \times 10 \times 28 = 8,4 \text{ kg/h} \rightarrow 0,21 \text{ kmol/h}$

kg/h de N₂ que ingresan

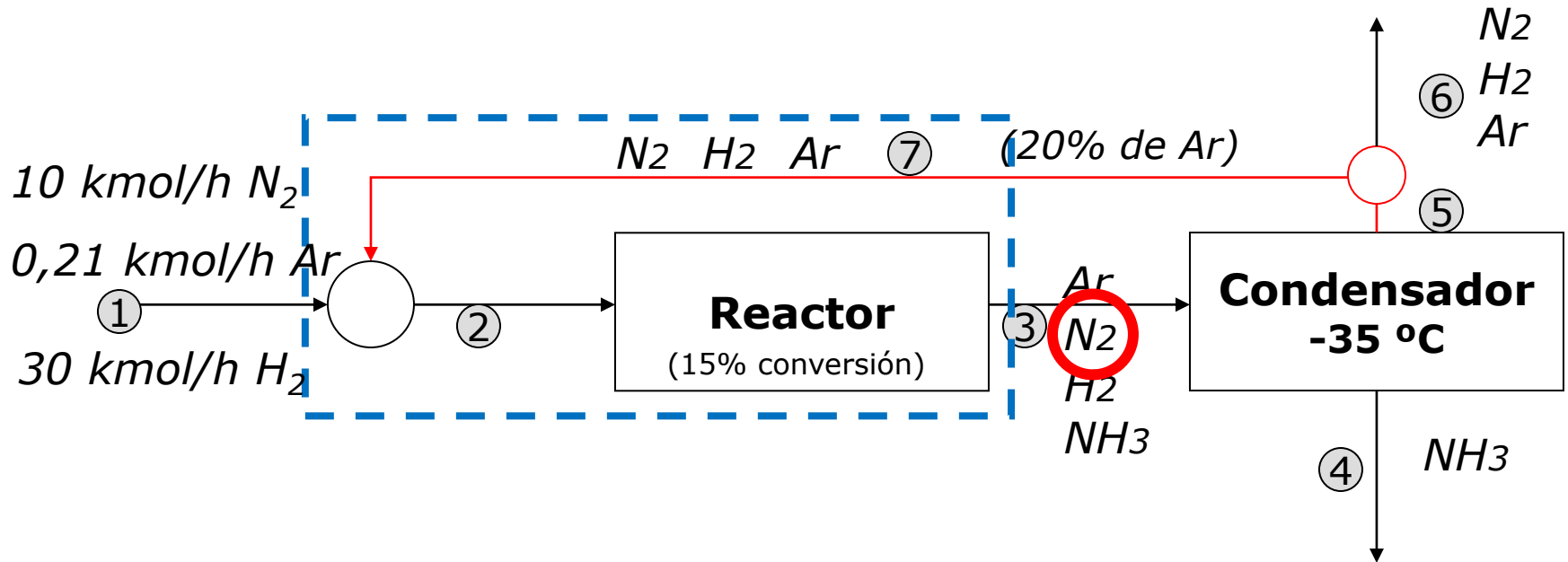
Resolución



Elegir el sistema a analizar (donde haremos balances)

La primer elección es un sistema tal que las corrientes con datos y con la incógnita atraviesen sus fronteras (de esta manera, datos e incógnitas aparecen en las ecuaciones de balance)

Resolución

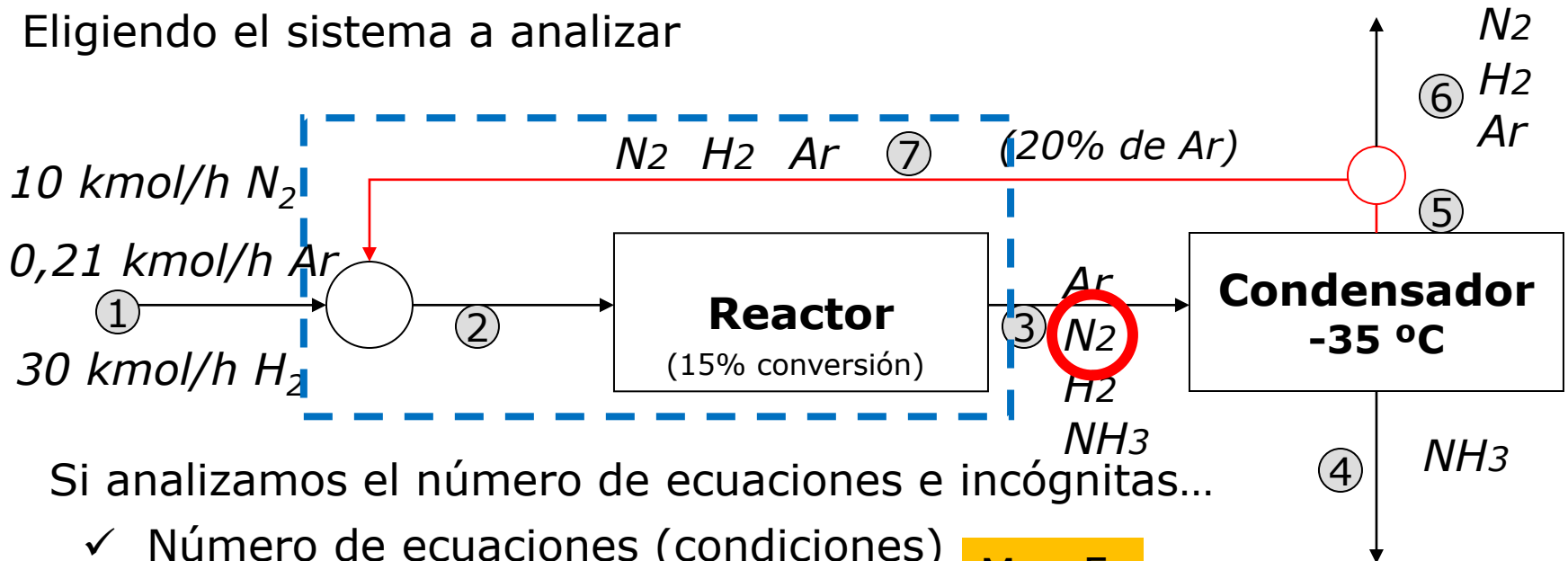


Elegir el sistema a analizar (donde haremos balances)

La primer elección es un sistema tal que las corrientes con datos y con la incógnita atraviesen sus fronteras (de esta manera, datos e incógnitas aparecen en las ecuaciones de balance)

Resolución

Eligiendo el sistema a analizar



Si analizamos el número de ecuaciones e incógnitas...

- ✓ Número de ecuaciones (condiciones) **$M = 5$**
 - + 4 balances de 4 especies
 - 1 dependencia por reacción química (= 3 incógnitas y 2 ec. indep)
 - + 1 condición por grado de avance
 - + 1 relación (% molar de Ar en corriente 7)

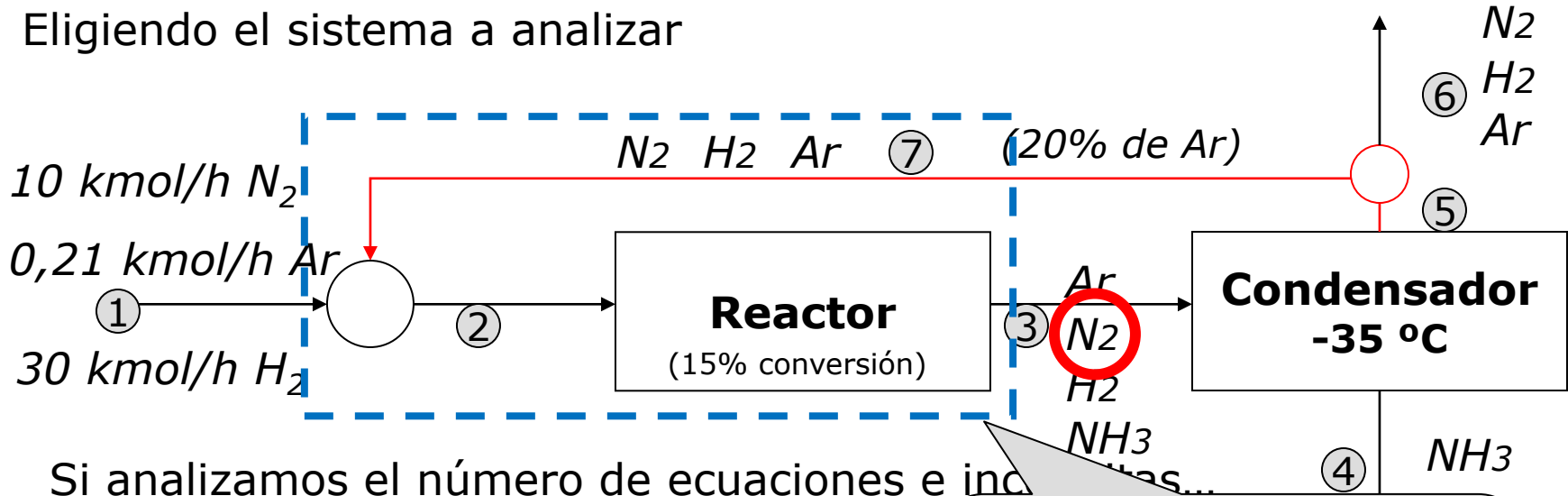
- ✓ Número de variables, **$N = 7$**

Flujos de las especies presentes en las corrientes 3 y 7

$M < N$, sistema NO DETERMINADO

Resolución

Eligiendo el sistema a analizar



Si analizamos el número de ecuaciones e incógnitas...

- ✓ Número de ecuaciones (condiciones)
 - + 4 balances de 4 especies
 - 1 dependencia por reacción química
 - + 1 condición por grado de avance
 - + 1 relación (% molar de Ar en corriente)

✓ Número de variables, **$N = 7$**

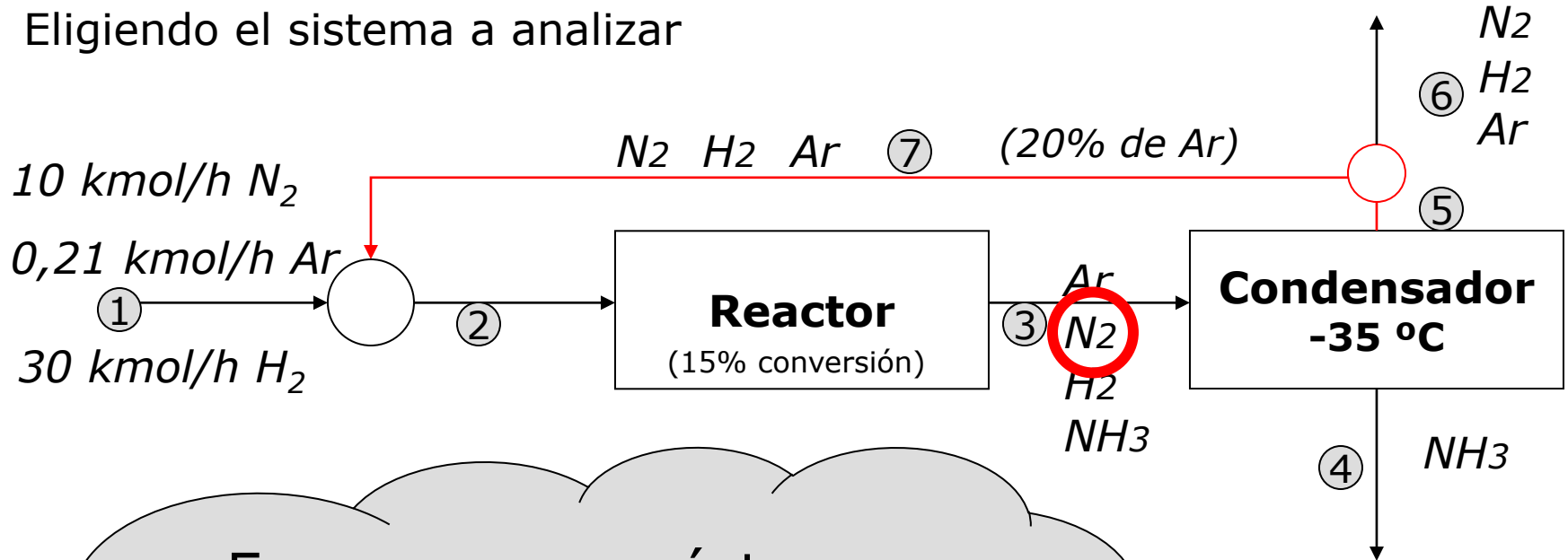
Flujos de las especies presentes en las corrientes 3 y 7

$M < N$, sistema NO DETERMINADO

LA ELECCION DE ESTE SISTEMA NO SIRVE PUES NO QUEDA DETERMINADO

Resolución

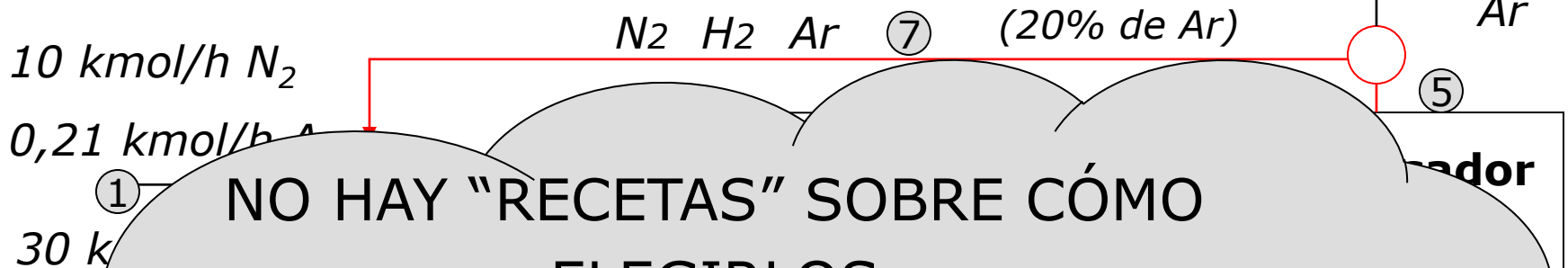
Eligiendo el sistema a analizar



En casos como éste,
deberemos realizar más
de un balance en
sistemas diferentes

Resolución

Eligiendo el sistema a analizar

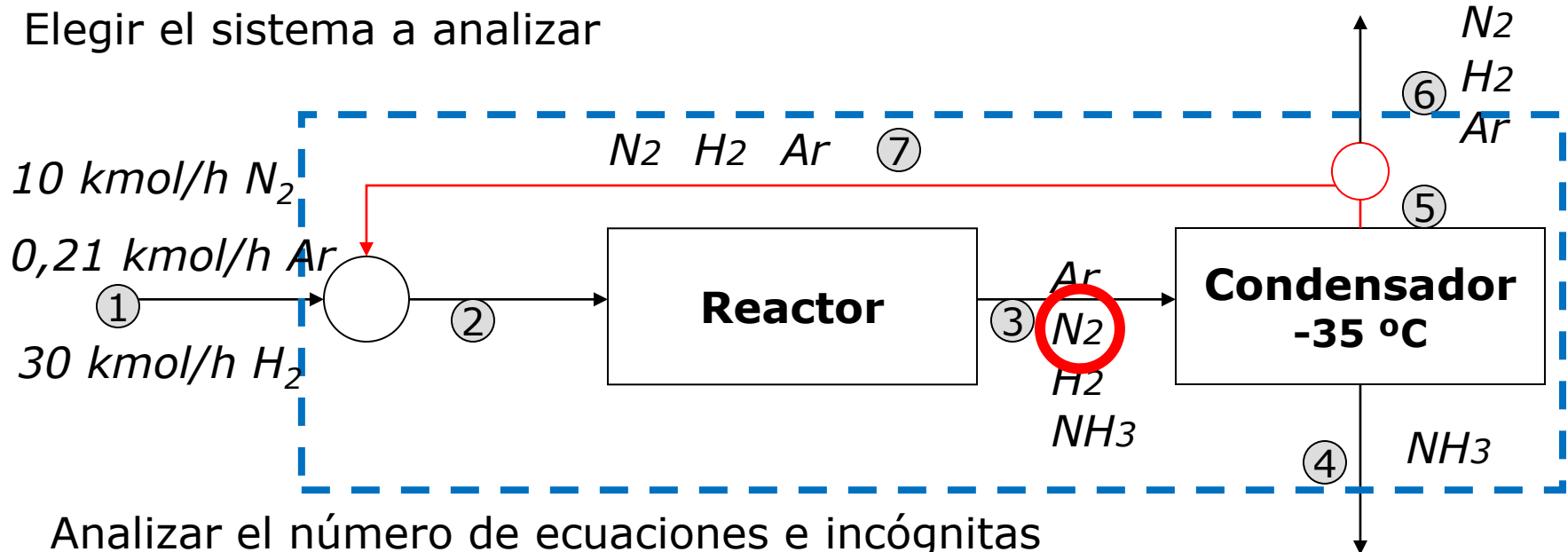


NO HAY "RECETAS" SOBRE CÓMO ELEGIRLOS

En este caso, empezaremos probando con el sistema completo (por su frontera pasan las corrientes con "datos") (veremos si queda "Determinado")

Realizando el Balance de materia

Elegir el sistema a analizar

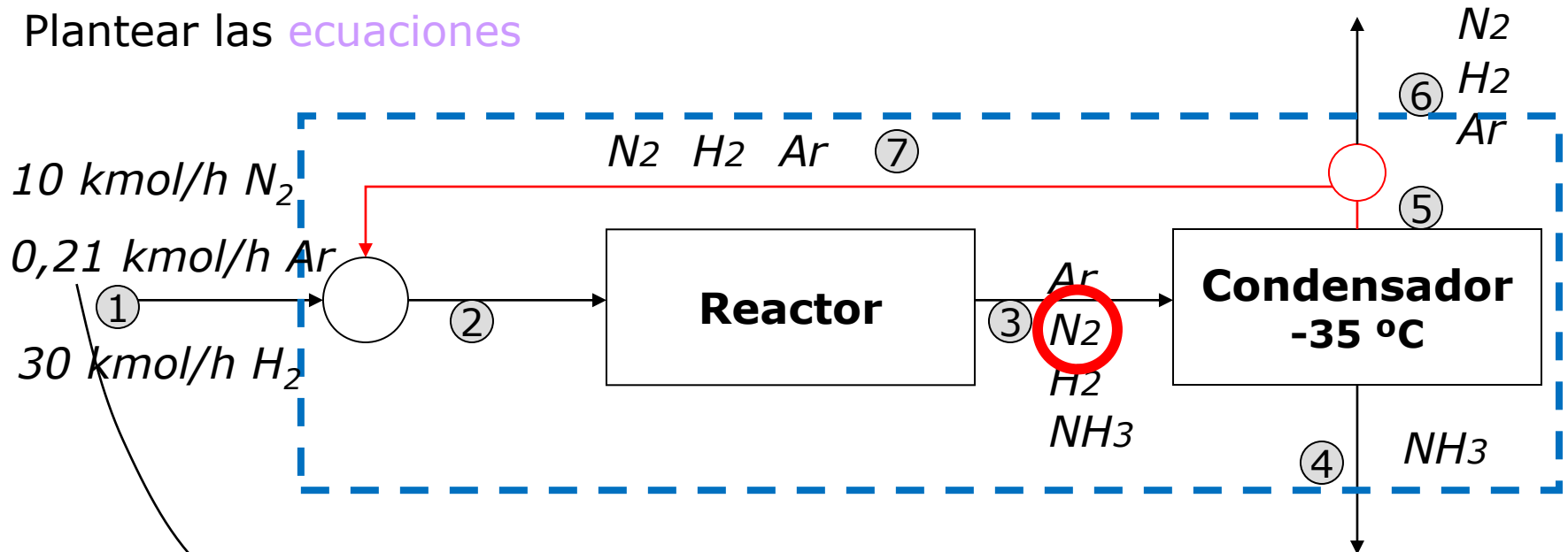


Analizar el número de ecuaciones e incógnitas

- ✓ Número de ecuaciones, $M = 4$
 - + 4 balances de 4 especies
 - 1 dependencia por reacción química
 - + 1 condición por fracción molar de Argón
 - ✓ Número de variables, $N = 4$ (corrientes 4 y 6)
- $M = N$, sistema DETERMINADO

Realizando el Balance de materia

Plantear las ecuaciones

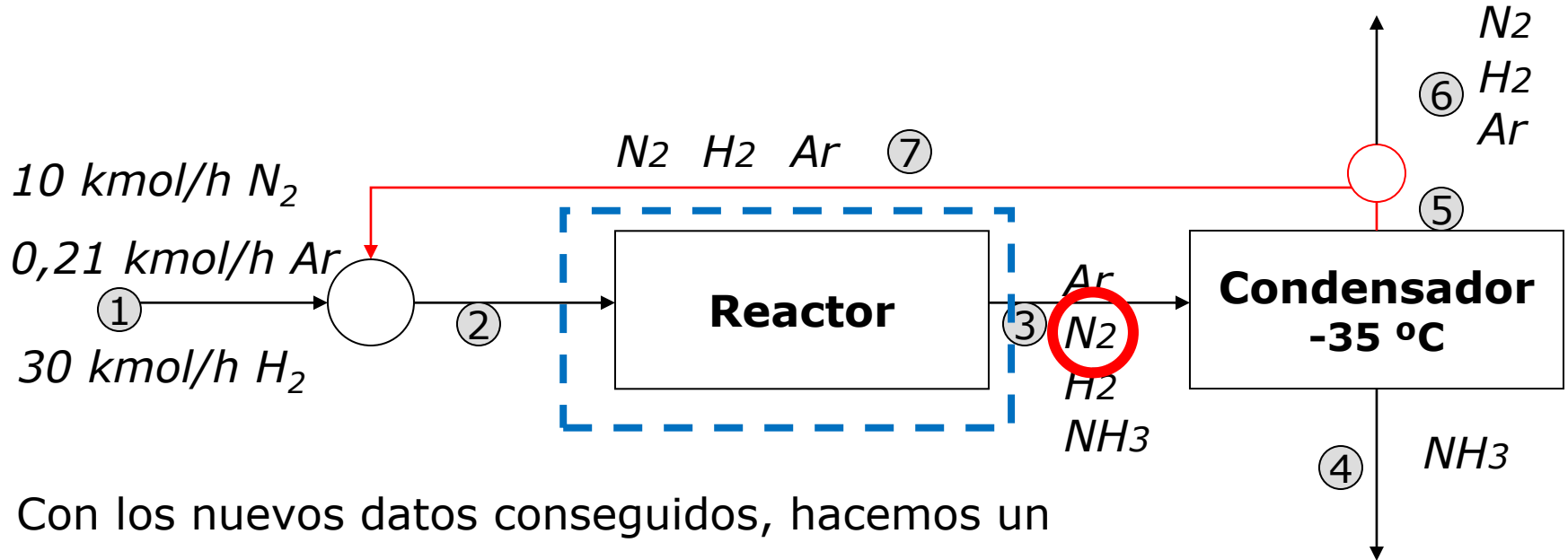


Balance del proceso (unidades \rightarrow kmol/h)

- $\rightarrow W_{6,Ar} = W_{1,Ar}$
 - $\rightarrow W_{6,Ar} = 0,2 (W_{6,N_2} + W_{6,H_2} + W_{6,Ar})$
 - $\rightarrow W_{6,N_2} = 10 - R$
 - $\rightarrow W_{6,H_2} = 30 - 3R$
 - $\rightarrow W_{4,NH_3} = 0 + 2R$
- (donde R = conversión extensiva de la reacción en N_2 en kmol/h)

$$\begin{aligned}
 R &= 9,79 \\
 W_{6,N_2} &= 0,21 \\
 W_{6,H_2} &= 0,63 \\
 W_{4,NH_3} &= 19,58 \\
 W_{6,Ar} &= 0,21
 \end{aligned}$$

Realizando el Balance de masa



Con los nuevos datos conseguidos, hacemos un segundo balance.

Sistema a analizar: N_2 en el Reactor

- $w_{3,N_2} = w_{2,N_2} - 0,15 w_{2,N_2}$
- siendo $0,15 w_{2,N_2} = R$

De donde...

$$w_{3,N_2} = 55,5 \text{ kmol/h}$$

$$R = 9,79$$

$$w_{6,N_2} = 0,21$$

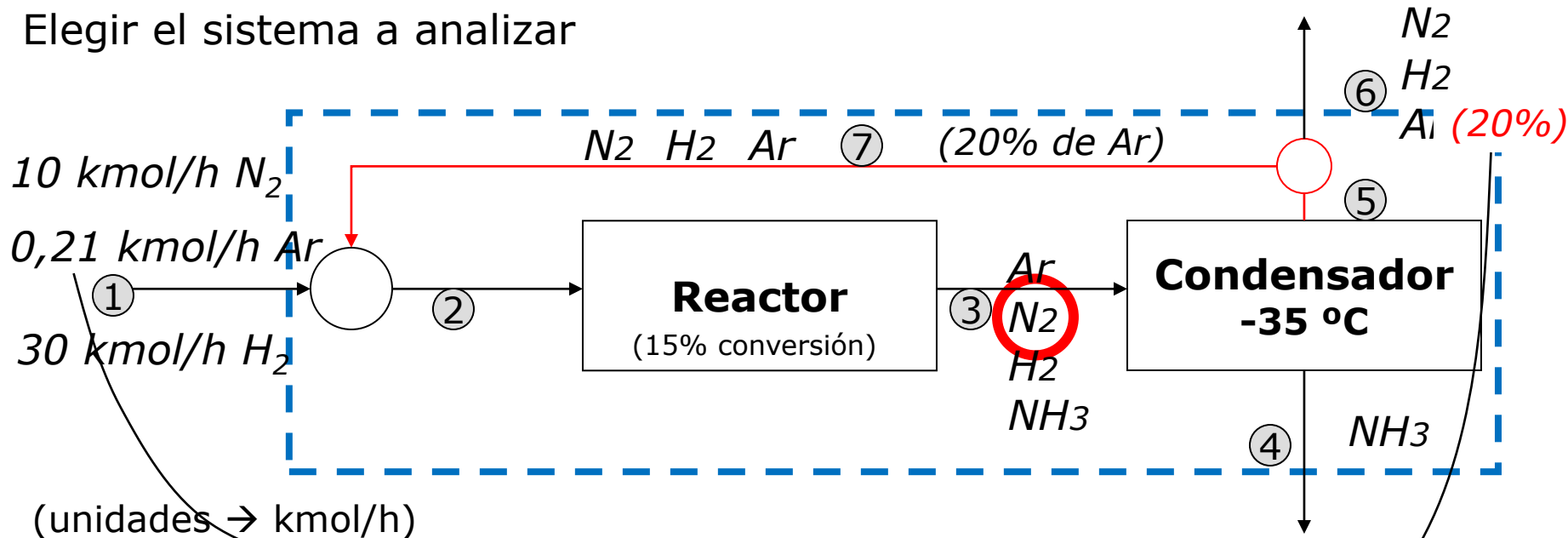
$$w_{6,H_2} = 0,63$$

$$w_{4,NH_3} = 19,58$$

$$w_{6,Ar} = 0,21$$

Resolución

Elegir el sistema a analizar



➤ $\omega_{6,Ar} = \omega_{1,Ar} = 0,21$

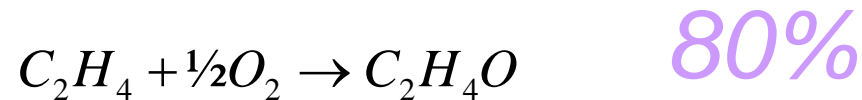
La proporción de Ar en 6 es la misma que en 7

➤ $\omega_{6,Ar} = 0,2 (\omega_{6,N_2} + \omega_{6,H_2} + \omega_{6,Ar})$

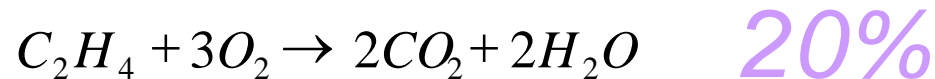
EJEMPLO

(reacciones en paralelo)

El óxido de etileno (C_2H_4O) se produce por oxidación parcial de etileno (C_2H_4) con exceso de aire sobre un catalizador de plata. La reacción básica es:

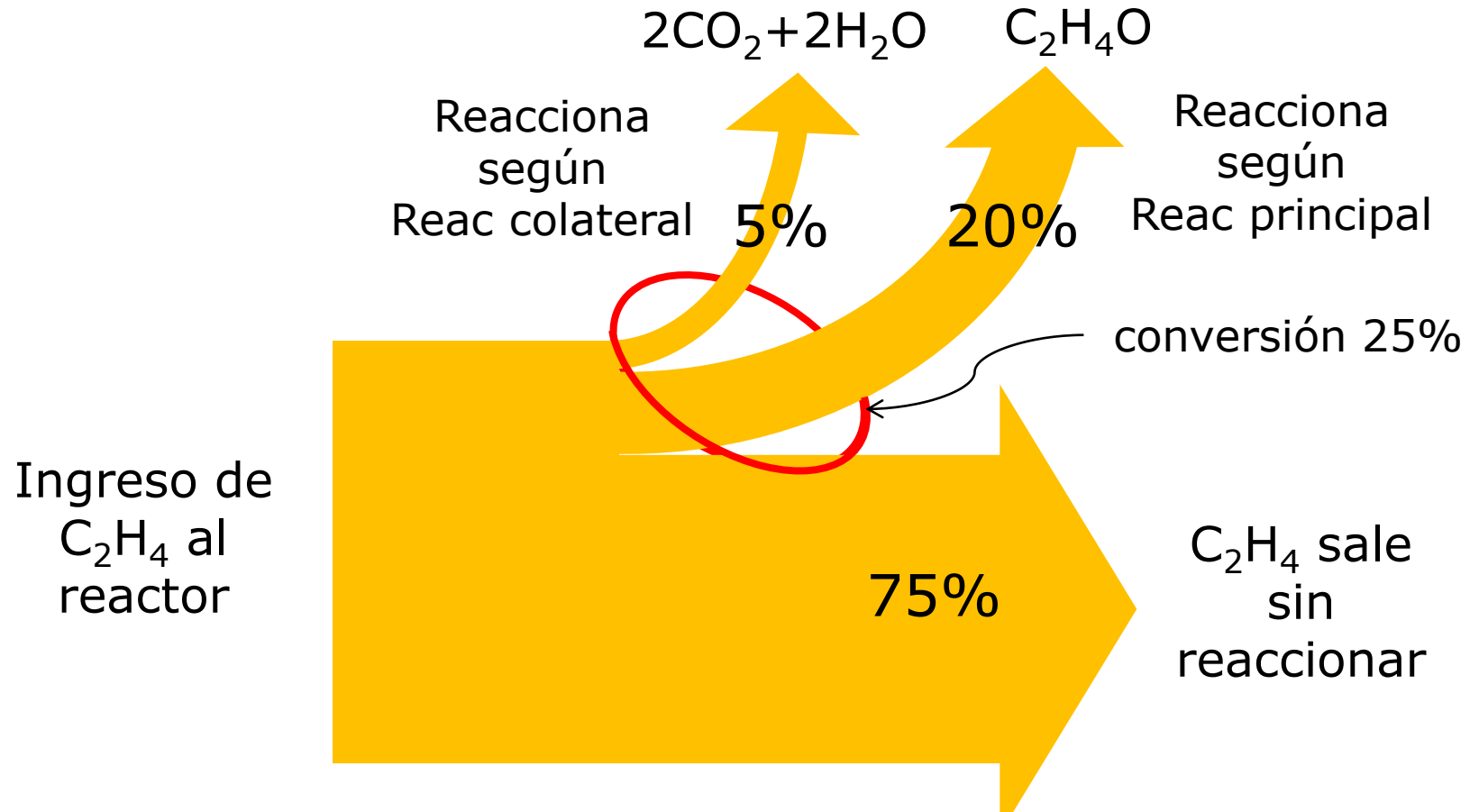


Sin embargo, también se produce una reacción colateral de oxidación del etileno a dióxido de carbono y agua según la ecuación:



Suponer que con una alimentación conteniendo 10% de etileno y 90% de aire, y una conversión de etileno del 25%, las reacciones principal / colateral proceden en una relación 80%/ 20%.

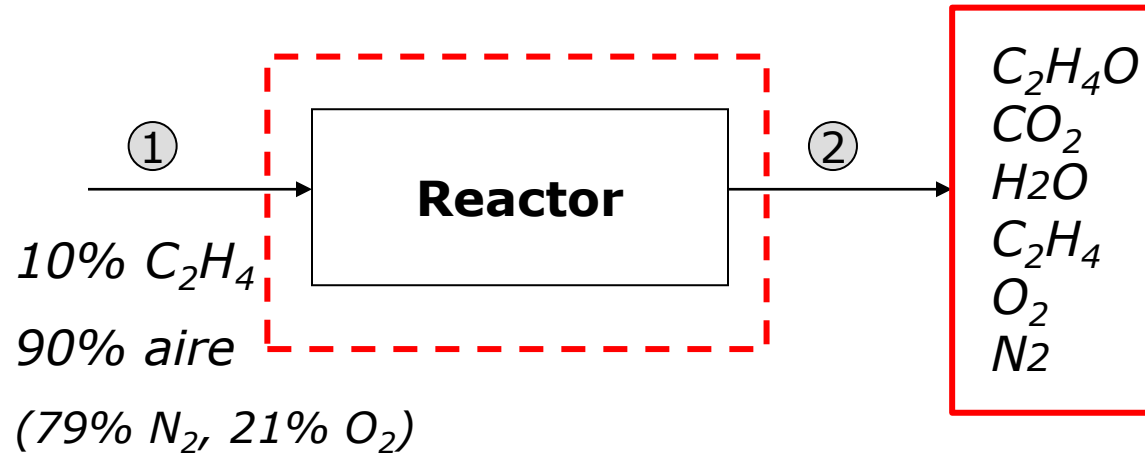
Calcular la **composición de la corriente de salida** del reactor cuando el sistema está en régimen.



Suponer que con una alimentación conteniendo 10% de etileno y 90% de aire, y una conversión de etileno del 25%, las reacciones principal / colateral proceden en una relación 80%/ 20%.

Resolución

Diagrama de bloques, identificación de corrientes y datos



Sistema a analizar: el Reactor

Base de cálculo: 1 kmol de alimentación

0,1 kmol C_2H_4
0,9 kmol aire

Cantidad de incógnitas: 6 (caudales de salida de las 6 especies)

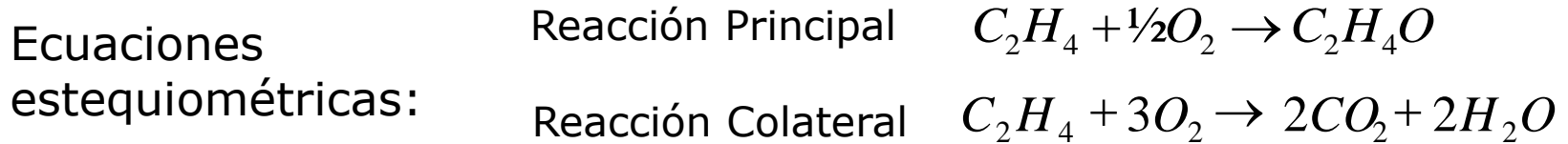
Cantidad de ecuaciones:

6 (balances de masa de cada especie)

- 2 (ecuaciones estequiométricas)

2 (grado de conversión de cada reacción, 20% y 5% respect.)

Resolución



Ecuaciones de balance de masa para cada especie:

(No hay acumulación pues el sistema está "en régimen" (estado estacionario)).

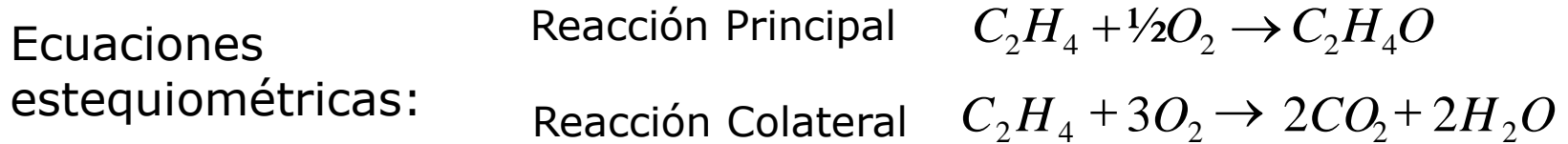
$$\text{salida} = \text{entrada} + \text{generación} - \text{consumo}$$

Cálculo de la generación - consumo (base = 1 kmol de alimentación)

Un 10% de la alimentación (0,1 kmol) es C_2H_4 . De éstos, 20% se convierten a través de la reacción principal y 5% se convierten a través de la reacción colateral.

	C_2H_4	O_2	O	C_2H_4O
REAC PRINC	-0,02	20% de 0,1 kmol		
REAC COLAT	-0,005	5% de 0,1 kmol		
AMBAS				

Resolución



Ecuaciones de balance de masa para cada especie:

(No hay acumulación pues el sistema está "en régimen" (estado estacionario)).

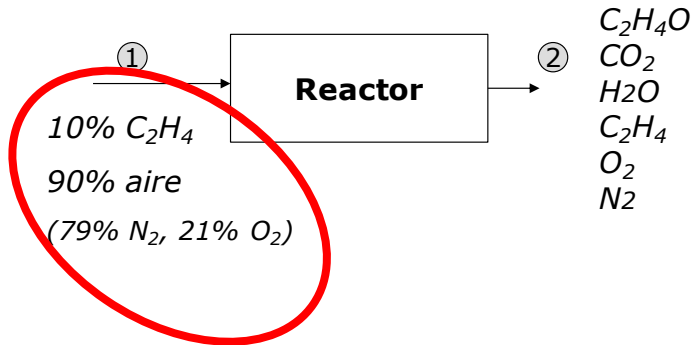
$$\text{salida} = \text{entrada} + \text{generación} - \text{consumo}$$

Cálculo de la generación - consumo (base = 1 kmol de alimentación)

Un 10% de la alimentación (0,1 kmol) es C_2H_4 . De éstos, 20% se convierten a través de la reacción principal y 5% se convierten a través de la reacción colateral.

	C_2H_4	O_2	CO_2	H_2O	C_2H_4O
REAC PRINC	-0,02	-0,01			0,02
REAC COLAT	-0,005	-0,015	0,01	0,01	
AMBAS	-0,025	-0,025	0,010	0,010	0,020

Resolución



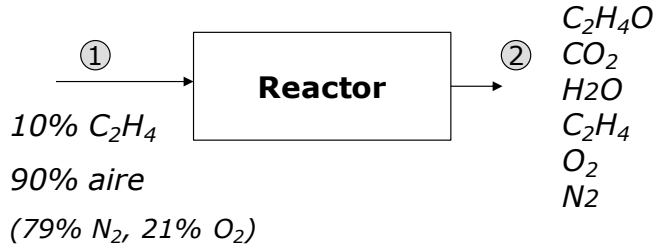
generación - consumo (base = 1 kmol de alimentación)

	C_2H_4	O_2	CO_2	H_2O	C_2H_4O
REAC PRINC	-0,02	-0,01			0,02
REAC COLAT	-0,005	-0,015	0,01	0,01	
AMBAS	-0,025	-0,025	0,010	0,010	0,020

Balance de cada especie (base = 1 kmol de alimentación)

	entrada (kmol)	generación - consumo (kmol)	salida (kmol)	Composición % v/v
C_2H_4O	0			
CO_2	0			
H_2O	0			
C_2H_4	0,1			
O_2	$0,9 \times 0,21 = 0,189$			
N_2	$0,9 \times 0,79 = 0,711$			

Resolución



generación - consumo (base = 1 kmol de alimentación)

	C_2H_4	O_2	CO_2	H_2O	C_2H_4O
REAC PRINC	-0,02	-0,01			0,02
REAC COLAT	-0,005	-0,015	0,01	0,01	
AMBAS	-0,025	-0,025	0,010	0,010	0,020

Balance de cada especie (base = 1 kmol de alimentación)

	entrada (kmol)	generación - consumo (kmol)	salida (kmol)	Composición % v/v
C_2H_4O	0	0,02		
CO_2	0	0,01		
H_2O	0	0,01		
C_2H_4	0,1	-0,025		
O_2	$0,9 \times 0,21 = 0,189$	-0,025		
N_2	$0,9 \times 0,79 = 0,711$	0		

Resolución

①
10% C_2H_4
90% aire
(79% N_2 , 21% O_2)



②
 C_2H_4O
 CO_2
 H_2O
 C_2H_4
 O_2
 N_2

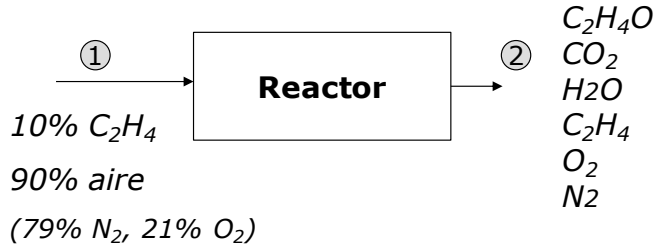
generación - consumo (base = 1 kmol de alimentación)

	C_2H_4	O_2	CO_2	H_2O	C_2H_4O
REAC PRINC	-0,02	-0,01			0,02
REAC COLAT	-0,005	-0,015	0,01	0,01	
AMBAS	-0,025	-0,025	0,010	0,010	0,020

Balance de cada especie (base = 1 kmol de alimentación)

	1 kmol	generación - consumo (kmol)	salida (kmol)	Composición % v/v
C_2H_4O	+	+		
CO_2				
H_2O				
C_2H_4				
O_2				
N_2				

Resolución



generación - consumo (base = 1 kmol de alimentación)

	C_2H_4	O_2	CO_2	H_2O	C_2H_4O
REAC PRINC	-0,02	-0,01			0,02
REAC COLAT	-0,005	-0,015	0,01	0,01	
AMBAS	-0,025	-0,025	0,010	0,010	0,020

Balance de cada especie (base = 1 kmol de alimentación)

	entrada (kmol)	generación - consumo (kmol)	salida (kmol)	Composición % v/v
C_2H_4O	0	0,02	0,02	2,0
CO_2	0	0,01	0,01	1,0
H_2O	0	0,01	0,01	1,0
C_2H_4	0,1	-0,025	0,075	7,6
O_2	$0,9 \times 0,21 = 0,189$	-0,025	0,164	16,6
N_2	$0,9 \times 0,79 = 0,711$	0	0,711	71,8

EJEMPLO

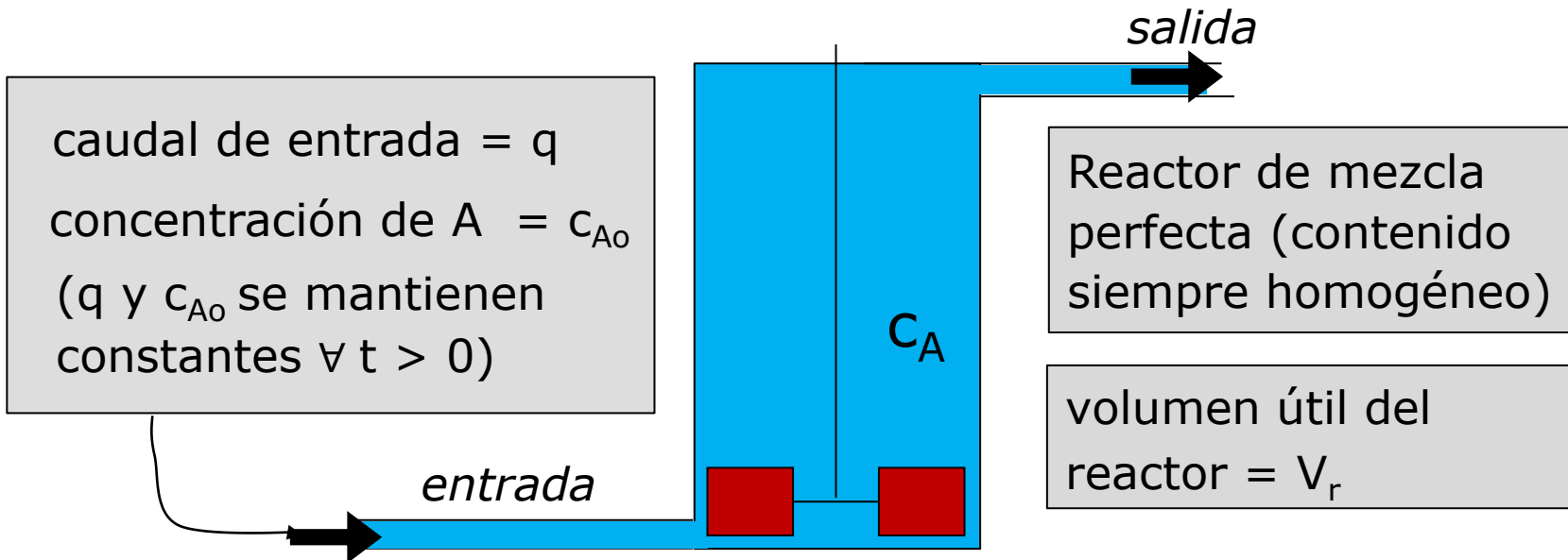
Reactor de tanque continuo idealmente agitado

Reacción irreversible (en fase líquida)



con velocidad de conversión $R_A = kc_A$ $[(\text{kmol}/\text{s})/\text{m}^3]$
(reacción de primer orden)

La densidad del líquido no cambia en el proceso.



EJEMPLO

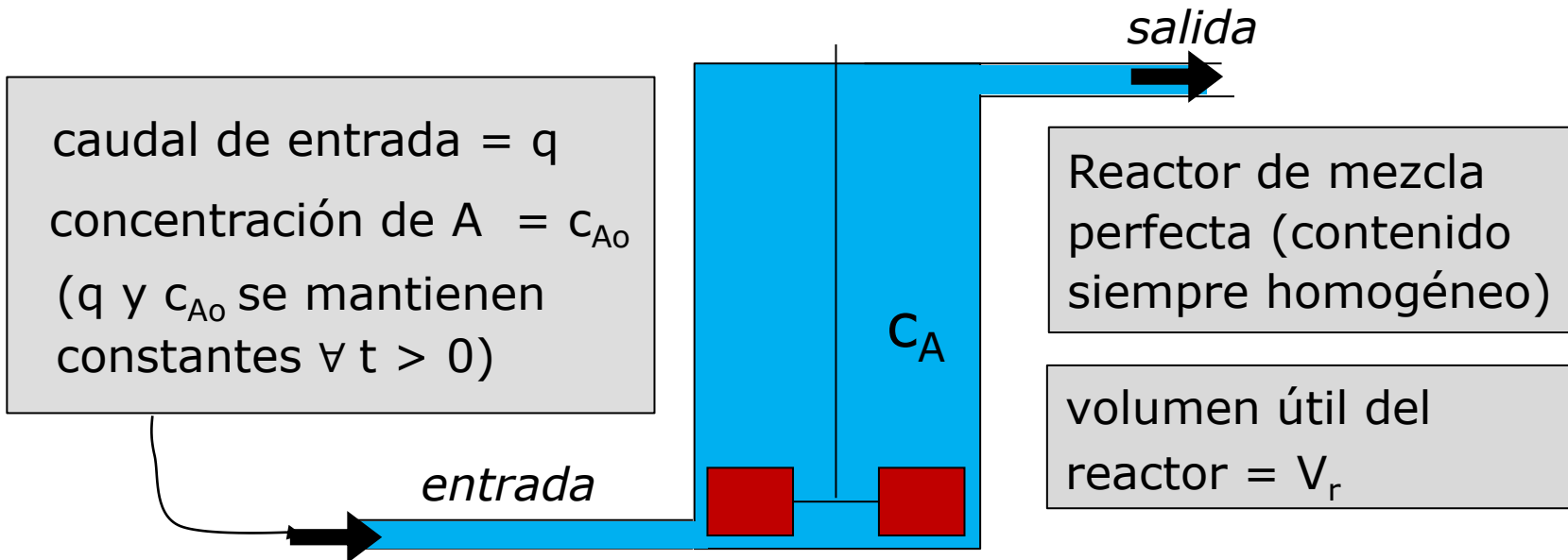
Reactor de tanque continuo idealmente agitado

Reacción irreversible (en fase líquida)



con velocidad de conversión $R_A = kc_A$ $[(\text{kmol}/\text{s})/\text{m}^3]$
(reacción de primer orden)

La densidad del líquido no cambia en el proceso.



EJEMPLO

Reactor de tanque continuo idealmente agitado

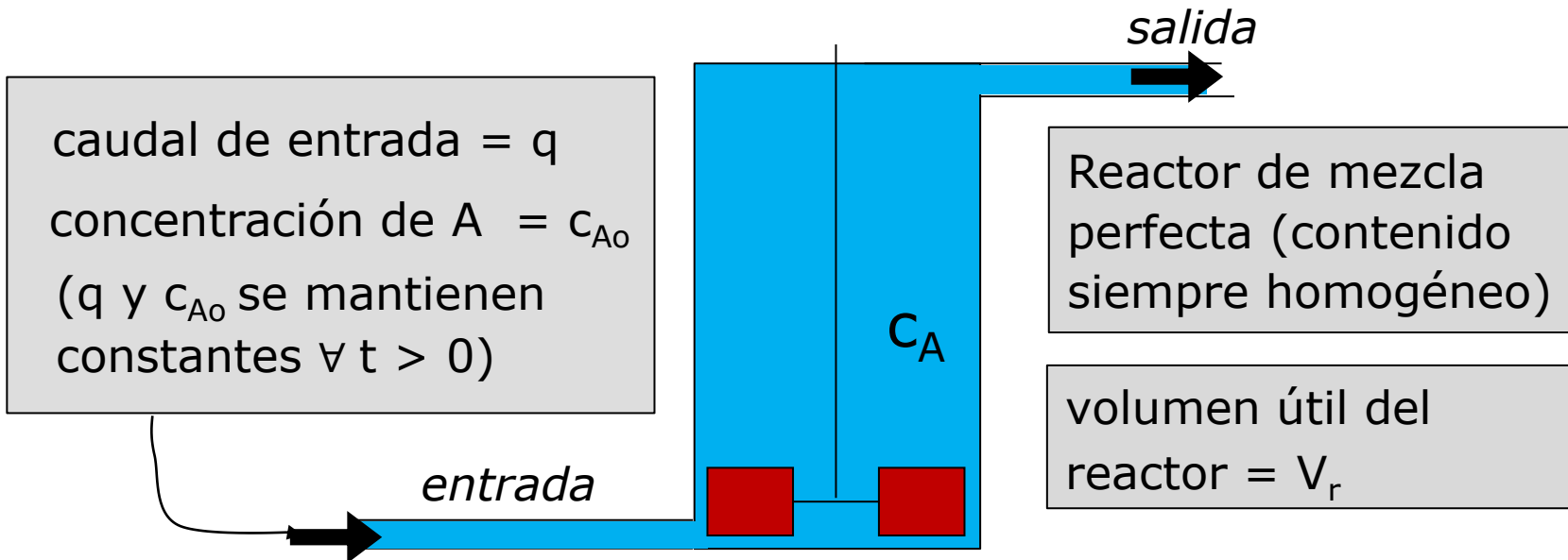
Reacción irreversible (en fase líquida)



**ESTADO
ESTACIONARIO**

con velocidad de conversión $R_A = kc_A$ $[(\text{kmol}/\text{s})/\text{m}^3]$
(reacción de primer orden)

La densidad del líquido no cambia en el proceso.



EJEMPLO

Reactor de tanque continuo idealmente agitado

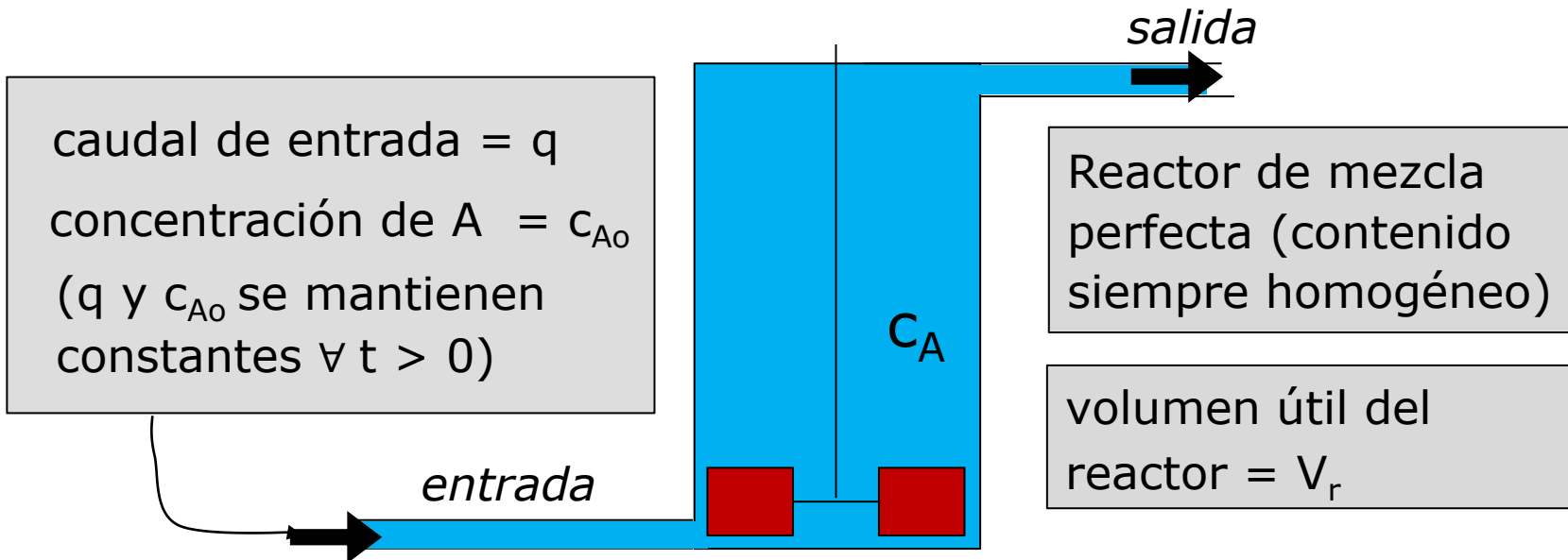
Reacción irreversible (en fase líquida)



**ESTADO
ESTACIONARIO**

con velocidad de conversión $R_A = kc_A$ $[(\text{kmol}/\text{s})/\text{m}^3]$
(reacción de primer orden)

La densidad del líquido no cambia en el proceso.



EJEMPLO

Reactor de tanque continuo idealmente agitado

Balance de masa de A

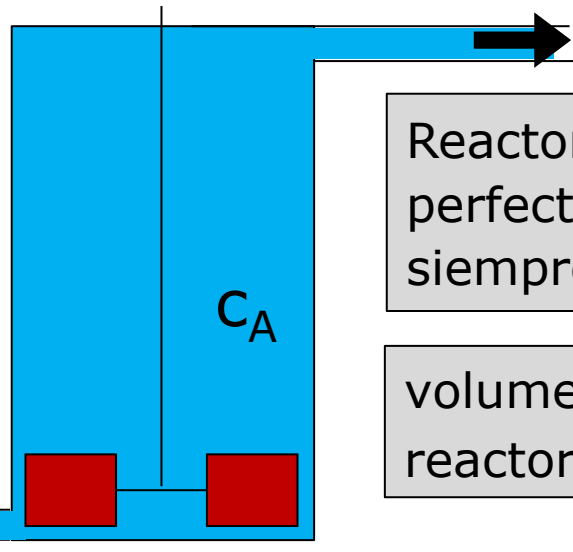
$$\text{vel acum} = \text{vel entr} - \text{vel sal} + \text{vel gen} - \text{vel cons}$$

Velocidad de acumulación de A = 0 (estado estacionario)

Velocidad de entrada de A = $q c_{A0}$ ($\text{m}^3/\text{s})(\text{kmol}/\text{m}^3) = [\text{kmol}/\text{s}]$

Velocidad de salida de A = $q_{\text{salida}} c_A$

caudal de entrada = q
concentración de A = c_{A0}
(q y c_{A0} se mantienen constantes $\forall t > 0$)



Reactor de mezcla perfecta (contenido siempre homogéneo)

volumen útil del reactor = V_r

EJEMPLO

Reactor de tanque continuo idealmente agitado

Balance de masa de A

$$\text{vel acum} = \text{vel entr} - \text{vel sal} + \text{vel gen} - \text{vel cons}$$

Velocidad de acumulación de A = 0 (estado estacionario)

Velocidad de entrada de A = $q c_{A0}$ ($\text{m}^3/\text{s})(\text{kmol}/\text{m}^3) = [\text{kmol}/\text{s}]$

Velocidad de salida de A = $q_{\text{salida}} c_A = q c_A$

¿qué relación hay entre q_{salida} y q ?

caudal de entrada = q
concentración de A = c_{A0}
(q y c_{A0} se mantienen constantes $\forall t > 0$)

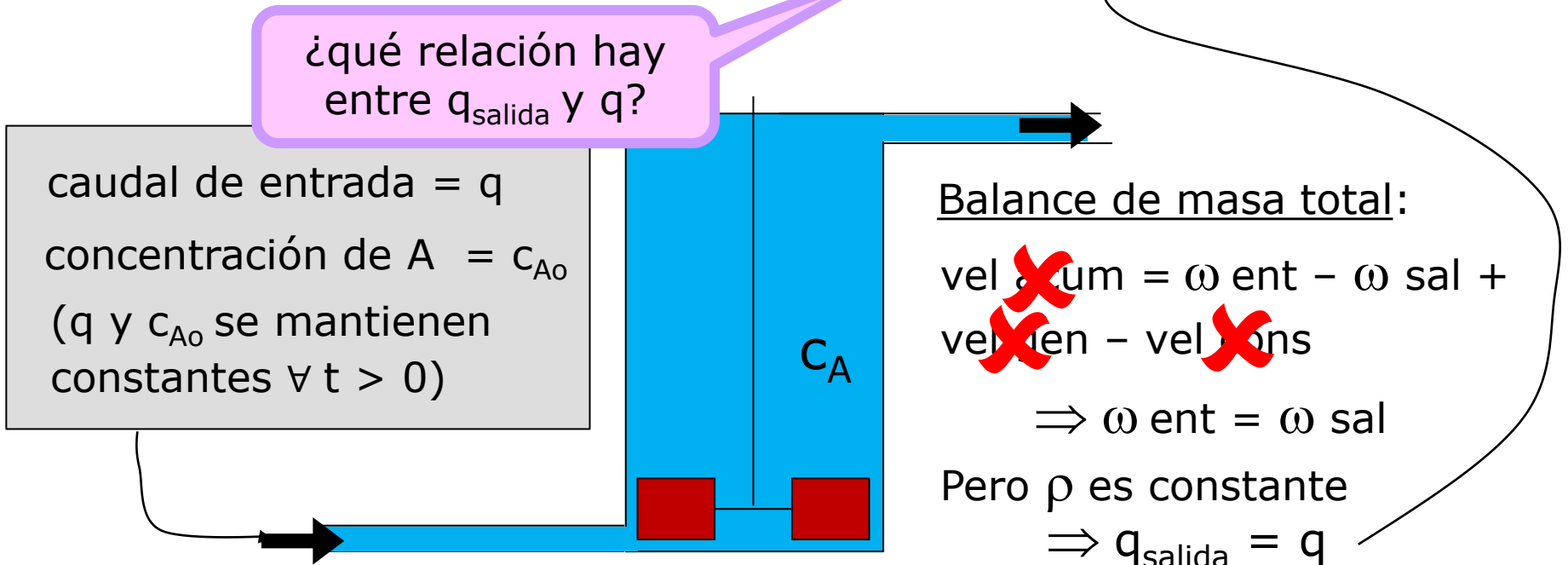
Balance de masa total:

$$\text{vel } \cancel{\text{acum}} = \omega \text{ ent} - \omega \text{ sal} + \text{vel } \cancel{\text{gen}} - \text{vel } \cancel{\text{cons}}$$

$$\Rightarrow \omega \text{ ent} = \omega \text{ sal}$$

Pero ρ es constante

$$\Rightarrow q_{\text{salida}} = q$$



EJEMPLO

Reactor de tanque continuo idealmente agitado

Balance de masa de A

$$\text{vel acum} = \text{vel entr} - \text{vel sal} +$$

$$\text{Velocidad de acumulación de A} = 0$$

$$\text{Velocidad de entrada de A} = q c_{A0}$$

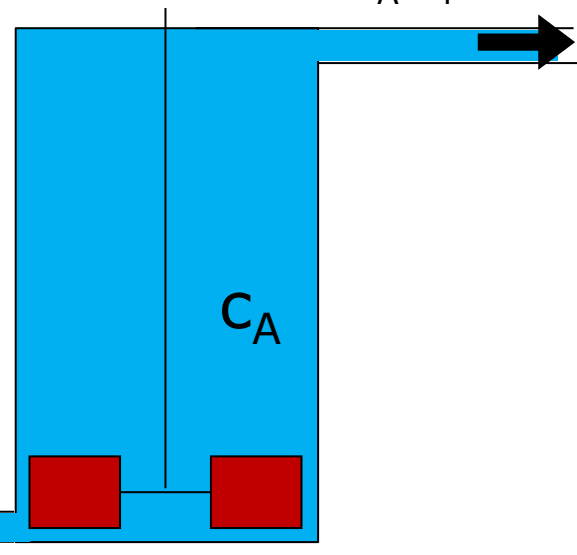
$$\text{Velocidad de salida de A} = q_{\text{salida}} - q c_A$$

$$\text{Velocidad de generacion} = 0$$

$$\text{Velocidad de consumo de A} = R_A V_r = k c_A V_r \quad \begin{matrix} (\text{kmol/s/m}^3)(\text{m}^3) \\ = [\text{kmol/s}] \end{matrix}$$

velocidad conversi3n R_A
 $= k c_A$ [kmol/s/m³]

caudal de entrada = q
concentraci3n de A = c_{A0}
(q y c_{A0} se mantienen constantes $\forall t > 0$)



EJEMPLO

Reactor de tanque continuo idealmente agitado

Balance de masa de A

$$\text{vel acum} = \text{vel entr} - \text{vel sal} + \text{vel gen} - \text{vel cons}$$

$$\text{Velocidad de acumulación de A} = 0 \quad (\text{estado estacionario})$$

$$\text{Velocidad de entrada de A} = q c_{A0} \quad (\text{m}^3/\text{s})(\text{kmol}/\text{m}^3) = [\text{kmol}/\text{s}]$$

$$\text{Velocidad de salida de A} = q_{\text{salida}} c_A = q c_A$$

$$\text{Velocidad de generacion} = 0$$

$$\text{Velocidad de consumo de A} = R_A V_r = k c_A V_r \quad \begin{array}{l} (\text{kmol}/\text{s}/\text{m}^3)(\text{m}^3) \\ = [\text{kmol}/\text{s}] \end{array}$$

$$\text{vel acum} = \text{vel entr} - \text{vel sal} + \text{vel gen} - \text{vel cons}$$

$$0 = q c_{A0} - q c_A + 0 - k c_A V_r$$

$$c_A = q c_{A0} / (q + k V_r)$$

$$c_A = \frac{c_{A0}}{(1 + k V_r/q)}$$

EJEMPLO

Reactor de tanque continuo idealmente agitado

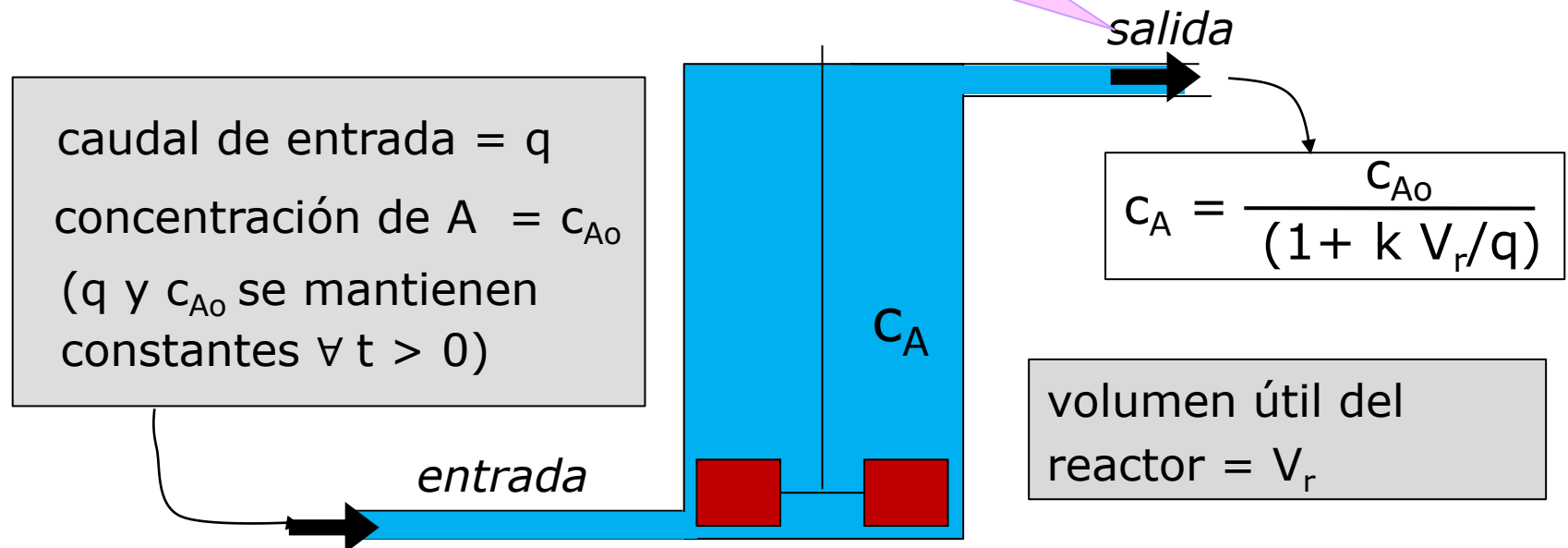
Reacción irreversible (en fase líquida)

ESTADO ESTACIONARIO

con velocidad v ¿cuál es la concentración de A en la salida?

$$[(\text{kmol}/\text{s})/\text{m}^3]$$

La densidad del líquido no cambia en el proceso.



EJEMPLO

Pero no siempre estuvo en estado estacionario...

Al principio el tanque tiene que haber estado vacío.

Hubo una etapa de transición entre el estado estacionario “tanque vacío” y el estado estacionario planteado en este problema.

Cómo fue variando el volumen dentro del tanque en ese período? ...y la concentración de A en el tanque?

Balances de Materia

En estado no
estacionario

Ecuaciones de balance de materia

Ecuación de balance entre dos "tiempos" diferentes

$$\Delta M = \delta M_{\text{entrada}} - \delta M_{\text{salida}} + \delta M_{\text{formada}} - \delta M_{\text{consumida}}$$

todos los cambios medidos entre t y $t + \Delta t$

Ecuación de balance diferencial (velocidades de cambio)

$$\dot{M}_{\text{acum}} = \dot{M}_{\text{entrada}} - \dot{M}_{\text{salida}} + \dot{M}_{\text{formación}} - \dot{M}_{\text{consumo}}$$

todas las velocidades medidas en el mismo instante

A priori no podemos "tachar" ningún término!!!

EJEMPLO

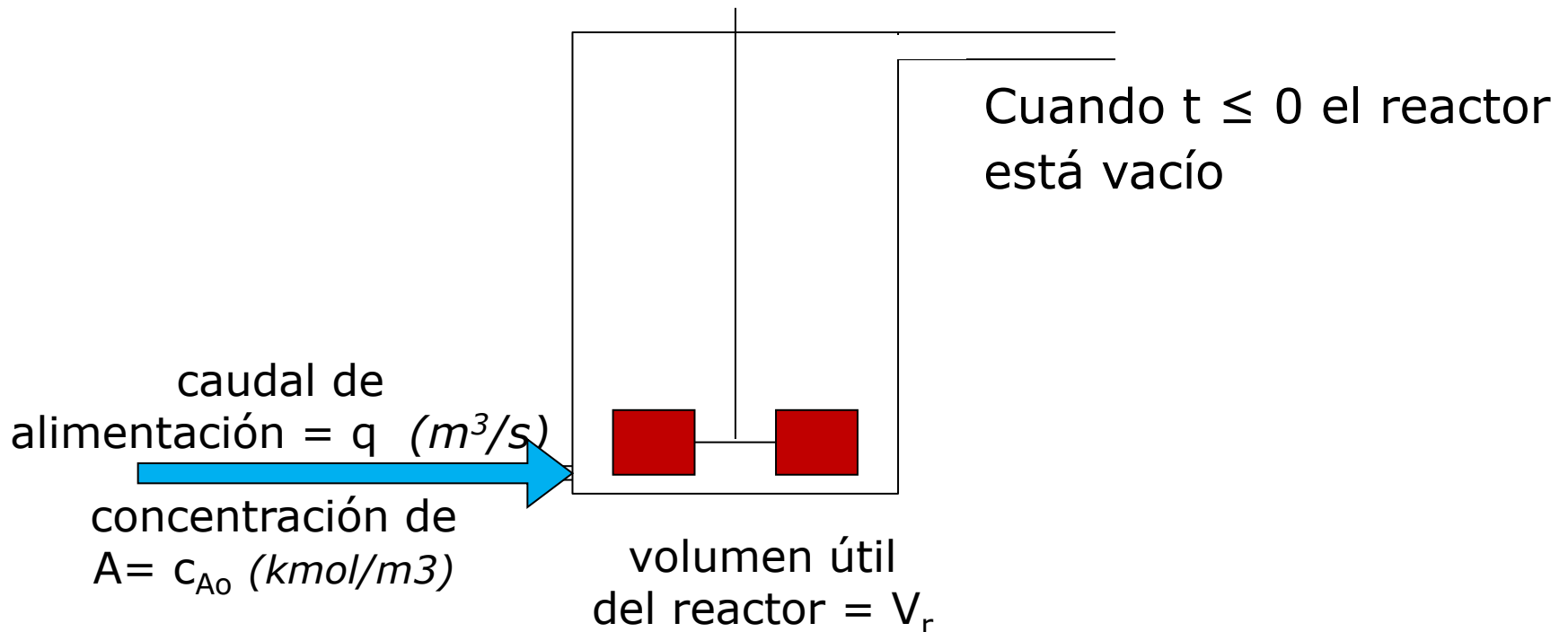
Reactor de tanque continuo idealmente agitado

Reacción irreversible (en fase líquida)



con velocidad de conversión $R_A = kc_A$ $[(\text{kmol}/\text{s})/\text{m}^3]$

La densidad del líquido no cambia en el proceso.



EJEMPLO

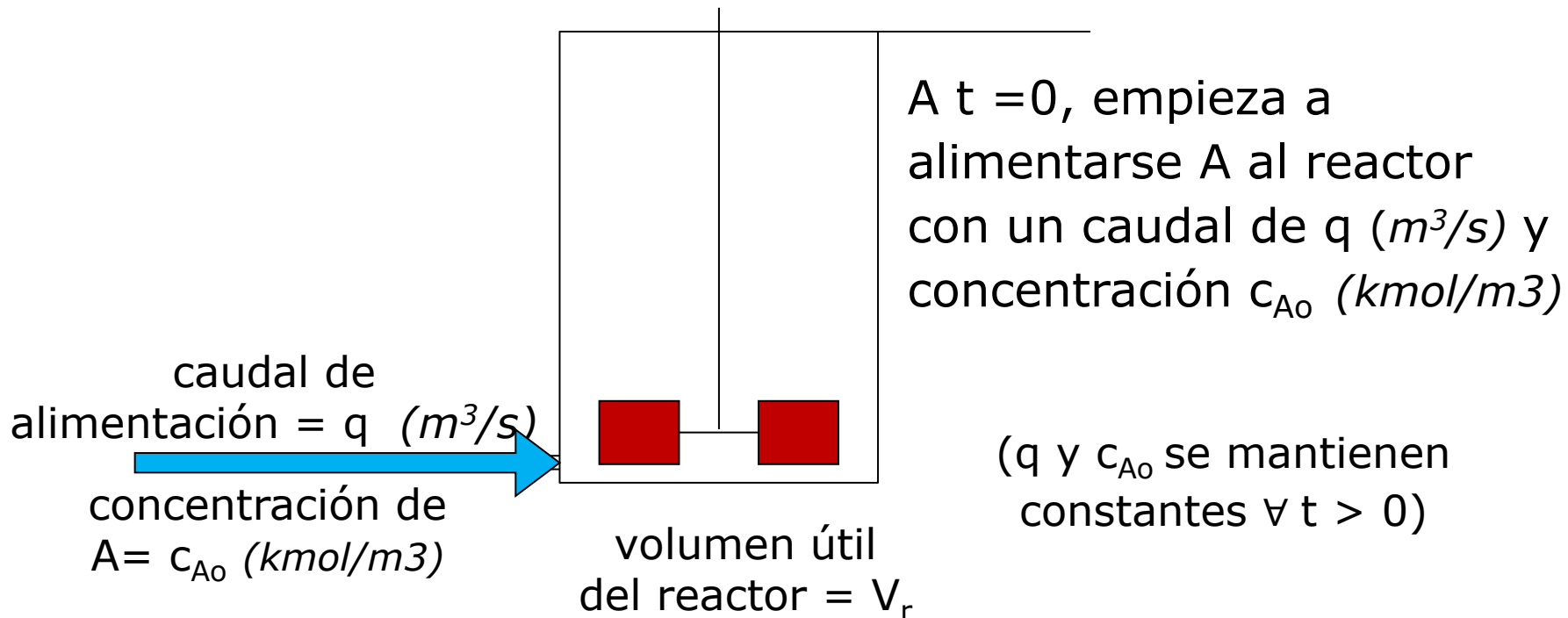
Reactor de tanque continuo idealmente agitado

Reacción irreversible (en fase líquida)



con velocidad de conversión $R_A = kc_A$ $[(\text{kmol}/\text{s})/\text{m}^3]$

La densidad del líquido no cambia en el proceso.



EJEMPLO

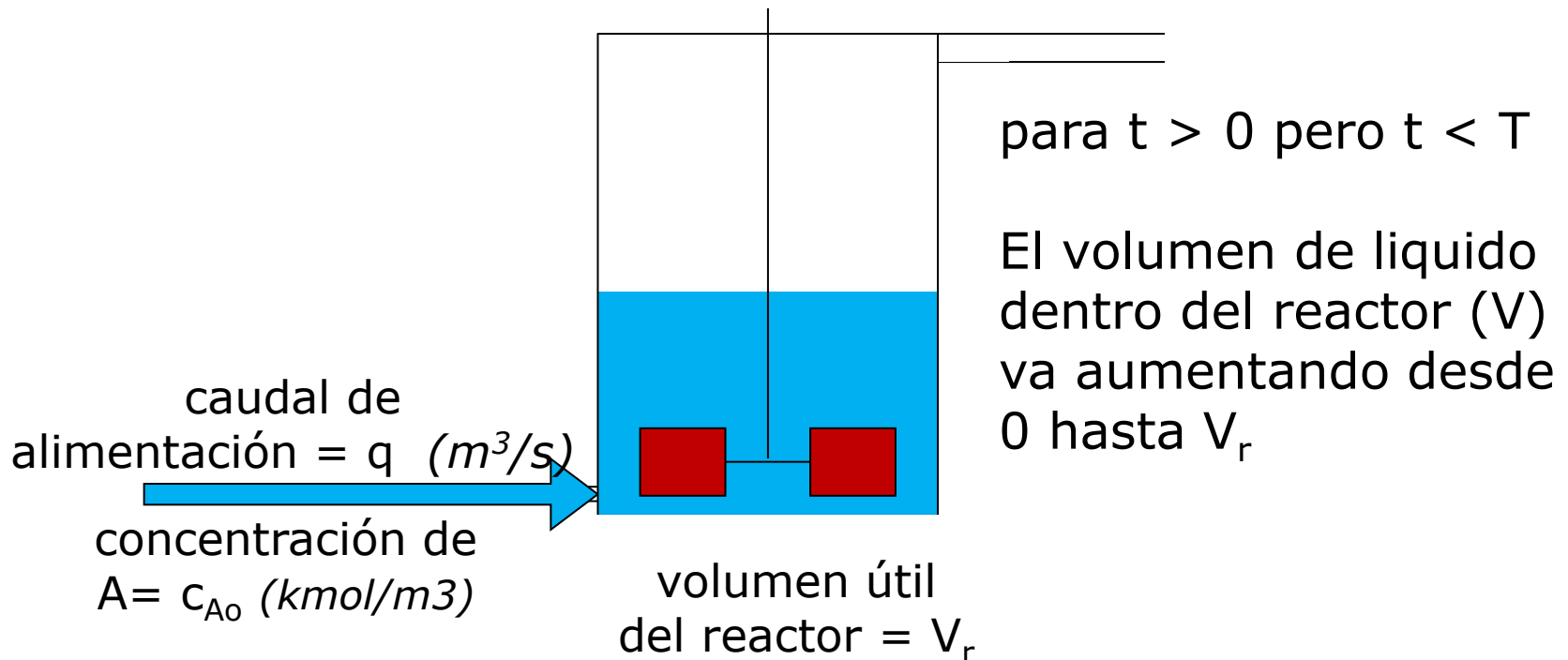
Reactor de tanque continuo idealmente agitado

Reacción irreversible (en fase líquida)



con velocidad de conversión $R_A = kc_A$ $[(\text{kmol}/\text{s})/\text{m}^3]$

La densidad del líquido no cambia en el proceso.



EJEMPLO

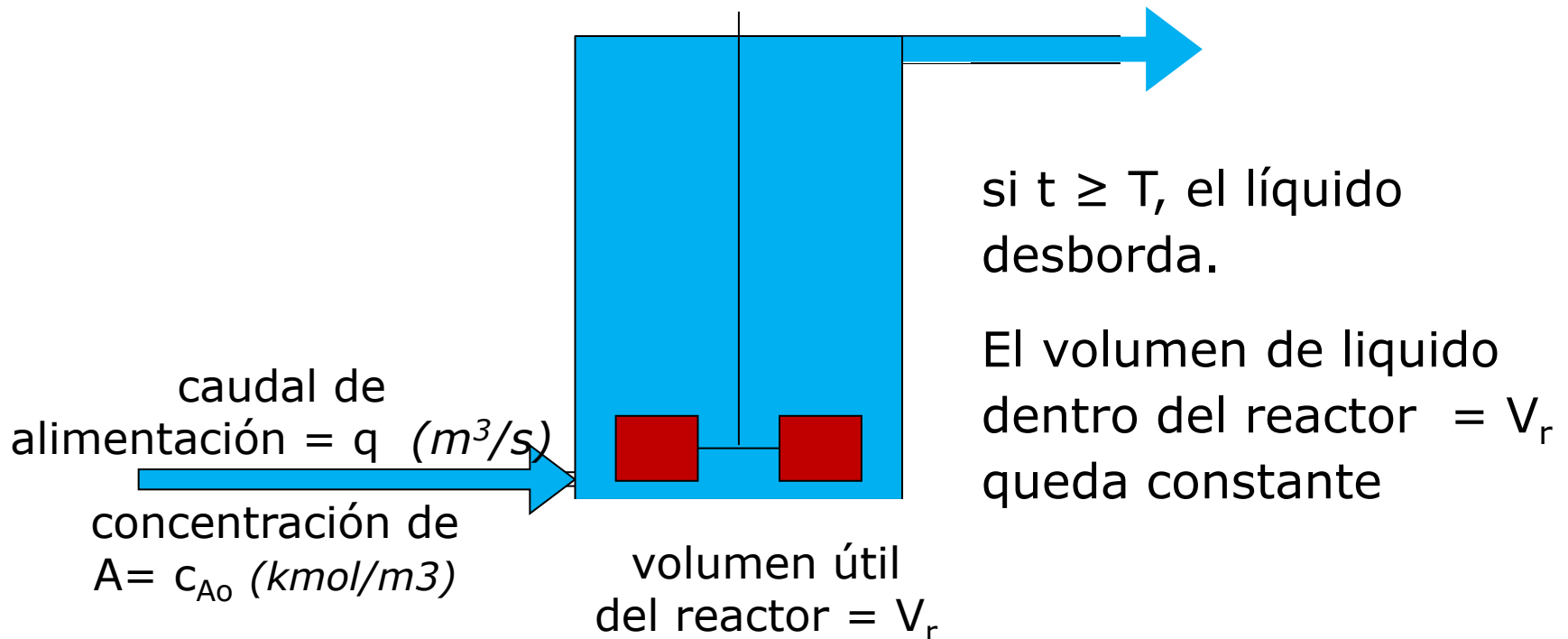
Reactor de tanque continuo idealmente agitado

Reacción irreversible (en fase líquida)



con velocidad de conversión $R_A = kc_A$ $[(\text{kmol}/\text{s})/\text{m}^3]$

La densidad del líquido no cambia en el proceso.



EJEMPLO

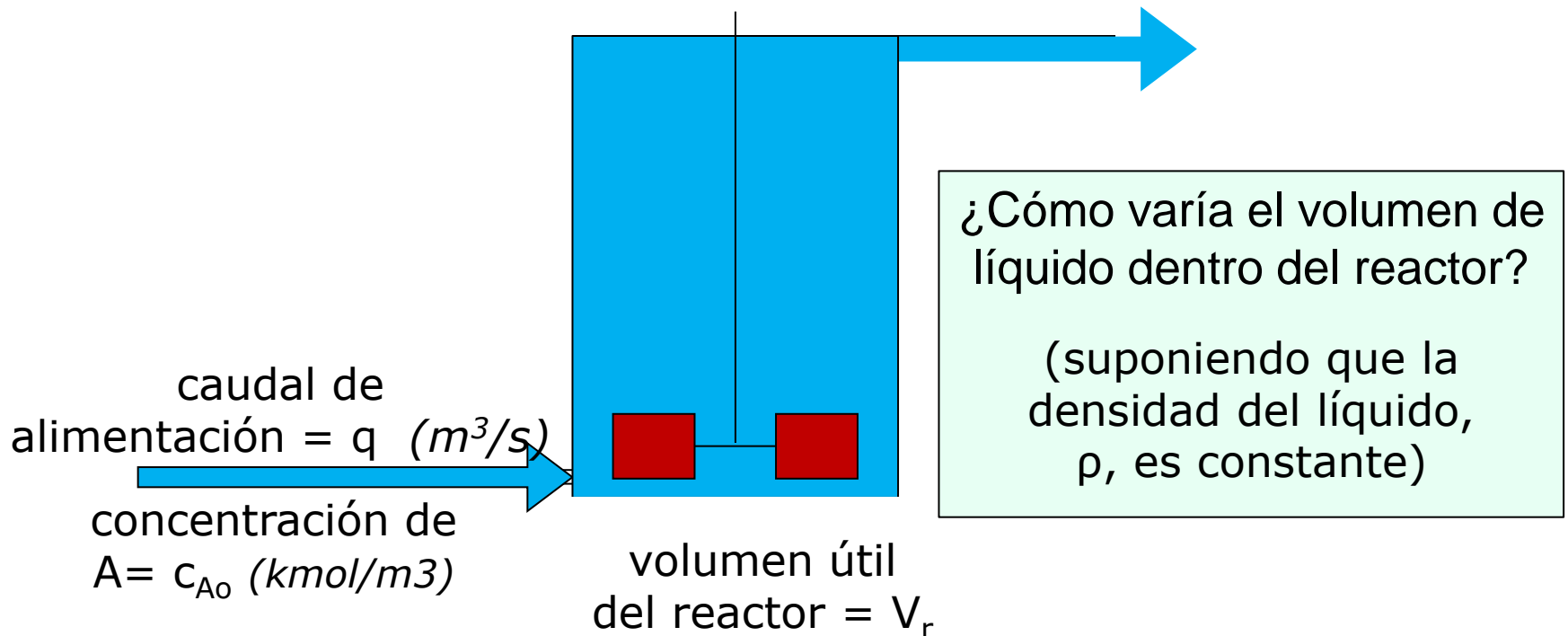
Reactor de tanque continuo idealmente agitado

Reacción irreversible (en fase líquida)



con velocidad de conversión $R_A = kc_A$ $[(\text{kmol}/\text{s})/\text{m}^3]$

La densidad del líquido no cambia en el proceso.

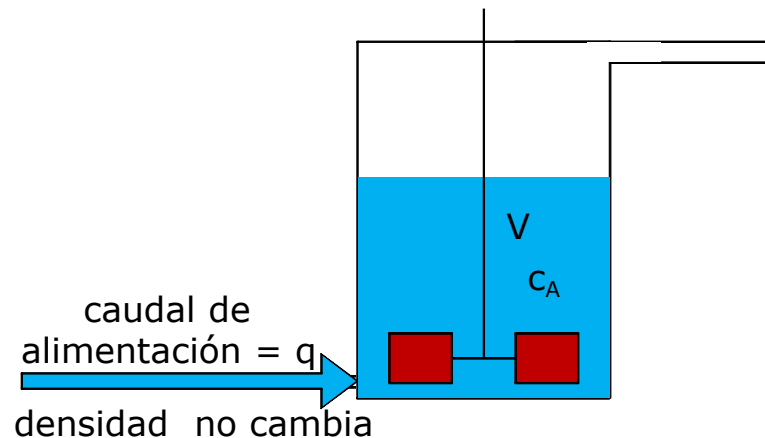


Balance (estado transitorio)

1. Balance total en el reactor, durante el llenado

(la densidad del líquido, ρ , es constante)

$$\text{vel acum} = \text{vel entr} - \text{vel sal} + \text{vel gen} - \text{vel cons}$$



Balance (estado transitorio)

1. Balance total en el reactor, durante el llenado

(la densidad del líquido, ρ , es constante)

Cantidad total en el tanque = $M = V \rho$

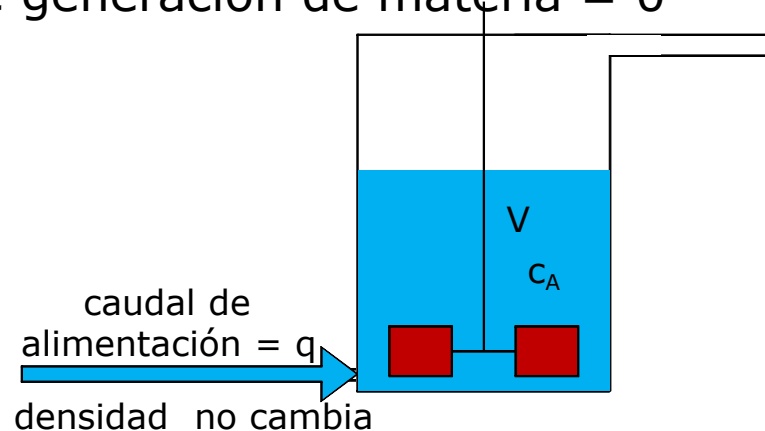
Velocidad de acumulación = $d(V \rho)/dt$

Velocidad de entrada de materia = $q \rho$

Velocidad de salida de materia = 0 (durante el llenado, no sale)

Velocidad de consumo de materia = 0

Velocidad de generación de materia = 0



Balance (estado transitorio)

1. Balance total en el reactor, durante el llenado

(la densidad del líquido, ρ , es constante)

Cantidad total en el tanque = $M = V \rho$

Velocidad de acumulación = $d(V \rho)/dt = \rho (dV/dt)$

Velocidad de entrada de materia = $q \rho$

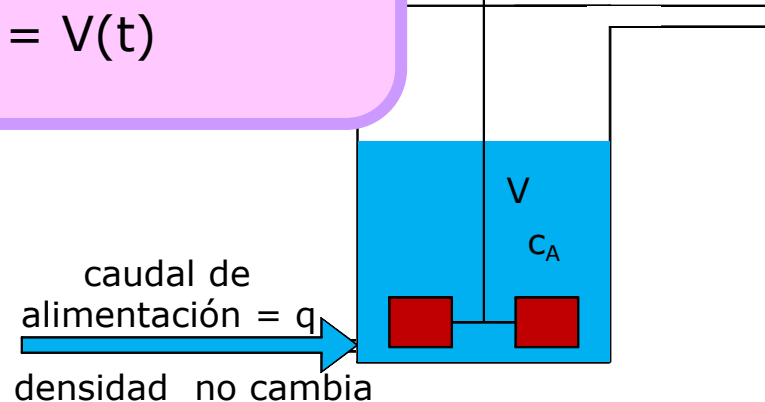
Velocidad de salida de materia = 0 (durante el llenado, no sale)

Velocidad de entrada de materia = 0

Velocidad de salida de materia = 0

ρ es constante, pero V
varía con el tiempo

$$V = V(t)$$



Balance (estado transitorio)

1. Balance total en el reactor, durante el llenado

(la densidad del líquido, ρ , es constante)

$$\text{Cantidad total en el tanque} = M = V \rho$$

$$\text{Velocidad de acumulación} = d(V \rho)/dt = \rho (dV/dt)$$

$$\text{Velocidad de entrada de materia} = q \rho$$

$$\text{Velocidad de salida de materia} = 0 \quad (\text{durante el llenado, no sale})$$

$$\text{Velocidad de consumo de materia} = 0$$

$$\text{Velocidad de generación de materia} = 0$$

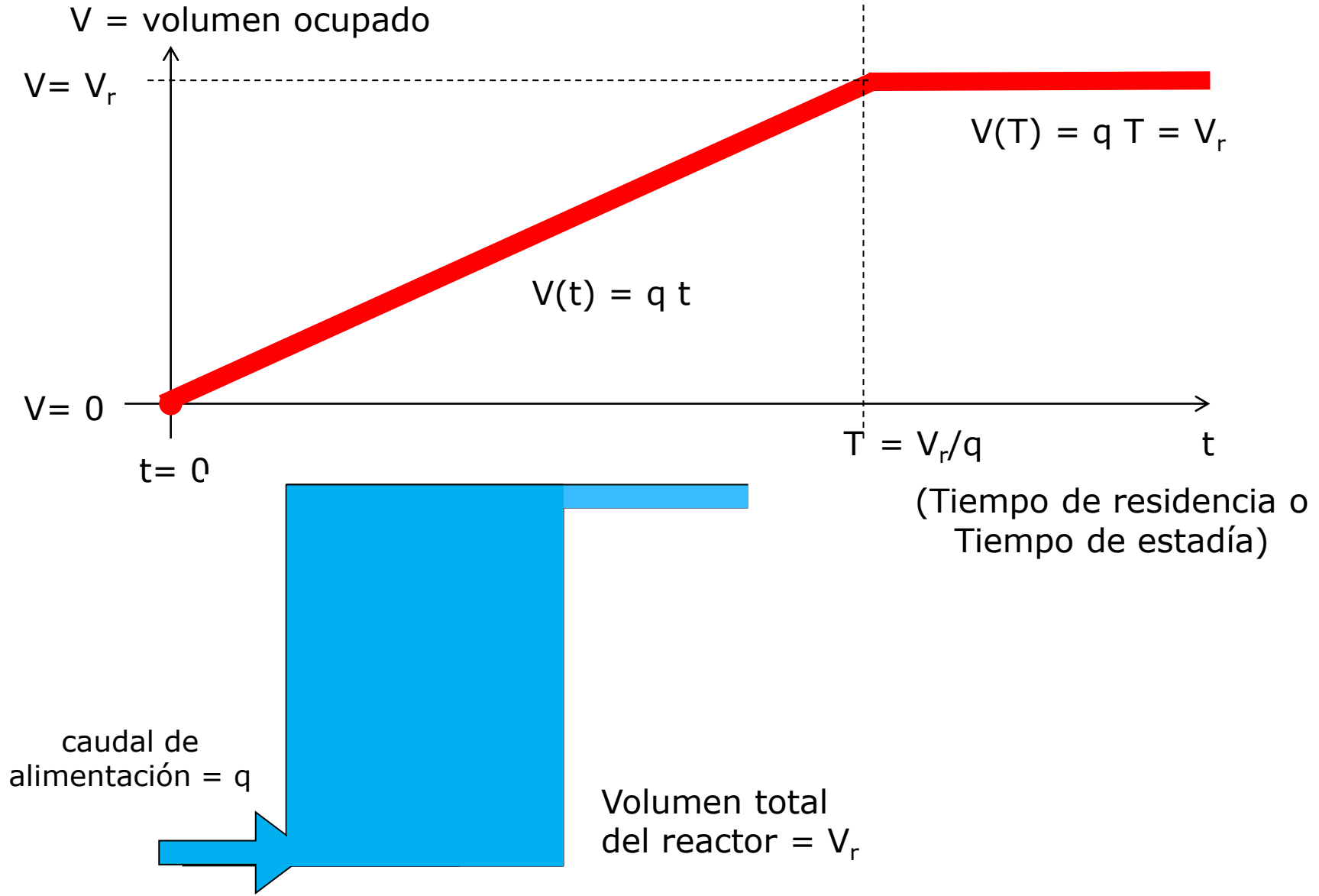
$$\text{vel acum} = \text{vel entr} - \text{vel sal} + \text{vel gen} - \text{vel cons}$$

$$\rho (dV/dt) = q \rho$$

$$\rho dV = q \rho dt \rightarrow \int dV = q \int dt \rightarrow V(t) - V(0) = q t$$

Como inicialmente el reactor está vacío, $V(0) = 0$,
por lo que, mientras se llena $V = q t$

Reactor de tanque continuo idealmente agitado

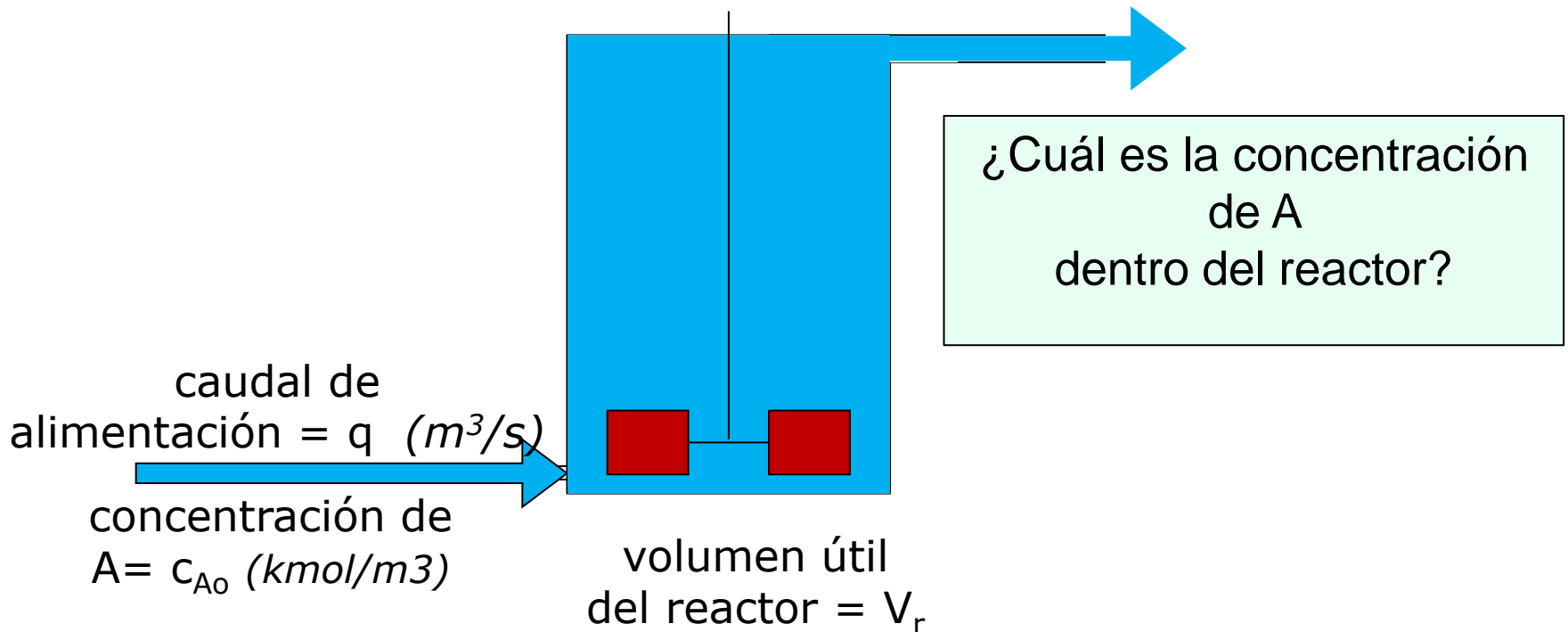


Balance (estado transitorio)

Reacción irreversible, isotérmica y con densidad constante



con velocidad de conversión $R_A = kc_A$ [kmol/m³s]

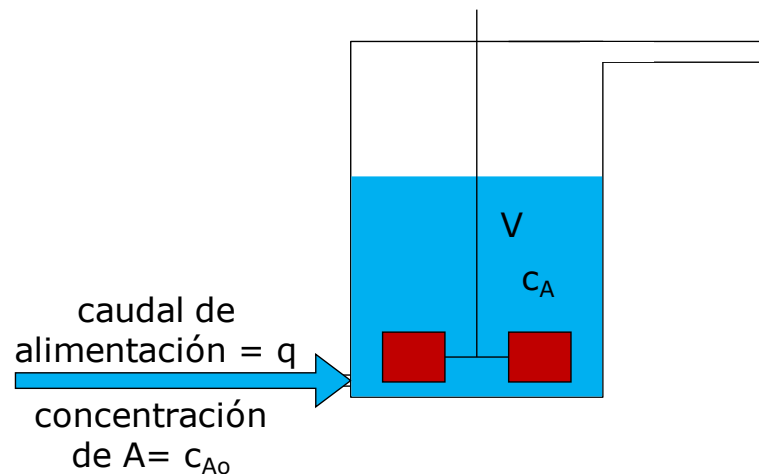


Tiempo de residencia, $T = V_r / q$

Balance (estado transitorio)

1. Balance de A en el reactor, durante el llenado

$$\text{vel acum} = \text{vel entr} - \text{vel sal} + \text{vel gen} - \text{vel cons}$$



Se supone que debido a que la mezcla es perfecta, existe una concentración uniforme (c_A) en todo el líquido del tanque.

estado transitorio)

reactor, durante el llenado

Cantidad de A en el tanque $= c_A V$

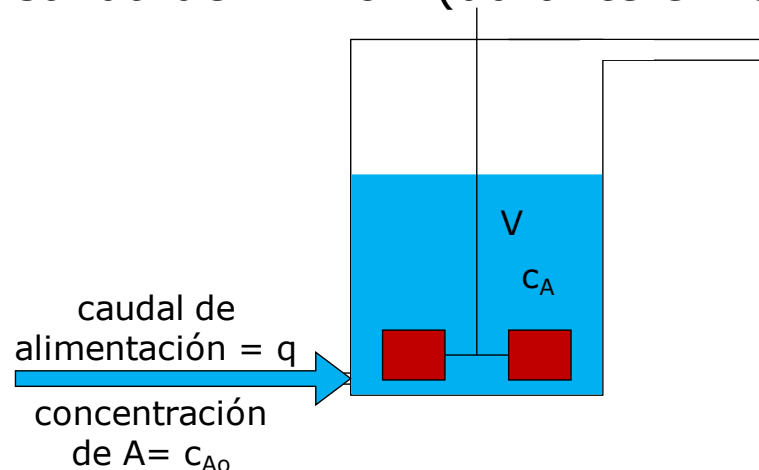
Velocidad de acumulación de A $= d(c_A V)/dt$

Velocidad de entrada de A $= q c_{A0}$

Velocidad de consumo de A $= k c_A V$

Velocidad de generación $= 0$ (no se produce A)

Velocidad de salida de A $= 0$ (durante el llenado, no sale A)



Balance (estado transitorio)

1 Véase que tanto c_A como V varían con el tiempo

$$c_A = c_A(t)$$

$$V = V(t)$$

$$m_A = c_A V$$

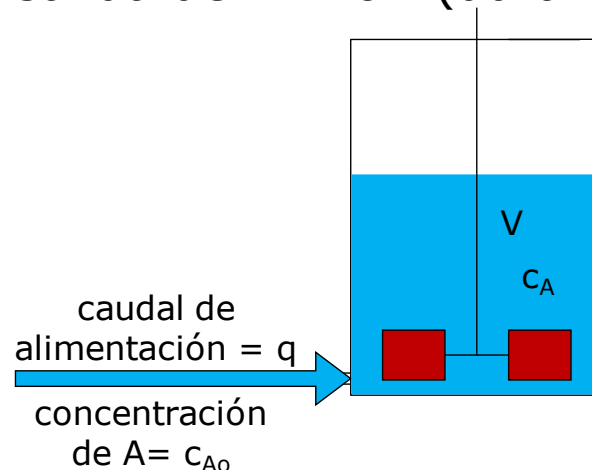
$$\frac{dm_A}{dt} = d(c_A V)/dt$$

$$\text{Velocidad de entrada de A} = q c_{A0}$$

$$\text{Velocidad de consumo de A} = k c_A V$$

$$\text{Velocidad de generación} = 0 \quad (\text{no se produce A})$$

$$\text{Velocidad de salida de A} = 0 \quad (\text{durante el llenado, no sale A})$$



$$\text{Velocidad conversión } R_A = k c_A \quad \text{kmol/s m}^3$$

(reacción de primer orden)

Balance (estado transitorio)

1. Balance de A en el reactor, durante el llenado

$$t < T = V_r / q$$

$$\text{Cantidad de A en el tanque} = c_A V$$

$$\text{Velocidad de acumulación de A} = d(c_A V)/dt$$

$$\text{Velocidad de entrada de A} = q c_{A0}$$

$$\text{Velocidad de consumo de A} = k c_A V$$

$$\text{Velocidad de generación} = 0 \quad (\text{no se produce A})$$

$$\text{Velocidad de salida de A} = 0 \quad (\text{durante el llenado, no sale A})$$

$$\text{vel acum} = \text{vel entr} - \text{vel sal} + \text{vel gen} - \text{vel cons}$$

$$d(c_A V)/dt = q c_{A0} - k c_A V$$

Balance (estado transitorio)

$$d(c_A V)/dt = qc_{A0} - kc_A V \quad (1)$$

como $V = qt$, y q es constante, entonces:

$$d(c_A V)/dt = d(c_A qt)/dt = q d(c_A t)/dt =$$

$$qc_{A0} - kc_A V = q c_{A0} - k c_A q t = q (c_{A0} - kc_A t)$$

Reemplazando en (1): $d(c_A t)/dt = c_{A0} - k(c_A t)$

Si definimos $u(t) \equiv c_A(t) t \Rightarrow \boxed{du/dt = c_{A0} - ku}$

$$\frac{du}{c_{A0} - k u} = dt \Rightarrow \frac{du}{(c_{A0}/k) - u} = k dt$$

$$\int_{u(0)}^{u(t)} \frac{du}{(c_{A0}/k) - u} = \int_0^t k dt \Rightarrow \ln \frac{(c_{A0}/k) - u(0)}{(c_{A0}/k) - u(t)} = k t$$

Balance (estado transitorio)

$$\int_{u(0)}^{u(t)} \frac{du}{(c_{A0}/k) - u} = \int_0^t k dt \quad \Rightarrow \quad \ln \frac{(c_{A0}/k) - u(0)}{(c_{A0}/k) - u(t)} = k t$$

$$\frac{1}{[1 - (k/c_{A0}) u(t)]} = e^{kt} \quad [1 - (k/c_{A0}) u(t)] = e^{-kt}$$

$$(k/c_{A0}) u(t) = 1 - e^{-kt}$$

$$u(t) = c_{A0} (1 - e^{-kt})/k$$

$$c_A(t) = \frac{c_{A0} (1 - e^{-kt})}{k t}$$

(para $t \leq T = V_r/q$)

Cantidad de A en el tanque = $c_A V = c_{A0} q(1 - e^{-kt})/k$ (para $t \leq T = V_r/q$)

Concentración de A en el tanque en el instante que se llena ($t = T$):

$$c_A(T) = c_{A0} (1 - e^{-kT})/kT$$

Concentración de A en el tanque a $t = 0$?

Balance (estado transitorio)

Una vez lleno, el volumen dentro del reactor queda constante ($= V_r$)

el reactor cuando está desbordando

$$V = V_r \quad \forall t \geq T = V_r/q$$

Cantidad de A en el tanque $= c_A V_r$

Velocidad de acumulación de A $= d(c_A V_r)/dt = V_r (dc_A/dt)$

Velocidad de entrada de A $= q c_{A0}$

Velocidad de consumo de A $= k c_A V_r$

Velocidad de generacion $= 0$ (no se produce A)

Velocidad de salida de A $= q_{salida} c_A$

Como vimos antes, como la densidad es siempre la misma:

$$q_{salida} = q$$

Balance (estado transitorio)

2. Balance de A en el reactor cuando está desbordando

$$t \geq T = V_r/q \qquad V = V_r \quad \forall t \geq T = V_r/q$$

$$\text{Cantidad de A en el tanque} = c_A V_r$$

$$\text{Velocidad de acumulación de A} = d(c_A V_r)/dt = V_r (dc_A/dt)$$

$$\text{Velocidad de entrada de A} = q c_{A0}$$

$$\text{Velocidad de consumo de A} = k c_A V_r$$

$$\text{Velocidad de generacion} = 0 \quad (\text{no se produce A})$$

$$\text{Velocidad de salida de A} = q_{\text{salida}} c_A = q c_A$$

$$\text{vel acum} = \text{vel entr} - \text{vel sal} + \text{vel gen} - \text{vel cons}$$

$$V_r dc_A/dt = q c_{A0} - q c_A - k c_A V_r$$

Dividiendo entre V_r ...

$$dc_A/dt = c_{A0} / T - (1/T + k) c_A$$

Balance (estado transitorio)

$$dc_A/dt = c_{A0} / T - (1/T + k) c_A$$

Determinación de $c_A(t)$...

$$dc_A/dt = (1/T) [c_{A0} - (1 + kT) c_A]$$

$$\frac{dc_A}{c_{A0} - (1 + kT) c_A} = \frac{dt}{T}$$

$$\frac{dc_A}{[c_{A0}/(1+kT)] - c_A} = \frac{(1+kT) dt}{T}$$

Integramos entre $c_A(T)$ y $c_A(t)$, y entre T y t

.....

Balance (estado transitorio)

$$dc_A/dt = c_{A0} / T - (1/T + k) c_A$$

Es probable que si el sistema se mantiene en esas condiciones, evolucione hacia un nuevo estado estacionario.

¿Cuál será la concentración de A en ese nuevo estado estacionario?

Un camino posible para saberlo:

- resolver la ecuación diferencial (hallar $c_A(t)$),
y luego,
- calcular el límite para cuando $t \rightarrow \infty$

Balance (estado transitorio)

$$dc_A/dt = c_{A0} / T - (1/T + k) c_A$$

Aun sin resolver la ecuación diferencial podemos concluir cosas a partir del análisis de dicha ecuación....

Balance (estado transitorio)

$$dc_A/dt = c_{A0} / T - (1/T + k) c_A$$

Luego de un largo tiempo (t tiende a infinito) se alcanza el estado estacionario con una concentración de A, $c_{A\infty}$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} c_A = c_{A\infty} \quad \dots \text{ y a su vez: } \lim_{t \rightarrow \infty} dc_A/dt = 0$$

Si aplicamos límites a la ecuación diferencial...

Balance (estado transitorio)

$$dc_A/dt = c_{A0} / T - (1/T + k) c_A$$

Luego de un largo tiempo (t tiende a infinito) se alcanza el estado estacionario con una concentración de A, $c_{A\infty}$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} c_A = c_{A\infty} \quad \dots \text{ y a su vez: } \lim_{t \rightarrow \infty} dc_A/dt = 0$$

Si aplicamos límites a la ecuación diferencial...

$$\lim_{t \rightarrow \infty} [dc_A/dt] = \lim_{t \rightarrow \infty} [c_{A0} / T - (1/T + k) c_A]$$

$$\text{Al reemplazar } \quad 0 \quad = \quad c_{A0} / T - (1/T + k) c_{A\infty}$$

$$\text{despejando,} \quad c_{A\infty} = c_{A0} / (1 + kT)$$

$$\text{pero } T = V_r/q, \text{ o sea que: } \quad c_{A\infty} = c_{A0} / (1 + k V_r/q)$$

Balance (estado transitorio)

$$dc_A/dt = c_{A0} / T - (1/T + k) c_A$$

Luego de un largo tiempo (t tiende a infinito) se alcanza el estado estacionario con una concentración de A, $c_{A\infty}$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} c_A = c_{A\infty} \quad \dots \text{ y a su vez: } \lim_{t \rightarrow \infty} dc_A/dt = 0$$

Si aplicamos límites a la ecuación diferencial...

$$\lim_{t \rightarrow \infty} [dc_A/dt] = \lim_{t \rightarrow \infty} [c_{A0} / T - (1/T + k) c_A]$$

$$\text{Al reemplazar } \quad 0 = c_{A0} / T - (1/T + k) c_{A\infty}$$

$$\text{despejando,} \quad c_{A\infty} = c_{A0} / (1 + kT)$$

$$\text{pero } T = V_r/q, \text{ o sea que: } \quad c_{A\infty} = c_{A0} / (1 + k V_r/q)$$