

Tema 2

BALANCES

MACROSCÓPICOS DE

MATERIA

Este material se publica bajo licencia: Creative Commons BY-NC-SA 4.0





2.0.
Conceptos
generales

Tema 2

BALANCES

MACROSCÓPICOS

DE MATERIA



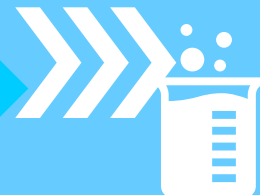
2.0.
Conceptos
generales



2.1.
La ecuación
general de
balances.
Clasificación
genérica de
problemas



2.2.
Balances
macroscópicos
de materia sin
reacción
química



2.3.
Balances
macroscópicos
de materia con
reacción
química

1

Distinguir los diferentes tipos de diagramas que se usan en el ámbito de la ingeniería química

Resultados de aprendizaje

- Formular balances macroscópicos de cantidad de movimiento, energía, y materia en sistemas de diferente complejidad
- Aplicar la formulación de balances macroscópicos para resolver casos de estudios seleccionados

1

Distinguir los diferentes tipos de diagramas que se usan en el ámbito de la ingeniería química

2

Distinguir entre prop. extensivas e intensivas

3

Conocer los elementos básicos de la ecuación general de balances en sus formas diferencial e integral

4

Clasificar los problemas de materia y energía en función de su carácter abierto o cerrado y si son función del tiempo

5

Formular y resolver balances macroscópicos de materia sin y con reacción química

2.0 Conceptos generales



Balances macroscópicos vs microscópicos

$$F_1 + F_2 + F_3 = F_4 + F_5$$



Ec. algebraica

VS



Ec. diferencial con la posición



No hay influencia de la posición pero sí del tiempo

$$\begin{aligned} x : \quad & \rho \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \mu \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + \rho g_x \\ y : \quad & \rho \left(\frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \mu \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + \rho g_y \\ z : \quad & \rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \mu \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + \rho g_z \end{aligned}$$



Hay influencia de la posición y del tiempo

En balances microscópicos tenemos la variación de las propiedades con la posición (**ESPACIO**), mientras que la variación con la posición no se aplica a balances macroscópicos. En balances macroscópicos trabajamos con valores globales/promedios y corrientes, no con campos espaciales. Esta diferencia no se ve afectada por la variación temporal (**TIEMPO**)

Balances macroscópicos vs microscópicos

Balances macroscópicos

- Pueden tener en cuenta lo que sucede en el **tiempo**, pero **no en el espacio**
- Ecuaciones diferenciales ordinarias en el tiempo para procesos no estacionarios.
- Ecuaciones algebraicas para estado estacionario



No hay influencia de la posición pero sí del tiempo



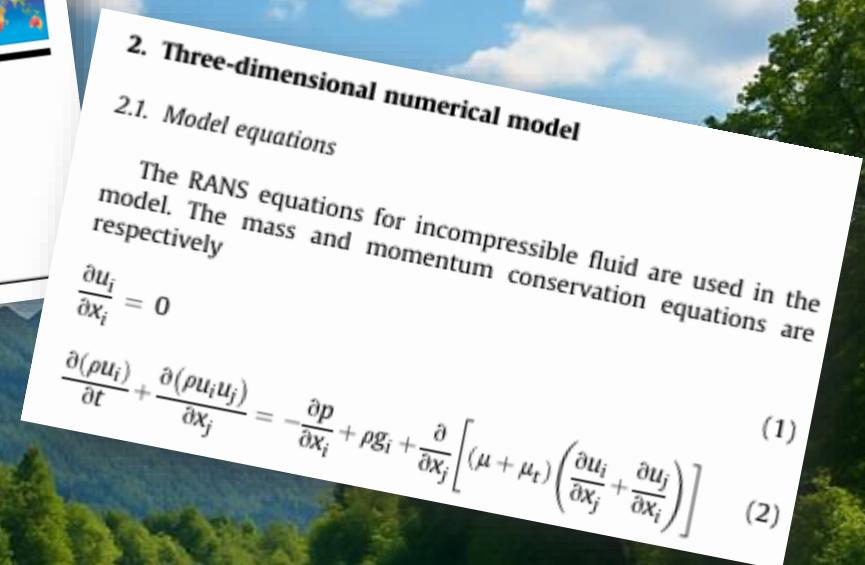
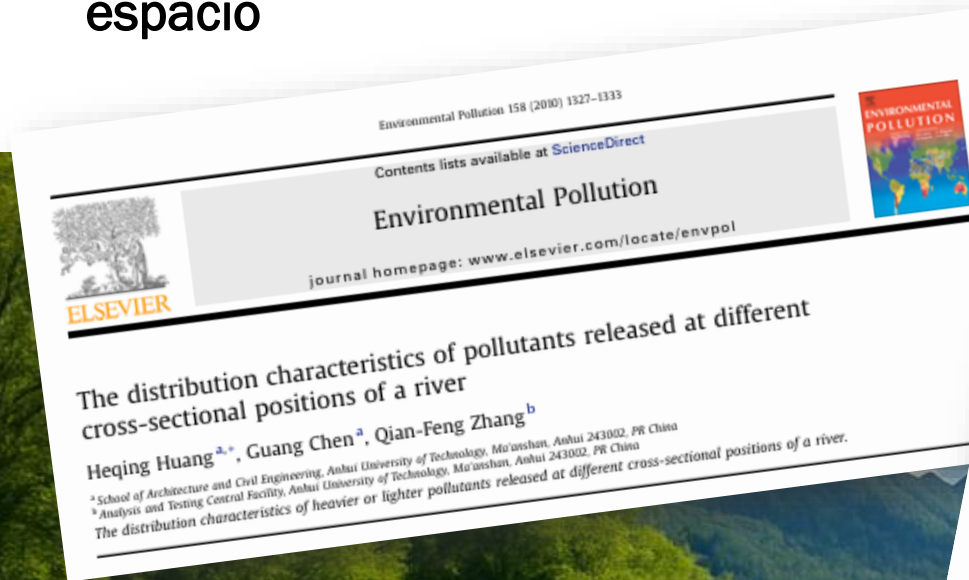
Balances macroscópicos vs microscópicos

Balances microscópicos

- Pueden tener en cuenta lo que sucede en el tiempo y en el espacio
- Ecuaciones diferenciales parciales en el tiempo y en el espacio



Hay influencia de la posición y del tiempo



Balances macroscópicos vs microscópicos

Balances microscópicos

- Pueden tener en cuenta lo que sucede en el tiempo y en el espacio
- Ecuaciones diferenciales parciales en el tiempo y en el espacio



Hay influencia de la posición y del tiempo

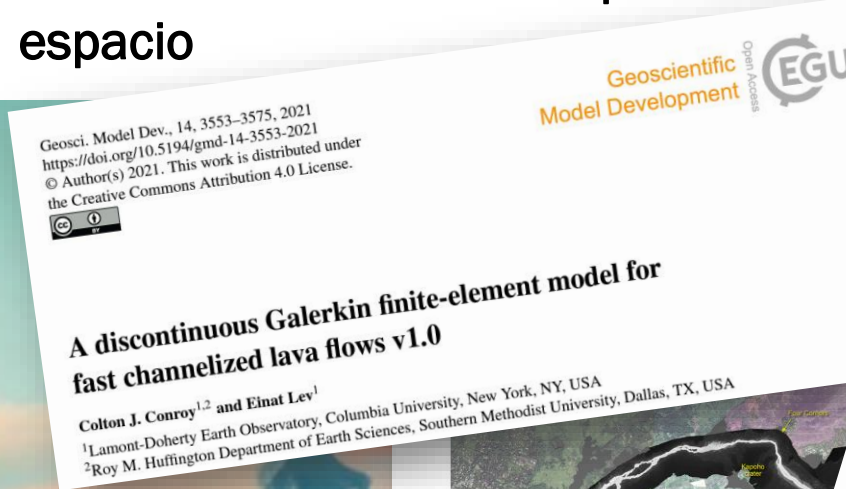
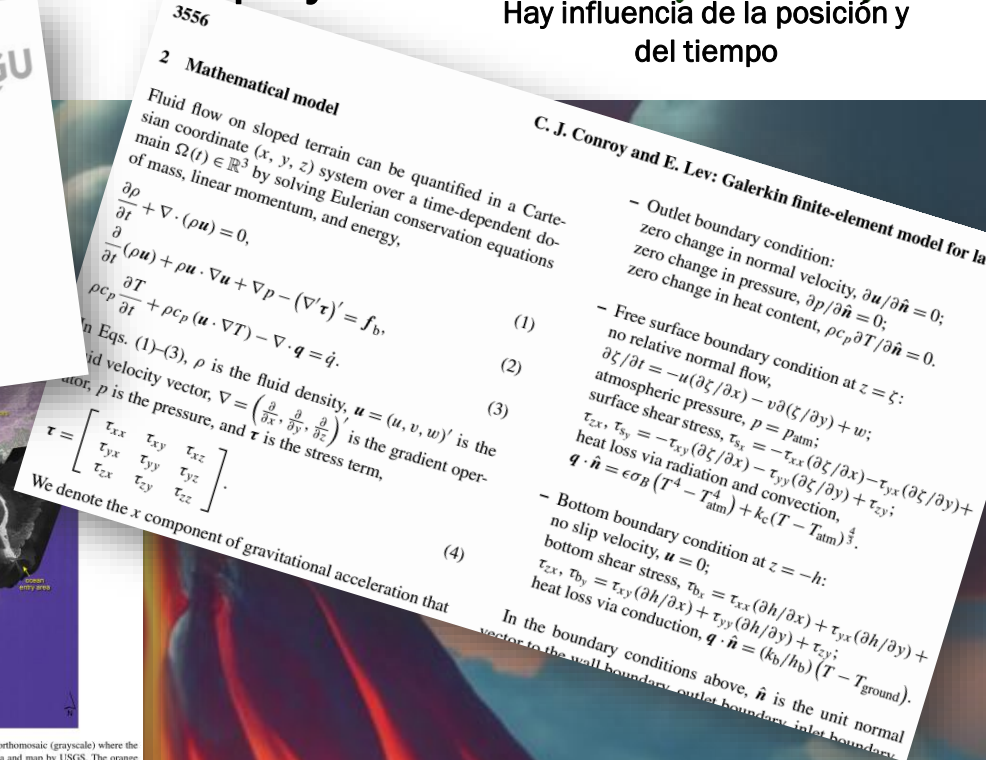


Figure 1. A satellite image (colored, in the background, by DigitalGlobe) overlaid with a thermal aerial orthorectified (grayscale) where the white and light gray areas reveal the path of the Fissure 8 flow channel as it was on 21 June 2018. Data and map by USGS. The orange rectangle depicts the area of UAS site 8 from where the video we analyzed was captured on 22 June 2018. The flat gray areas south of the active flow channel demarcate the areas inundated by lava during the early stages of the eruption. The top of the image is north. PGV is the Puna Geothermal Ventures power plant that was heavily impacted by the lava.



Tipos de diagramas en Ing Química

Diagramas
en Ingeniería
Química

Diagramas de
bloques de flujo

proceso

planta

Diagramas de flujo de
proceso

Diagramas de tuberías e
instrumentación *P&ID*

Diagrama de bloques de flujo

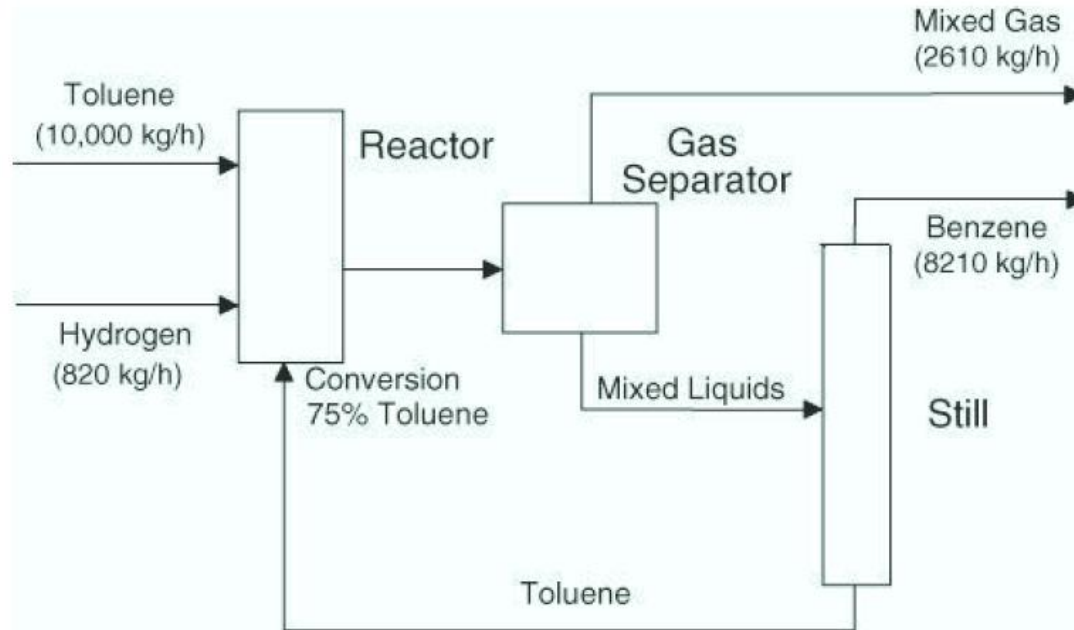
Es un conjunto de bloques que representan **diferentes equipos o unidades de operación** que están conectadas por corrientes de entrada o salida. Se puede incluir información como **temperatura, presión, conversiones, flujos**, pero no detalles de los equipos.

- Diagrama de bloques de flujo de proceso
- Diagrama de bloques de flujo de planta



Diagrama de bloques de flujo

Diagrama de bloques de flujo de proceso



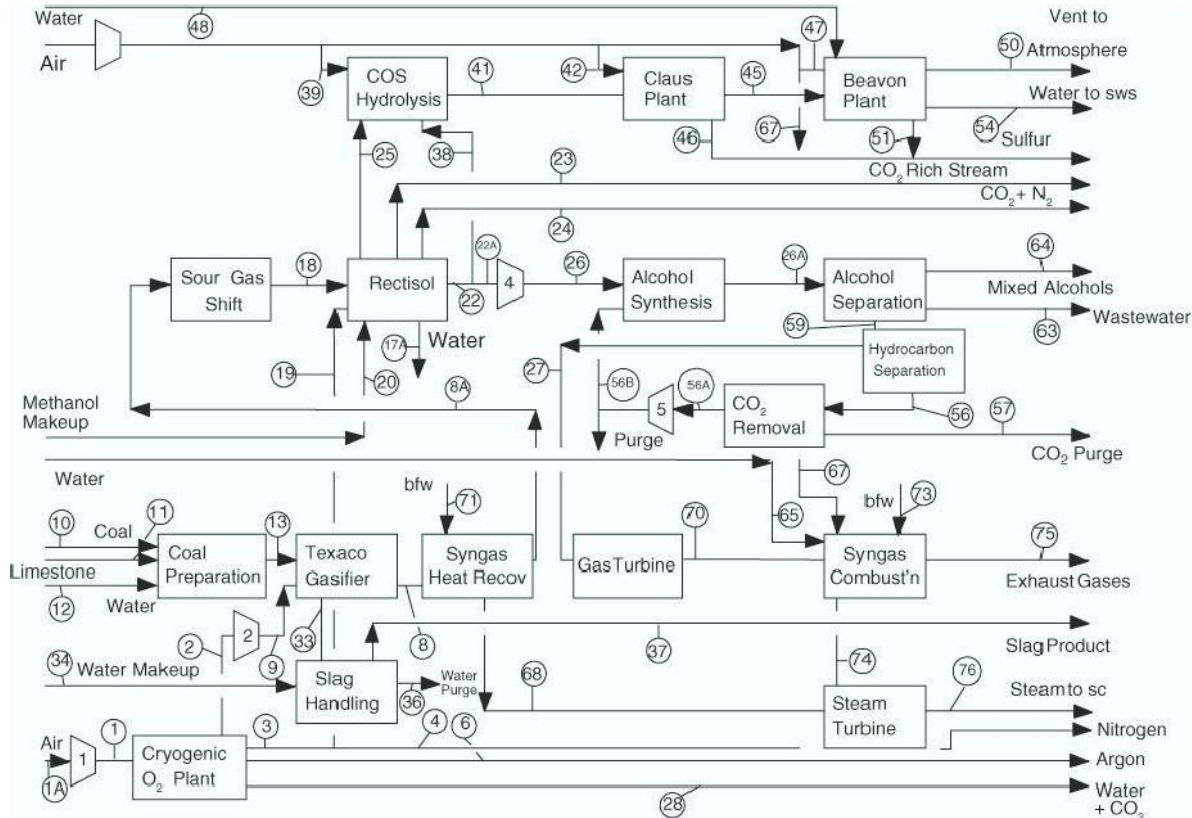
Cada bloque puede representar más de un equipo real

Es lo que se espera de transformar un enunciado

Es un conjunto de bloques que representan diferentes equipos o unidades de operación que están conectadas por corrientes de entrada y/o salida. Se puede incluir información como temperatura, presión, conversiones, flujos pero no detalles de los equipos. Normalmente la disposición sería de izquierda a derecha de acuerdo al flujo. Las flechas muestran la dirección del flujo. En general, una corriente líquida saldría desde el fondo y una gaseosa desde la parte superior del bloque.

Diagrama de bloques de flujo

Diagrama de bloques de flujo de planta



Visión completa de la planta y de todos los procesos que interactúan

Cada bloque representa un proceso químico completo. Da una visión completa de lo que realiza la planta y como interactúan todos sus procesos. Se da sólo información limitada de cada unidad de proceso.

Diagrama de bloques de flujo

Diagrama de bloques de flujo de proceso para una central térmica

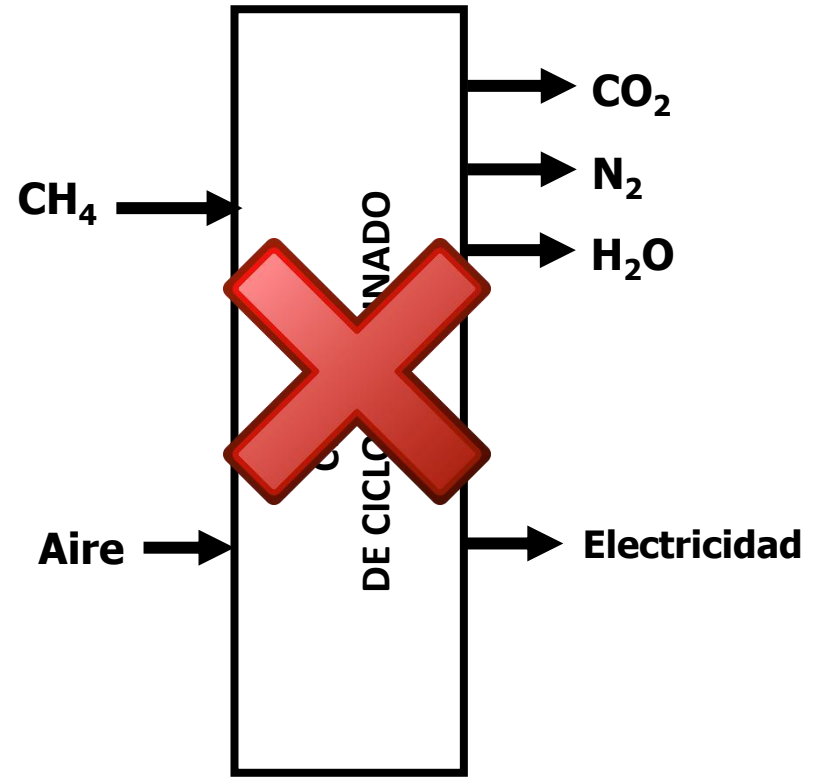
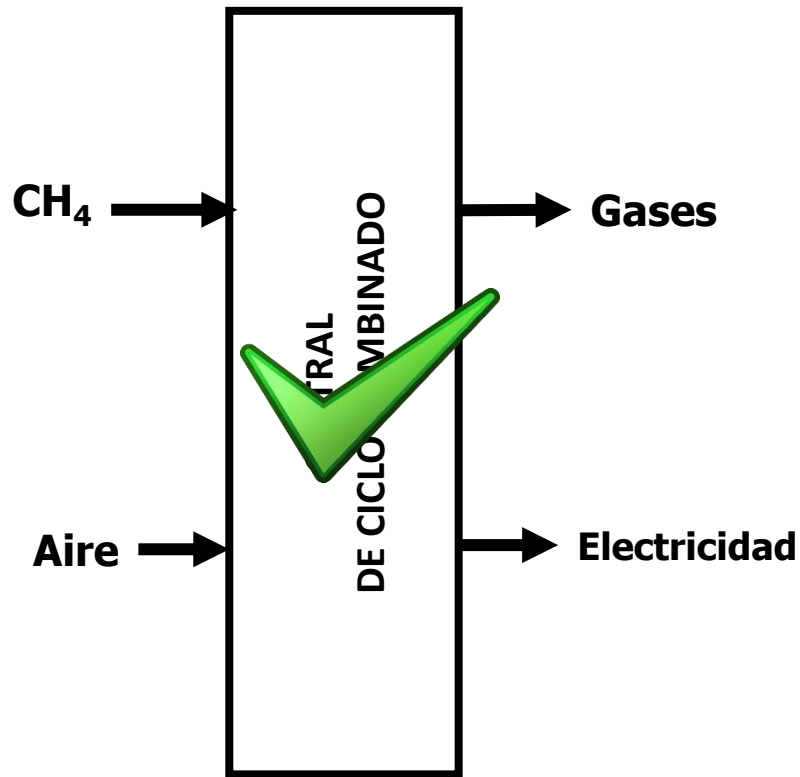


Diagrama de flujo de proceso

Un diagrama de flujo de proceso (*Process Flow Diagram* o PFD) contiene la información principal/relevante de ingeniería de proceso



Diagrama de flujo de proceso

Un PFD contendrá:

- 1) Los principales equipos del proceso. Se les asignará un **número y nombre descriptivo**.
- 2) Todas las **corrientes de flujo** se mostrarán y se identificarán con un **número**. Se describirán las **condiciones de proceso y composición química** de cada corriente bien en diagrama o en una tabla resumen.
- 3) Todas las **corrientes auxiliares** se incluirán en el diagrama.
- 4) *Se mostrarán los lazos de control básicos usados en las operaciones normales del proceso.*



Diagrama de flujo de proceso

Símbolos para reactores, vasijas, mezcladores y tanques

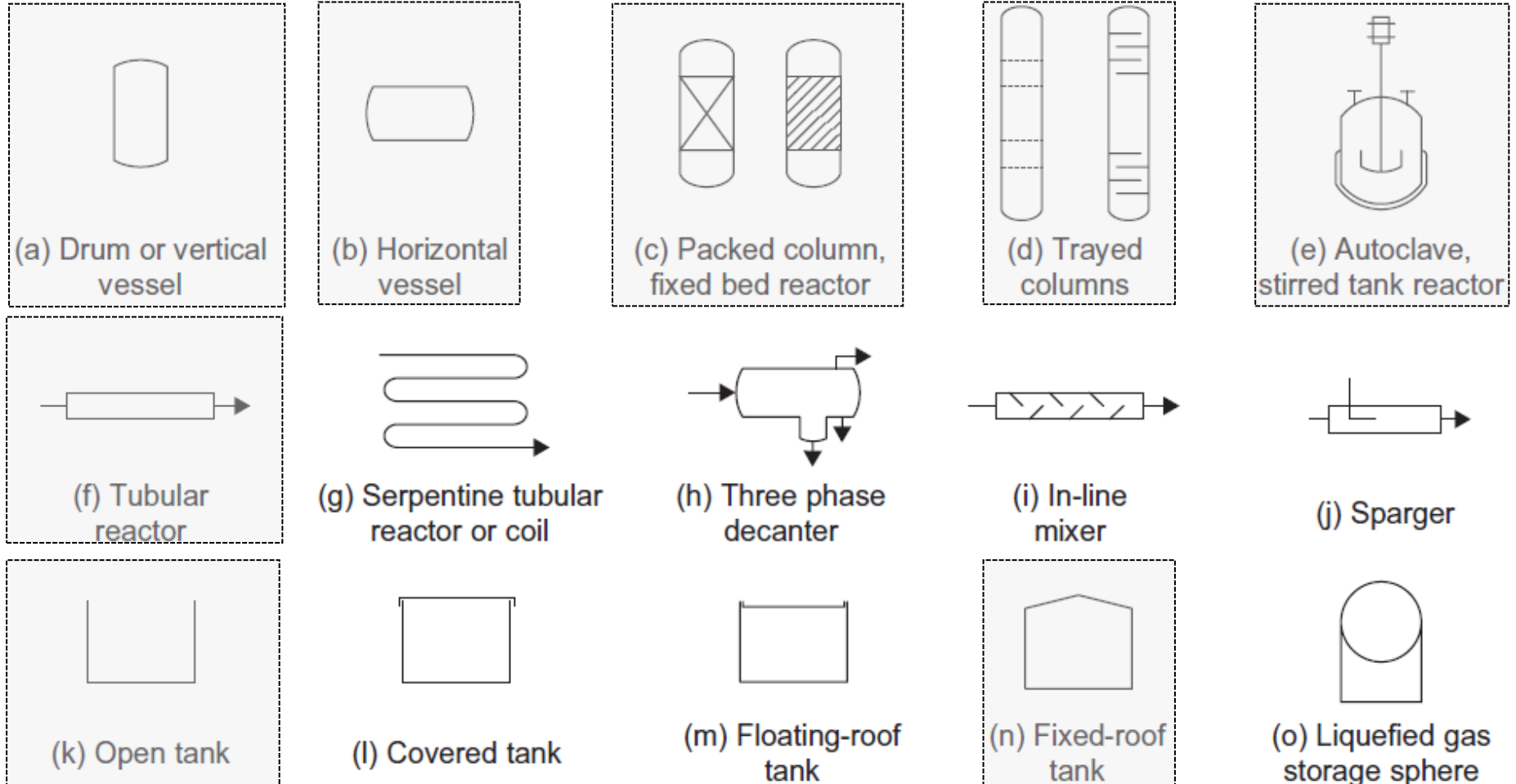


Diagrama de flujo de proceso

Símbolos para equipos de transferencia de calor



(a) Heat exchangers (basic symbols)



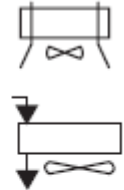
(b) Fired heater with process duty in radiant section



(c) Fired heater with heat recovery in convective section



(d) Shell and tube exchangers



(e) Air coolers



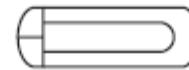
(f) Tube bundle or stab-in reboiler



(g) Kettle reboiler



(h) Finned tube exchanger



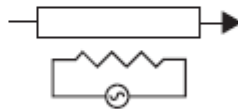
(i) U-tube exchanger



(j) Heating or cooling coil



(k) Plate heat exchanger



(l) Electric heater

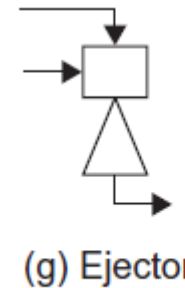
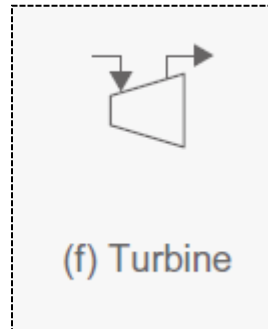
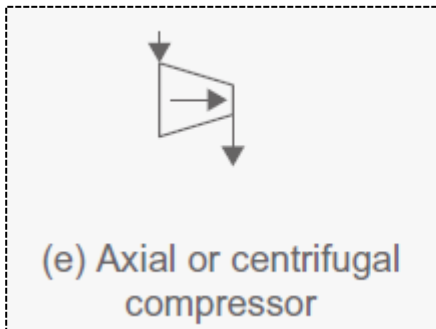
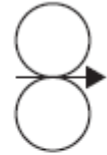
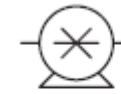
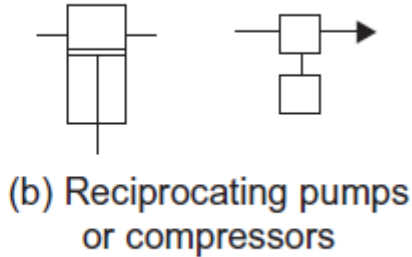
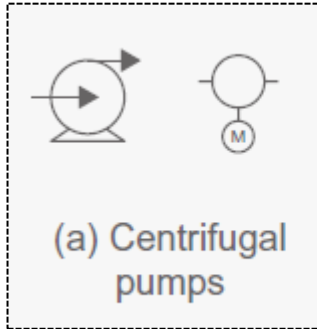


(m) Cooling tower

Cada unidad empleada en el diagrama de flujo de proceso permite diferenciarla del resto. Cada símbolo es indicativo de la unidad que representa.

Diagrama de flujo de proceso

Símbolos para equipos de manejo de fluidos



Cada unidad empleada en el diagrama de flujo de proceso permite diferenciarla del resto. Cada símbolo es indicativo de la unidad que representa.

Diagrama de flujo de proceso

Símbolos para equipos de manejo de sólidos

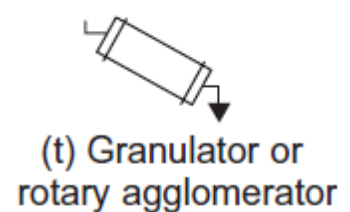
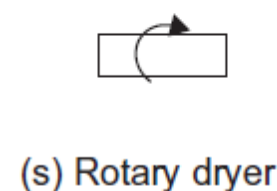
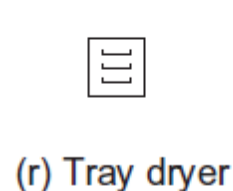
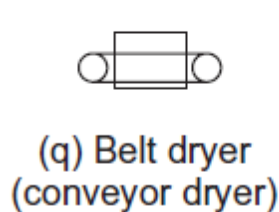
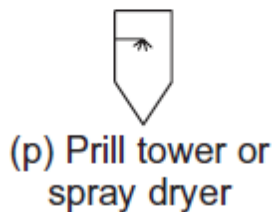
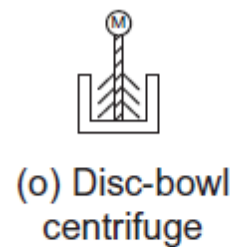
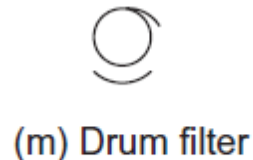
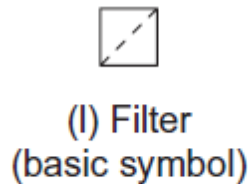
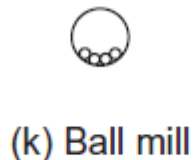
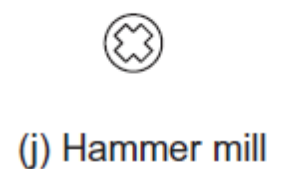
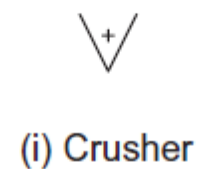
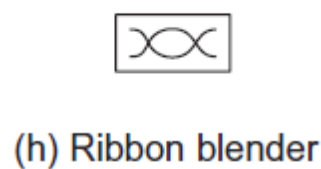
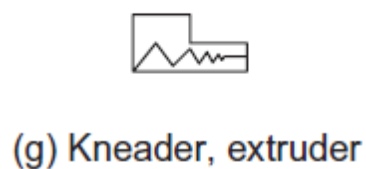
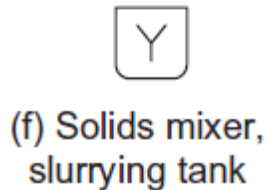
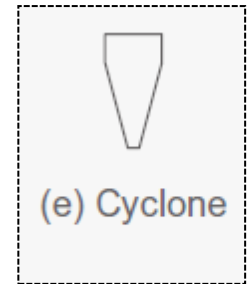
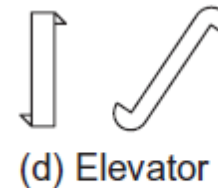
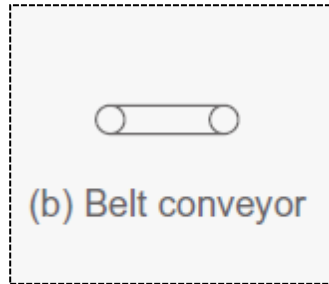
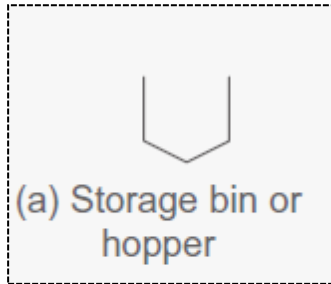
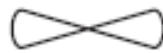
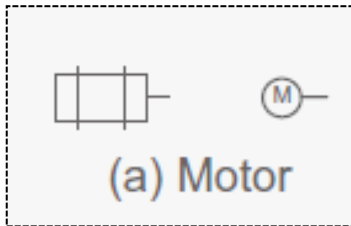
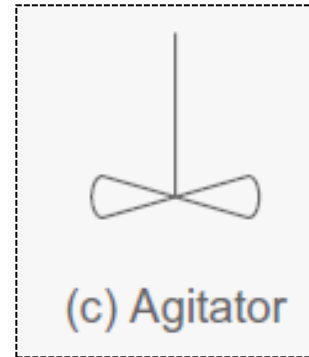


Diagrama de flujo de proceso

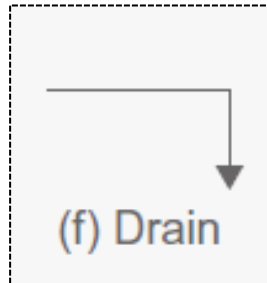
Símbolos genéricos



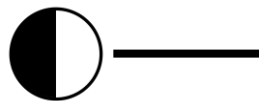
(b) Fan



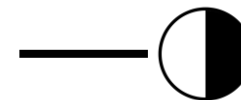
(d) Spray device



(g) Flanged joint



Process input



Process output

Diagrama de flujo de proceso

Información a incluir

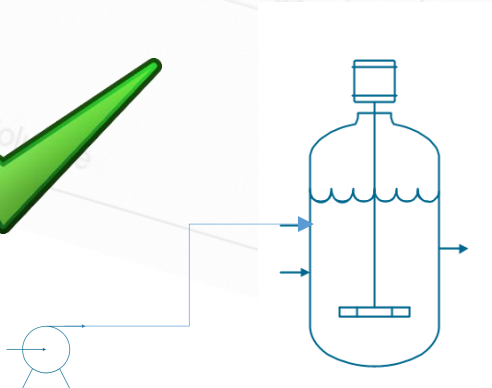
- **Todos los equipos de proceso**, almacenamiento de materias primas y producto, y el equipo utilizado para transportar fluidos y sólidos
 - **Ubicación de las válvulas** de control de proceso
 - **Composición de la corriente**:
 - En forma tabular el flujo másico de cada componente individual, kg/h
 - La composición de la corriente como fracción en peso
 - **Flujo másico de las corrientes**, kg/h
 - **Temperatura de la corriente**, °C
 - **Presión de operación nominal**, kPa, bar, atm
 - **Entalpía de la corriente**, kJ/h.
-  **OPCIONAL**
-  **ESENCIAL**
- **Composición molar (%) y/o flujo molar**
 - Datos de propiedades físicas, valores medios: **densidad** (kg/m³), **viscosidad** (mN s/m²)
 - **Nombre de la corriente** (breve descripción de una o dos palabras), p. ej.: “FONDOS DE COLUMNA DE ACETONA”.

Diagrama de flujo de proceso

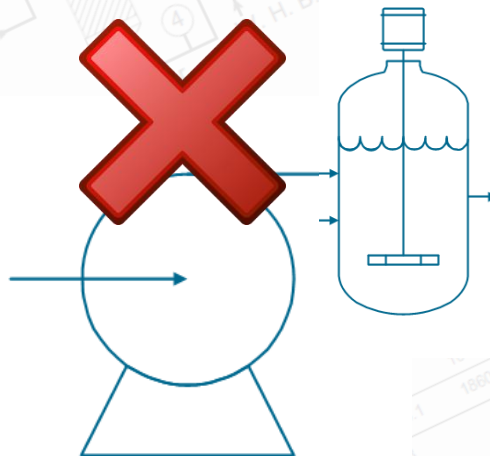
Disposición

- La **disposición** de los principales elementos debe parecerse al diseño de planta propuesto
- El equipo **debe dibujarse aproximadamente a escala**. Los elementos principales (reactores, etc.) deben ser dibujados aproximadamente en la proporción correcta
- Se debe incluir la información de **TODAS** las corrientes (*incluso si pareciera poco relevante*)

Proporción
correcta



Proporción
incorrecta



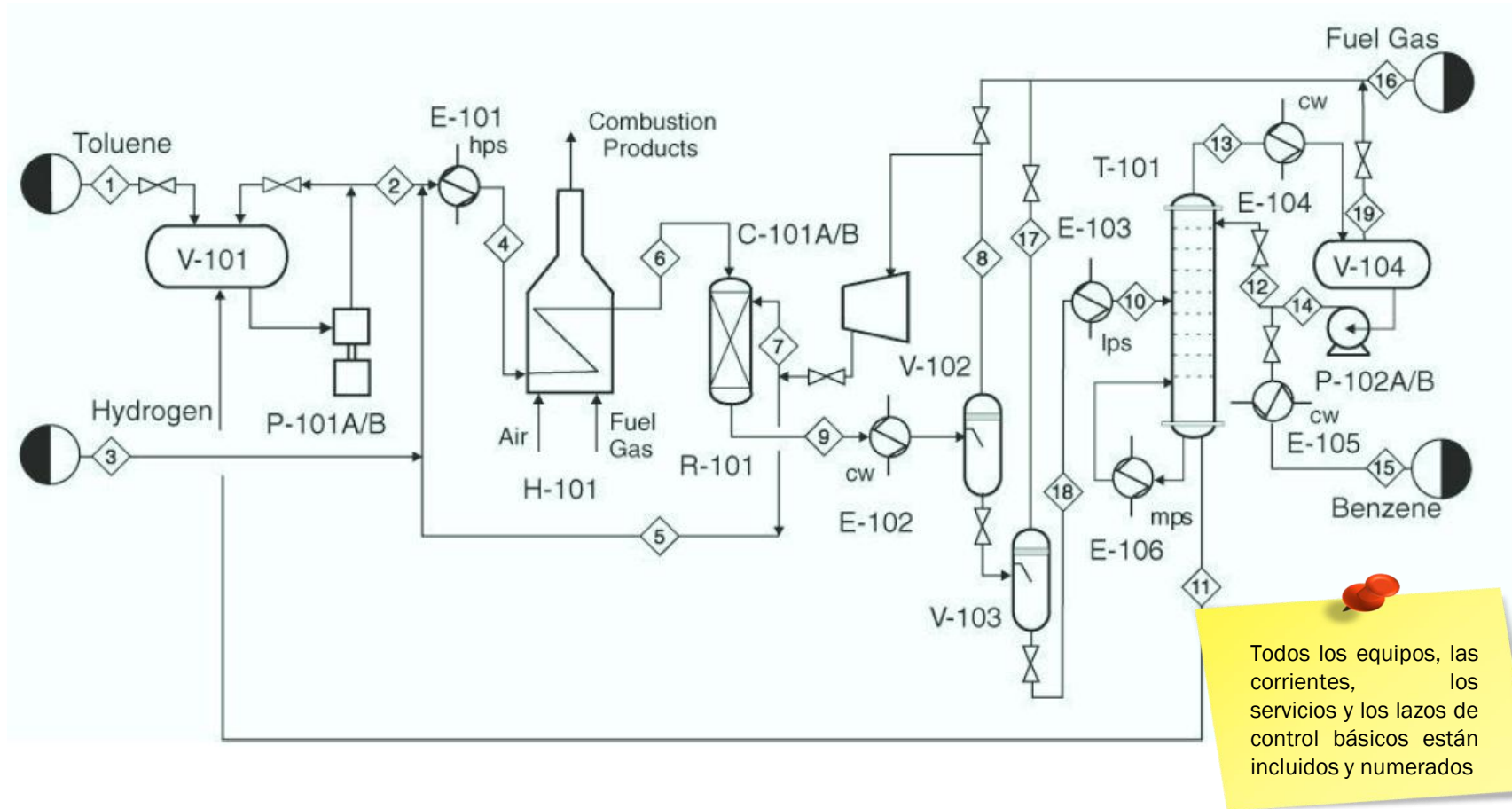
Se debe ejercer alguna licencia en la colocación de elementos auxiliares, tales como intercambiadores de calor y bombas, o el diseño estará demasiado congestionado.

Diagrama de flujo de proceso

Precisión de los datos, bases de cálculo, procesos batch, servicios, identificación de equipos, pruebas de diagramas

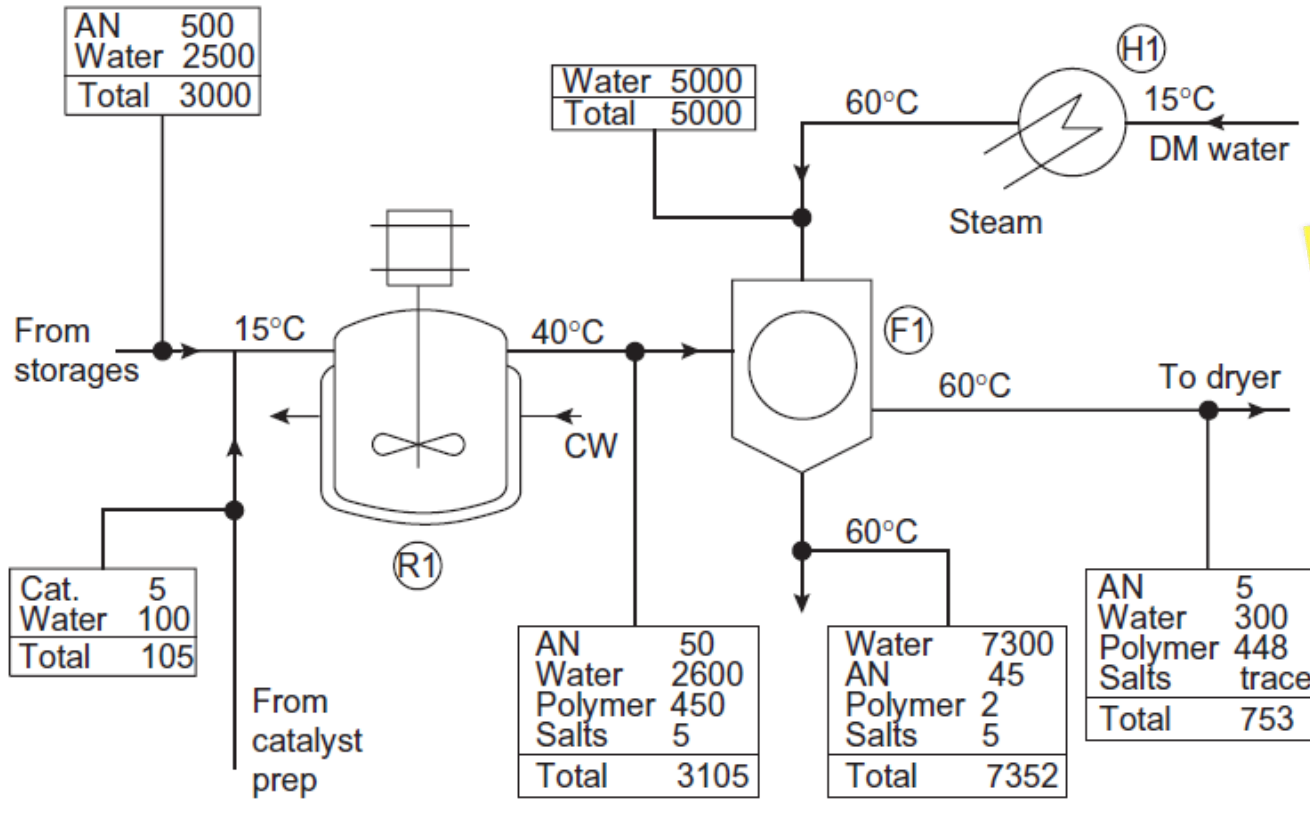
- Usar 3 o 4 cifras significativas
- Listar las principales consideraciones (temp., rendimientos, verano/invierno)
- Indicar cuando se trata de un proceso batch
- No incluir las conexiones completas de los servicios (agua, vapor, etc.)
- Identificar los equipos con códigos numéricos y nombres
- El PFD es responsabilidad del dibujante: el profesional de la ingeniería química será quien haga el boceto / croquis y de revise el DFP final

Diagrama de flujo de proceso



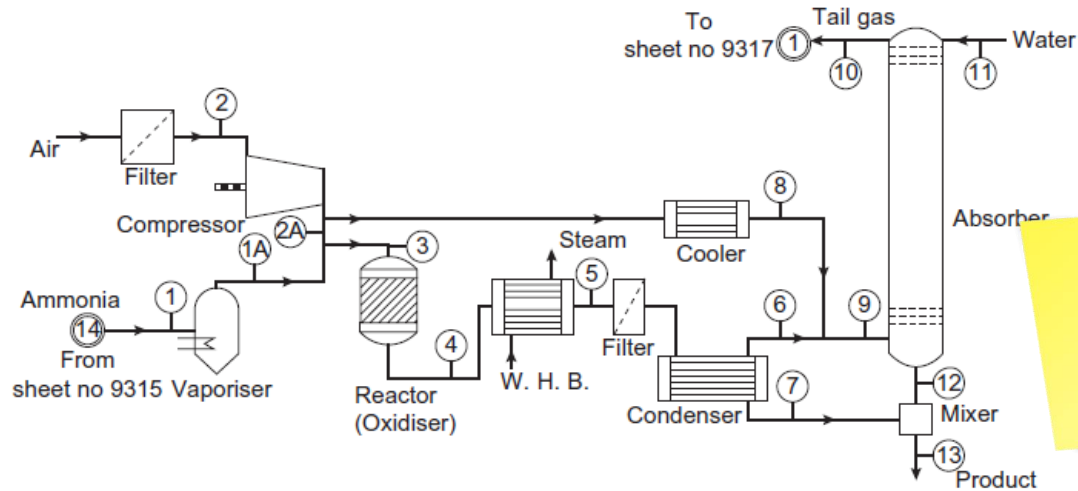
Un diagrama de flujo de proceso (Process Flow Diagram o PFD) contiene la información principal/relevante de ingeniería de proceso.

Diagrama de flujo de proceso



Un diagrama de flujo de proceso (Process Flow Diagram o PFD) contiene la información principal/relevante de ingeniería de proceso.

Diagrama de flujo de proceso



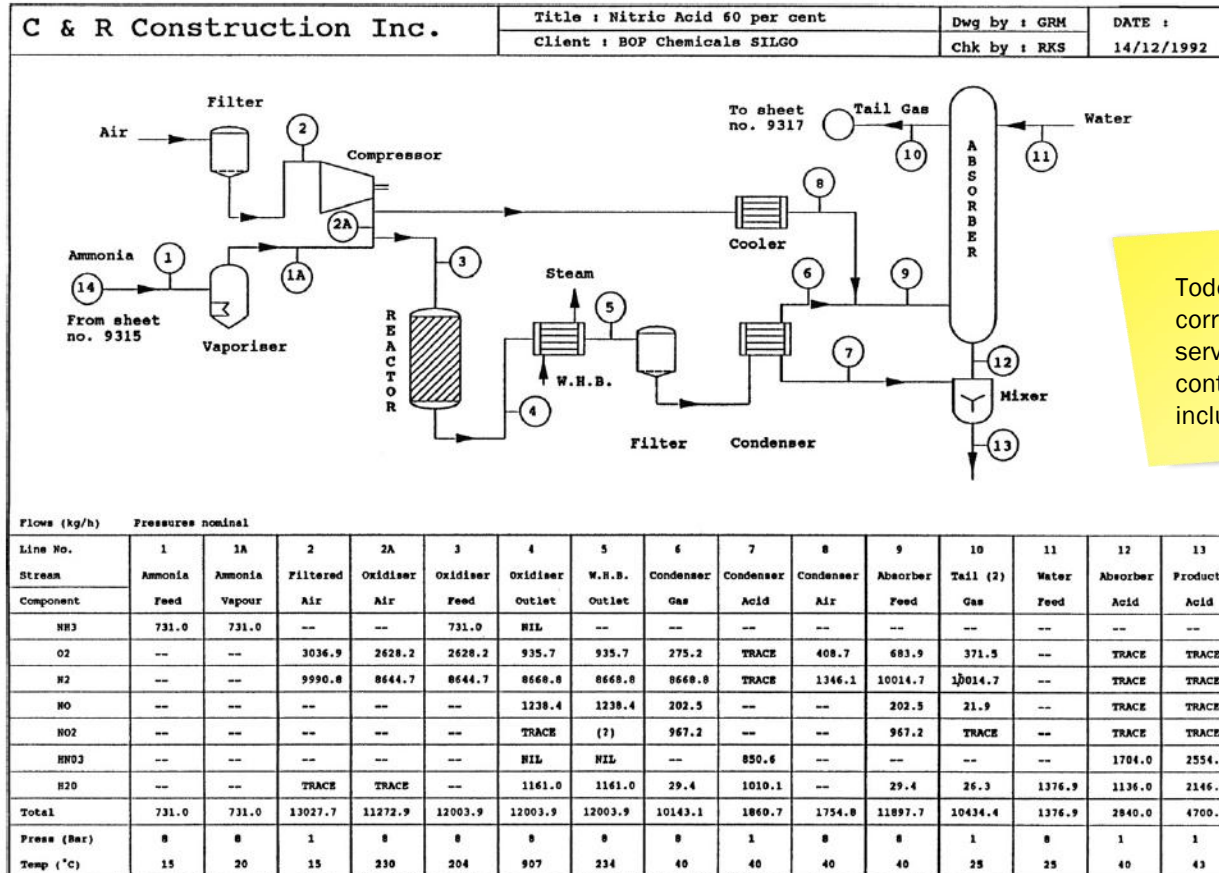
Todos los equipos, las corrientes, los servicios y los lazos de control básicos están incluidos y numerados

Flows kg/h pressures nominal

Line no. Stream component	1 Ammonia feed	1A Ammonia vapor	2 Filtered air	2A Oxidiser air	3 Oxidiser feed	4 Oxidiser outlet	5 W.H.B. outlet	6 Condenser gas	7 Condenser acid	8 Secondary air	9 Absorber feed	10 Tail(2) gas	11 Water feed	12 Absorber acid	13 Product acid	C & R Construction Inc
NH ₃	731.0	731.0	—	—	731.0	Nil	—	—	—	—	—	—	—	—	—	Nitric acid 60 percent
O ₂	—	—	3036.9	2628.2	2628.2	935.7	(935.7) ⁽¹⁾	275.2	Trace	408.7	683.9	371.5	—	Trace	Trace	100,000 ty
N ₂	—	—	9990.8	8644.7	8644.7	8668.8	8668.8	8668.8	Trace	1346.1	10,014.7	10,014.7	—	Trace	Trace	Client BOP chemicals
NO	—	—	—	—	—	1238.4	(1238.4) ⁽¹⁾	202.5	—	—	202.5	21.9	—	Trace	Trace	SLIGO
NO ₂	—	—	—	—	—	Trace	(7) ⁽¹⁾	967.2	—	—	967.2	(Trace) ⁽¹⁾	—	Trace	Trace	Sheet no. 9316
HNO ₃	—	—	—	—	—	Nil	Nil	—	850.6	—	—	—	—	1704.0	2554.6	
H ₂ O	—	—	Trace	—	—	1161.0	1161.0	29.4	1010.1	—	29.4	26.3	1376.9	1136.0	2146.0	
Total	731.0	731.0	13,027.7	11,272.9	12,003.9	12,003.9	12,003.9	10,143.1	1860.7	1754.8	11,897.7	10,434.4	1376.9	2840.0	4700.6	
Press bar	8	8	1	8	8	8	8	8	1	8	8	1	8	1	1	Dwg by Date
Temp. °C	15	20	15	230	204	907	234	40	40	40	40	25	25	40	43	Checked 25/7/1980

Un diagrama de flujo de proceso (Process Flow Diagram o PFD) contiene la información principal/relevante de ingeniería de proceso.

Diagrama de flujo de proceso



Todos los equipos, las corrientes, los servicios y los lazos de control básicos están incluidos y numerados

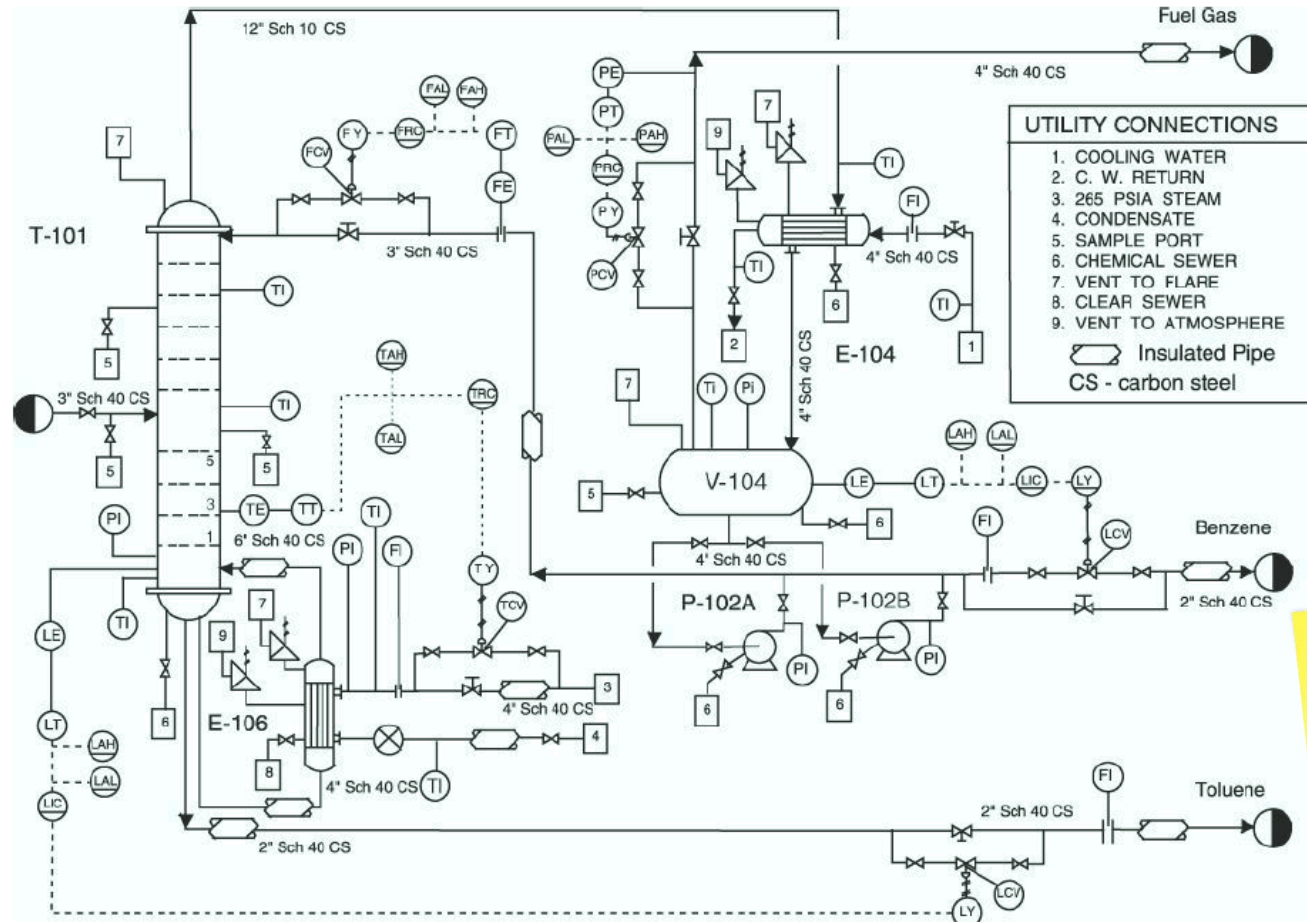
Un diagrama de flujo de proceso (Process Flow Diagram o PFD) contiene la información principal/relevante de ingeniería de proceso.

Diagrama de tuberías e instrumentación

El diagrama de tuberías e instrumentación (*P&I Diagram* o *P&ID*), también conocido como diagrama de flujo mecánico, aporta la información necesaria por los ingenieros para comenzar a planificar la construcción de la planta



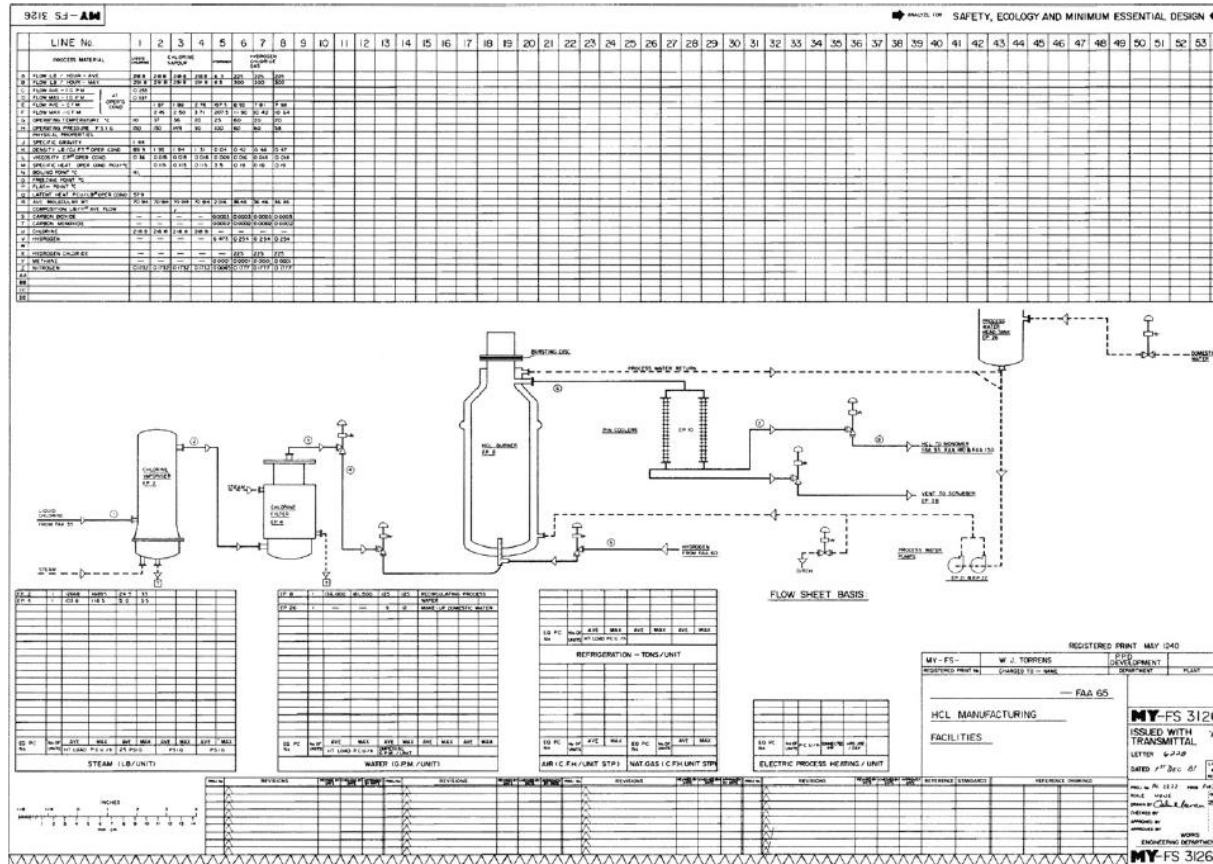
Diagrama de tuberías e instrumentación



Incluye todos los elementos mecánicos

El diagrama de tuberías e instrumentación (P&I diagram o P&ID), también conocido como diagrama de flujo mecánico aporta la información necesaria por los ingenieros para comenzar a planificar la construcción de la planta

Diagrama de tuberías e instrumentación



Incluye todos los elementos mecánicos

El diagrama de tuberías e instrumentación (P&I diagram o P&ID), también conocido como diagrama de flujo mecánico aporta la información necesaria por los ingenieros para comenzar a planificar la construcción de la planta

Comparación PFD vs P&ID

Diagrama de flujo de proceso

Equipo principal

Tubería de proceso principal

Valores del sistema y valores operacionales (presión, temperatura, flujo, densidad).

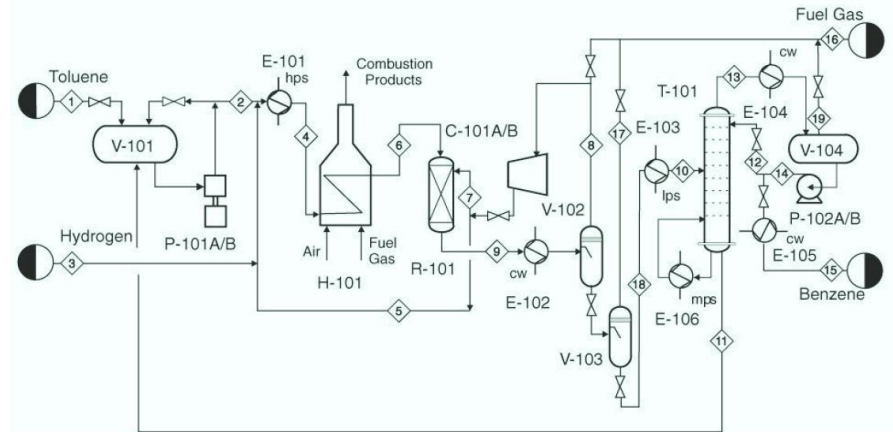


Diagrama de tuberías e instrumentación

Nº de línea de la tubería, tamaño, material, aislamiento

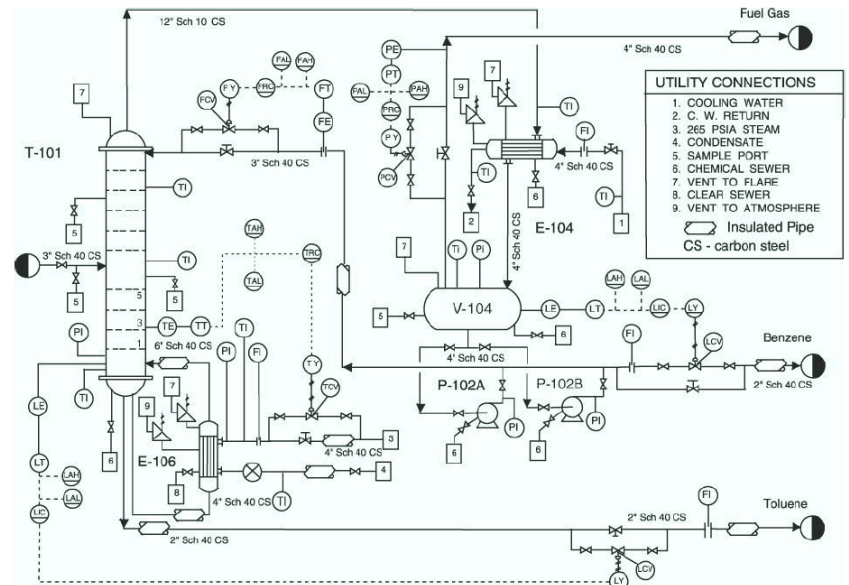
Cada instrumento y su señal neumática/eléctrica

Bucles de control detallados

Líneas de servicios, líneas de drenaje y ventilación, líneas de muestreo, etc.

Equipos paralelos y de repuesto y tuberías conectadas

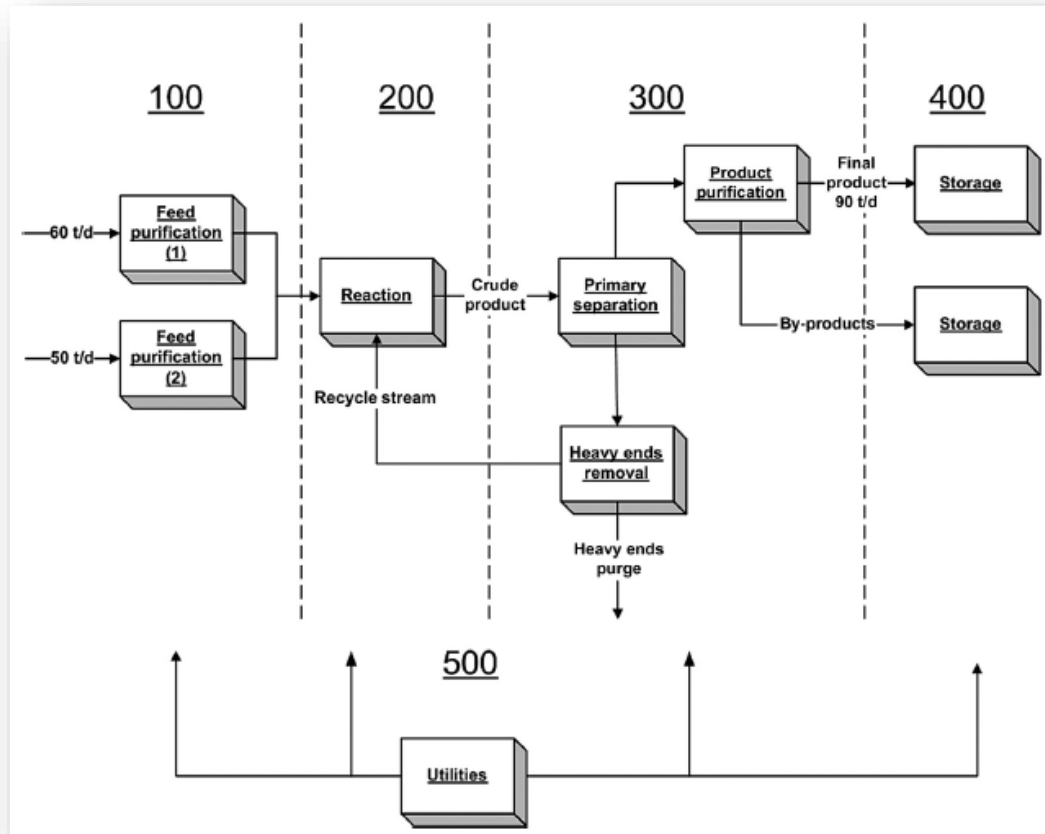
Aislamiento y válvulas de cierre.





Ejemplo diagramas

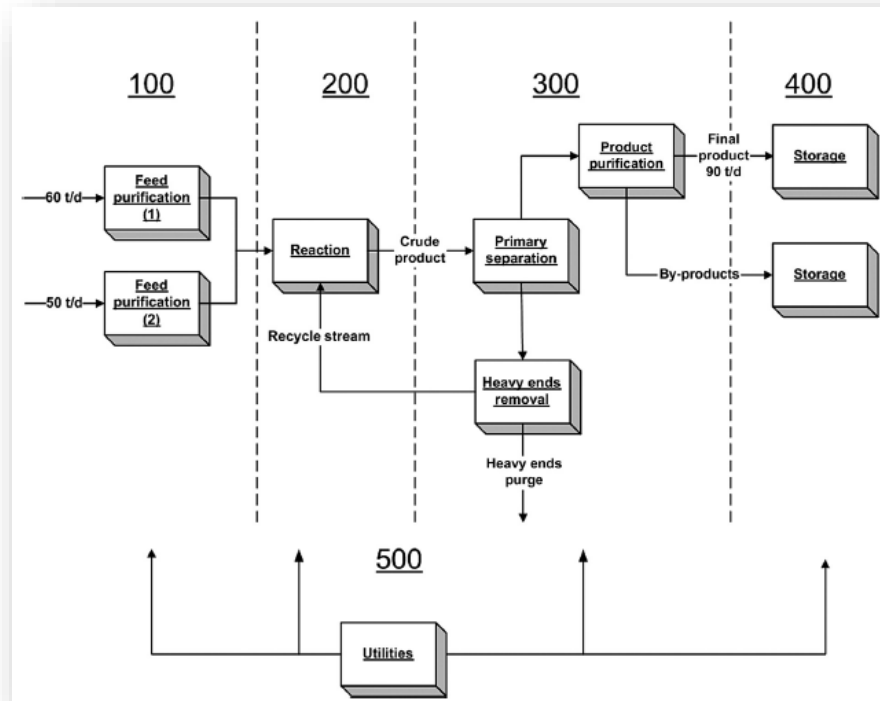
¿Qué tipo de diagrama sería el siguiente y por qué?





Ejemplo diagramas

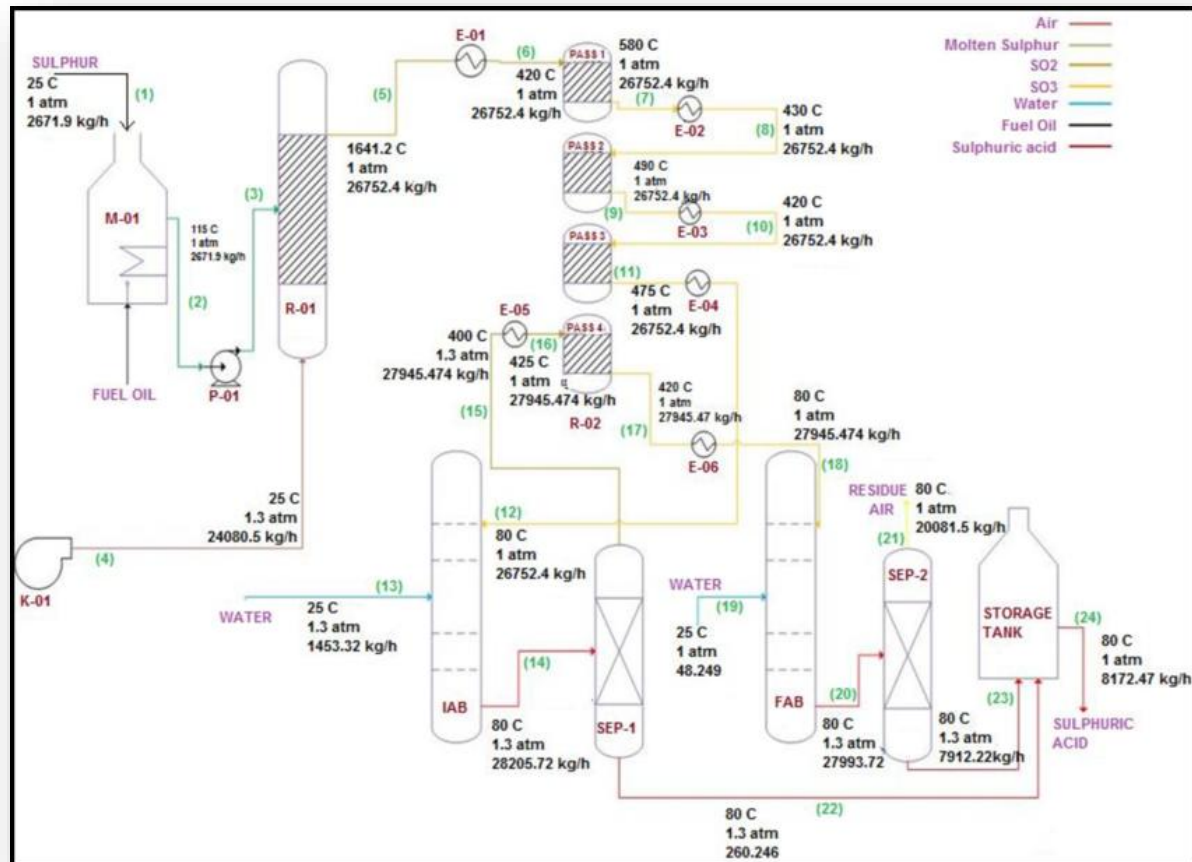
Se trataría de un **diagrama de bloques de flujo de proceso**. Evidentemente aparecen bloques conectados por flechas a un nivel muy general (pero sin detalles por lo que no son de flujo de planta). No lleva detalles de los equipos. El flujo va de izquierda a derecha y los *utilities* van anotados de forma general.



Ejemplo diagramas



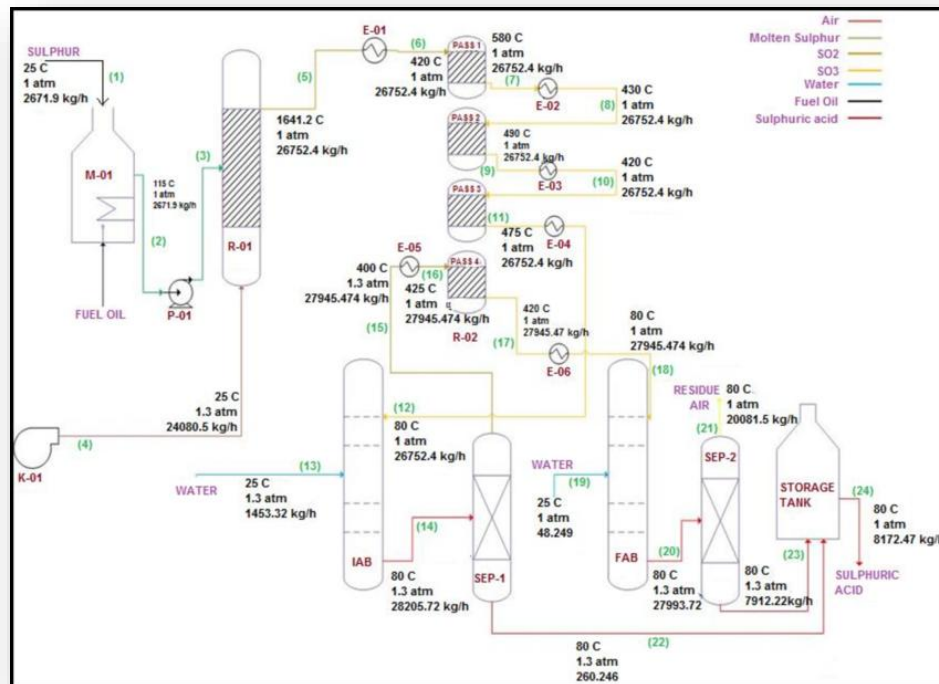
¿Qué tipo de diagrama sería el siguiente y por qué?



Ejemplo diagramas



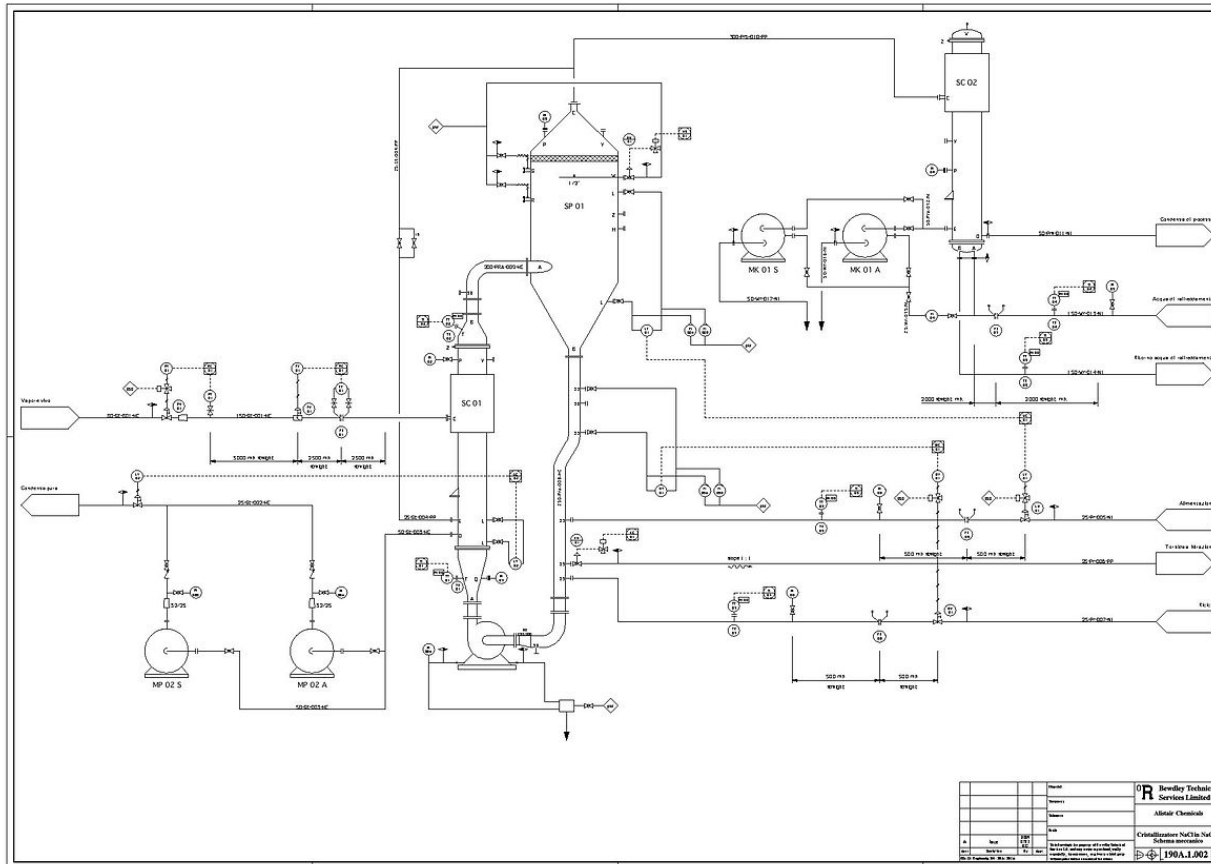
Se trataría de un **diagrama de flujo de proceso (PFD)**. Evidentemente no aparecen bloques como tales luego no es un diagrama de bloques (ni de proceso ni de planta). Así mismo vemos que aparecen los símbolos de distintas unidades: horno, columnas de relleno, intercambiadores de calor, pero no hay detalles sobre el tamaño de los equipos, sus materiales, o los lazos de control.

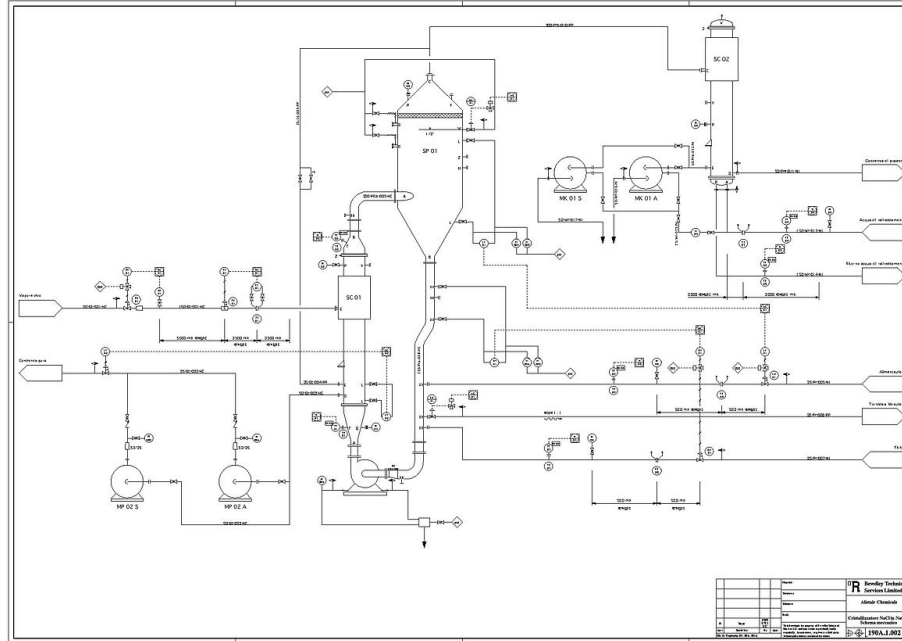


Ejemplo diagramas



¿Qué tipo de diagrama sería el siguiente y por qué?



[illegible]

2.1 La ecuación general de balances. Clasificación genérica de casos



La ecuación general de balances

El principio de conservación

DE LA ENERGÍA

**“La energía ni se crea ni se destruye,
únicamente puede transformarse”**

(se corresponde con la primera ley de la termodinámica)

La ecuación general de balances

El principio de conservación

DE LA MASA

“La masa no puede crearse ni destruirse”

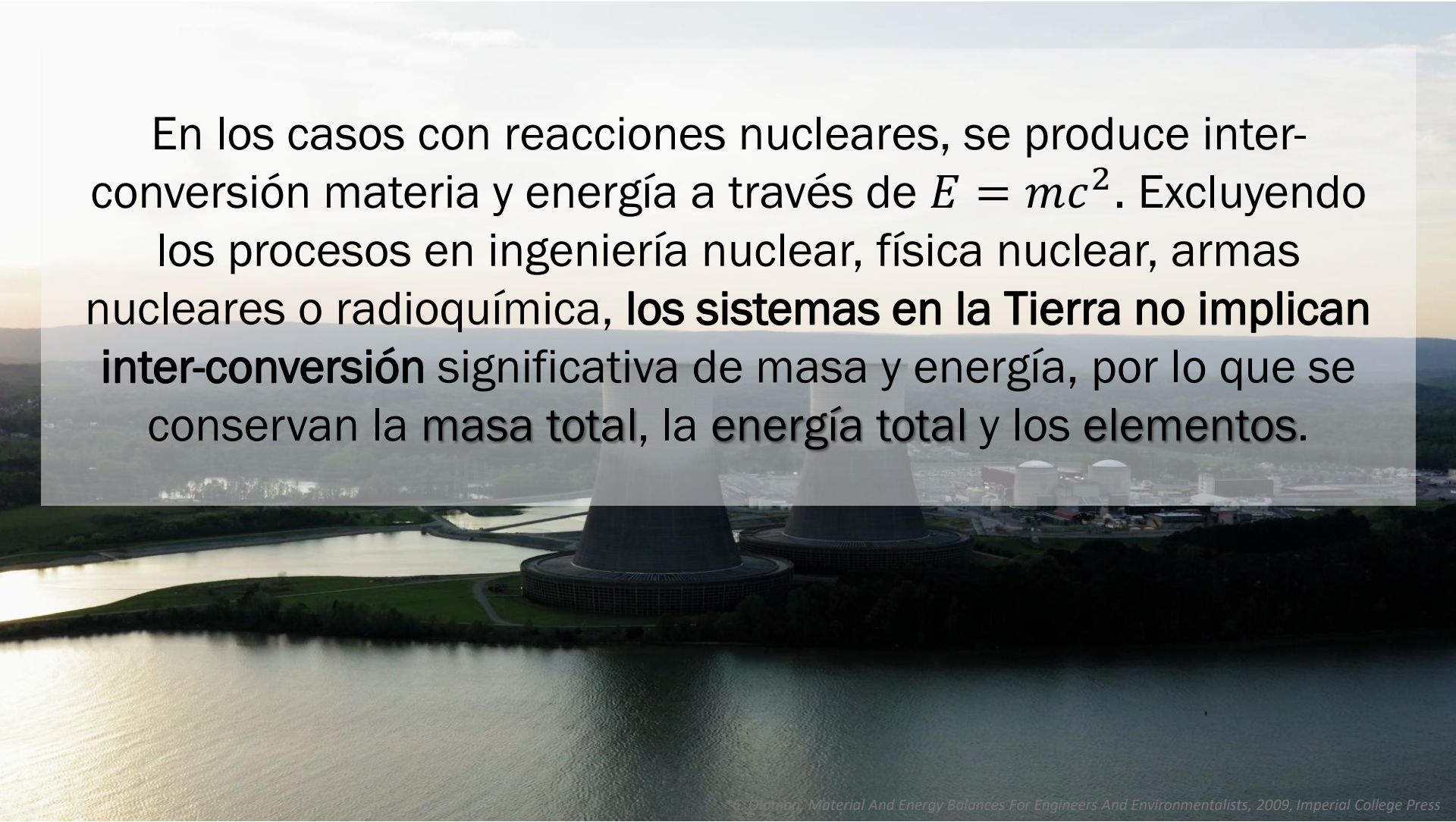
(excluyendo las reacciones nucleares o la interconversión de materia y energía a través de la relación $E = m \cdot c^2$)

*Se conoce como Ley de conservación de la materia,
ley de conservación de la masa o ley de Lomonósov-Lavoisier*

La ecuación general de balances

El principio de conservación

En los casos con reacciones nucleares, se produce inter-conversión materia y energía a través de $E = mc^2$. Excluyendo los procesos en ingeniería nuclear, física nuclear, armas nucleares o radioquímica, **los sistemas en la Tierra no implican inter-conversión** significativa de masa y energía, por lo que se conservan la masa total, la energía total y los elementos.



La ecuación general de balances

El principio de conservación

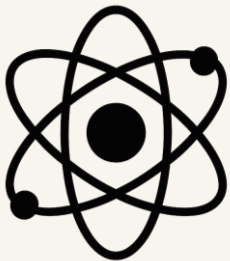
El principio de conservación, y por ende, todos los balances de materia y energía, se basan en nuestra experiencia (realidad física), de tal forma que la materia y la energía total pueden cambiar su forma pero no pueden aparecer ni desaparecer.

La ecuación general de balances

Propiedades conservativas

Aquellas cuya cantidad total se mantiene constante y por tanto obedece al *principio de conservación*, que establece que tal cantidad no puede ser ni creada ni destruida. Alternativamente se podría decir que son aquellas que permanecen constantes en un sistema aislado, independientemente de los cambios que ocurren en el interior del sistema.

Elementos



Masa total



Energía total



Cant.
movimiento

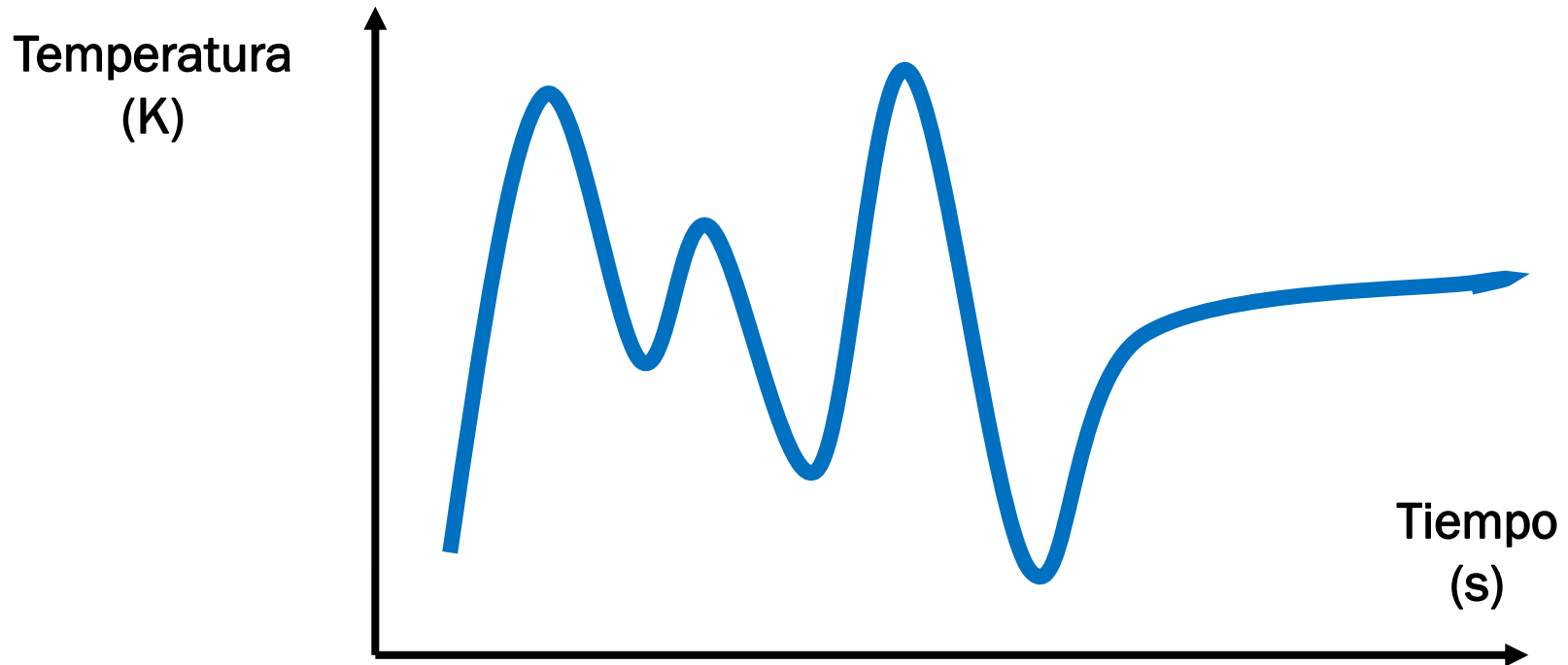


La entalpía, la entropía y el volumen son ejemplos de propiedades que no se conservan necesariamente

La ecuación general de balances

Propiedades cuantitativas

Describe alguna característica macroscópica, que, aunque pueda variar con el tiempo, tiene un valor dado en un instante de tiempo.

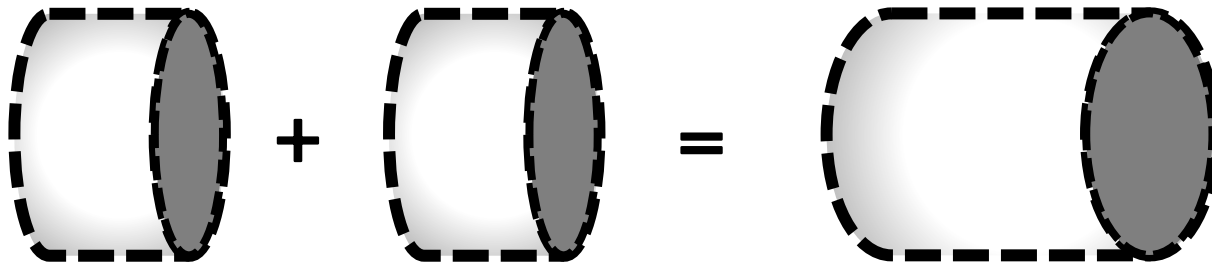


La ecuación general de balances

Propiedades extensivas e intensivas

Una **propiedad extensiva** de un sistema es aquella tal que, si el sistema se dividiese en dos partes, la propiedad del sistema sería la suma de las propiedades de las partes individuales. Ejemplos: masa, volumen, cantidad de energía, superficie*

Masa total



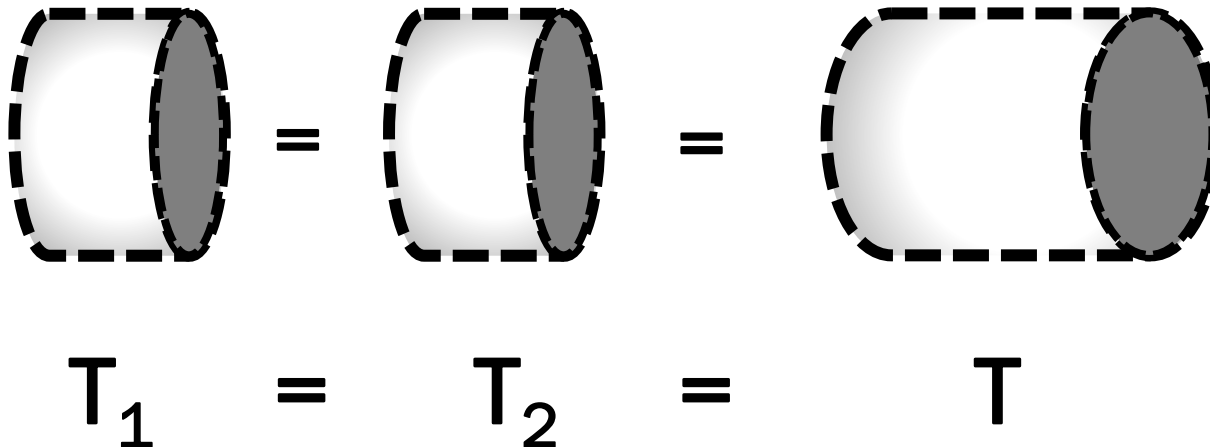
$$m_1 + m_2 = m$$

La ecuación general de balances

Propiedades extensivas e intensivas

Una **propiedad intensiva** de un sistema homogéneo es aquella tal que, si el sistema se dividiese en dos partes, la propiedad del sistema sería la misma en el sistema y en sus partes individuales. Ejemplos: densidad, concentración, presión, temperatura.

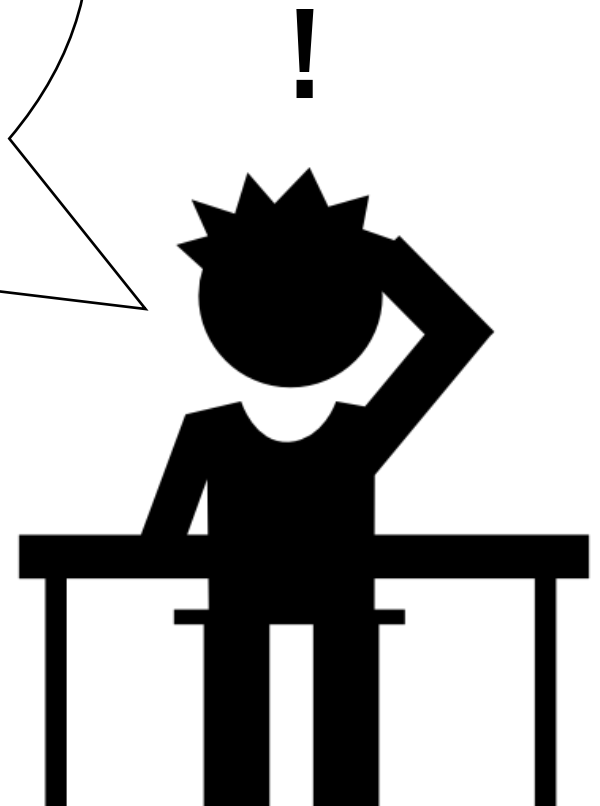
Temperatura



En una región heterogénea puede variar con la posición (sería una propiedad local)

¡Entendido! La energía total es una propiedad conservativa y extensiva.

La temperatura sería una propiedad intensiva (no tendría sentido hablar de ella como propiedad conservativa o no conservativa)



La ecuación general de balances

La forma matemática de expresar el principio de conservación de magnitudes extensivas (ya sea de cualquier propiedad conservativa o no conservativa) es la Ecuación General de Balances:

Ecuación
general
de
balances

$$A = E - S + G - C$$

Generación G
y consumo C
sólo aparecen
para
magnitudes no
conservativas
(existe un
sumidero o
fuente)

Es una ecuación muy potente que se puede expresar en forma integral o diferencial

La ecuación general de balances

Ecuación
general de
balances

$$A = E - S + G - C$$

Forma
integral

Término de la ec.	Variable	Significado (forma integral)
<i>A</i>	Acumulación	Acumulación en el sistema (cantidad final de propiedad menos cantidad inicial de la propiedad) dentro de los límites del sistema
<i>E</i>	Entrada	Cantidad de la propiedad que entra al sistema a través de los límites del sistema
<i>S</i>	Salida	Cantidad de la propiedad que sale del sistema a través de los límites del sistema
<i>G</i>	Generación	Cantidad de la propiedad generada o formada dentro de los límites del sistema
<i>C</i>	Consumo	Cantidad de la propiedad consumida o convertida dentro de los límites del sistema

La ecuación general de balances



materia

Para un SISTEMA dado y una PROPIEDAD/MAGNITUD extensiva especificada, la ecuación general para el **BALANCE EN FORMA INTEGRAL** es:



energía

ACUMULACIÓN	=	ENTRADAS	-	SALIDAS	+	GENERACIÓN	-	CONSUMO
En el sistema		Al sistema		Del sistema		En el sistema		En el sistema

$$A = E - S + G - C$$

Ecuación general para Balance integral → cantidades totales (en lugar de velocidades) de la magnitud especificada en cada uno de los términos del balance sobre un periodo de tiempo dado desde el estado inicial al estado final del sistema. Es un enfoque de caja negra focalizado en el comportamiento general de un sistema. Para el caso de que la magnitud sea materia, este balance es particularmente relevante cuando se aplica a sistemas con reacciones químicas. Los términos son (+) cuando se cruzan los límites hacia dentro del sistema y (-) cuando se salen hacia afuera del sistema

La ecuación general de balances



materia

Para un SISTEMA dado y una PROPIEDAD/MAGNITUD extensiva especificada, la ecuación general para el **BALANCE EN FORMA INTEGRAL** es:



energía



La ecuación general de balances

Ecuación
general de
balances

$$V_A = V_E - V_S + V_G - V_C$$

Forma
diferencial

Término de la ec.	Variable	Significado (forma diferencial)
V_A	Acumulación	Velocidad de acumulación en el sistema (cantidad final de propiedad menos cantidad inicial de la propiedad) dentro de los límites del sistema
V_E	Entrada	Velocidad de entrada de la propiedad hacia el sistema desde el entorno a través de los límites del sistema
V_S	Salida	Velocidad de salida de la propiedad desde el sistema hacia el entorno a través de los límites del sistema
V_G	Generación	Velocidad de generación o formación de la propiedad dentro de los límites del sistema
V_C	Consumo	Velocidad de consumo o conversión de la propiedad dentro de los límites del sistema

La ecuación general de balances



materia

Para un SISTEMA dado y una PROPIEDAD/MAGNITUD extensiva especificada, la ecuación general para el **BALANCE EN FORMA DIFERENCIAL** es:



energía

Velocidad de
ACUMULACIÓN

En el sistema

=

Velocidad de
ENTRADAS

Al sistema

-

Velocidad de
SALIDAS

Del sistema

+

Velocidad de
GENERACIÓN

En el sistema

-

Velocidad de
CONSUMO

En el sistema

$$V_A = V_E - V_S + V_G - V_C$$

El balance diferencial permite evaluar cambios en el sistema con el tiempo → aplicación a sistemas en estado no estacionario → requiere conocimientos de cálculo para resolver ecuaciones diferenciales (en estado estacionario no hay cambios con el tiempo → resolución de ecuaciones algebraicas). Se focaliza en los mecanismos dentro del sistema. Son balances que se dan en un instante de tiempo (se trata de la fotografía de ese instante). En el balance integral, la diferencia es entre la fotografía entre dos instantes.

La ecuación general de balances

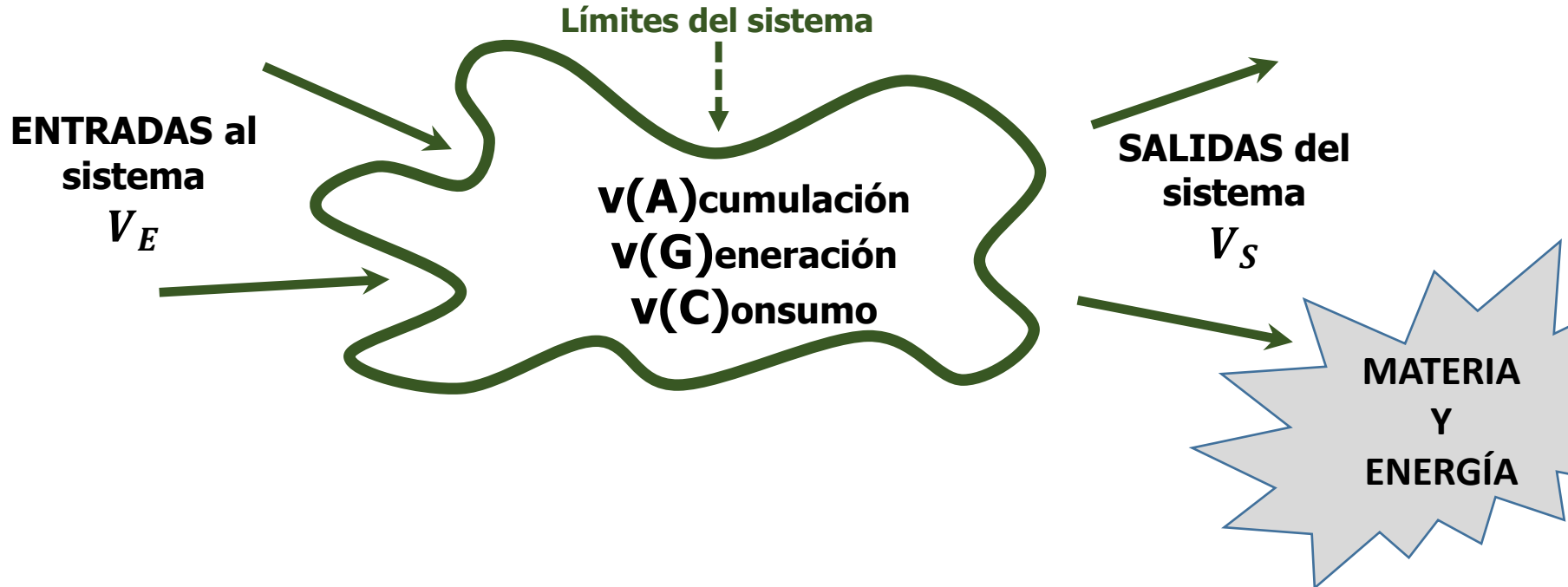


materia

Para un SISTEMA dado y una PROPIEDAD/MAGNITUD extensiva especificada, la ecuación general para el **BALANCE EN FORMA DIFERENCIAL** es:



energía



La ecuación general de balances

Diferencia entre
dos fotos fijas
(inicio y final)

FORMA INTEGRAL

$$\begin{array}{ccccccccc} \text{ACUMULACIÓN} & = & \text{ENTRADAS} & - & \text{SALIDAS} & + & \text{GENERACIÓN} & - & \text{CONSUMO} \\ \text{En el sistema} & & \text{Al sistema} & & \text{Del sistema} & & \text{En el sistema (Rx)} & & \text{En el sistema (Rx)} \end{array}$$

$$A = E - S + G - C$$

Foto en un
instante tiempo
determinado

FORMA DIFERENCIAL

$$\begin{array}{ccccccccc} \text{Velocidad de} & = & \text{Velocidad de} & - & \text{Velocidad de} & + & \text{Velocidad de} & - & \text{Velocidad de} \\ \text{ACUMULACIÓN} & & \text{ENTRADAS} & & \text{SALIDAS} & & \text{GENERACIÓN} & & \text{CONSUMO} \\ \text{En el sistema} & & \text{Al sistema} & & \text{Del sistema} & & \text{En el sistema (Rx)} & & \text{En el sistema (Rx)} \end{array}$$

$$v(A) = v(E) - v(S) + v(G) - v(C)$$

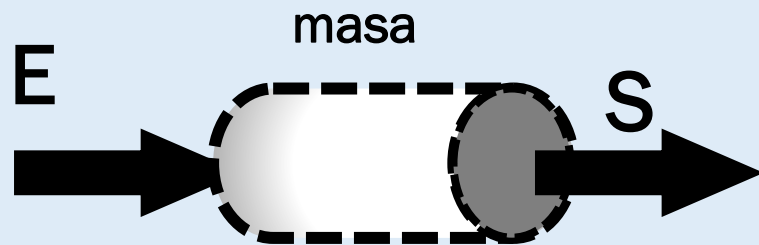
Esta ecuación general de balances puede aplicarse tanto a magnitudes/propiedades que se conservan como a magnitudes/propiedades que no se conservan. EMPLEAR LA ECUACIÓN GENERAL DE BALANCES EN FORMA INTEGRAL O DIFERENCIAL DEPENDERÁ DE CADA CASO CONCRETO. EN SISTEMAS ABIERTOS NORMALMENTE SERÁ EN FORMA DIFERENCIAL Y EN SISTEMAS CERRADOS NORMALMENTE SERÁ EN FORMA INTEGRAL

La ecuación general de balances

Ejemplos de magnitudes que se **conservan** son los elementos, la masa total, la energía total, la cantidad de movimiento (puede haber acumulación, pero no hay generación o consumo neto)

$$G = C = 0$$

$$A = E - S$$



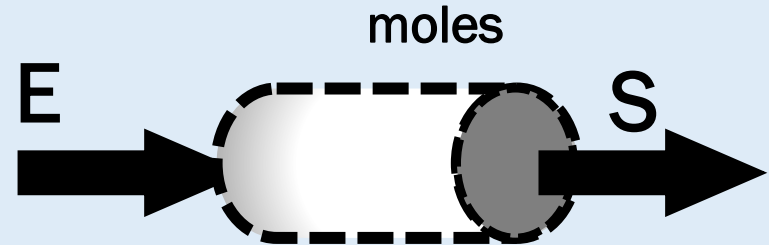
Por ejemplo, si no hay acumulación $A=0$ kg/s ni Rx, entonces
 $E=S=10$ kg/s

¡La masa ni se genera ni se consume!

Ejemplos de magnitudes que no se **conservan necesariamente** son el volumen, la entalpía o la entropía. Los moles se conservan en sistemas sin reacciones químicas. No se conservan necesariamente en sistemas con Rx

$$G \wedge C \neq 0$$

$$G \vee C \neq 0$$



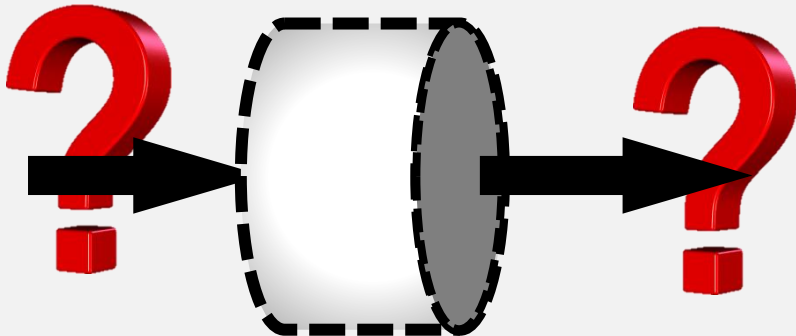
Por ejemplo, si $E_A=10$ kmol/h, no hay acumulación $A=0$ kmol/h, y la Rx es $A \rightarrow 2B$, con $C_A=2$ kmol/h, entonces $E_T=10$ kmol/h y $S_T=12$ kmol/h, luego $E \neq S$

Clasificación general de problemas

Tipo de sistema y modo de operación:

Sistemas cerrados
Sistemas abiertos
Sistemas aislados

 materia y/o energía



En función de cambios o no con el tiempo:

Estado estacionario

Estado no estacionario



Clasificación general de problemas

En función de cambios o no con el tiempo:

Estado estacionario

No hay cambios de las variables que caracterizan el sistema con el tiempo

$$A = 0$$



Estado no estacionario

Hay cambios en una o más de las variables que caracterizan el sistema con el tiempo

$$A \neq 0$$



Clasificación general de problemas

Tipo de sistema y modo de operación (materia):



Sistemas cerrados

En un periodo de tiempo fijado, no hay ni entradas ni salidas de materia

$$E = S = 0$$

Un proceso que tiene lugar en un sistema cerrado se denomina proceso BATCH (normalmente la alimentación se carga al inicio y se retira tras un periodo de tiempo $E=S=0$).

Un proceso BATCH es uno en el que una cantidad finita de producto es obtenida en un periodo de horas o días. Normalmente, implica uno o más tanques para el mezclado, calentamiento, reacción y destilación, en intervalos de tiempo discretos.

Sistemas abiertos

Hay entradas y/o salidas de materia, que pueden ser constantes o no con respecto al tiempo

$$E \wedge S \neq 0 \quad E \vee S \neq 0$$

Un proceso que tiene lugar en un sistema abierto se denomina proceso CONTINUO (normalmente las corrientes de entrada y de salida fluyen de manera continua durante el proceso $E = S$, siendo $E \vee S \neq 0$).

Un proceso CONTINUO es aquel en el que se manda continuamente la alimentación a un conjunto de equipos, de tal forma que cada equipo se encarga de una única operación. Los productos tienden a almacenarse.

Clasificación general de problemas

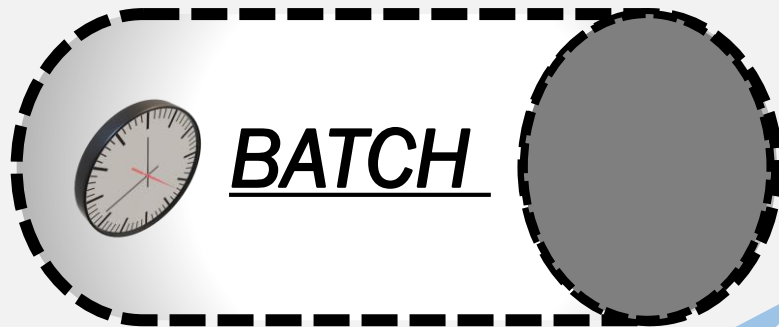
Tipo de sistema y modo de operación (materia):



Sistemas cerrados

En un periodo de tiempo fijado, no hay ni entradas ni salidas de materia

$$E = S = 0$$

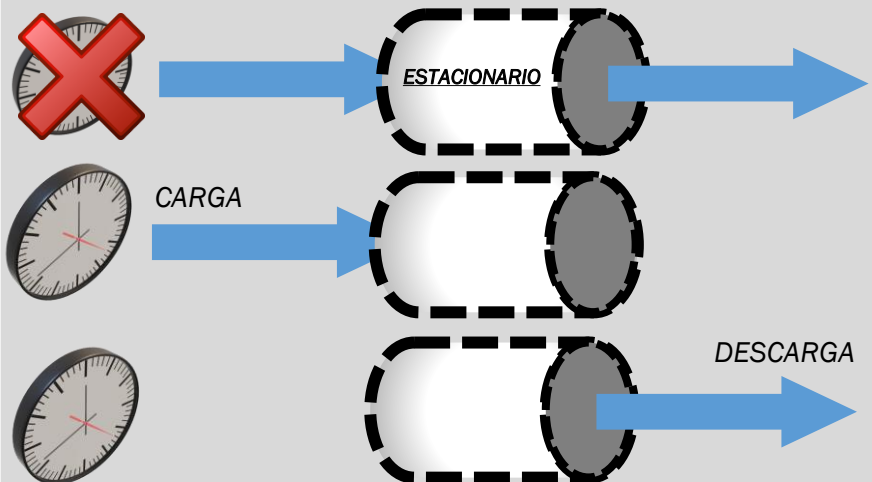


El tiempo no influye en que sea un sistema abierto o cerrado

Sistemas abiertos

Hay entradas y/o salidas de materia, que pueden ser constantes o no con respecto al tiempo

$$E \wedge S \neq 0 \quad E \vee S \neq 0$$

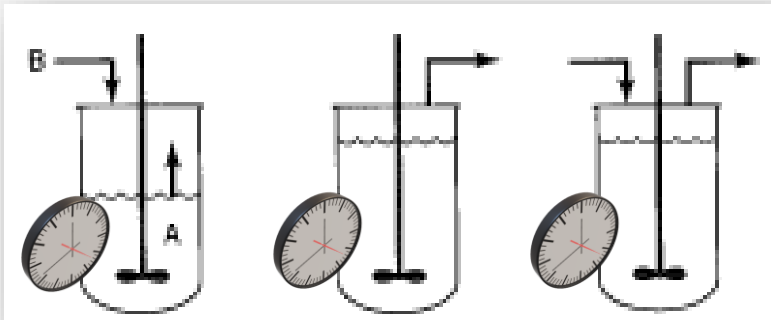


Clasificación general de problemas

Tipo de sistema y modo de operación (materia): 

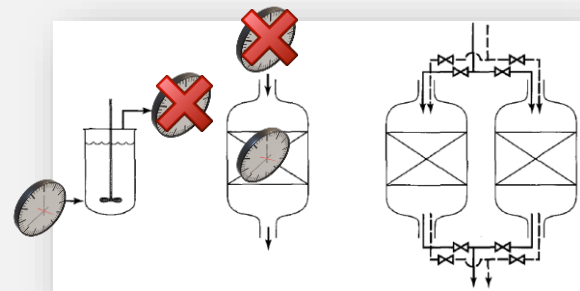
Reactores semibatch

Es una variación del proceso batch. Existe una entrada o salida de materia al sistema que puede ser intermitente o continua. Consecuentemente, la naturaleza de esta operación es de estado no estacionario (adición de reactivo, retirada de producto, adición de reactivo y eliminación de producto simultánea)



Reactores semicontinuos

Existe más de una fase presente, de modo que una de ellas fluye de forma continua – estacionaria-, mientras que la otra opera en modo batch –no estacionario- (reactor G-L; reactor G-S; ciclo reacción/regeneración). Se da en el inicio de un reactor de tanque hacia el estado estable



Clasificación general de problemas

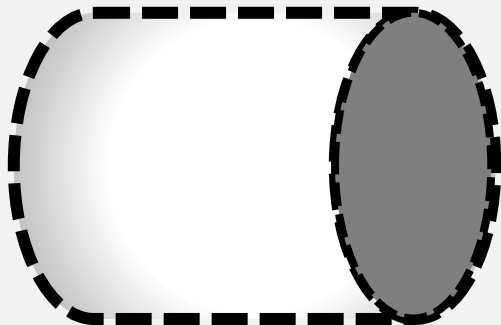
Tipo de sistema y modo de operación (calor):



Sistemas adiabáticos

No hay ni entradas ni salidas de calor (no hay transferencia de calor)

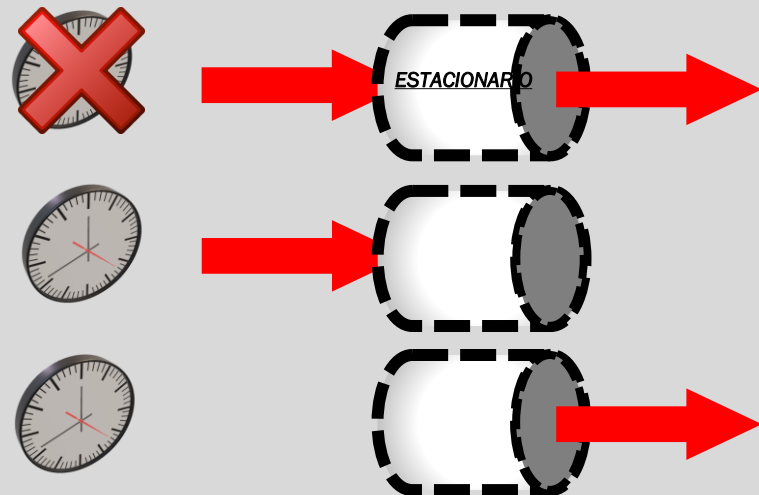
$$E = S = 0$$



Sistemas diatérmicos

Hay entradas y/o salidas de calor (hay transferencia de calor)

$$E \wedge S \neq 0 \quad E \vee S \neq 0$$



Clasificación general de problemas

Tipo de sistema y modo de operación (calor y materia):

S. cerrados

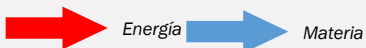
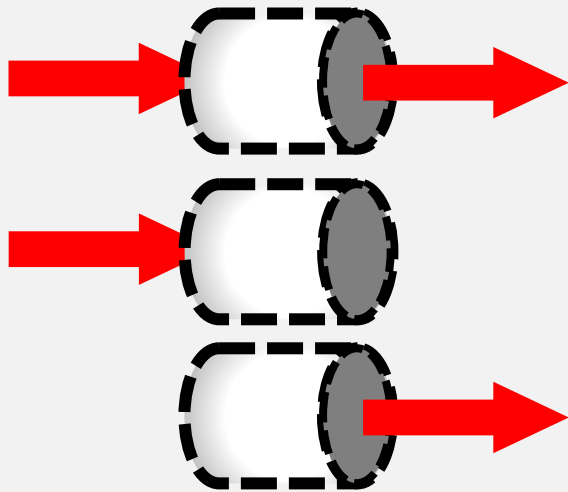
Hay entradas y/o salidas de calor, pero no de materia



$$E = S = 0$$



$$E \wedge S \neq 0$$

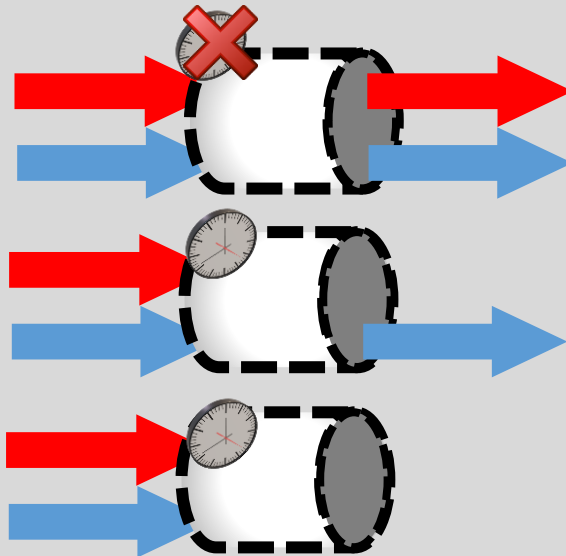


S. abiertos

Hay entradas y/o salidas de materia y/o calor

$$E \wedge S \neq 0 \quad E \vee S \neq 0$$

$$E \wedge S \neq 0 \quad E \vee S \neq 0$$



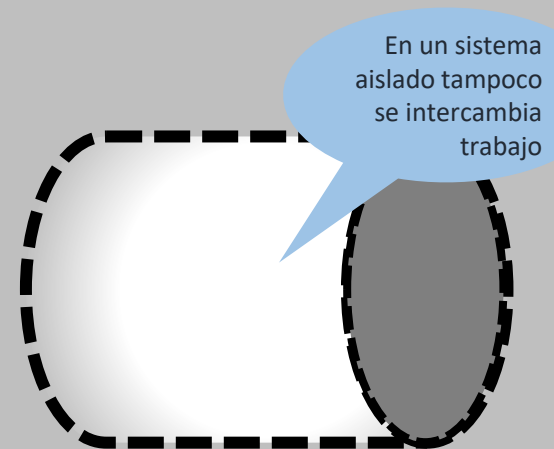
No todas las combinaciones están representadas aquí

S. aislados

No hay entradas ni salidas de calor o materia

$$E = S = 0$$

$$E = S = 0$$



Clasificación general de problemas

Tipo de sistema y modo de operación (calor y materia):

S. cerrados

Hay entradas y/o salidas de calor, pero no de materia

Sistema cerrado

Intercambio solo energía



Vaso tapado

S. abiertos

Hay entradas y/o salidas de materia y/o calor

Sistema abierto

Intercambio de masa y energía



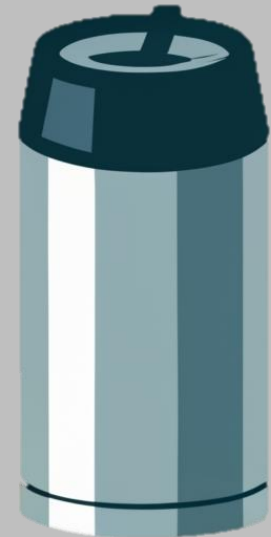
Vaso abierto

S. aislados

No hay entradas ni salidas de calor o materia

Sistema aislado

No existe intercambio



Termo

Clasificación general de problemas

Tipo de sistema y modo de operación (calor y materia):

Materia	Energía	Sistema
$E = S = 0$		Cerrado (<i>batch</i>)
$E \wedge S \neq 0; (E \vee S \neq 0)$		Abierto (continuo)
	$E = S = 0$	Adiabático
	$E \wedge S \neq 0 \ E \vee S \neq 0$	Diatérmico
$E = S = 0$	$E = S = 0$	Aislado
$E = S = 0$	$E \wedge S \neq 0 \ E \vee S \neq 0$	Cerrado
$E \wedge S \neq 0 \ E \vee S \neq 0$	$E \wedge S \neq 0 \ E \vee S \neq 0$	Abierto

Clasificación general de problemas

Tipo de sistema y modo de operación (calor y materia):

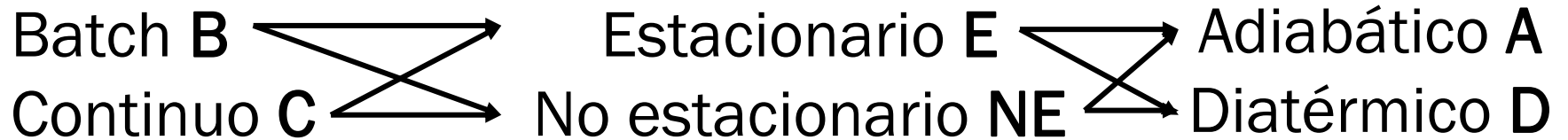
Tipo de problema (diferencial)	A		=		E	-	S	+	G	-	C
Compuestos en un sistema cerrado	A		=						G	-	C
Masa total en un sistema cerrado	A		=	0							
Compuestos en un sistema abierto en estado estacionario	0		=		E	-	S	+	G	-	C
Masa total en un sistema abierto	A		=		E	-	S				
Masa total en un sistema abierto en estado estacionario	0		=		E	-	S				
Energía total en un sistema abierto o cerrado	A		=		E	-	S				
Energía total en estado estacionario	0		=		E	-	S				

No todas las combinaciones están representadas aquí

Se ve claramente como para las propiedades conservativas no hay términos de **G** y/o **C**

Clasificación general de problemas

Posibles combinaciones



Ejemplos convencionales

Batch no estacionario diatérmico (lotes)

Continuo estacionario (producción a gran escala)

Continuo no estacionario (dinámica y control)

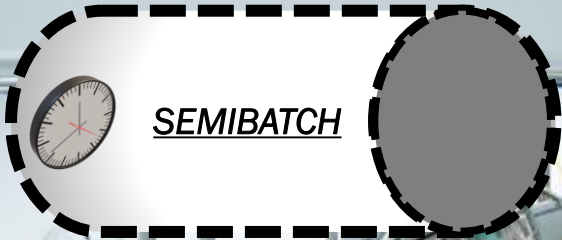
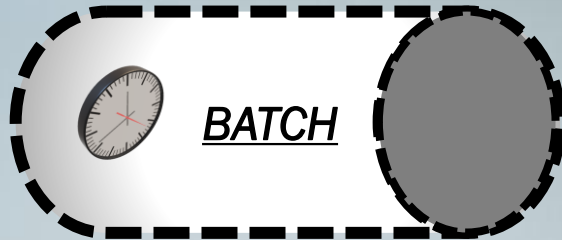
Semi-batch (batch/continuo)

Ejemplos prácticos

_____: Batch no estacionario (diatérmico)

Ejemplos prácticos

FARMACÉUTICA: Batch no estacionario (diatérmico)



Ejemplos prácticos

_____:

Batch no estacionario (carga/descarga)

Batch estacionario (no hay carga ni descarga)

Ejemplos prácticos

ALMACEN DE CARBÓN:

Batch no estacionario (carga/descarga)

Aislado (no hay carga ni descarga)



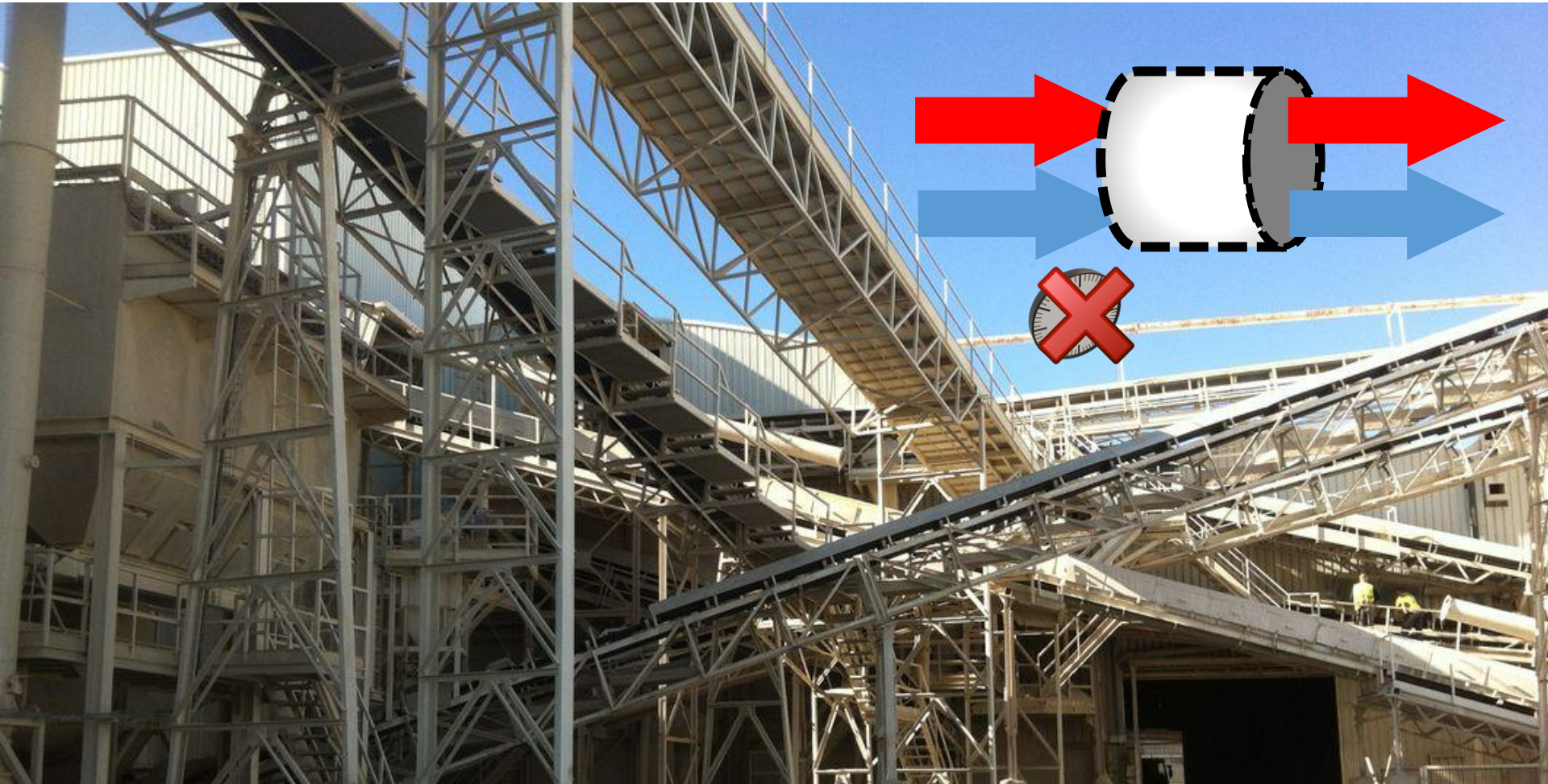
Ejemplos prácticos

_____:

Continuo estacionario (operación normal)

Ejemplos prácticos

PRODUCCIÓN DE COMMODITIES: Continuo estacionario (operación normal)



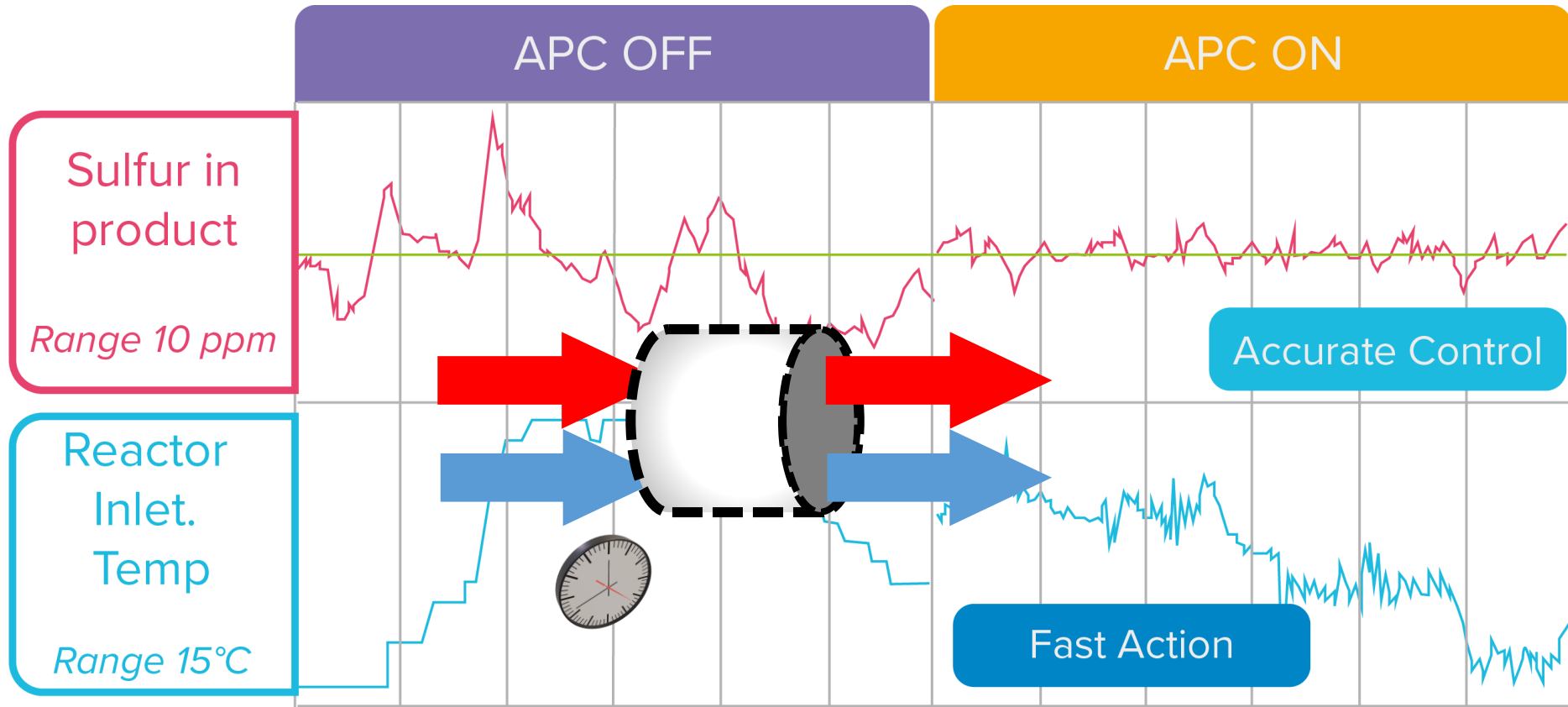
Ejemplos prácticos

_____:

Continuo no estacionario (control de proceso)

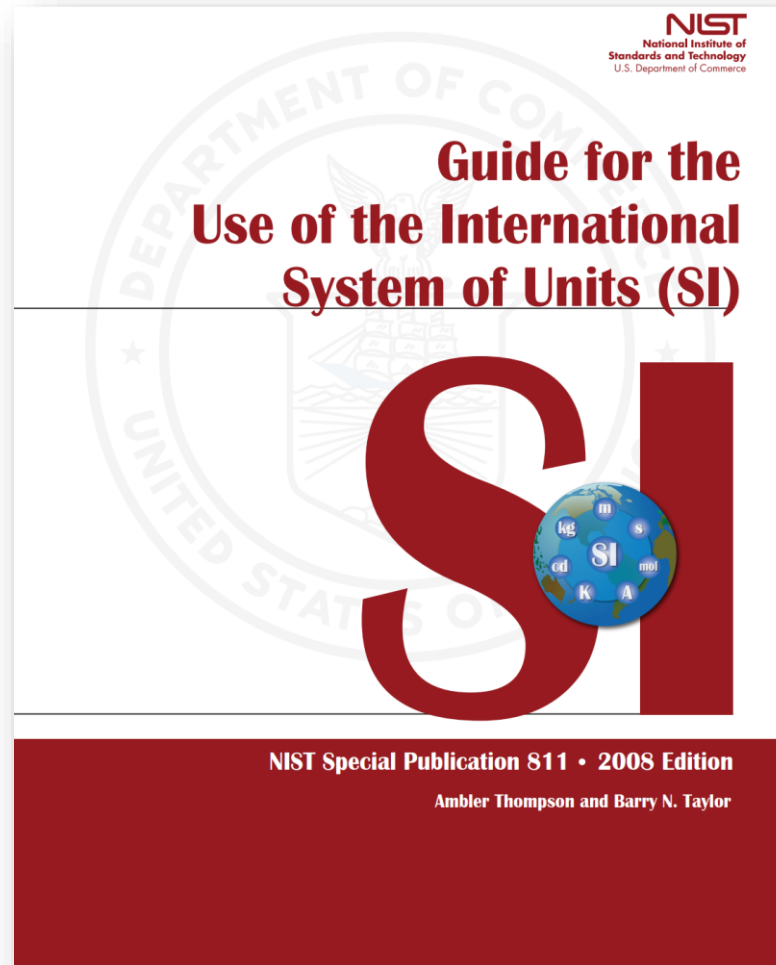
Ejemplos prácticos

Continuo no estacionario (control de proceso)



Uso del Sistema Internacional de Unidades

Guía del NIST



Incluye
factores de
conversión

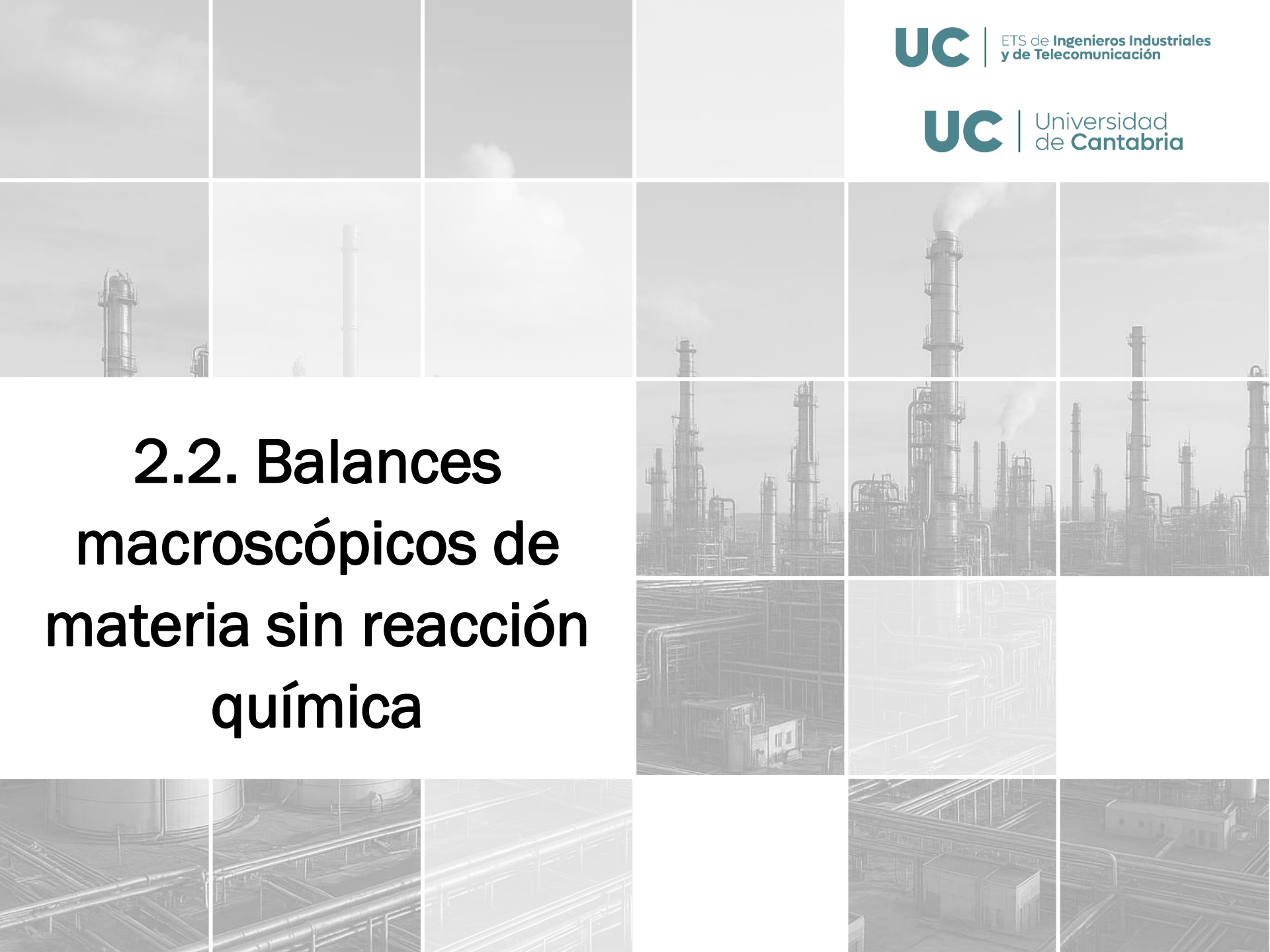
Nomenclatura

Símbolos, definiciones y unidades

Símbolo	Otros	Definición	Dim. de las und	Unidades
m	M	Masa	masa	kg, g,
m_A	M_A	Masa de la especie A	masa	kg, g
n		moles	moles	mol
n_A		moles de la especie A	moles	mol
V		Volumen de un contenedor	Volumen	m ³ , cm ³ ,
$\dot{m}$	F	Flujo másico	Masa/tiempo	kg/h, g/s, kg/min
$\dot{m}_1$	F_1	Flujo másico de una corriente 1	Masa/tiempo	kg/h, g/s, kg/min
$\dot{m}_A$	F_A	Flujo másico de la especie A	Masa/tiempo	kg/h, g/s, kg/min
$\dot{n}$	F	Flujo molar	moles/tiempo	kmol/h, mol/s
$\dot{n}_A$	F_A	Flujo molar de la esp. A	moles/tiempo	kmol/h, mol/s
$\dot{V}$	F, Q	Flujo volumétrico	Volumen/tiempo	m ³ /h, cm ³ /s
x_A	y_A	Fracción másica de la esp. A	Sin unidades	-
$x_{A,1}$	$x_{1,A}, y_{A,1}$	Fracción másica de la esp. A en una corriente 1	Sin unidades	-
x_A	y_A	Fracción molar de la esp. A	Sin unidades	-
C_A		Concentración de especie A	moles/volumen	kmol/m ³ , mol/L
ρ		Densidad	Masa/volumen	kg/m ³
P		Presión	Fuerza/área	bar, mm Hg
T		Temperatura	Temperatura	°C, K

Resulta de interés definir que representa cada variable a través de su símbolo. No existe un símbolo único para cada variable

2.2. Balances macroscópicos de materia sin reacción química



MATERIA



Balances de materia

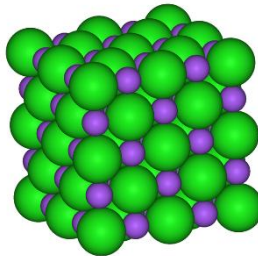
Especies/compuestos y elementos

Especies/compuestos

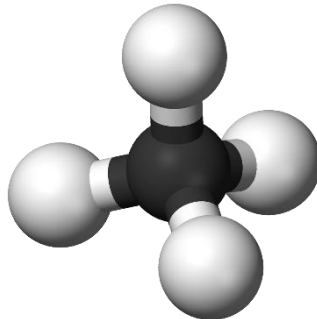
Conjunto de entidades moleculares
químicamente idénticas



cloruro de sodio



metano



Elementos

Tipo de materia constituida por
átomos de la misma clase



sodio



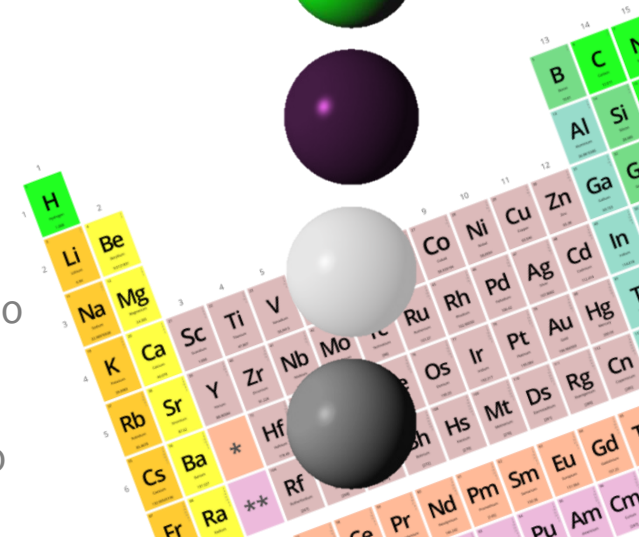
cloro



hidrógeno



carbono



Balances de materia

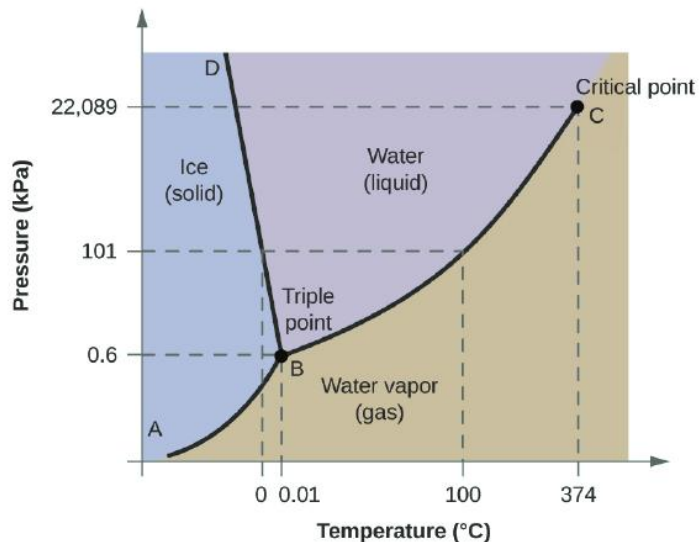
Estados de agregación de la materia

Sólido

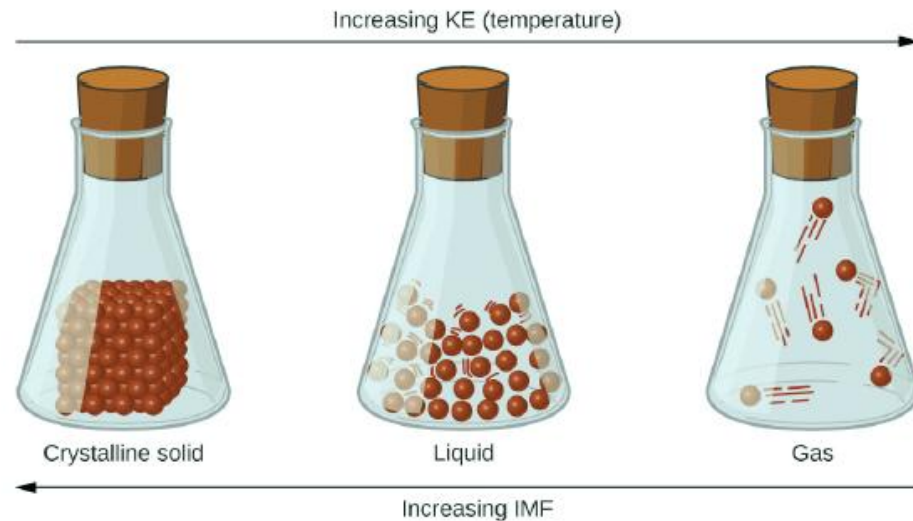
Líquido

Gas

Diagrama de
transición de fases



Transición entre sólido,
líquido y gas



Balances de materia

Tipos de transformaciones

Físicas

Cambios de fase o transferencia de componentes entre fases



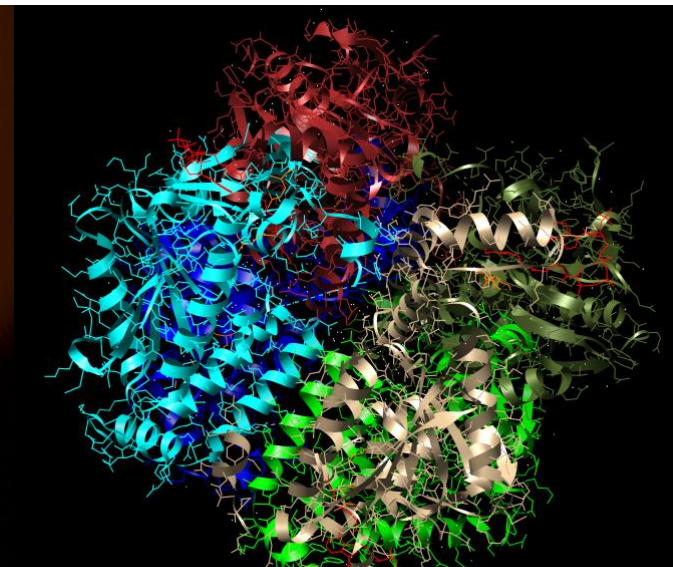
Químicas

Cambios en especies químicas



Biomoleculares

Cambios en sistemas de biomoléculas (sistemas biológicos)



Balances de materia

Tipología de los balances de materia

Balances de materia total

Pueden ser en forma integral (entre dos instantes en el tiempo) o de forma diferencial (en un instante en el tiempo). Normalmente se formula en términos de kg o kg/h

Balances de materia a elementos j

Pueden ser en forma integral (entre dos instantes en el tiempo) o de forma diferencial (en un instante en el tiempo). Normalmente se formula en términos de kg, kg/h, kmol o kmol/h

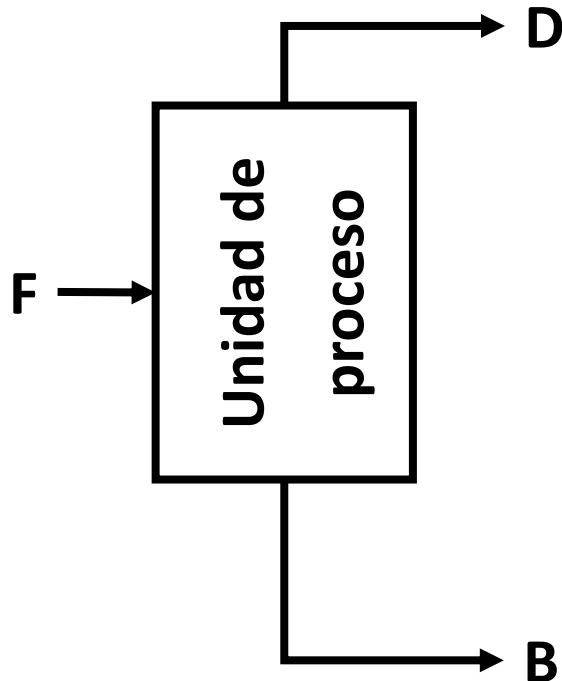
BM para una especie/ compuesto i

Pueden ser en forma integral (entre dos instantes en el tiempo) o de forma diferencial (en un instante en el tiempo). Si hay reacción química (RX), se formula en términos de kmol/h o kmol por la cuestión de la estequiometría. Si no hay RX, se formula en términos de kg, kg/h, kmol o kmol/h

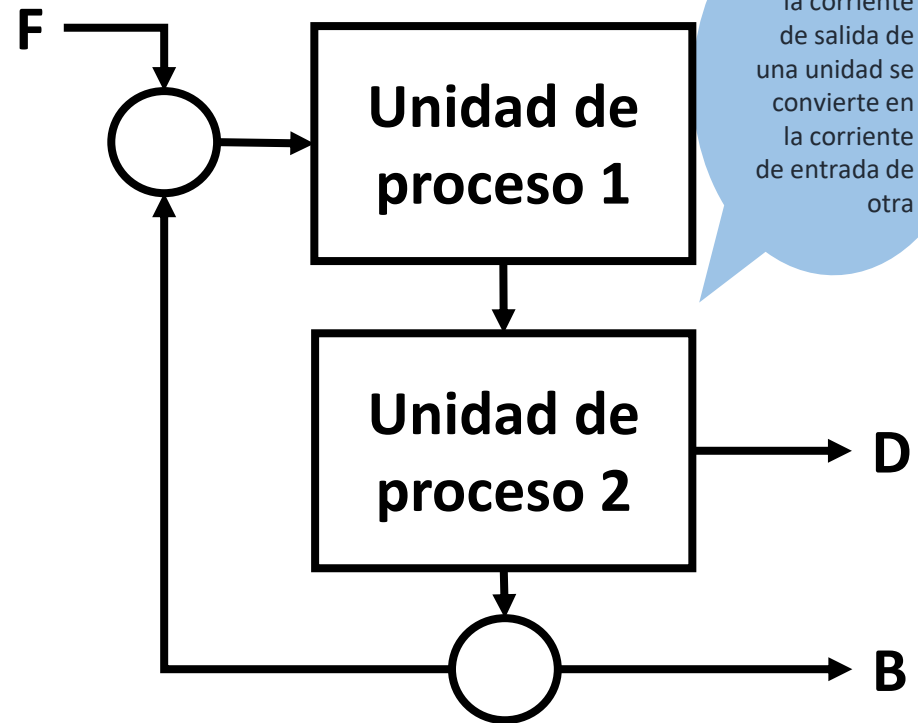
Balances de materia

Aplicación a diferentes sistemas

Sistemas de una unidad



Sistemas multiunidad



Por ejemplo
la corriente
de salida de
una unidad se
convierte en
la corriente
de entrada de
otra

Balances de materia

Balance de materia total

$$\begin{array}{ccccccc} \text{ACUMULACIÓN} & = & \text{ENTRADAS} & - & \text{SALIDAS} & + & \text{GENERACIÓN} & - & \text{CONSUMO} \\ \text{En el sistema} & & \text{Al sistema} & & \text{Del sistema} & & \text{En el sistema} & & \text{En el sistema} \\ \mathbf{A} & = & \mathbf{E} & - & \mathbf{S} & + & G & - & C \end{array}$$

$G=C=0$

$$\mathbf{A = E - S} \qquad \mathbf{E = A + S}$$

La masa total es una propiedad conservativa.

Ambas expresiones (término de acumulación a la izquierda de la igualdad o término de entrada a la izquierda de la igualdad) son ampliamente utilizadas. En general se puede recomendar el uso de la primera ($A = E - S$) de tal forma que “*lo que se acumula es igual a lo que entra menos lo que sale*”

Balances de materia

Balance de materia total (integral)

$$G = C = 0$$

$$M_A = M_E - M_S$$

La masa de los materiales que se acumulan o permanecen en el sistema M_A entre dos instantes de tiempo determinados debe ser igual a la masa total de todos los materiales que se han introducido a un sistema M_E entre esos dos instantes de tiempo menos la masa total de todos los materiales que se han extraído del mismo también entre esos dos instantes de tiempo. M_S , M_E , M_S , y M_A , tienen unidades, por ejemplo, de kg

Estado estacionario

No hay cambios de las variables que caracterizan el sistema con el tiempo

$$A = 0 \quad M_A = 0$$

Estado no estacionario

Hay cambios en una o más de las variables que caracterizan el sistema con el tiempo

$$A \neq 0 \quad M_A \neq 0$$

Ejemplo BM sin RX f. integral



Se desea realizar un balance de materia a un depósito de carbón dentro del almacén de una compañía exportadora. Inicialmente la masa de carbón disponible era de 150 toneladas. En un determinado momento, la masa de carbón en el depósito es de 50 toneladas. ¿Cuál es la cantidad de carbón que ha salido del depósito?





Ejemplo BM sin RX f. integral

En primer lugar se definen los límites del sistema. En este caso, se trata de un depósito de carbón. De acuerdo al enunciado, podemos asumir que es correcto una única corriente de salida.





Ejemplo BM sin RX f. integral

En **segundo lugar**, definimos las variables (y sus correspondientes unidades).

En tercer lugar, analizamos el número de grados de libertad.

Tiempo $t = t_i$

Masa inicial

$m_i = 150 \text{ t carbón}$



En este caso, se trata de un depósito de carbón, por lo que, aunque somos conocedores de la especie vamos a aplicar un balance de materia total. $-M_S$ será la masa de carbón que ha salido entre los dos instantes de tiempo t_f y t_i

Tiempo $t = t_f$

Masa final

$m_f = 50 \text{ t carbón}$





Ejemplo BM sin RX f. integral

En cuarto lugar se formula matemáticamente el problema

FORMA INTEGRAL (carbón, depósito de carbón)

ACUMULACIÓN	=	ENTRADAS	-	SALIDAS	+	GENERACIÓN	-	CONSUMO
En el sistema		Al sistema		Del sistema		En el sistema		En el sistema
A	=	E	-	S	+	G	-	C





Ejemplo BM sin RX f. integral

En quinto lugar se resuelve el problema

FORMA INTEGRAL (carbón, depósito de carbón)

ACUMULACIÓN	=	ENTRADAS	-	SALIDAS	+	GENERACIÓN	-	CONSUMO
En el sistema		Al sistema		Del sistema		En el sistema		En el sistema
A	=	E	-	S	+	G	-	C

Tiempo $t = t_i$

Tiempo $t = t_f$

Masa inicial $m_i = 150$ t carbón

Masa final $m_f = 50$ t carbón

$$M_A = (m_f - m_i) = -M_S$$

$$(50 - 150) = -M_S \text{ [t carbón]}$$

$$M_S = 100 \text{ t carbón}$$



Balances de materia

Balance de materia total (diferencial)

$$G = C = 0$$

$$\dot{m}_A = \frac{dm_A}{dt} = \dot{m}_E - \dot{m}_S$$

La velocidad de acumulación de materiales en el sistema $\dot{m}_A$ debe ser igual a al flujo másico de todos los materiales que entran al sistema $\dot{m}_E$ menos el flujo másico de todos los materiales que se salen del sistema $\dot{m}_S$. La acumulación m_A tendrá unidades, por ejemplo, de kg, mientras que $\dot{m}_E$, $\dot{m}_S$, $\dot{m}_A$ tienen unidades, p.ej.: de kg/s.

Estado estacionario

No hay cambios de las variables que caracterizan el sistema con el tiempo

$$A = 0 \quad \dot{m}_A = 0$$

Estado no estacionario

Hay cambios en una o más de las variables que caracterizan el sistema con el tiempo

$$A \neq 0 \quad \dot{m}_A \neq 0$$

Balances de materia

Balance de materia total (diferencial)

$$G = C = 0$$

$$\dot{m}_E = \dot{m}_S + \dot{m}_A = \dot{m}_S + \frac{dm_A}{dt}$$

En varios títulos aparece de esta forma, que es equivalente a la anterior

El flujo másico de todos los materiales que entran a un sistema $\dot{m}_E$ en un debe ser igual al flujo másico de todos los materiales que salen del mismo $\dot{m}_S$, más la velocidad de acumulación de los materiales en el sistema $\dot{m}_A$. La acumulación m_A tendrá unidades, por ejemplo, de kg mientras que $\dot{m}_A$, $\dot{m}_E$ y $\dot{m}_S$ tendrán unidades, por ejemplo, de kg/s.

Estado estacionario

No hay cambios de las variables que caracterizan el sistema con el tiempo

$$A = 0 \quad \dot{m}_A = 0$$

Estado no estacionario

Hay cambios en una o más de las variables que caracterizan el sistema con el tiempo

$$A \neq 0 \quad \dot{m}_A \neq 0$$

Ejemplo BM sin RX f. diferencial



Se desea realizar un balance de materia a un depósito de carbón dentro del almacén de una compañía exportadora. Inicialmente hay un depósito con 150 toneladas de carbón. En un periodo de 10 horas, se han evacuado 100 toneladas de carbón. ¿Cuál es la velocidad de extracción del depósito de carbón? ¿Cuál sería la cantidad de carbón que quedaría en el depósito transcurridas las 10 horas?



Ejemplo BM sin RX f. diferencial



En primer lugar se definen los límites del sistema. En este caso, se trata de un depósito de carbón. De acuerdo al enunciado, podemos asumir que es correcto una única corriente de salida.



Ejemplo BM sin RX f. diferencial



En **segundo lugar**, definimos las variables (y sus correspondientes unidades).

En tercer analizamos el número de grados de libertad.

$$V_A = \dot{m}_A = \frac{dm_A}{dt} = \frac{-100 \text{ t de carbón}}{10 \text{ h}}$$





Ejemplo BM sin RX f. diferencial

En cuarto lugar se formula matemáticamente el problema

FORMA DIFERENCIAL (carbón, depósito de carbón)

Velocidad de ACUMULACIÓN	=	Velocidad de ENTRADAS	-	Velocidad de SALIDAS	+	Velocidad de GENERACIÓN	-	Velocidad de CONSUMO
En el sistema		Al sistema		Del sistema		En el sistema		En el sistema
V_A	=	V_E	-	V_S	+	V_G	-	V_C





Ejemplo BM sin RX f. diferencial

En quinto lugar se resuelve el problema

FORMA DIFERENCIAL (carbón, depósito de carbón)

Velocidad de ACUMULACIÓN	=	Velocidad de ENTRADAS	-	Velocidad de SALIDAS	+	Velocidad de GENERACIÓN	-	Velocidad de CONSUMO
En el sistema		Al sistema		Del sistema		En el sistema		En el sistema
V_A	=	V_E	-	V_S	+	V_G	-	V_C

$$\dot{m}_A = \frac{dm_A}{dt} = -\dot{m}_S$$

$$\frac{-100}{10} = -\dot{m}_S \text{ [t carbón/h]}$$

$$\dot{m}_S = 10 \text{ t carbón/h}$$





Ejemplo BM sin RX f. diferencial

En quinto lugar se resuelve el problema

FORMA INTEGRAL (carbón, depósito de carbón)

ACUMULACIÓN	=	ENTRADAS	-	SALIDAS	+	GENERACIÓN	-	CONSUMO
En el sistema		Al sistema		Del sistema		En el sistema		En el sistema
A	=	E	-	S	+	G	-	C

$$\dot{m}_S = 10 \text{ t de carbón/h} \quad M_S = 10 \frac{\text{t de carbón}}{\text{h}} * 10 \text{ h} = 100 \text{ t de carbón}$$

$$M_A = (m_f - m_i) = -M_S$$

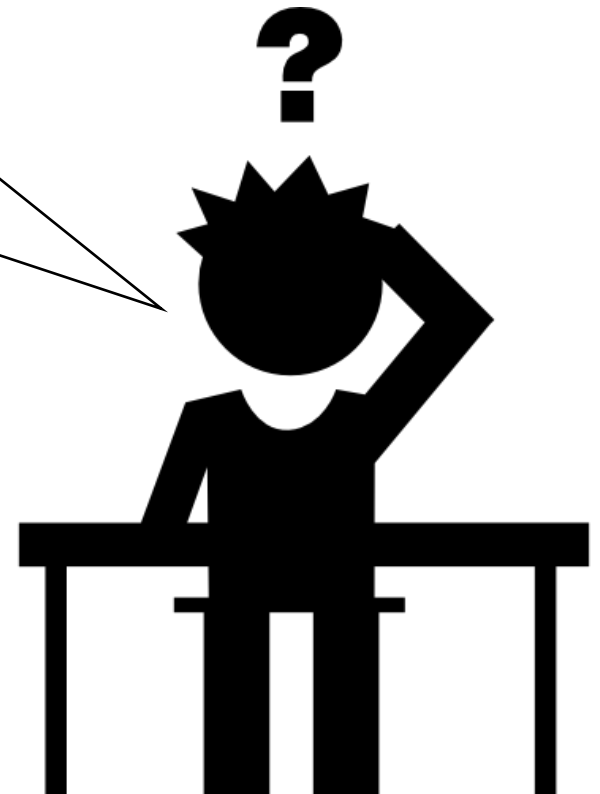
$$(m_F - 150) = -100 \text{ t de carbón}$$

$$m_F = 50 \text{ t de carbón}$$

Es necesario conocer la cantidad total M_S que en las 10 h han salido del depósito

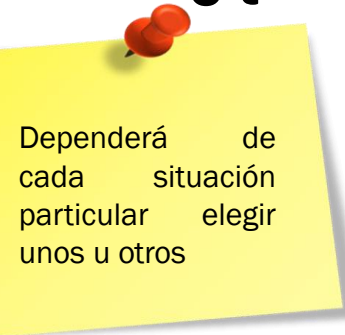
Para resolver a la segunda pregunta no necesitábamos la parte diferencial (sólo integral ya que “se han extraído 100 t de carbón”)

OK. Vale. Pero ¿cómo puedo saber si tengo que aplicar una ecuación? ¿Cuándo diferencial y cuando integral? ¿y si tengo más corrientes? ¿Y cómo sé cuántos componentes tengo? ¿Y si hay muchas corrientes?



Balances de materia

¿Qué y cuántos BM hay que plantear? Grados de libertad



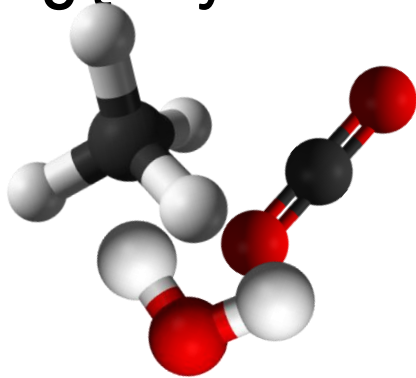
Balance de materia para cada especie i
Balance de materia para cada elemento j
Balance de materia total



Para un sistema que posee P **especies/compuestos indexados como i** , es posible plantear un total de $P + 1$ **balances de materia**, de los cuales P **balances** corresponden a las P especies y **1 balance** se corresponde al balance de materia total. Por tanto, se podrán formular $P + 1$ ecuaciones.

Balances de materia

¿Qué y cuántos BM hay que plantear? Grados de libertad



$$X = a + b$$

$$Y = c + d$$

$$Z = e + f$$

$$H = g + j$$

P

+

1

=

$P + 1$

Especies /
compuestos

Balance de
materia total

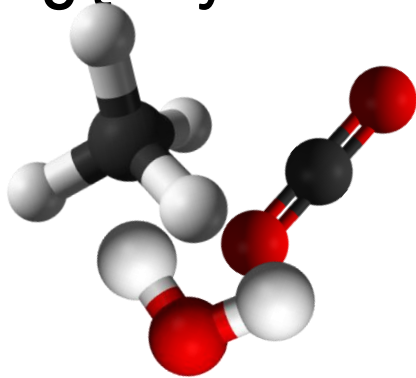
Ecuaciones
totales

Es posible demostrar que tan sólo P de esas $P + 1$ ecuaciones SON LINEALMENTE INDEPENDIENTES, es decir que si A es la matriz de coeficientes de las $P + 1$ ecuaciones se da que:

$$\text{rango}(A) = P$$

Balances de materia

¿Qué y cuántos BM hay que plantear? Grados de libertad



$$X = a + b$$

$$Y = c + d$$

$$Z = e + f$$

$$H = g + j$$

P

+

1

=

$P + 1$

Especies /
compuestos

Balance de
materia total

Ecuaciones
totales

El resultado de combinar las P ecuaciones correspondientes a las P especies es equivalente al balance de materia total.

Cuando el número de especies es 1, necesariamente el balance de materia total y el balance de materia a la especie coinciden.

Balances de materia

¿Qué y cuántos BM hay que plantear? Grados de libertad

Además de las P ecuaciones linealmente independientes que surgen de aplicar los balances de materia totales, a las especies y/o elementos existen otras posibles fuentes de relaciones independientes:

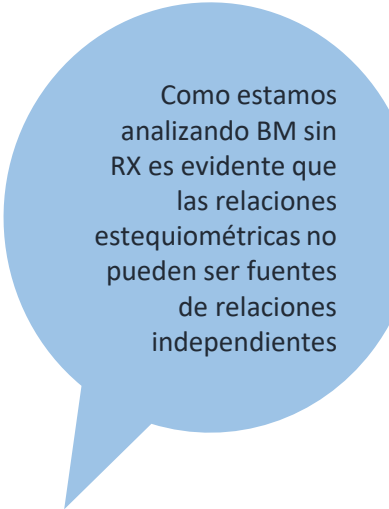
Balances de energía

Especificaciones de proceso
(composición de una corriente)

Propiedades físicas y leyes
(ley gases ideales)

Restricciones físicas
(fracción másica o molar igual a 1)

*Relaciones estequiométricas en sistemas con
reacciones químicas*



Como estamos analizando BM sin RX es evidente que las relaciones estequiométricas no pueden ser fuentes de relaciones independientes

Balances de materia

¿Qué y cuántos BM hay que plantear? Grados de libertad

1

Definir los límites del sistema: a cada unidad de proceso, en los puntos unión/separación y/o a todo el proceso

2

Escribir las ecuaciones por cada límite del sistema en número igual al número de ecuaciones independientes que exista, que es igual al número de especies que existen en el sistema

Aparecerán normalmente como conversiones de reacción

$$\# \text{ grados de libertad} = \# \text{ variables desconocidas} + \# \text{ reacciones independientes} - \# \text{ ecuaciones independientes (BM)} - \# \text{ relaciones auxiliares útiles}$$

$\# gdl = 0$ **Definido** (solución única)

$\# gdl > 0$ **Infradefinido** (infinitas soluciones)

$\# gdl < 0$ **Sobredefinido** (irresoluble)

Como estamos analizando BM sin RX es evidente que las relaciones estequiométricas no se consideran

Balances de materia

¿Qué y cuántos BM hay que plantear? Grados de libertad

$$\# \text{ gdl} = 0$$

Bien especificado

Este será el caso más habitual la que nos vamos a enfrentar ya que es el caso de que **existe una solución única**

Ejemplo:

$$X = 100$$

$$\# \text{ gdl} > 0$$

Subespecificado

En este caso existen **infinitas soluciones**, ya que existen infinitas combinaciones que hacen posible que se cumplan las ecuaciones.

Ejemplo:

$$X + Y = 100$$

$$\# \text{ gdl} < 0$$

Sobreespecificado

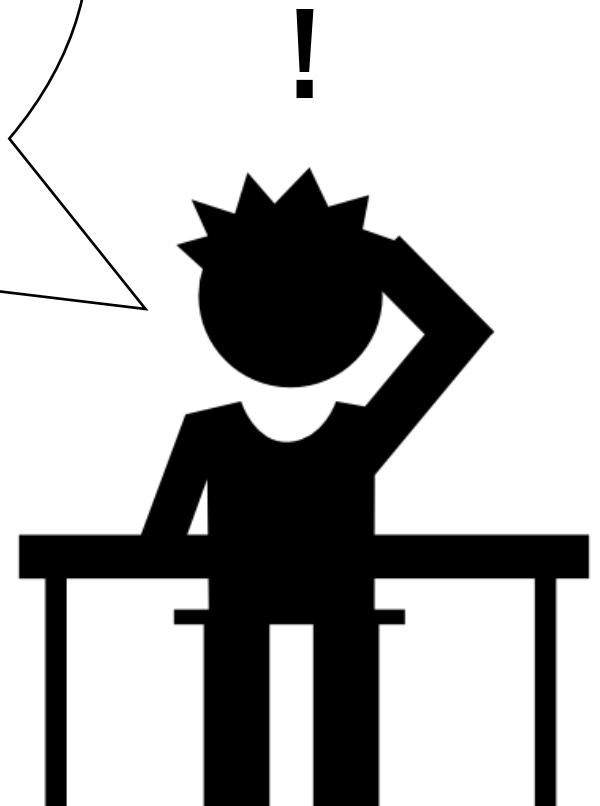
Es irresoluble, no existe ninguna solución ya que estamos imponiendo varias condiciones que no se pueden satisfacer simultáneamente.

Ejemplo:

$$X = 100$$

$$X = 50$$

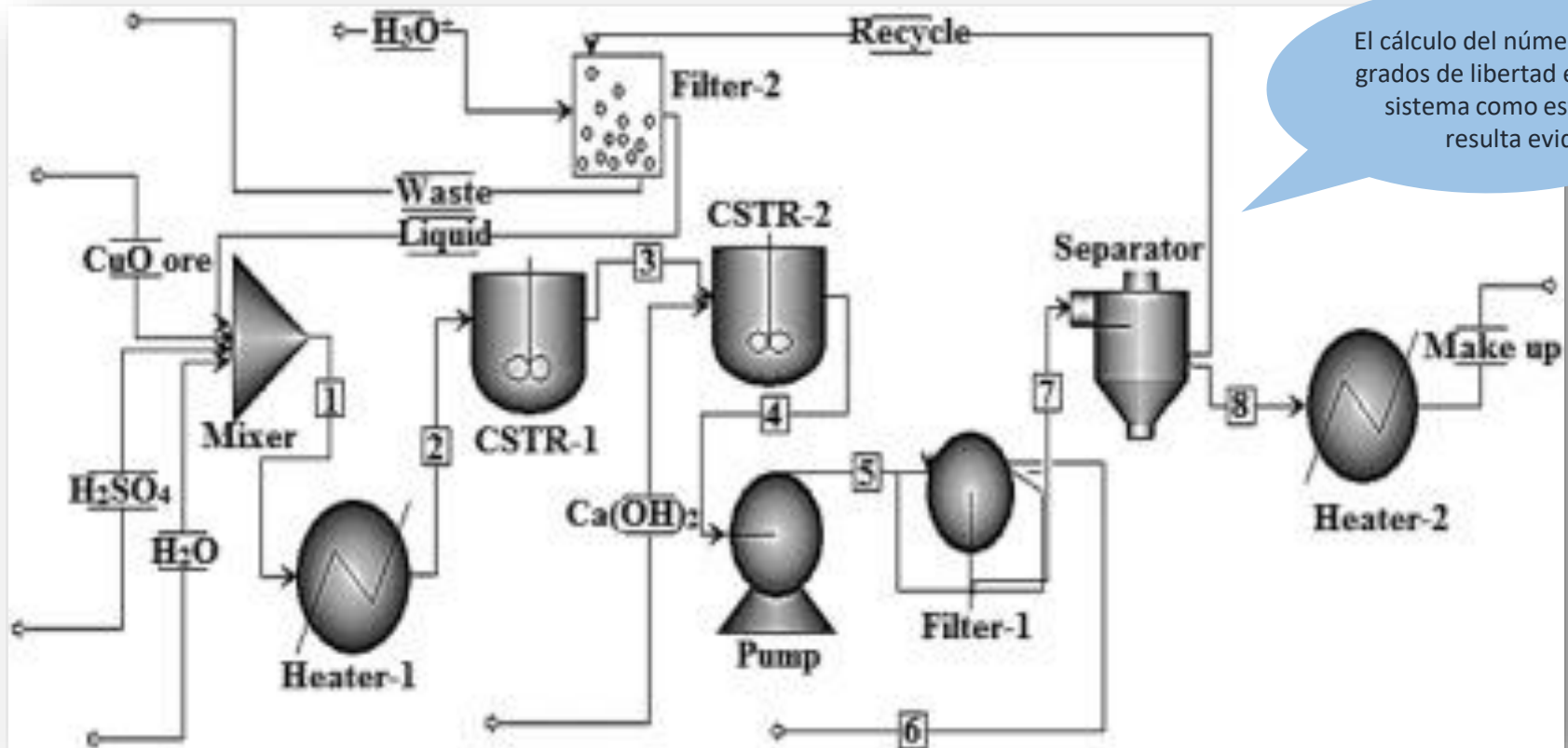
¡Entendido! Para poder resolver cada situación particular, analizando el número de grados de libertad, podré saber si tengo suficientes ecuaciones independientes, las cuales provienen de realizar balances de materia



Balances de materia

¿Qué y cuántos BM hay que plantear? Grados de libertad

Diagrama de flujo de proceso de la producción de sulfato de cobre



Balances de materia

Simuladores de procesos

Un simulador de procesos es un software que permite construir un modelo digital de un proceso físico (mezclas, reacciones, intercambios de calor, transporte de masa, equipos, etc.), con condiciones de entrada especificadas, para predecir cómo se comportará el sistema bajo distintas condiciones. Además, los simuladores verifican de forma automática los grados de libertad del diagrama de flujo de proceso, indicando si el modelo está bien especificado, subespecificado o sobreespecificado.

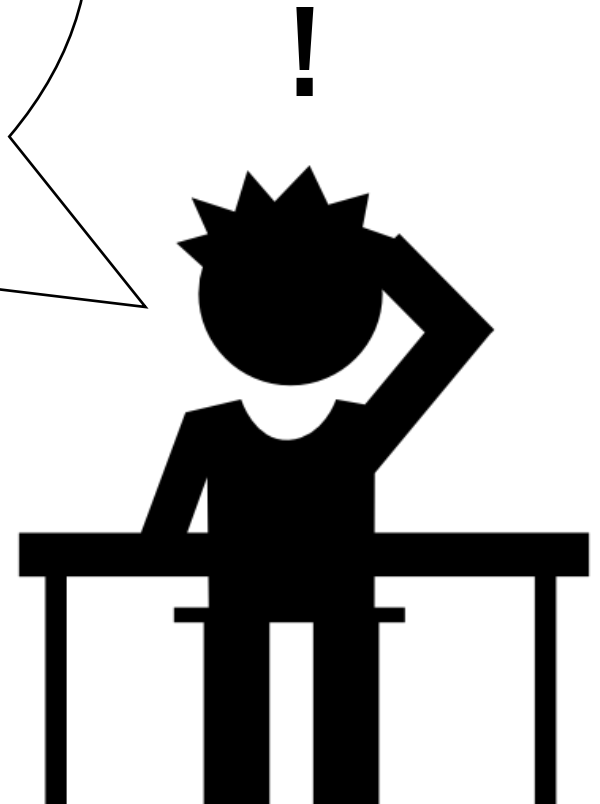


Simuladores comerciales



Simuladores *open-source*

¡Entendido! En el contexto de la asignatura debo entender el concepto de grados de libertad, aunque en la práctica ingenieril pueda abordar su cálculo a través de simuladores de proceso



MATERIA



Balances de materia

Aplicación de la EGB a BM sin RX

Balances de materia sin RX	Forma integral	Forma diferencial
Elementos j	$m_j^A = m_j^E - m_j^S$	$\dot{m}_j^A = \dot{m}_j^E - \dot{m}_j^S$
Compuestos / especies i	$n_i^A = n_i^E - n_i^S$	$\dot{n}_i^A = \dot{n}_i^E - \dot{n}_i^S$
Masa total	$n^A = n^E - n^S$	$\dot{n}^A = \dot{n}^E - \dot{n}^S$

Los balances de materia se pueden aplicar a la materia / masa total, a elementos, y a compuestos/especies. Cada balance de materia sin RX puede aplicarse en su forma integral o diferencial.

Balances de materia de elementos

BM para un elemento j (BM elementales) (integral)

$$m_j^E = m_j^S + m_j^A \qquad m_j^A = m_j^E - m_j^S$$
$$m_j^G = m_j^C = 0$$

Los átomos ni se crean ni se destruyen en reacciones químicas. En cambio, las especies químicas SÍ pueden actuar como reactivos (se consumen) o como productos (se generan). Útil cuando se desconoce la estequiometría del sistema o si solo se dispone de un análisis elemental de los reactivos. En forma integral, cada término m_j^x tiene unidades, por ejemplo, de mol o de g.

Estado estacionario

No hay cambios en la masa del elemento del sistema con el tiempo

$$A = 0 \qquad m_j^A = 0$$

Estado no estacionario

Hay cambios en la masa del elemento del sistema con el tiempo

$$A \neq 0 \qquad m_j^A \neq 0$$

Balances de materia de especies/compuestos

BM para una especie/compuesto i (integral)

$$n_i^E = n_i^S + n_i^A - \cancel{n_i^G} + \cancel{n_i^C}$$

$$n_i^A = n_i^E - n_i^S + \cancel{n_i^G} - \cancel{n_i^C}$$

Las especies SÍ pueden dar lugar a productos (generación) a partir de reactivos (consumo). Sin embargo, **al no haber Rx, los términos de generación (G) y consumo (C) son nulos**. En forma integral, cada término n_i^x tiene unidades, por ejemplo, de mol.

Estado estacionario

No hay cambios en la masa de la especie del sistema con el tiempo

$$A = 0 \quad n_i^A = 0$$

Estado no estacionario

Hay cambios en la masa de la especie del sistema con el tiempo

$$A \neq 0 \quad n_i^A \neq 0$$

Balances de materia total

BM total (integral)

$$m^E = m^S + m^A - \cancel{m^G} + \cancel{m^C}$$
$$m^A = m^E - m^S + \cancel{m^G} - \cancel{m^C}$$

La masa total es una propiedad conservativa, por lo que **los términos de generación (G) y consumo (C) son nulos**. En forma integral, cada término m^x tiene unidades, por ejemplo, de kg (¡al no haber RX!)

Estado estacionario

No hay cambios en la masa total del sistema con el tiempo

$$A = 0 \quad m^A = 0$$

Estado no estacionario

Hay cambios en la masa total del sistema con el tiempo

$$A \neq 0 \quad m^A \neq 0$$

Balances de materia de elementos

BM para un elemento j (BM elementales) (diferencial)

$$\dot{m}_j^G = \dot{m}_j^C = 0 \qquad \dot{m}_j^A = \dot{m}_j^E - \dot{m}_j^S \qquad \dot{m}_j^E = \dot{m}_j^S + \dot{m}_j^A$$

Los átomos de un elemento ni se crean ni se destruyen en Rx. Los términos de generación (G) y consumo (C) son NECESARIAMENTE nulos. En forma diferencial, cada término $\dot{m}_j^x$ tiene unidades de mol/s o g/s. Útil cuando se desconoce la estequiometría del sistema o si solo se dispone de un análisis elemental de los reactivos.

Estado estacionario

No hay cambios en la masa del elemento del sistema con el tiempo

$$A = 0 \qquad \dot{m}_j^A = 0$$

Estado no estacionario

Hay cambios en la masa del elemento del sistema con el tiempo

$$A \neq 0 \qquad \dot{m}_j^A \neq 0$$

Balances de materia de especies/compuestos

BM para una especie/compuesto i (diferencial)

$$\dot{n}_i^E = \dot{n}_i^S + \dot{n}_i^A - \cancel{\dot{n}_i^G} + \cancel{\dot{n}_i^C}$$

$$\dot{n}_i^E = \dot{n}_i^S + \dot{n}_i^A$$

¡Fundamental!

$$\dot{n}_i^A = \dot{n}_i^E - \dot{n}_i^S + \cancel{\dot{n}_i^G} - \cancel{\dot{n}_i^C}$$

$$\dot{n}_i^A = \dot{n}_i^E - \dot{n}_i^S$$

Las especies SÍ pueden dar lugar a productos (generación $-G-$) a partir de reactivos (consumo $-C-$). Sin embargo, **si no hay Rx, los términos de generación (G) y consumo (C) son nulos**. En forma diferencial, cada término $\dot{n}_i^x$ tiene unidades de mol/s.

Estado estacionario

No hay cambios en la masa de la especie del sistema con el tiempo

$$A = 0 \quad \dot{n}_i^A = 0$$

Estado no estacionario

Hay cambios en la masa de la especie del sistema con el tiempo

$$A \neq 0 \quad \dot{n}_i^A \neq 0$$

Balances de materia total

BM total (diferencial)

$$\dot{m}^E = \dot{m}^S + \dot{m}^A - \cancel{\dot{m}^G} + \cancel{\dot{m}^C}$$

$$\dot{m}^E = \dot{m}^S + \dot{m}^A$$

¡Fundamental!

$$\dot{m}^A = \dot{m}^E - \dot{m}^S + \cancel{\dot{m}^G} - \cancel{\dot{m}^C}$$

$$\dot{m}^A = \dot{m}^E - \dot{m}^S$$

La masa total es una propiedad conservativa, por lo que **los términos de generación (G) y consumo (C) son nulos**. En forma diferencial, cada término $\dot{m}_i^x$ tiene unidades de kg/s (¡al no haber RX!)

Estado estacionario

No hay cambios en la masa total del sistema con el tiempo

$$A = 0 \quad \dot{m}^A = 0$$

Estado no estacionario

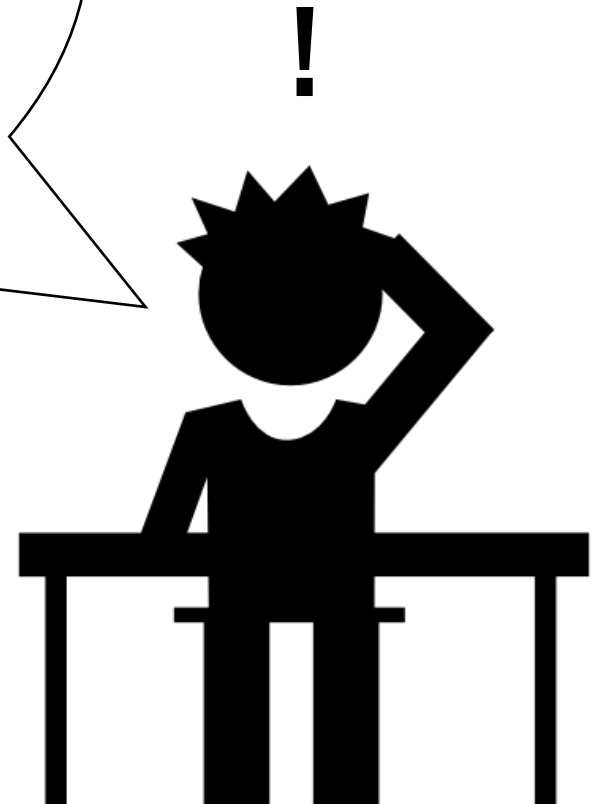
Hay cambios en la masa total del sistema con el tiempo

$$A \neq 0 \quad \dot{m}^A \neq 0$$

En la práctica se va a traducir en que la suma de la masa de un compuesto en el conjunto de las corrientes de entrada va a ser igual a la suma de la masa de ese mismo compuesto en el conjunto de las corrientes de salida (si no hay RX)

Físicas

Cambios de fase o
transferencia de componentes
entre fases



Balances de materia de especies/compuestos

BM para una especie/compuesto i (diferencial)

$$\dot{n}_i^A = \dot{n}_i^E - \dot{n}_i^S$$

¡Fundamental!

Una vez definidos los límites del sistema es posible determinar si se produce acumulación $\dot{n}_i^A$ dentro del citado sistema. En cuanto al término de entrada $\dot{n}_i^E$, este hace referencia al conjunto de las r entradas (sumatorio para todas las r entradas, existiendo un total E entradas), mientras que el de salida $\dot{n}_i^S$ hace referencia al conjunto de las v salidas (sumatorio para todas las v salidas, existiendo un total S salidas). Valido para cada especie/compuesto i presente en el sistema.

IMPORTANTÍSIMO

Aquí no hay sumatorio porque la acumulación es única en los límites del sistema (¡no hay varias acumulaciones!)

$$\dot{n}_i^A = \sum_{r=1}^{r=E} \dot{n}_i^r - \sum_{v=1}^{v=S} \dot{n}_i^v$$

IMPORTANTÍSIMO

Se trata de ampliar el conjunto de las posibles entradas y salidas. No tiene que haber una única entrada y/o una única salida. Por eso tenemos que sumar los posibles flujos molares o másicos de las entrada y/o salidas

Balances de materia

Número y tipos de BM a plantear

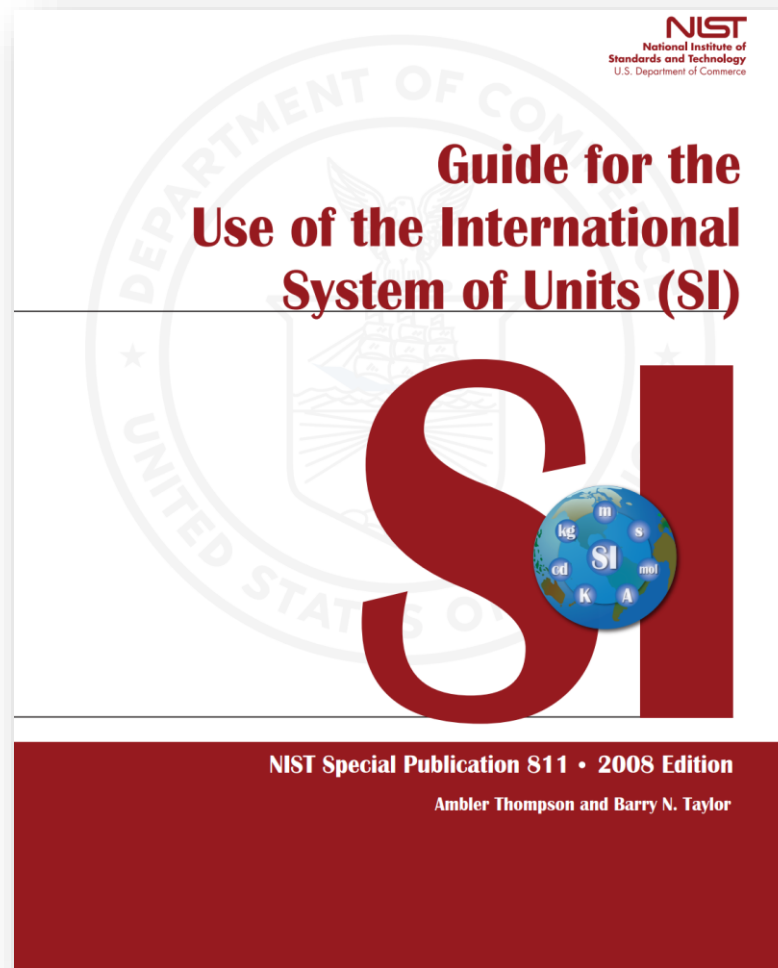
El número y tipo de BM a plantear dependerá de cada situación particular. En función de la información suministrada, cada situación se resolverá, generalmente, planteando un sistema de ecuaciones algebraicas formado por, para el caso de i especies/compuestos:

- 1 BM total y $P - 1$ BM correspondientes a las i especies/compuestos (total de P ecuaciones), ya que $i \in \{1, \dots, P\}$
- P BM correspondientes a las i especies/compuestos (total de P ecuaciones), ya que $i \in \{1, \dots, P\}$

Normalmente habrá una serie de relaciones auxiliares que permitirán que el número de grados de libertad sea cero ($\#gdl = 0$) de tal forma que exista una solución única.

Balances de materia de especies/compuestos

Uso del Sistema Internacional de Unidades



Incluye
factores de
conversión

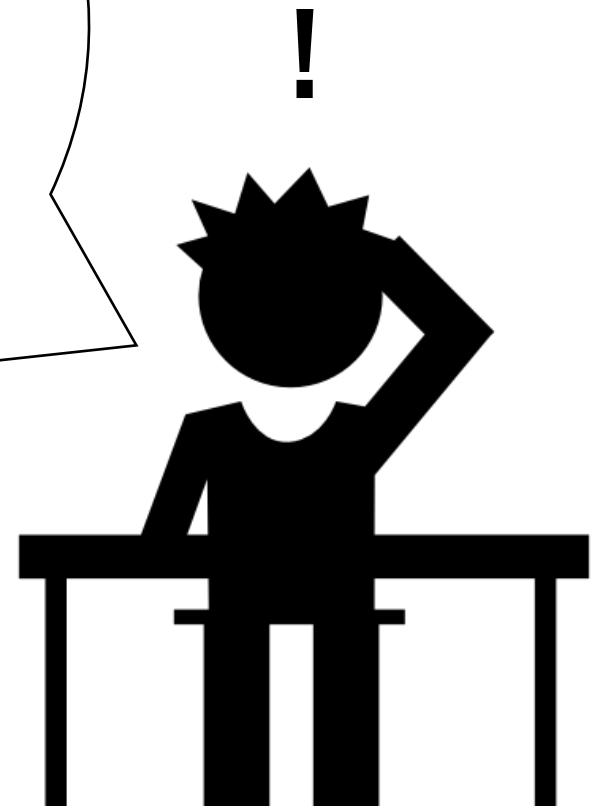
Balances de materia de especies/compuestos

Nomenclatura

Símbolo	Otros	Definición	Dim. de las und	Unidades
m	M	Masa	masa	kg, g,
m_A	M_A	Masa de la especie A	masa	kg, g
n		moles	moles	mol
n_A		moles de la especie A	moles	mol
V		Volumen de un contenedor	Volumen	m ³ , cm ³ ,
$\dot{m}$	F	Flujo másico	Masa/tiempo	kg/h, g/s, kg/min
$\dot{m}_1$	F_1	Flujo másico de una corriente 1	Masa/tiempo	kg/h, g/s, kg/min
$\dot{m}_A$	F_A	Flujo másico de la especie A	Masa/tiempo	kg/h, g/s, kg/min
$\dot{n}$	F	Flujo molar	moles/tiempo	kmol/h, mol/s
$\dot{n}_A$	F_A	Flujo molar de la esp. A	moles/tiempo	kmol/h, mol/s
$\dot{V}$	F, Q	Flujo volumétrico	Volumen/tiempo	m ³ /h, cm ³ /s
x_A	y_A	Fracción másica de la esp. A	Sin unidades	-
$x_{A,1}$	$x_{1,A}, y_{A,1}$	Fracción másica de la esp. A en una corriente 1	Sin unidades	-
x_A	y_A	Fracción molar de la esp. A	Sin unidades	-
C_A		Concentración de especie A	moles/volumen	kmol/m ³ , mol/L
ρ		Densidad	Masa/volumen	kg/m ³
P		Presión	Fuerza/área	bar, mm Hg
T		Temperatura	Temperatura	°C, K

Resulta de interés definir que representa cada variable a través de su símbolo. No existe un símbolo único para cada variable

OK! Entonces esto significa que las variables que representan a los flujos, composiciones, etc. pueden tener cualquier nomenclatura, pero que hay una serie de letras y símbolos que se utilizan de forma preferencial



Balances macroscópicos de materia sin reacción química

Balances de materia de especies/compuesto i (diferencial)

¡Fundamental!

$$\dot{n}_j^E = \dot{n}_j^S + \dot{n}_j^A$$

$$\dot{n}_j^E = \dot{n}_j^S + \dot{n}_j^A - \dot{n}_j^G + \dot{n}_j^C$$

$$\dot{n}_j^A = \dot{n}_j^E - \dot{n}_j^S$$

Las especies **SÍ** pueden dar lugar a productos (generación -G-) a partir de reactivos (consumo -C-). Sin embargo, si no hay Rx, los términos de generación (G) y consumo (C) son nulos. En forma diferencial, cada término $\dot{n}_i^x$ tiene unidades de g/s (preferentemente) o de mol/s.

Estado estacionario

No hay cambios en la masa de la especie del sistema con el tiempo

Estado no estacionario

Hay cambios en la masa de la especie del sistema con el tiempo

$$A = 0$$

$$\dot{n}_i^A = 0$$

$$A \neq 0$$

$$\dot{n}_i^A \neq 0$$

Balances de materia de especies/compuestos i (diferencial)

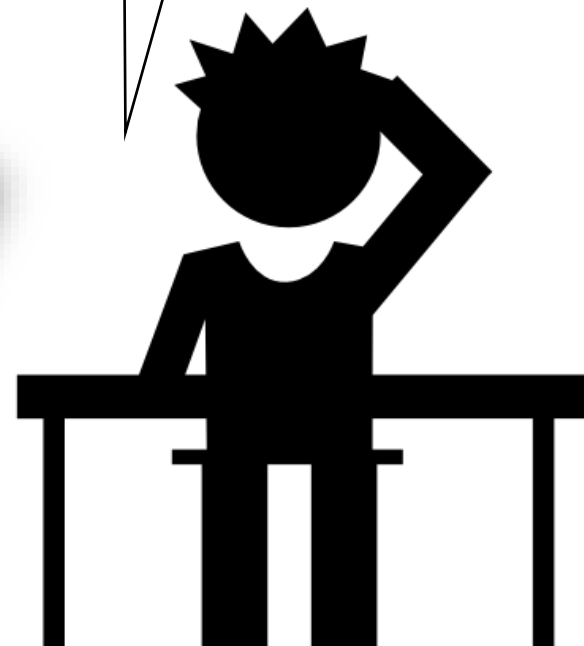
$$\dot{n}_j^A = \dot{n}_j^E - \dot{n}_j^S$$

Una vez definidos los límites del sistema es posible determinar si se produce acumulación dentro del citado sistema. En cuanto al término de entrada, este hace referencia al conjunto de entradas (sumatorio para todas las entradas), mientras que el de salida hace referencia al conjunto de salidas (sumatorio para todas las salidas).

$$\dot{n}_j^A = \sum_{r=1}^{r=E} \dot{n}_j^r - \sum_{v=1}^{v=S} \dot{n}_j^v$$

OK. Vale.
Necesito un
ejemplo

?





Ejemplo de BM sin RX

Nomenclatura

Utilizamos el **número** para la denominación de la corriente

Utilizamos la **letra** para la especie/compuesto

$$\dot{m}_A^1 = F_A^1 = F_{A,1} = F_1 X_{A,1}$$

Se puede invertir para no confundir con superíndices $\dot{m}_1^A$ o bien seguido como subíndice $\dot{m}_{A,1}$

El flujo másico de la especie A en la corriente 1 $\dot{m}_A^1$ también puede anotarse como $F_{A,1}$ (o incluso F_A^1) que igualmente representaría el flujo másico de la especie A en la corriente 1. Por definición el flujo másico de la especie A en la corriente 1 $F_{A,1}$ se corresponde con el producto del flujo masico total de la corriente 1 F_1 por la fracción másica de la especie A en la corriente 1 $X_{A,1}$

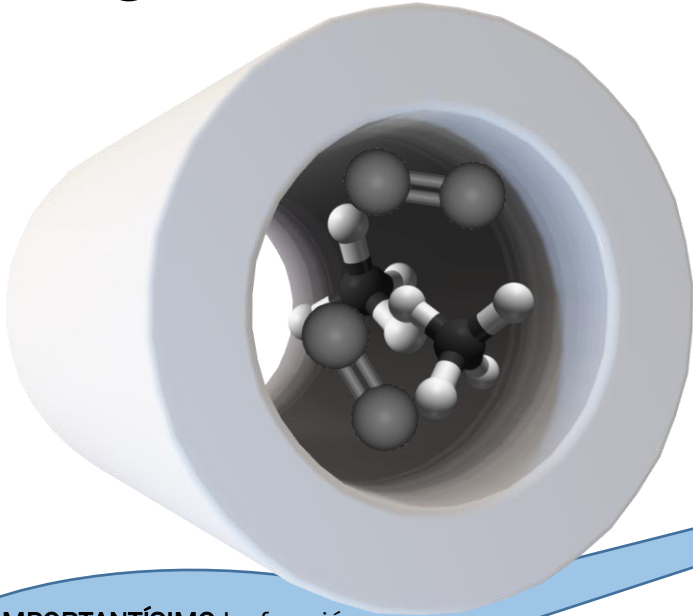




Ejemplo de BM sin RX

Nomenclatura

Se tiene una tubería por la que circula un flujo másico total de 100 kg/h. La fracción másica de metano en la corriente es de 0,8, mientras que el resto es nitrógeno ¿Cuáles son los flujos másicos de las dos especies metano y nitrógeno?



$$F_1 = 100 \frac{kg}{h}, \quad X_{CH_4,1} = 0,8$$

$$\begin{aligned} F_{CH_4}^1 &= F_{CH_4,1} = \dot{m}_{CH_4}^1 = F_1 X_{CH_4,1} \\ &= 100 \frac{kg}{h} \cdot 0,8 = 80 \frac{kg}{h} CH_4 \end{aligned}$$

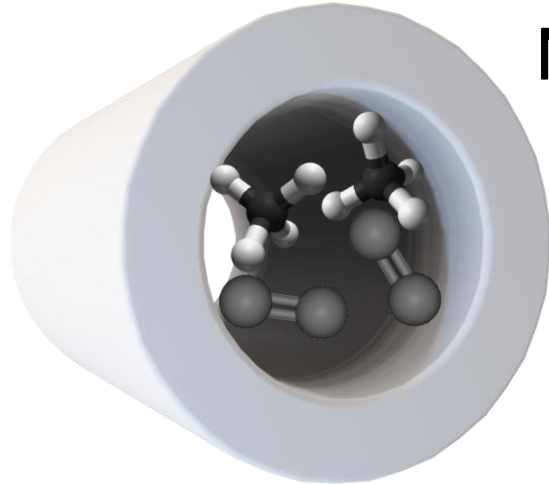
$$\begin{aligned} F_{N_2}^1 &= F_{N_2,1} = \dot{m}_{N_2}^1 = F_1 X_{N_2,1} \\ &= 100 \frac{kg}{h} \cdot (1 - 0,8) = 20 \frac{kg}{h} N_2 \end{aligned}$$

IMPORTANTÍSIMO La fracción másica es adimensional, pero tiene un significado físico asociado con una relación de masas (kg especie/kg totales)

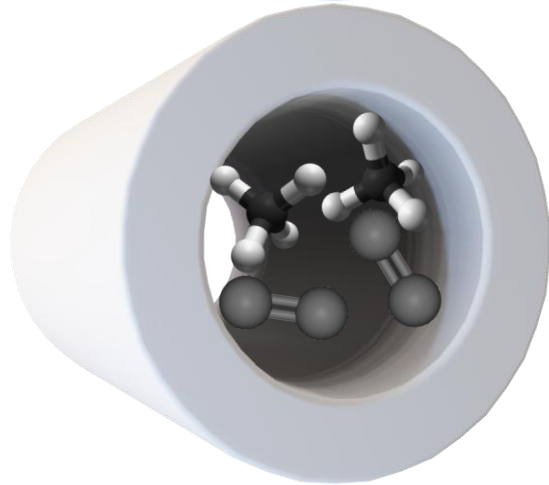


Ejemplo de BM sin RX

Nomenclatura



$$\begin{array}{l} F_1 \\ X_{CH_4,1} \\ X_{N_2,1} \end{array}$$



$$\begin{array}{l} F_1 \\ X_{CH_4,1} \end{array}$$



$$\begin{array}{l} F_2 \\ X_{N_2,2} \end{array}$$

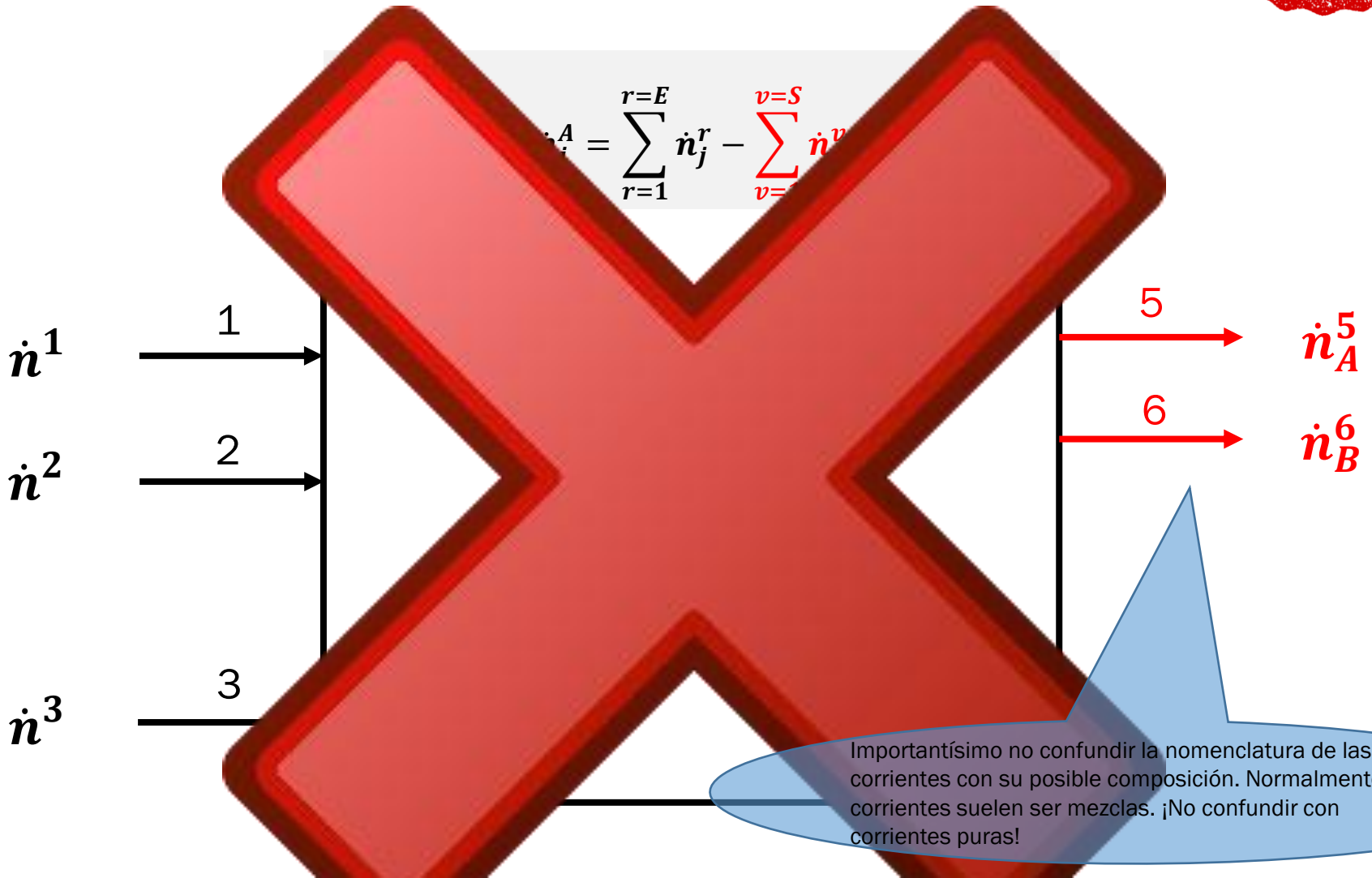


Una flecha representa normalmente una conducción, por la cual circulan mezclados un determinado conjunto de especies/compuestos. Es un error muy grave utilizar una flecha independiente para cada especie o compuesto



Ejemplo de BM sin RX

BM para una especie/compuesto i (diferencial)



$$\dot{n}_i^A = \sum_{r=1}^{r=E} \dot{n}_j^r - \sum_{v=1}^{v=S} \dot{n}_v^v$$

Balances macroscópicos de materia sin reacción química

Balances de materia de especies/compuesto

BM para una especie/compuesto i (diferencial)

$$\dot{n}_j^E = \dot{n}_j^S + \dot{n}_j^A - \dot{n}_j^G + \dot{n}_j^C$$

$$\dot{n}_j^E = \dot{n}_j^S + \dot{n}_j^A$$

$$\dot{n}_j^A = \dot{n}_j^E - \dot{n}_j^S$$

Las especies Sí pueden dar lugar a productos (generación - reactivos (consumo -C-). Sin embargo, si no hay Rx, los generación (G) y consumo (C) son nulos. En forma diferencial, $\dot{n}_i^x$ tiene unidades de g/s (preferentemente) o de mol/s.

Estado estacionario

No hay cambios en la masa de la especie del sistema con el tiempo

Estado no estacionario

Hay cambios en la masa de la especie del sistema con el tiempo

$$A = 0$$

$$\dot{n}_i^A = 0$$

$$A \neq 0$$

$$\dot{n}_i^A \neq 0$$

Balances de materia de especies/compuestos

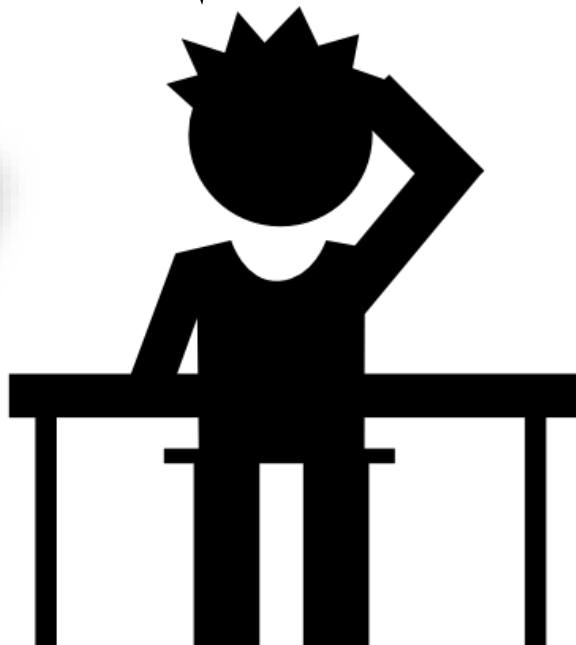
$$\dot{n}_j^A = \dot{n}_j^E - \dot{n}_j^S$$

Si están definidos los límites del sistema es posible determinar si se produce acumulación dentro del citado sistema. En cuanto al término de entrada, este hace referencia al conjunto de entradas (sumatorio para todas las entradas), mientras que el de salida hace referencia al conjunto de salidas (sumatorio para todas las salidas).

$$\dot{n}_j^A = \sum_{r=1}^{r=E} \dot{n}_j^r - \sum_{v=1}^{v=S} \dot{n}_j^v$$

¿Otro ejemplo para saber cuál de los tres balances hay que plantear y cuantos?

?



Estrategia general de resolución

Pasos a seguir

1

Lectura y
comprensión

2

Diagrama
(E/S),
variables y
unidades

3

Análisis
de GDL

4

Formulación
matemática

5

Resolución,
resultados,
análisis y
discusión





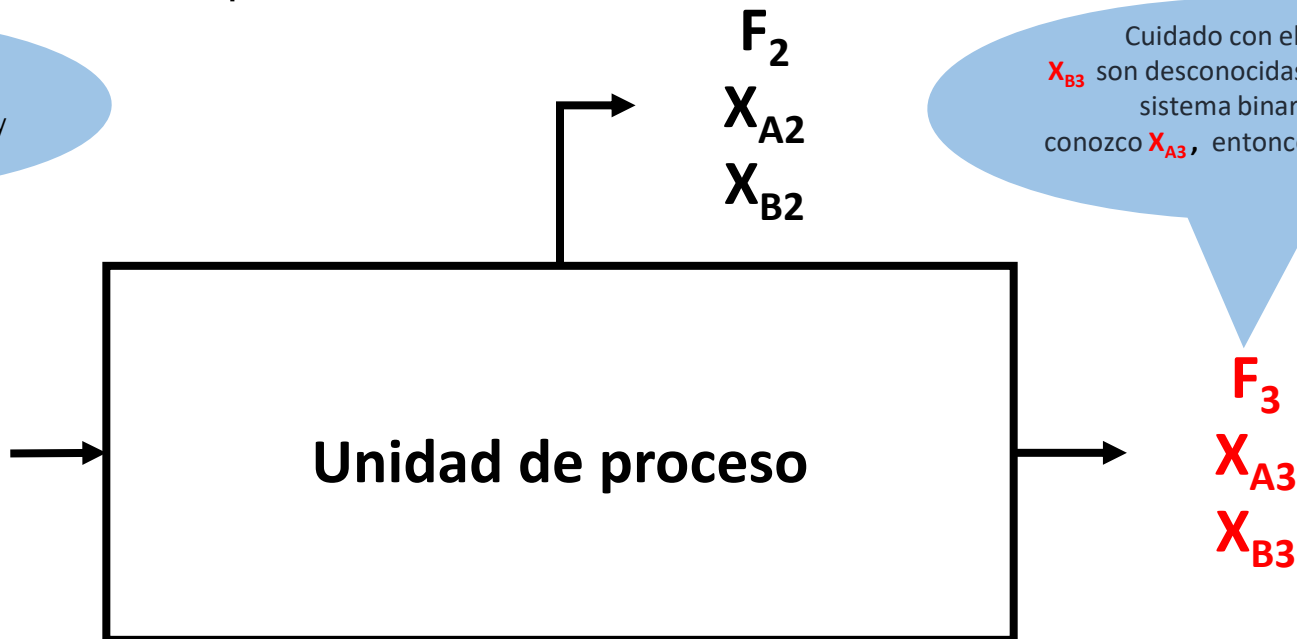
Ejemplo de BM sin RX

¿Qué y cuántos BM hay que plantear?

Se tiene una unidad de proceso que posee una corriente de entrada F_1 y dos corrientes de salida, F_2 y F_3 . Únicamente existen 2 especies, A y B. F_n indica el flujo másico total de la corriente n (kg/h), mientras que X_{in} indica la fracción másica de la especie i en la corriente n . No hay reacción química. F_3 , X_{A3} y X_{B3} son valores desconocidos (es decir los valores de las variables que definen la corriente 3). La unidad opera en estado estacionario.

En cada corriente de entrada y/o salida anotamos el flujo másico F y la composición x

F_1
 X_{A1}
 X_{B1}



Cuidado con el lenguaje: X_{A3} , X_{B3} son desconocidas, pero si es un sistema binario, entonces si conozco X_{A3} , entonces conozco X_{B3}

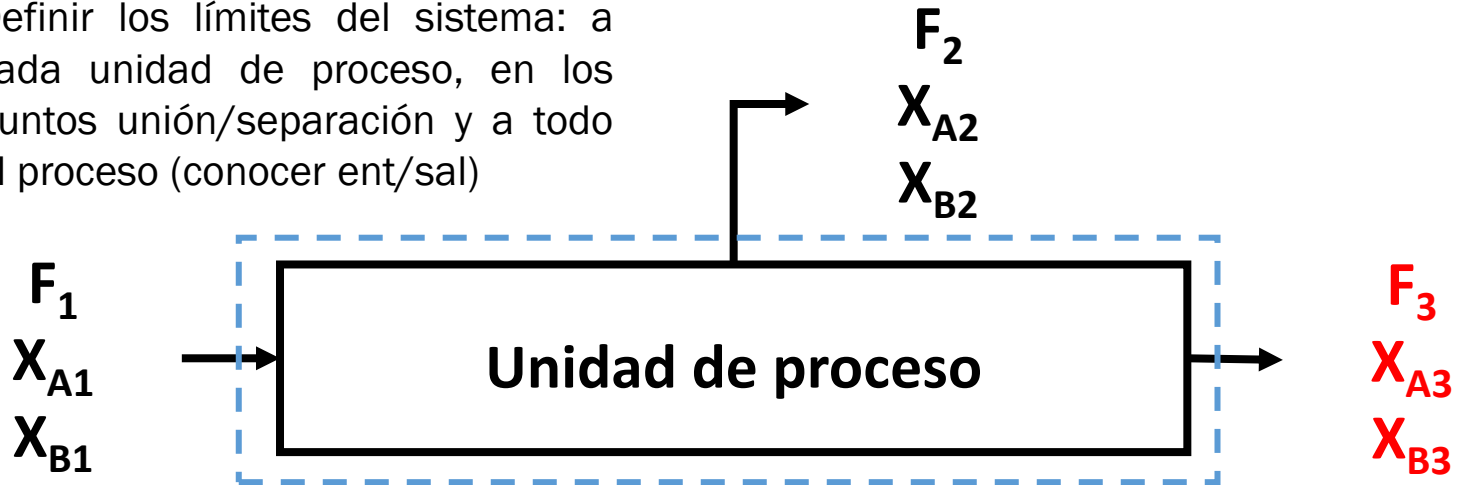


Ejemplo de BM sin RX

¿Qué y cuántos BM hay que plantear?



Definir los límites del sistema: a cada unidad de proceso, en los puntos unión/separación y a todo el proceso (conocer ent/sal)



Una vez identificados los límites del sistema, lo que implica conocer cuáles son las corrientes de salida y las de entrada, entonces podemos plantear los posibles balances de materia en función de los datos suministrados. El enunciado sugiere que **necesitaremos aplicar BM para cada especie/compuesto i (diferencial) y/o BM total** por tener flujos másicos. **Al estar en estado estacionario no se está produciendo acumulación.**



Ejemplo de BM sin RX

¿Qué y cuántos BM hay que plantear?

En este ejemplo no hay acumulación en la unidad de proceso, por lo que el término $\dot{m}_i^A$ debe ser cero $\dot{m}_i^A = 0$. Como resultado, la suma de los E flujos másicos de la especie A debido a cada una de las r corrientes de entrada $\sum_{r=1}^{r=E} \dot{m}_i^r$ se debe igualar a la suma de los S flujos másicos de la especie A debido a cada una de las v corrientes de salida $\sum_{v=1}^{v=S} \dot{m}_i^v$.

$$\dot{m}_i^A = \sum_{r=1}^{r=E} \dot{m}_i^r - \sum_{v=1}^{v=S} \dot{m}_i^v$$

$$\dot{m}_i^A = 0$$

$$\sum_{r=1}^{r=E} \dot{m}_i^r = \sum_{v=1}^{v=S} \dot{m}_i^v$$

En este punto vemos que se cumple que estamos aplicando la ecuación general de balances en forma diferencial, en particular un BM a una especie denominada A, de tal forma que directamente usamos el producto del flujo másico total de la corriente por su fracción másica en esa misma corriente:

La A representa a la especie A, no es la acumulación

SUMA DE LAS ENTRADAS:
(¡SOLO HAY UNA CORRIENTE DE ENTRADA!)

$$\dot{m}_A^1 = \dot{m}_A^2 + \dot{m}_A^3$$

$$F_1 X_{A1} = F_2 X_{A2} + F_3 X_{A3}$$

Solo es el BM para A. Como tengo P=2 especies tendré que plantear 2 BM (uno para A y otro para B; o bien uno para A y un BM global; o bien uno para B y un BM global)

SUMA DE LAS DOS CORRIENTES DE SALIDA



Balance
diferencial

Ejemplo de BM sin RX

¿Qué y cuántos BM hay que plantear?

BM total (kg/h) $F_1 = F_2 + F_3$ Ec. 1

BM especie A (kg A/h) $F_1 X_{A1} = F_2 X_{A2} + F_3 X_{A3}$ Ec. 2

BM especie B (kg B/h) $F_1 X_{B1} = F_2 X_{B2} + F_3 X_{B3}$ Ec. 3

Al sumar las ecuaciones Ec. 2 y Ec. 3, se obtiene la Ec.1 (la Ec. 1 es una combinación lineal de las Ec. 2 y Ec. 3)

$$F_1 X_{A1} + F_1 X_{B1} = F_2 X_{A2} + F_2 X_{B2} + F_3 X_{A3} + F_3 X_{B3}$$

$$F_1 (X_{A1} + X_{B1}) = F_2 (X_{A2} + X_{B2}) + F_3 (X_{A3} + X_{B3})$$

$$F_1 (1) = F_2 (1) + F_3 (1) \quad \text{Ec. 1}$$

Recordar que
 $\sum x_{i,\text{corriente}} = 1$

de ecuaciones independientes = # de especies del sistema



Ejemplo de BM sin RX

¿Qué y cuántos BM hay que plantear?

2

Escribir un BM en forma diferencial por cada especie/compuesto i que existe en el sistema más las restricciones físicas existentes :

BM especie A (kg A/h) $F_1 X_{A1} = F_2 X_{A2} + F_3 X_{A3}$

BM especie B (kg B/h) $F_1 X_{B1} = F_2 X_{B2} + F_3 X_{B3}$

Restricción física (-) $X_{A3} + X_{B3} = 1$

variables desconocidas = 3 (F_3 , X_{A3} y X_{B3})

reacciones independientes = 0

ecuaciones independientes = 2

(a las 2 especies)

#relaciones auxiliares útiles = 1

(restricción física fracción molar = 1) ($X_{A3} + X_{B3} = 1$)

→ # grados de libertad = 0 Solución única

Tendría un sistema de 3 ecuaciones algebraicas con 3 incógnitas (F_3 , X_{A3} y X_{B3})

Alternativa A



Ejemplo de BM sin RX

¿Qué y cuántos BM hay que plantear?

2

Escribir un BM en forma diferencial por cada especie/compuesto i que existe en el sistema integrando las restricciones físicas existentes:

BM especie A (kg A/h) $F_1 X_{A1} = F_2 X_{A2} + F_3 X_{A3}$

BM especie B (kg B/h) $F_1 X_{B1} = F_2 X_{B2} + F_3 (1 - X_{A3})$

variables desconocidas = 2 (F_3 y X_{A3})

reacciones independientes = 0

ecuaciones independientes = 2

(a las 2 especies)

#relaciones auxiliares útiles = 0

➔ # grados de libertad = 0 Solución única

Tendré un sistema de 2 ecuaciones con 2 incógnitas (F_3 y X_{A3})

Alternativa B



Ejemplo de BM sin RX

¿Qué y cuántos BM hay que plantear?

2

Escribir $i - 1$ BM en forma diferencial para $i - 1$ especies/compuestos que existen en el sistema más el BM total

BM especie A (kg A/h) $F_1 X_{A1} = F_2 X_{A2} + F_3 X_{A3}$

BM total (kg/h) $F_1 = F_2 + F_3$

variables desconocidas = 2 (F_3 y X_{A3})

reacciones independientes = 0

ecuaciones independientes = 2
(a las 2 especies)

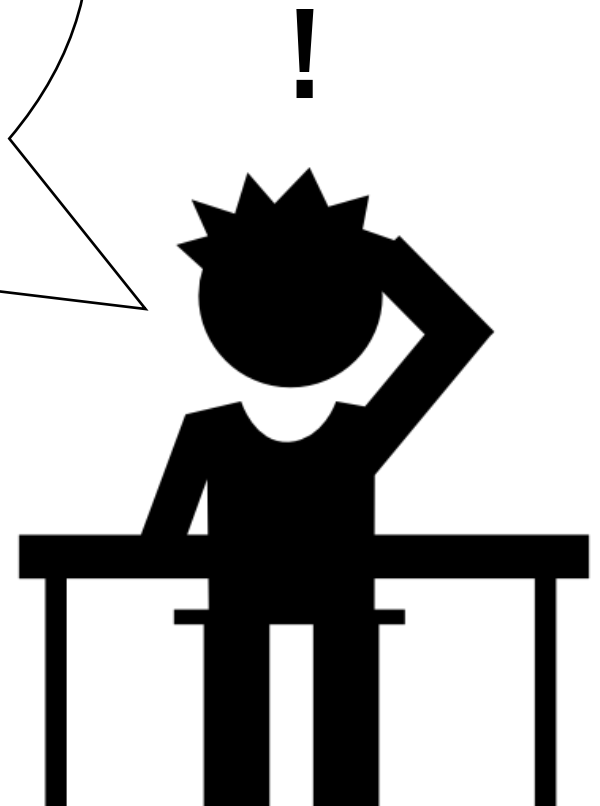
relaciones auxiliares útiles = 0

➔ # grados de libertad = 0 Solución única

Tendré un sistema de 2 ecuaciones con 2 incógnitas (F_3 y X_{A3}) en la que puedo despejar directamente F_3 del BM total

Alternativa C

En el ejemplo hay que formular entonces dos balances de materia en forma diferencial: uno a una especie y otro de materia total. Esto da lugar a un conjunto de ecuaciones algebraicas muy sencillo de solucionar. A partir de ahí puedo despejar los valores de las variables que desconozco.



Balances de materia

¿Qué y cuántos BM hay que plantear? Grados de libertad

gdl = 0

Bien especificado

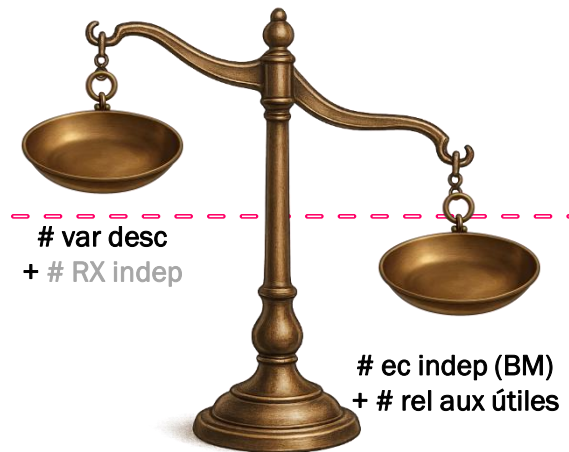
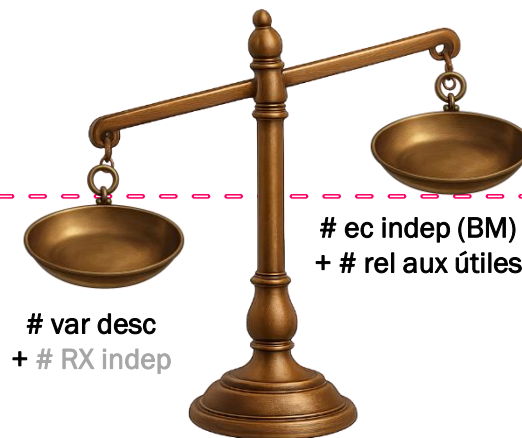
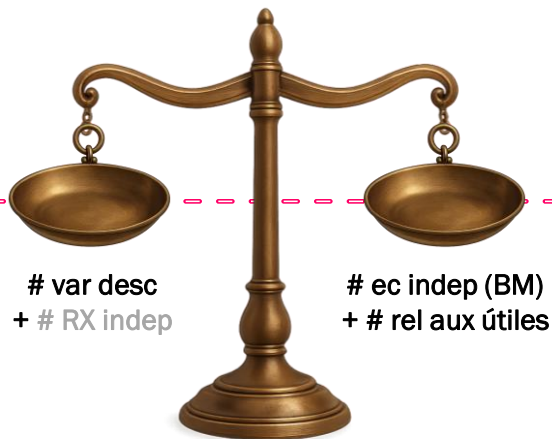
gdl > 0

Subespecificado

gdl < 0

Sobreespecificado

grados de libertad = # variables desconocidas + # reacciones independientes
- # ecuaciones independientes (BM) - # relaciones auxiliares útiles



Balances de materia a un equipo (I)

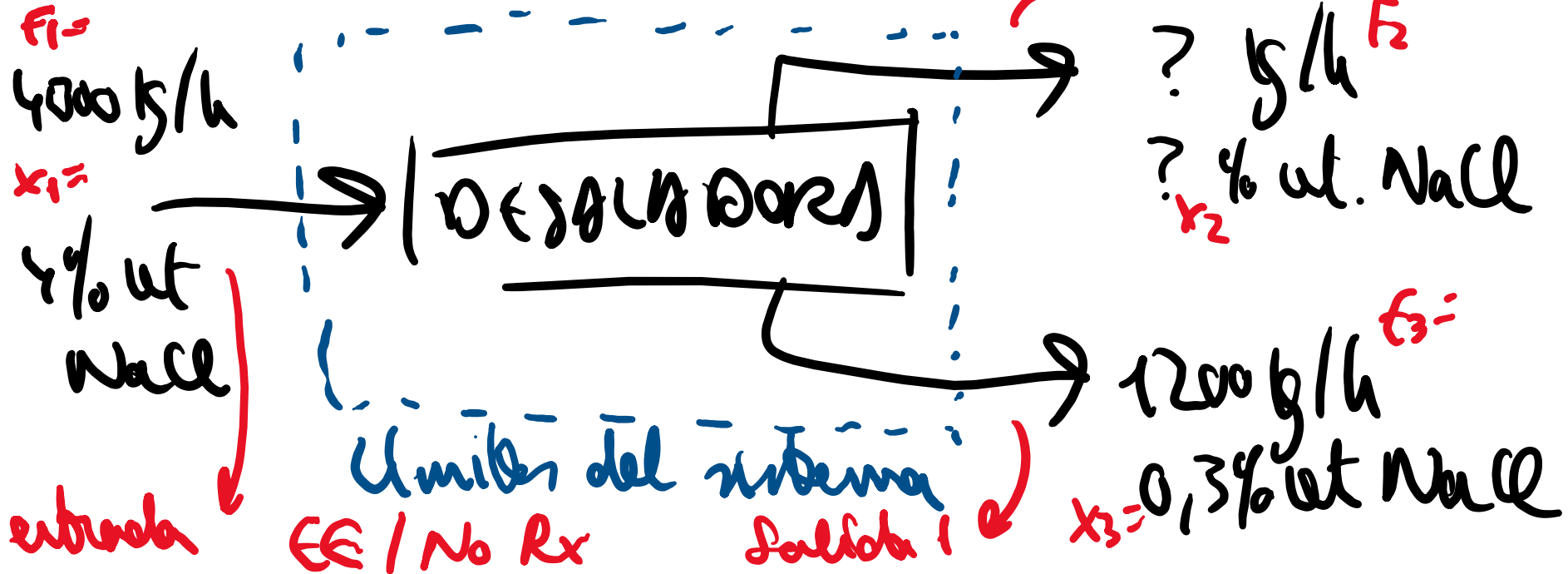
En una planta de desalinización por ósmosis inversa se tratan $4000 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$ de una disolución salina con un 4% en peso de sal, obteniéndose dos corrientes: i) $1200 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$ de agua desalinizada con un 0,3% en peso de sales; ii) una corriente de salmuera de rechazo. Calcular el porcentaje de sal y el caudal másico de esta salmuera de rechazo.



Balances de materia a un equipo (I)

Solución:

En primer lugar creamos un diagrama de bloques de p. de proceso, identificando los límites del sistema:



Balances de materia a un equipo (I)

Solución:

Plantear BM total y al NaCl ya que son los datos de los que disponemos.

$$\text{BM total} \quad F_1 = F_2 + F_3 \quad (\text{kg/h})$$

$$\text{BM NaCl} \quad F_1 x_1 = F_2 x_2 + F_3 x_3 \quad (\text{kg NaCl/h})$$

Sustituyendo los valores conocidos:

$$4000 = F_2 + 1200 \quad (\text{kg/h}) \quad \rightarrow \text{2 ec. // 2 incógn}$$

$$4000 \cdot \frac{4}{100} = F_2 \cdot x_2 + 1200 \cdot \frac{0.13}{100} \quad (\text{kg NaCl/h})$$

Balances de materia a un equipo (I)

Solución:

Por tanto el # de $gole = 0$, luego existe una solución única. Despejando de la 1ª ec:

$$4000 = F_2 + 1200 \Rightarrow F_2 = 2800 \text{ g/h}$$

Substituyendo en la segunda ecuación:

$$4000 \cdot \frac{4}{100} = 2800 \cdot x_2 + 1200 \cdot \frac{0,3}{100} \text{ (g NaCl/h)}$$

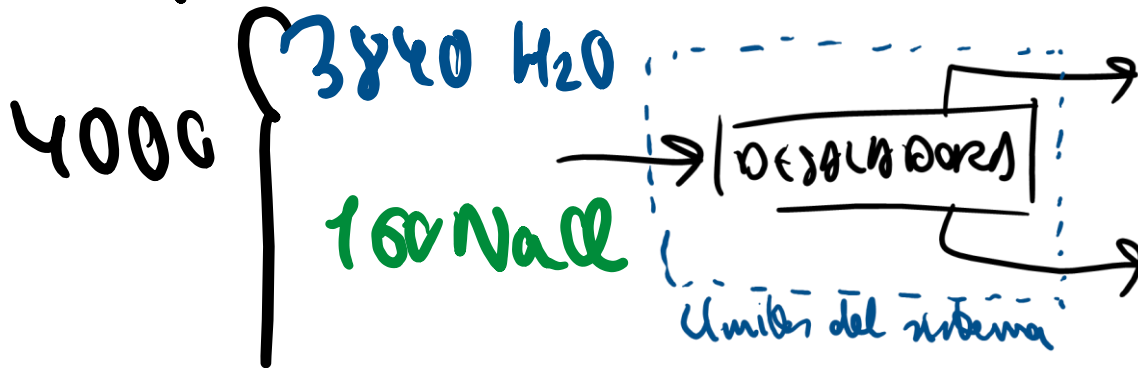
$$\text{luego } x_2 = 0,0559 \Rightarrow x_2 = 5,59 \% \text{ et NaCl}$$

↳ para tener % $\Rightarrow (x \cdot 100)$

Balances de materia a un equipo (I)

Solución:

Comprender:



$$2800 \left\{ \begin{array}{l} 2643,5 \text{ H}_2\text{O} \\ 156,4 \text{ NaCl} \end{array} \right.$$

$$1200 \left\{ \begin{array}{l} 1196,5 \text{ H}_2\text{O} \\ 3,6 \text{ NaCl} \end{array} \right.$$

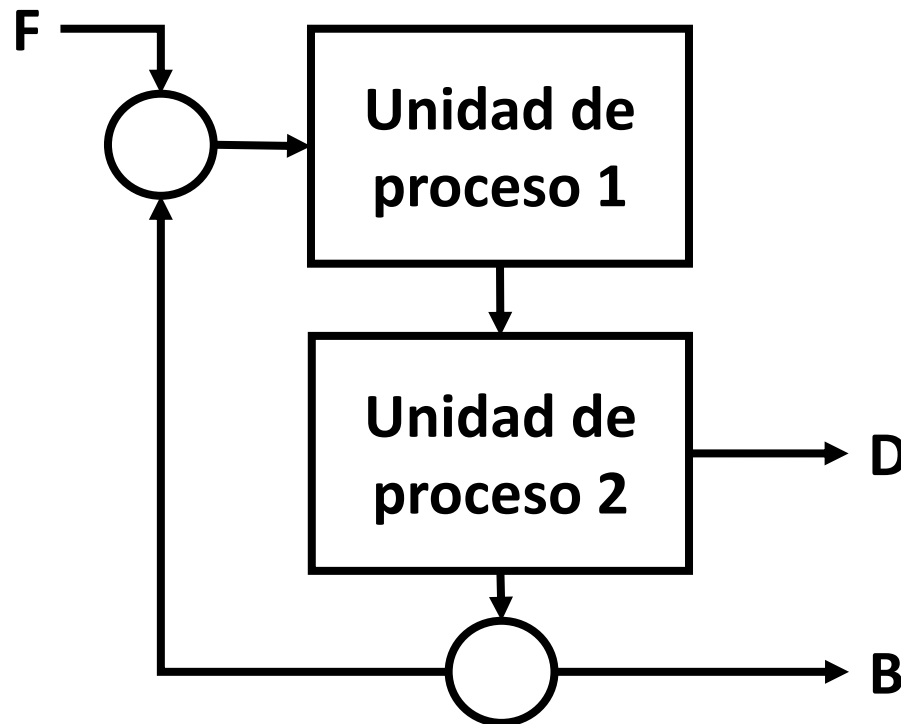
$$4000 = 2800 + 1200 \text{ g/h} \checkmark$$

$$160 = 156,4 + 3,6 \text{ g NaCl/h} \checkmark$$

$$3840 = 2643,5 + 1196,5 \text{ g H}_2\text{O/h} \checkmark$$

Balances de materia a un sistema multiunidad

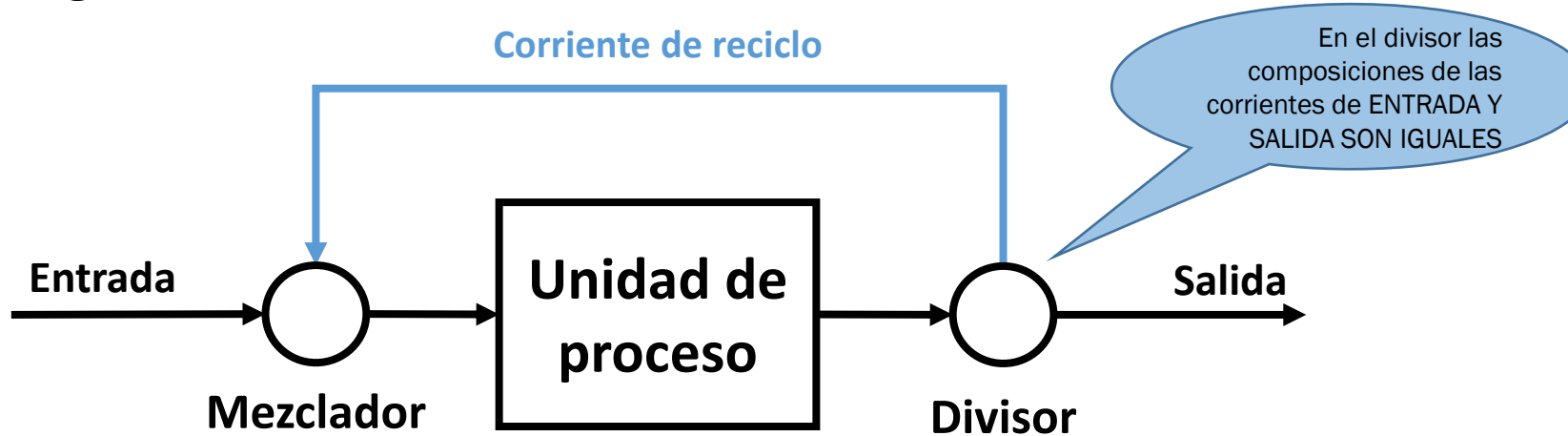
Un sistema o proceso multiunidad es simplemente un proceso que contiene más de una unidad. El procedimiento para resolver los balances de materia a una única unidad se pueden aplicar directamente a la solución de un sistema o proceso multiunidad.



Reciclado, bypass, purga y makeup

Reciclado

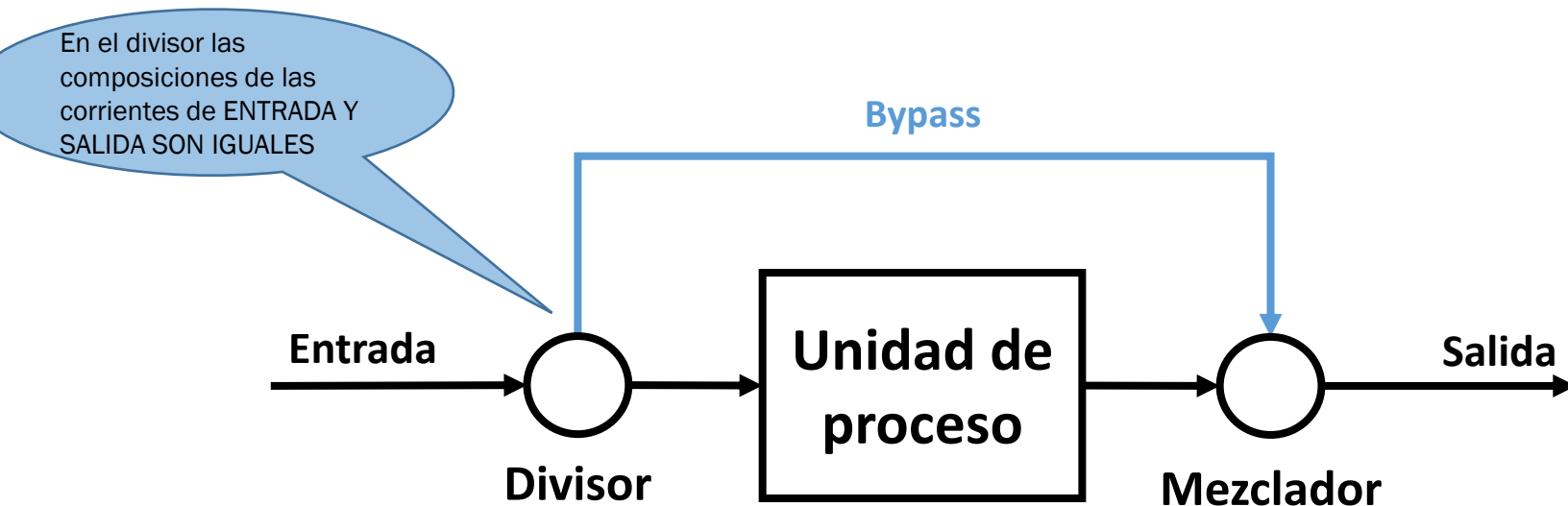
El reciclado es una estrategia común en Ingeniería Química. Entre las razones para incorporar corrientes de reciclo tendríamos la recuperación y reuso de reactivos no consumidos, la recuperación de catalizadores, la dilución de una corriente de proceso, el control de una variable y la circulación de un fluido de trabajo (vapor de agua, refrigerantes). Por tanto, simplemente, una corriente de reciclado sería tal aquella que se divide a la salida de una unidad de proceso y se devuelve de vuelta como entrada a una unidad aguas arriba.



Reciclado, bypass, purga y makeup

Bypass

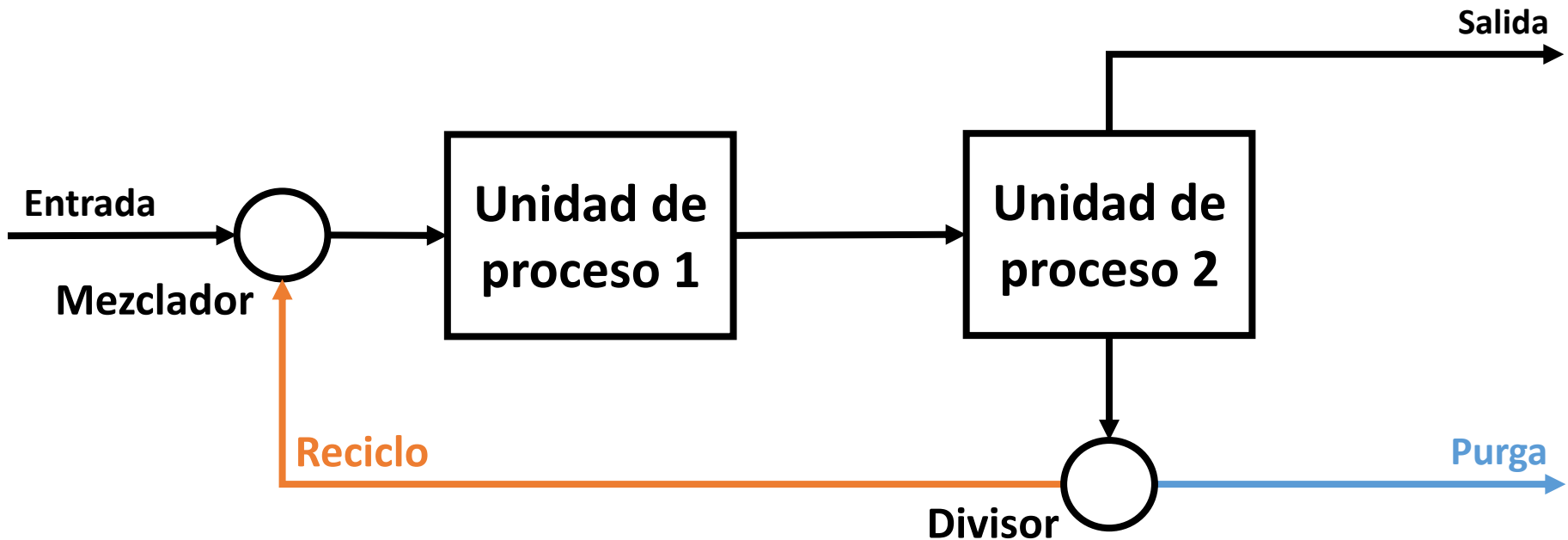
El *bypass* (derivación) se define como la fracción de la alimentación a una unidad de proceso que se desvía alrededor de la unidad y se combina con la corriente de salida de dicha unidad, y por tanto afecta a la composición y las propiedades de dicha corriente de salida. Por tanto, un bypass es una corriente que se divide de otra para evitar pasar por una unidad aguas abajo.



Reciclado, bypass, purga y makeup

Purga

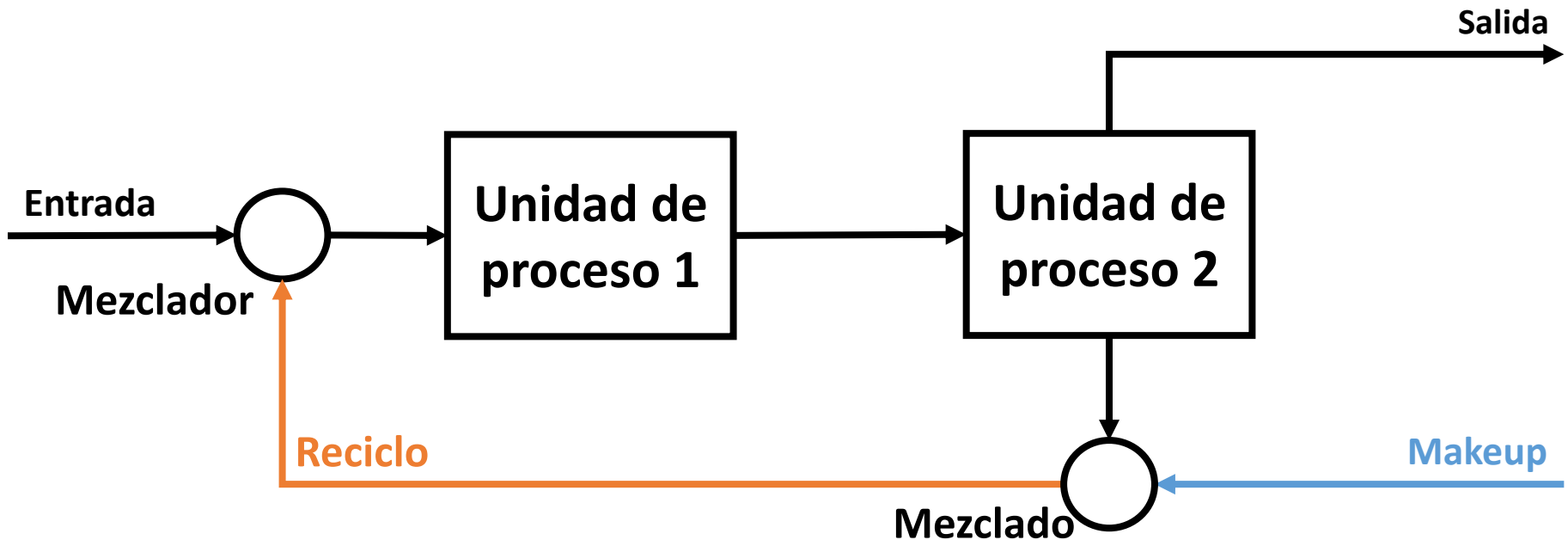
Una corriente de purga es aquella que se saca de un circuito de reciclo para prevenir la acumulación de inertes o impurezas en el sistema. En general, su flujo másico es tan pequeño en comparación con el de la corriente de reciclo que podría despreciarse en un balance de materia en estado estacionario.



Reciclado, bypass, purga y makeup

Makeup

Una corriente de *makeup* (compensación/reposición) es aquella que se emplea para compensar pérdidas debido a fugas, dentro del circuito de reciclo. El uso de las corriente de *makeup* y de purga pueden prevenir muchos problemas dentro de las plantas de proceso.



Ej. BM a una columna de separación

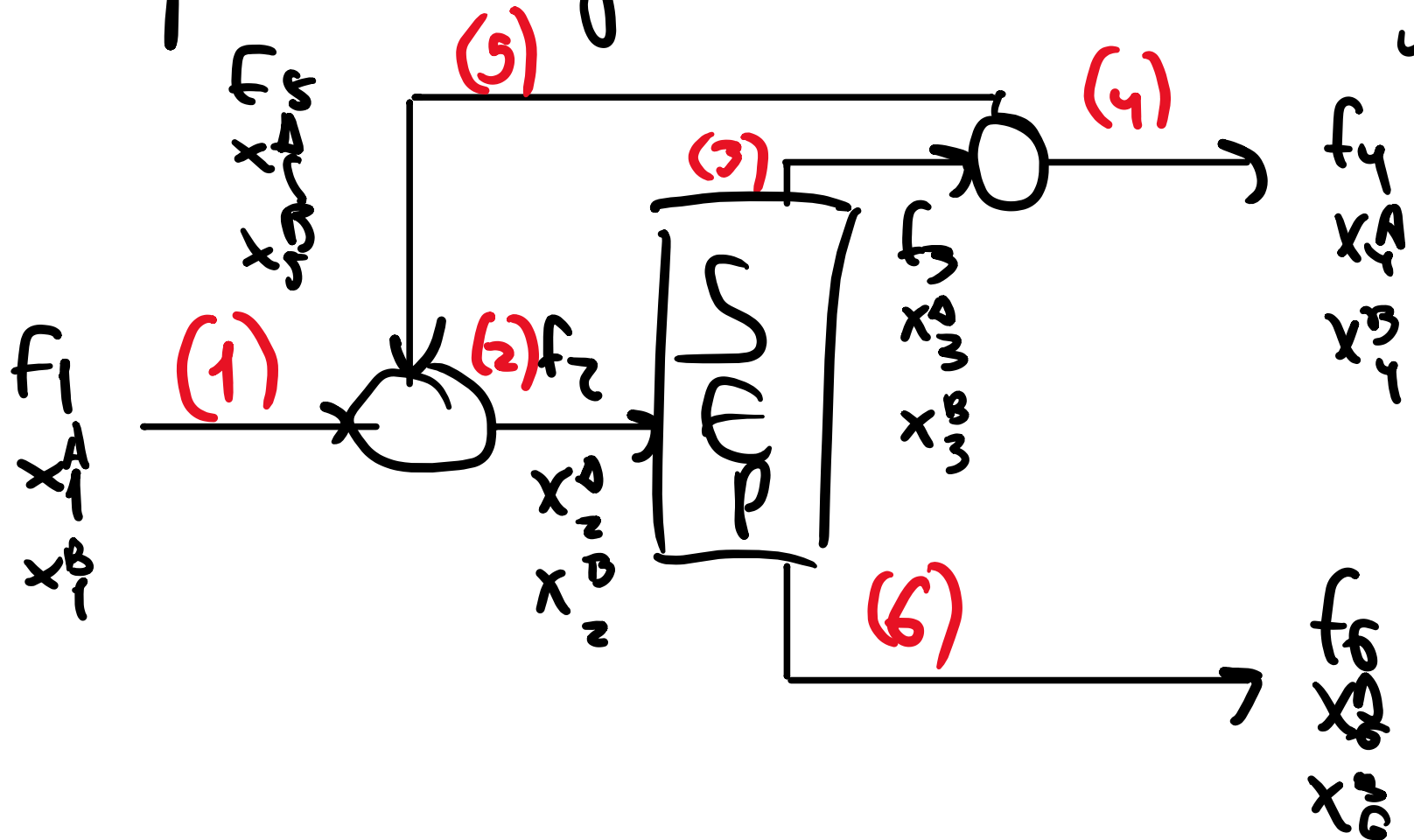


Se tiene una alimentación binaria de 2 compuestos A y B con un caudal másico de 100 kg/h (corriente 1) y que posee una fracción másica de A de 55%. Esa alimentación llega a un mezclador, donde se une con una corriente de reciclado (corriente 5) dando lugar a una corriente de salida (corriente 2). Esta corriente 2 alimenta a una columna de separación. Por la parte inferior de la columna se obtiene una corriente 6 que es pura en el compuesto A. Por la parte superior se obtiene una corriente 3. La columna está diseñada para que $2/3$ en masa del compuesto A abandonen la columna por la parte inferior de la misma. La corriente 3 que sale por la parte superior de la columna se divide en un divisor entre 2 corrientes: una corriente 4 que es purgada del sistema y que tiene una fracción másica de A del 10% y una corriente 5, que es la que se retorna al mezclador previo a la columna de separación junto a la alimentación fresca. Se pide calcular los flujos másicos y las composiciones de cada una de las 6 corrientes existentes.

Ej. BM a una columna de separación



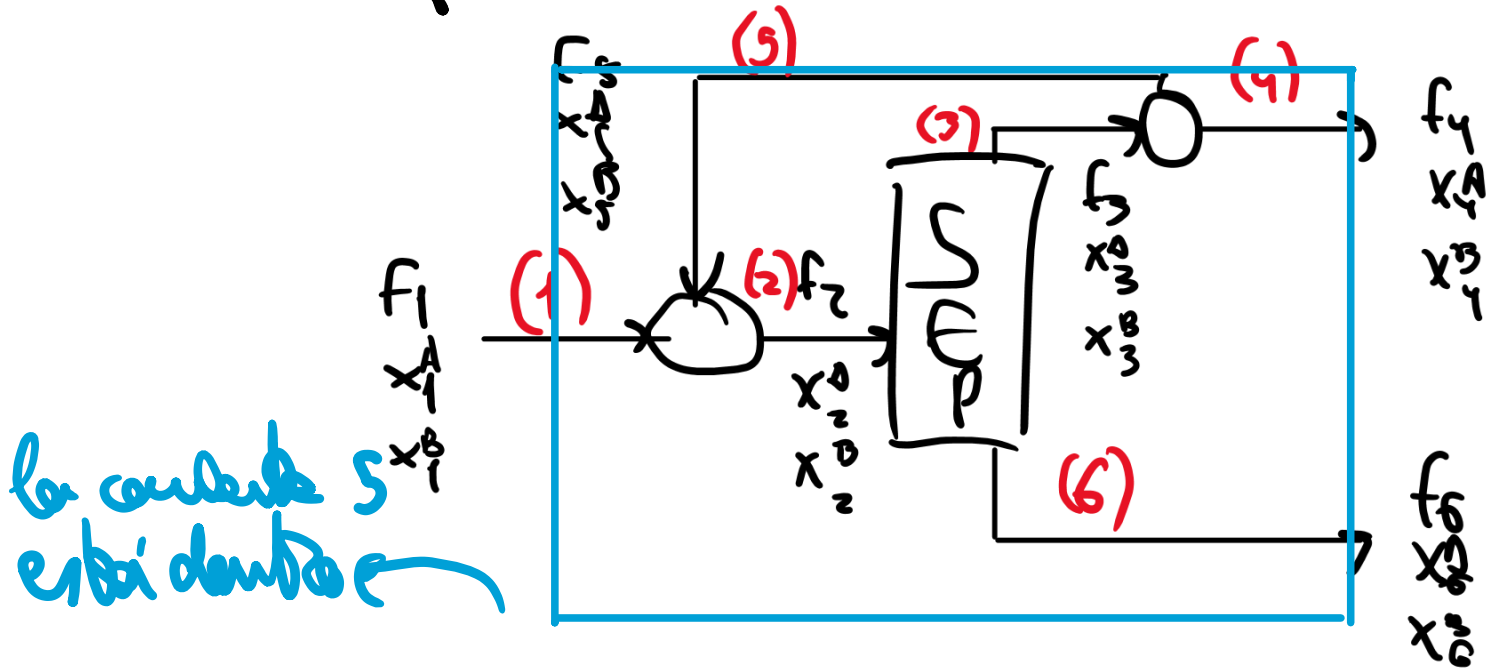
En primer lugar realizaremos un dibujo





Ej. BM a una columna de separación

La clave ahora es elegir los límites del sistema. Si hay reciclado, pondremos límites de forma que el reciclado (5) quede dentro





Ej. BM a una columna de separación

Ahora puedo plantear BM total y BM A:

$$\text{BM total } F_1 = F_4 + F_6$$

$$\text{BM A } F_1 x_1 = F_4 x_4 + F_6 x_6$$

Al sustituir

$$100 = F_4 + F_6 \text{ (kg/h)} \rightarrow F_4 = 100 - F_6$$

$$100 \cdot 0,55 = F_4 \frac{10}{100} + F_6 \cdot \frac{100}{100} \text{ (kg A/h)} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow 55 = 0,1 F_4 + F_6 = 0,1(100 - F_6) + F_6$$



Ej. BM a una columna de separación

$$100 = F_v + F_b \text{ (kg/h)} \rightarrow F_v = 100 - F_b$$

$$100 \cdot 0,55 = F_v \cdot \frac{10}{100} + F_b \cdot \frac{100}{100} \text{ (kg A/h)} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow 55 = 0,1 F_v + F_b = 0,1(100 - F_b) + F_b$$

$$55 = 10 - 0,1 F_b + F_b = 10 + 0,9 F_b$$

$$\Rightarrow F_b = 50 \text{ kg/h}$$

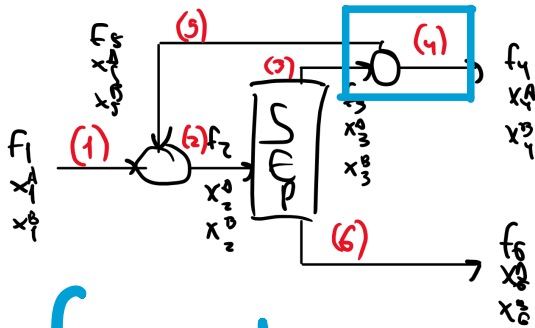
$$F_v = 100 - 50 = 50$$

$$\Rightarrow F_v = 50 \text{ kg/h}$$



Ej. BM a una columna de separación

¿Cuál sería el siguiente paso? Veamos como sería un **ERROR** hacer un BM al divider :



Recordar que
Las composiciones
de entradas y
salidas son iguales

$$F_3 = F_4 + F_5 \quad || \quad F_3 x_3 = F_4 x_4 + F_5 x_5$$

$$F_3 = 50 + F_5 ; \quad F_3 0,1 = 50 \cdot 0,1 + F_5 0,1$$

$$(50 + F_5) 0,1 = 5 + 0,1 F_5$$

$$5 + 0,1 F_5 = 5 + 0,1 F_5$$

NO
APORTA
NADA

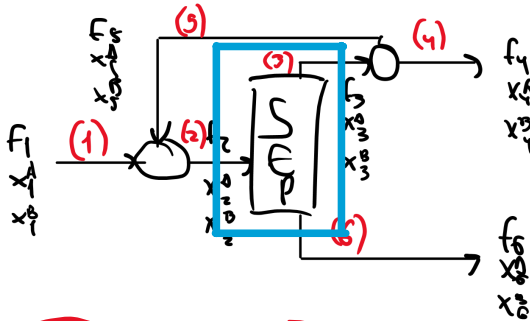


$$0 = 0$$



Ej. BM a una columna de separación

la clave está en poner los límites al separador:



BM total $F_2 = F_3 + F_6$

BM A $F_2 x_2 = F_3 x_3 + F_6 x_6$

Al substituir

$$F_2 = F_3 + 50 ; F_2 x_2 = F_3 \cdot 0,1 + 50 \cdot \frac{100}{100}$$

Veo que el # golc = 1. ¡Necesitamos una relación adicional!



Ej. BM a una columna de separación

$$F_2 = F_3 + 50 ; F_2 x_2 = F_3 \cdot 0,1 + 50 \cdot \frac{100}{100}$$

Ves que el # golf = 1. ¡Necesitamos una relación adicional!

En este caso nos dicen que $\frac{2}{3}$ de la masa de A abandona la columna por la parte inferior luego:

$$F_6 x_6 = \frac{2}{3} F_2 x_2$$

caudal mónico de A que abandona la columna por (6)

caudal mónico de A que entra al separador (2)



Ej. BM a una columna de separación

$$F_2 = F_3 + 50 ; F_2 x_2 = F_3 \cdot 0,1 + 50 \cdot \frac{100}{100}$$

$$\left(50 \cdot \frac{100}{100}\right) \leftarrow F_6 x_6 = \frac{2}{3} F_2 x_2$$

$$\frac{3}{2} 50 \cdot 1 = 0,1 F_3 + 50 \Rightarrow$$

$$F_3 = 250 \text{ kg/h}$$

$$F_2 = 250 + 50 = 300 \Rightarrow$$

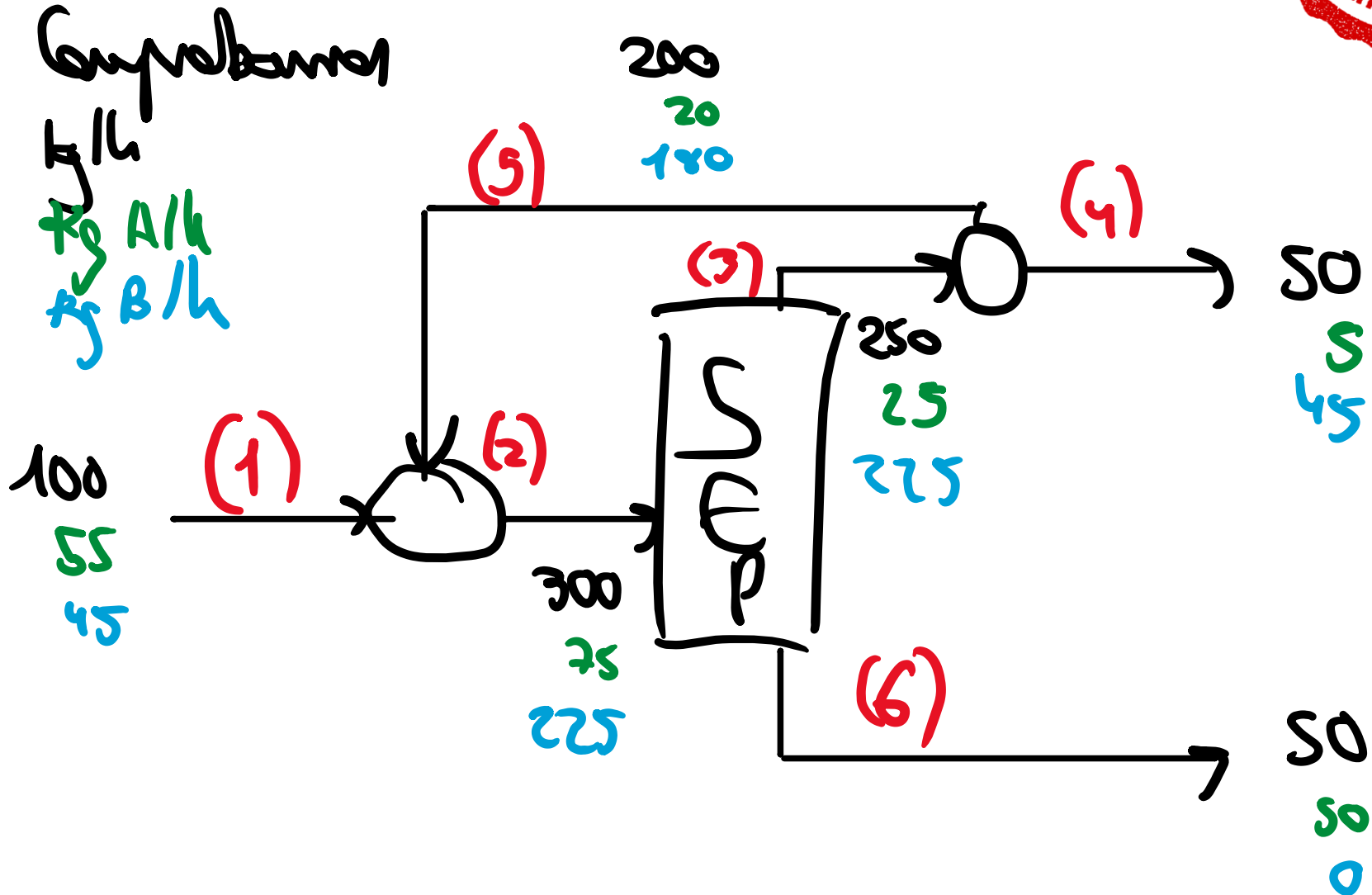
$$F_2 = 300 \text{ kg/h}$$

Y ahora simplemente $50 \cdot 1 = \frac{2}{3} 300 \cdot x_2$

$$\Rightarrow x_2 = 0,25 = 25\%$$



Ej. BM a una columna de separación



2.3. Balances macroscópicos de materia con reacción química



Ejemplo de BM multicomponente

Ejemplo BM para un sistema multicomponente

Suponer que el metano es un componente de una corriente de entrada (ENT) y de otra de salida (SAL) de una unidad de proceso en continuo. Se quiere comprobar si la unidad está funcionando como se diseñó, y se miden los flujos molares de metano en ambas corrientes ($\dot{n}_{CH_4}^{ENT}$ y $\dot{n}_{CH_4}^{SAL}$). Se encuentra que ambos flujos son diferentes, es decir, $\dot{n}_{CH_4}^{ENT} \neq \dot{n}_{CH_4}^{SAL}$: ¿cuáles podrían ser las posibles explicaciones para la diferencia observada en los flujos medidos $\dot{n}_{CH_4}^{ENT}$ y $\dot{n}_{CH_4}^{SAL}$?



Balances de materia con reacción química

Enfoques para la resolución de BM

*Método de la
extensión de la
reacción*

*BM para un
elemento j o
átomos
(elementales)*

**BM para una
especie/
compuesto i**

*La extensión ξ de la
reacción es la cantidad de
una especie convertida en
una reacción dividida por el
coeficiente estequiométrico
(única reacción)*

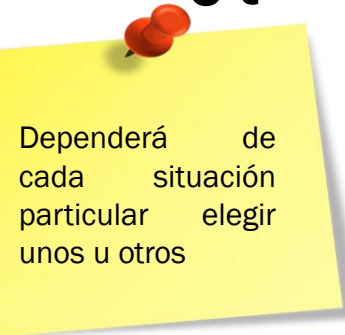
$$n_i^S = n_i^E + \nu_i \xi$$

*No hay términos de
generación o consumo ya
que los átomos ni se
generan ni se consumen.
Hay que tener en cuenta el
número de átomos de cada
compuesto en la molécula*

Hay términos de
generación y consumo, ya
que los compuestos sí
pueden generarse o
consumirse

Balances de materia

¿Qué y cuántos BM hay que plantear? Grados de libertad



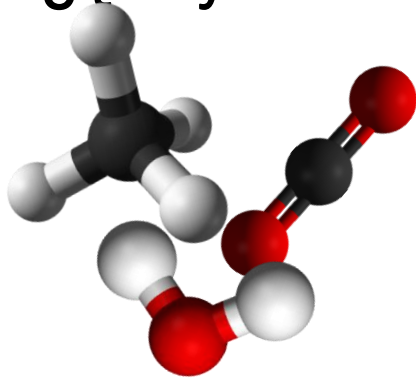
Balance de materia para cada especie i
Balance de materia para cada elemento j
Balance de materia total



Para un sistema que posee P **especies/compuestos indexados como i** , es posible plantear un total de $P + 1$ **balances de materia**, de los cuales P **balances** corresponden a las P especies y **1 balance** se corresponde al balance de materia total. Por tanto, se podrán formular $P + 1$ ecuaciones.

Balances de materia

¿Qué y cuántos BM hay que plantear? Grados de libertad



$$X = a + b$$

$$Y = c + d$$

$$Z = e + f$$

$$H = g + j$$

P

+

1

=

$P + 1$

Especies /
compuestos

Balance de
materia total

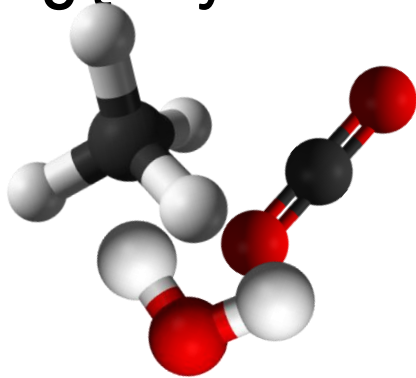
Ecuaciones
totales

Es posible demostrar que tan sólo P de esas $P + 1$ ecuaciones SON LINEALMENTE INDEPENDIENTES, es decir que si A es la matriz de coeficientes de las $P + 1$ ecuaciones se da que:

$$\text{rango}(A) = P$$

Balances de materia

¿Qué y cuántos BM hay que plantear? Grados de libertad



$$X = a + b$$

$$Y = c + d$$

$$Z = e + f$$

$$H = g + j$$

P

+

1

=

$P + 1$

Especies /
compuestos

Balance de
materia total

Ecuaciones
totales

El resultado de combinar las P ecuaciones correspondientes a las P especies es equivalente al balance de materia total.

Cuando el número de especies es 1, necesariamente el balance de materia total y el balance de materia a la especie coinciden.

Balances de materia

¿Qué y cuántos BM hay que plantear? Grados de libertad

Además de las P ecuaciones linealmente independientes que surgen de aplicar los balances de materia totales, a las especies y/o elementos existen otras posibles fuentes de relaciones independientes:

Balances de energía

Especificaciones de proceso

(composición de una corriente)

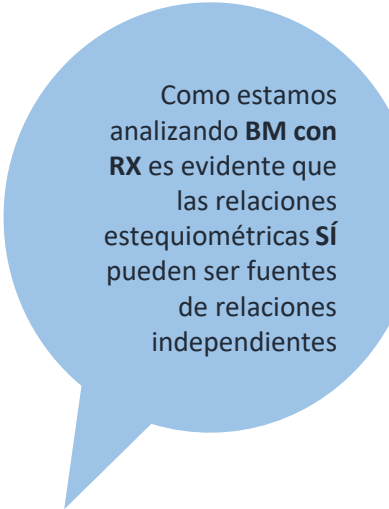
Propiedades físicas y leyes

(ley gases ideales)

Restricciones físicas

(fracción másica o molar igual a 1)

Relaciones estequiométricas en sistemas con reacciones químicas



Como estamos analizando **BM con RX** es evidente que las relaciones estequiométricas **SÍ** pueden ser fuentes de relaciones independientes

Balances de materia

¿Qué y cuántos BM hay que plantear? Grados de libertad

1

Definir los límites del sistema: a cada unidad de proceso, en los puntos unión/separación y/o a todo el proceso

2

Escribir las ecuaciones por cada límite del sistema en número igual al número de ecuaciones independientes que exista, que es igual al número de componentes i que existen en el sistema

**# grados de libertad = # variables desconocidas + # reacciones independientes
- # ecuaciones independientes (BM) - # relaciones auxiliares útiles**

gdl = 0 Definido (solución única)

gdl > 0 Infradefinido (infinitas soluciones)

gdl < 0 Sobredefinido (irresoluble)

Balances de materia

Aplicación de la EGB a BM con RX

Balances de materia con RX	Forma integral	Forma diferencial
Elementos j	$m_j^A = m_j^E - m_j^S$	$\dot{m}_j^A = \dot{m}_j^E - \dot{m}_j^S$
Compuestos / especies i	$n_i^A = n_i^E - n_i^S + n_i^G - n_i^C$	$\dot{n}_i^A = \dot{n}_i^E - \dot{n}_i^S + \dot{n}_i^G - \dot{n}_i^C$
Masa total	$m^A = m^E - m^S$	$\dot{m}^A = \dot{m}^E - \dot{m}^S$

Los balances de materia se pueden aplicar a la materia / masa total, a elementos, y a compuestos/especies. Cada balance de materia con RX puede aplicarse en su forma integral o diferencial.

Balances de materia de especies/compuestos

BM para una especie/compuesto i (integral)

$$n_i^E = n_i^S + n_i^A - n_i^G + n_i^C$$

$$n_i^A = n_i^E - n_i^S + n_i^G - n_i^C$$

Cuando existen reacciones químicas es aconsejable el uso de moles como unidad (estequiometría de la reacción)

Las especies SÍ pueden dar lugar a productos (generación) a partir de reactivos (consumo). Si sólo es posible una reacción química, cada especie que interviene actuará como reactivo (se consume) o como producto (se genera). En forma integral, cada término n_i^x tiene unidades de mol (cantidad de sustancia, no de masa).

Estado estacionario

No hay cambios en la masa de la especie del sistema con el tiempo

$$A = 0 \quad n_i^A = 0$$

Estado no estacionario

Hay cambios en la masa de la especie del sistema con el tiempo

$$A \neq 0 \quad n_i^A \neq 0$$

Balances de materia de especies/compuestos

BM para una especie/compuesto i (diferencial)

$$\dot{n}_i^E = \dot{n}_i^S + \dot{n}_i^A - \dot{n}_i^G + \dot{n}_i^C$$

$$\dot{n}_i^A = \dot{n}_i^E - \dot{n}_i^S + \dot{n}_i^G - \dot{n}_i^C$$

Cuando existen reacciones químicas es aconsejable el uso de moles como unidad (estequiometría de la reacción)

Las especies SÍ pueden dar lugar a productos (generación) a partir de reactivos (consumo). Si sólo es posible una reacción química, cada especie que interviene actuará como reactivo (se consume) o como producto (se genera). En forma diferencial, cada término $\dot{n}_i^x$ tiene unidades de mol/s (cantidad de sustancia, no de masa).

Estado estacionario

No hay cambios en la masa de la especie del sistema con el tiempo

$$A = 0 \quad \dot{n}_i^A = 0$$

Estado no estacionario

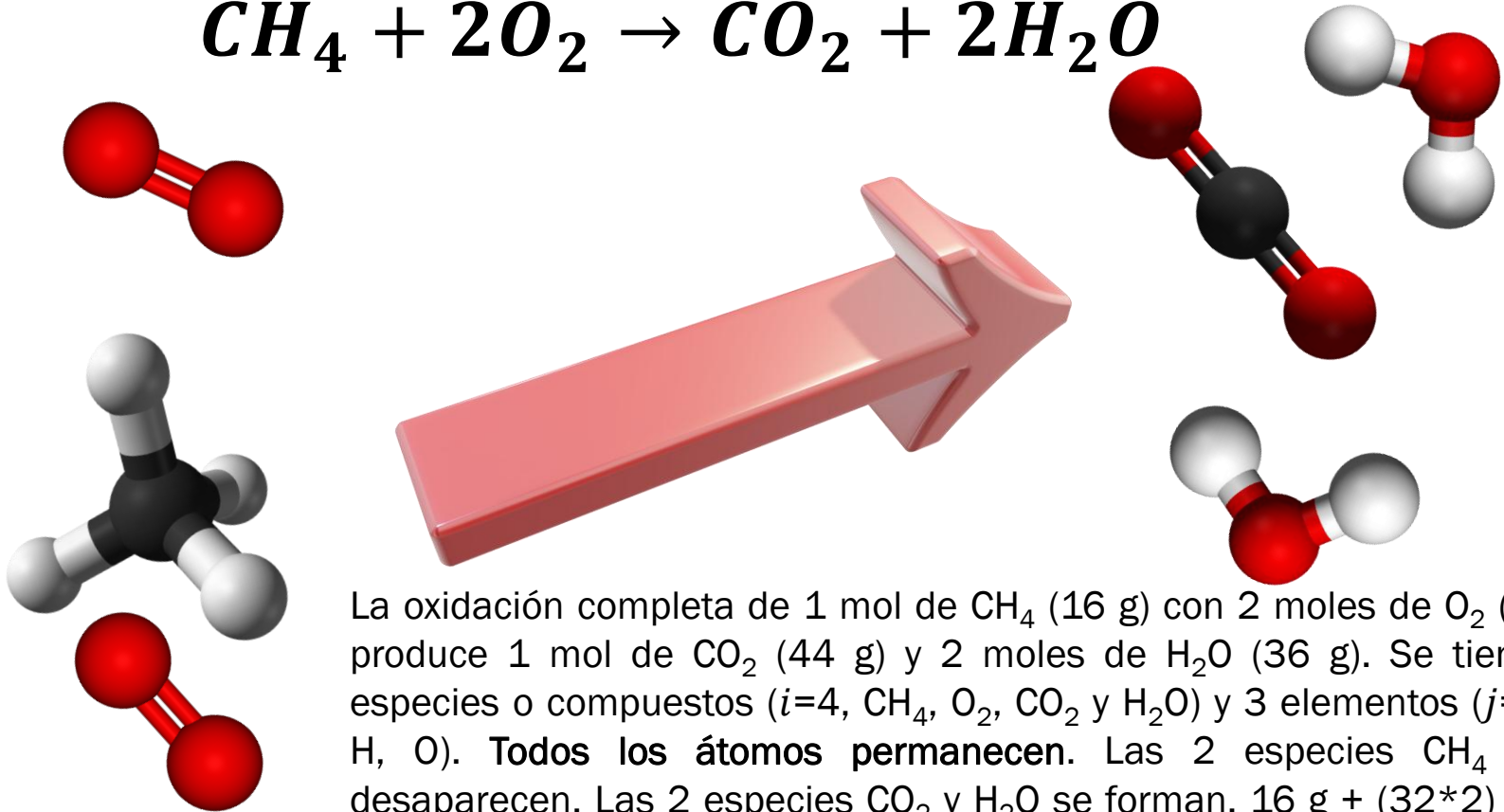
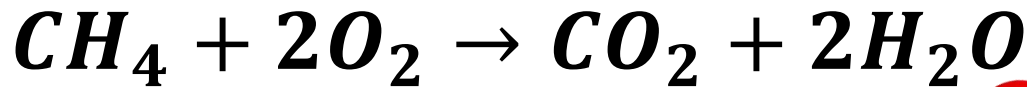
Hay cambios en la masa de la especie del sistema con el tiempo

$$A \neq 0 \quad \dot{n}_i^A \neq 0$$



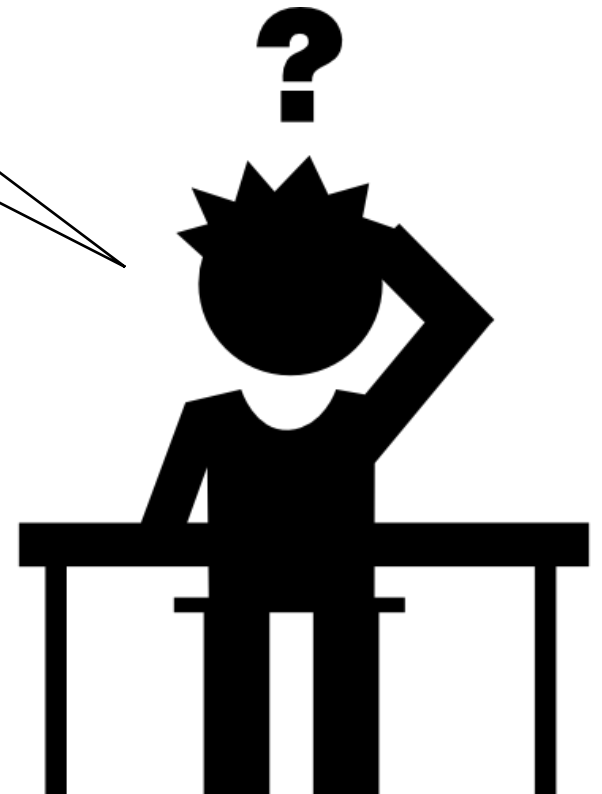
Balances de materia de especies

Ejemplo de BM con RX



La oxidación completa de 1 mol de CH_4 (16 g) con 2 moles de O_2 (64 g) produce 1 mol de CO_2 (44 g) y 2 moles de H_2O (36 g). Se tienen 4 especies o compuestos ($i=4$, CH_4 , O_2 , CO_2 y H_2O) y 3 elementos ($j=3$, C, H, O). **Todos los átomos permanecen.** Las 2 especies CH_4 y O_2 desaparecen. Las 2 especies CO_2 y H_2O se forman. 16 g + (32*2) g son 80 g a la entrada. A la salida tenemos 44 g + (18*2) g que son 80 g

OK. Vale.
Necesito un
ejemplo



Ejemplo BM con Rx f. integral



En un matraz aforado que contiene únicamente una disolución de 0,5 kg existe una sustancia **A**. Al someter el matraz a un proceso de irradiación UV durante 30 minutos, tiene lugar una reacción química con una estequiometría tal que **A** → **2B**, de tal forma que el 100% de **A** se convierte en **B**. Si inicialmente existen 10 mol de **A**, ¿cuánta masa se acumula en el matraz transcurridos 30 minutos? ¿qué cantidad de **B** se habrá formado una vez ha terminado la reacción química? No se produce ninguna adición de reactivos ni se extrae producto durante la reacción química.





Ejemplo BM con Rx f. integral

En primer lugar se definen los límites del sistema. En este caso, se trata de un matraz que contiene 0,5 kg de una disolución en la que existe el compuesto A. De acuerdo al enunciado, podemos asumir que es correcto que no existen corrientes ni de entrada ni de salida. Se trataría de un proceso *batch* (el matraz estaba cargado inicialmente)





Ejemplo BM con Rx f. integral

En **segundo lugar**, definimos las variables (y sus correspondientes unidades).
En **tercer lugar** analizamos el número de grados de libertad.

Tiempo $t = t_i$

Masa inicial

$m_i = 0,5 \text{ kg de dis}$

Tiempo $t = t_f$

Masa final

$m_f = 0,5 \text{ kg de dis}$

Matraz



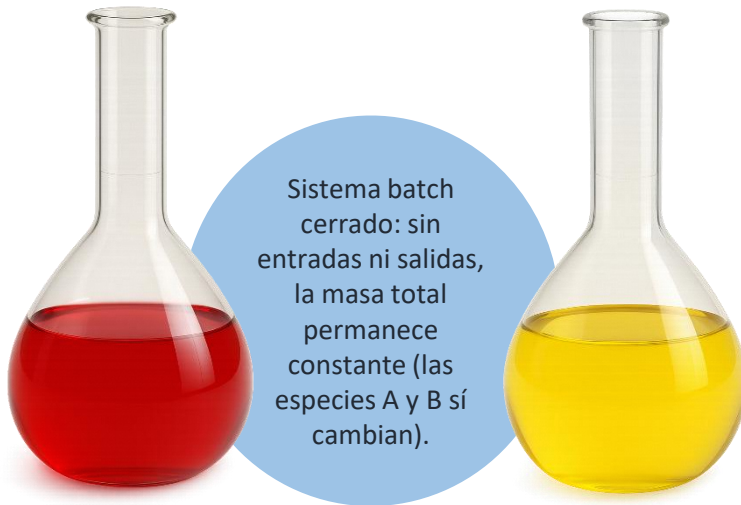


Ejemplo BM con Rx f. integral

En cuarto lugar se formula matemáticamente el problema

FORMA INTEGRAL (BM total, masa disolución)

ACUMULACIÓN	=	ENTRADAS	-	SALIDAS	+	GENERACIÓN	-	CONSUMO
En el sistema		Al sistema		Del sistema		En el sistema		En el sistema
A	=	E	-	S	+	G	-	C



$$M_A = (m_f - m_i) = 0$$

$$M_A = (0,5 - 0,5)$$

$$= 0 \text{ kg de dis}$$

$$M_A = 0 \text{ kg de dis}$$

$$m_i = 0,5 \text{ kg de dis} \quad m_f = 0,5 \text{ kg de dis}$$



Ejemplo BM con Rx f. integral

En cuarto lugar se formula matemáticamente el problema

FORMA INTEGRAL (BM compuestos)

ACUMULACIÓN	=	ENTRADAS	-	SALIDAS	+	GENERACIÓN	-	CONSUMO
En el sistema		Al sistema		Del sistema		En el sistema (Rx)		En el sistema (Rx)

A		A	=	0	-	0	+	0	-	10
---	---	----------	---	---	---	---	---	---	---	----

B		A	=	0	-	0	+	20	-	0
---	--	----------	---	---	---	---	---	----	---	---



$$n_A = 10 \text{ mol A}$$



$$n_B = 20 \text{ mol B}$$

$$n_A^A = 0 - 0 + 0 - 10 \text{ (mol de A)}$$

$$n_A^A = -10 \text{ (mol de A)}$$

$$n_B^A = 0 - 0 + \left(\frac{2}{1}\right) \cdot 10 - 0 \text{ (mol de B)}$$

$$n_B^A = 20 \text{ (mol de B)}$$

La estequiometría es $A \rightarrow 2B$

Se habrán acumulado 20 moles de B en 30 min

Balances de materia

¿Qué y cuántos BM hay que plantear? Grados de libertad

gdl = 0

Bien especificado

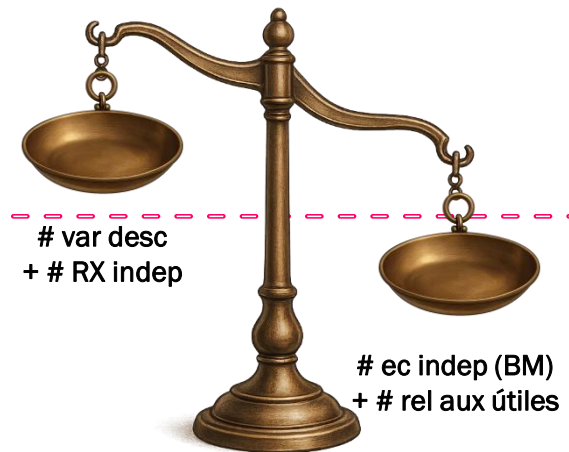
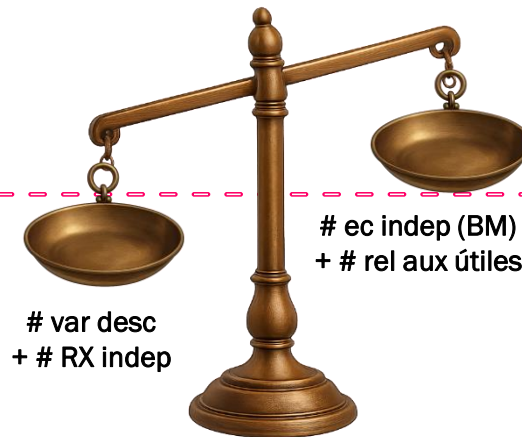
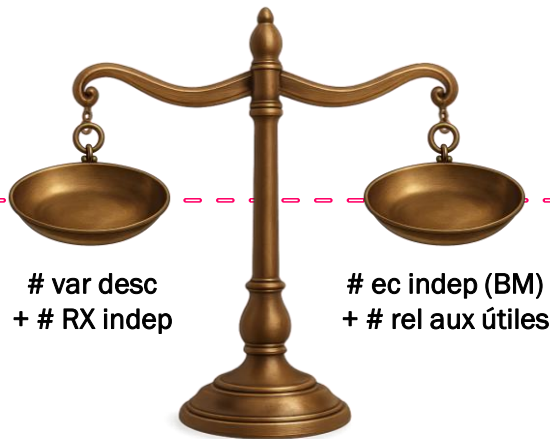
gdl > 0

Subespecificado

gdl < 0

Sobreespecificado

grados de libertad = # variables desconocidas + # reacciones independientes
- # ecuaciones independientes (BM) - # relaciones auxiliares útiles



Reactivo limitante

Definición

Un reactivo es limitante si está presente en menor proporción que la estequiometría relativa al resto de reactivos. El reactivo limitante será el primero en ser consumido completamente si la reacción fuera completa. El reactivo i que actúa como limitante será aquel que cumpla:

$$\min \left(\frac{n_i^E}{v_i} \right)$$

Donde n_i^E es el flujo molar de la especie reactiva i en la corriente de entrada y v_i es el coeficiente estequiométrico en la reacción.

Conversión

Definición

Normalmente, en ningún reactor tiene lugar una conversión completa del RL (tendría un tamaño muy grande). Típicamente el reactivo no reaccionado se separa de la corriente de salida y se recicla a la entrada del reactor. La conversión o conversión fraccional de un reactivo x_i es el ratio de la cantidad reaccionada con respecto a la cantidad alimentada al reactor:

$$x_i = \frac{n_i^C}{n_i^E} = \frac{n_i^E - n_i^S}{n_i^E}$$

Donde n_i^E es el flujo molar de la especie reactiva i en la corriente de entrada, n_i^S es el flujo molar de la especie reactiva i en la corriente de salida, y n_i^C es el flujo molar de la especie reactiva i que se consume como reactivo. Si no se especifica la conversión de un compuesto específico, la conversión se refiere a la del reactivo limitante.

Rendimiento

Definiciones

El rendimiento y_i mide qué fracción del producto deseado se obtiene respecto a una referencia. Existen tres definiciones habituales según la base elegida:

$$y_i^t = \frac{n_i^G}{n_i^a} \qquad y_i^E = \frac{n_i^G}{n_r^E} \qquad y_i^C = \frac{n_i^G}{n_r^C}$$

Donde n_i^G es el flujo molar de la especie i que se genera

y_i^t : teórico (máximo si el reactivo limitante reaccionara al 100% sin RX paralelas), siendo n_i^a la máxima cantidad de i que se formaría

y_i^E : respecto a la cantidad de reactivo r alimentado al sistema n_r^E

y_i^C : respecto a la cantidad de reactivo r efectivamente consumido n_r^C

El rendimiento es distinto de la selectividad, que compara producto deseado frente a productos no deseados

Selectividad

Definición

La selectividad de una especie/componente S_i es el número de moles de la especie/componente i deseada respecto al número de moles de los productos no deseados:

$$S_i = \frac{n_i^G}{\sum_1^I n_{i^* \neq i}^G}$$

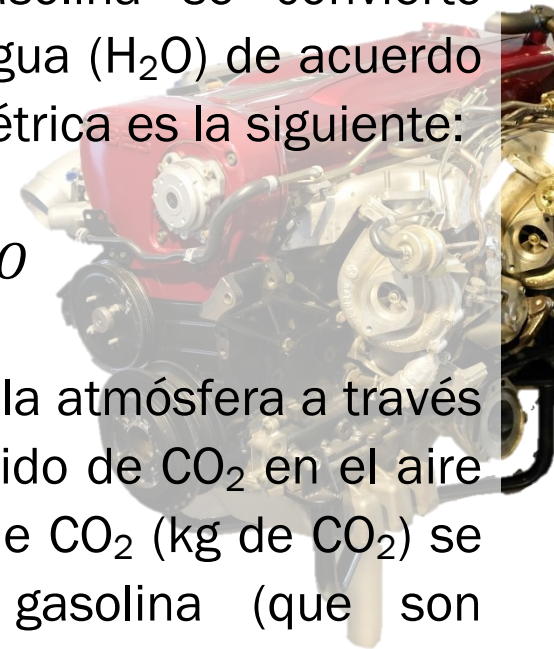
Donde n_i^G es el flujo molar/moles formados de la especie química deseada i ; $n_{i^* \neq i}^G$ es el flujo molar/moles de los productos i^* formados distintos de la especie/compuesto i para el total de los I productos formados.

Balances de materia con reacción química (I)

Un automóvil con un motor de combustión interna quema completamente 1 kmol de gasolina, que está compuesta en su totalidad por octano (C_8H_{18}), con una corriente de aire en una proporción tal que se aporta oxígeno (O_2) en cantidades estequiométricas. Como resultado, la gasolina se convierte completamente a dióxido de carbono (CO_2) y vapor de agua (H_2O) de acuerdo a una reacción de combustión, cuya ecuación estequiométrica es la siguiente:



Todo el CO_2 y H_2O producidos en la reacción se emiten a la atmósfera a través del tubo de escape del motor. Asumiendo que el contenido de CO_2 en el aire de entrada para la combustión es nulo, ¿qué cantidad de CO_2 (kg de CO_2) se emite a la atmósfera a partir de 1 kmol de gasolina (que son aproximadamente 158 L (0,72 kg/L), unos 3 tanques de gasolina de un coche familiar)?



Balances de materia con reacción química (I)

Solución:

BM en estado estacionario (expresado como forma integral)



1 kmol C_8H_{18}

?? kmol O_2



MOTOR COMBUSTIÓN



S kmol CO_2

P kmol H_2O

0 kmol C_8H_{18}

(conversión 100%)

Balance de materia al CO_2 en el motor de combustión:

$$0 = 0 - S + 1 \text{ kmol } \text{C}_8\text{H}_{18} \cdot \left(\frac{16 \text{ kmol } \text{CO}_2}{2 \text{ kmol } \text{C}_8\text{H}_{18}} \right) - 0 \quad S = 8 \text{ kmol } \text{CO}_2 = 352 \text{ kg } \text{CO}_2$$

No entra CO_2 con la corriente de aire luego $E=0$

Al reaccionar al 100% la G se corresponderá con lo que dicte la estequiometría

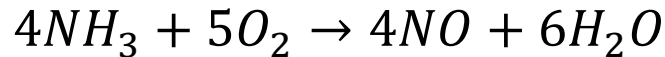
Balance de materia al H_2O en el motor de combustión:

$$0 = 0 - P + 1 \text{ kmol } \text{C}_8\text{H}_{18} \cdot \frac{18 \text{ kmol } \text{H}_2\text{O}}{2 \text{ kmol } \text{C}_8\text{H}_{18}} - 0 \quad P = 9 \text{ kmol } \text{H}_2\text{O} = 162 \text{ kg } \text{H}_2\text{O}$$



Ej. de BM con Rx

Se alimenta una corriente de amoníaco (NH_3) y oxígeno (O_2) a un reactor con flujos molares de 5 mol/h de NH_3 y 5 mol/h de O_2 . Como resultado de la oxidación, se obtiene el producto deseado, óxido nítrico (NO) así como agua, según la reacción:



La conversión fraccional con respecto al O_2 es del 0,5. Se pide calcular el valor del flujo molar de cada compuesto existente en la corriente de salida.



Ej. de BM con Rx

En primer lugar creamos un dbp
en segundo lugar, identificamos variables:

$$F_1 = \text{--- mol/h}$$

$$F_2 = \text{--- mol/h}$$

$$n_1^{\text{NH}_3} = 5 \text{ mol/h}$$

$$x_i = ?$$



NH₃ burner



$$n_1^{\text{O}_2} = 6 \text{ mol/h}$$

$$\text{CONVERSIÓN} = 0,5$$

EE, Rx



Ej. de BM con Rx

En este caso, tenemos un flujo molar de entrada, y no tenemos flujos molar por lo que el BM total no será de aplicación. Para $\# \text{gde}$, planteamos un BM a cada compuesto:

$i \text{ en mol/h!}$

$\text{NH}_3, \text{O}_2, \text{NO}, \text{H}_2\text{O}$

y planteamos $A = E - S + G - C$

por Estado externo

El BM total en masa sí es aplicable. Basta convertir los flujos molares a máscos mediante las masas molares. Lo que **NO** se conserva en general con reacción química es el flujo molar total

Ej. de BM con Rx



$$\text{BM } \text{NH}_3 \quad 0 = S - S_{\text{NH}_3} + 0 - 5 \cdot 0,5 \left(\frac{4}{5} \right)$$

$$\text{BM } \text{O}_2 \quad 0 = S - S_{\text{O}_2} + 0 - 5 \cdot 0,5$$

$$\text{BM } \text{NO} \quad 0 = 0 - S_{\text{NO}} + 5 \cdot 0,5 \left(\frac{4}{5} \right) - 0$$

$$\text{BM } \text{H}_2\text{O} \quad 0 = 0 - S_{\text{H}_2\text{O}} + 5 \cdot 0,5 \left(\frac{6}{5} \right) - 0$$



¡Es clave la relación de coef. estequiométricos!



Ej. de BM con Rx

$$\text{BM } \text{NH}_3 \quad 0 = S - S_{\text{NH}_3} + 0 - 5 \cdot 0,5 \left(\frac{1}{3} \right)$$

$$\text{BM } \text{O}_2 \quad 0 = S - S_{\text{O}_2} + 0 - 5 \cdot 0,5$$

$$\text{BM } \text{NO} \quad 0 = 0 - S_{\text{NO}} + 5 \cdot 0,5 \left(\frac{4}{5} \right) - 0$$

$$\text{BM } \text{H}_2\text{O} \quad 0 = 0 - S_{\text{H}_2\text{O}} + 5 \cdot 0,5 \left(\frac{6}{5} \right) - 0$$

Por la definición de conversión, es lógico que se obtenga que $S_{\text{O}_2} = 2,5 \text{ mol/h}$



Ej. de BM con Rx

$$\text{BM } \text{NH}_3 \quad 0 = S - S_{\text{NH}_3} + 0 - 5 \cdot 0,5 \left(\frac{4}{5} \right)$$

$$\text{BM } \text{O}_2 \quad 0 = S - S_{\text{O}_2} + 0 - 5 \cdot 0,5$$

$$\text{BM } \text{NO} \quad 0 = 0 - S_{\text{NO}} + 5 \cdot 0,5 \left(\frac{4}{5} \right) - 0$$

$$\text{BM } \text{H}_2\text{O} \quad 0 = 0 - S_{\text{H}_2\text{O}} + 5 \cdot 0,5 \left(\frac{6}{5} \right) - 0$$

$$S_{\text{NH}_3} = 3 \text{ mol/h } \text{NH}_3 \quad S_{\text{O}_2} = 2,5 \text{ mol/h } \text{O}_2$$

$$S_{\text{NO}} = 2 \text{ mol/h } \text{NO} \quad S_{\text{H}_2\text{O}} = 3 \text{ mol/h } \text{H}_2\text{O}$$



Ej. de BM con Rx

El flujo total molar será la suma de los flujos individuales:

$$F_2 = 3 + 2,5 + 2 + 3 = 10,5 \text{ mol/h}$$

x representa fracción molar

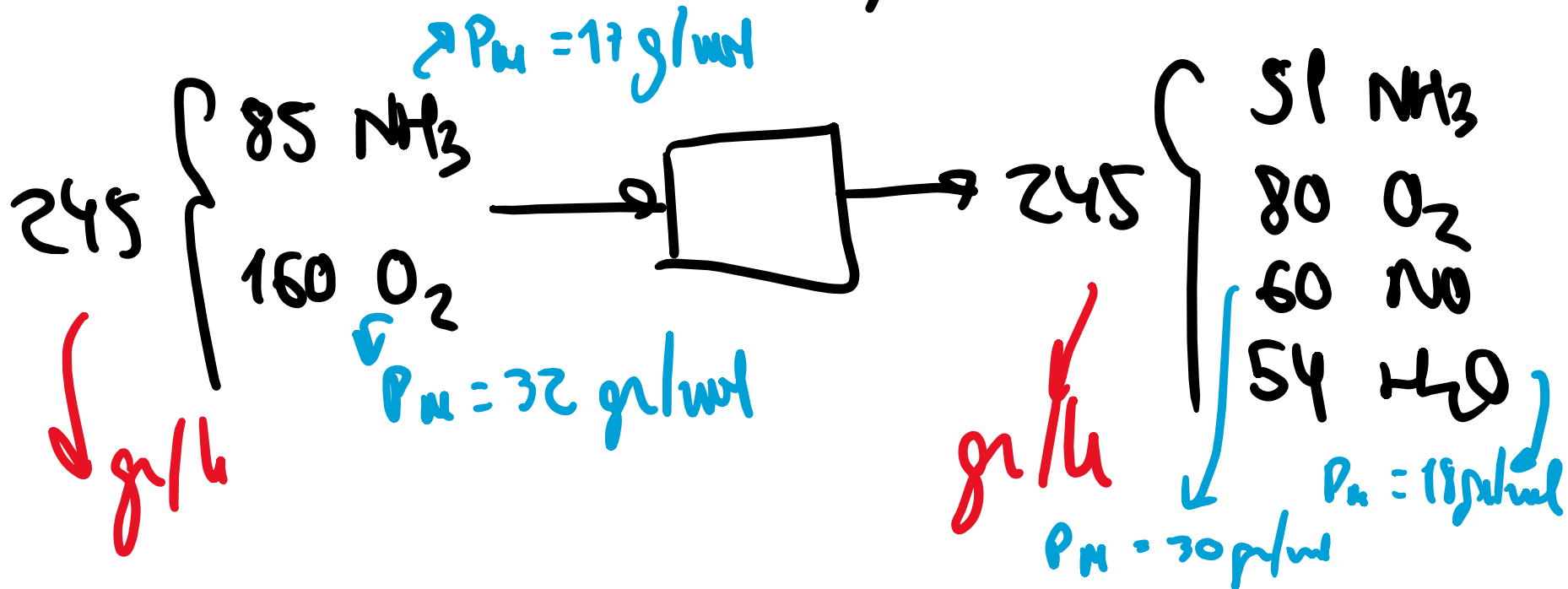
luego: $x_2^{\text{NH}_3} = 24\%$ $x_2^{\text{O}_2} = 24\%$
 $x_2^{\text{NO}} = 19\%$ $x_2^{\text{H}_2\text{O}} = 29\%$





Ej. de BM con Rx

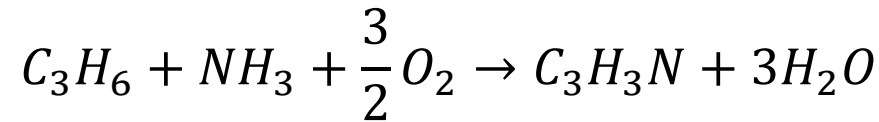
Comprobamos que se cumple que flujo molar de entrada es igual a flujo molar de salida (en EE $\Rightarrow A=0$)





Ej. de BM con Rx

Se alimenta una corriente de propileno a un reactor junto con amoniaco y aire. La composición molar de la corriente de entrada es de 10% en propileno (C_3H_6), 12% en amoniaco (NH_3) y 78% en aire. Como resultado, se obtiene el producto deseado, acrilonitrilo (C_3H_3N) así como agua, según la reacción:



Se conoce que la conversión fraccional del reactivo limitante es del 30%. Tomando como base 100 mol/h de corriente de entrada, se pide calcular el valor del flujo molar de cada compuesto existente en la corriente de salida.



Ej. de BM con Rx

En primer lugar creamos un dbp
en segundo lugar, identificamos variables:

$$F_1 = 100 \text{ mol/h} \rightarrow \text{base de cálculo}$$

$$x_1^{\text{C}_2\text{H}_6} = 0,1$$

$$x_1^{\text{H}_2} = 0,12$$

$$x_1^{\text{O}_2} = 0,78 \cdot 0,21 \\ = 0,164$$

$$x_1^{\text{N}_2} = 0,78 \cdot 0,79 \\ = 0,616$$



$$F_2 = \text{--- mol} \\ x_i ??$$

$$\text{CONVERSIÓN} = 0,3 \\ \text{sobre RL}$$

EE, Rx



Ej. de BM con Rx

En este caso, tenemos un flujo molar de entrada, y no tenemos flujos molar por lo que el BM total no será de aplicación. Para $\# \text{gdl}$, planteamos un BM a cada compuesto: **¡en mol/h!**

C_2H_6 , NH_3 , O_2 , N_2 , $\text{C}_2\text{H}_3\text{N}$ y H_2O

Y planteamos $A \overset{=0}{=} E - S + G - C$
por Estado estacionario



Ej. de BM con Rx

Dado que la conversión fraccional x refiere al reactivo limitante (RL) es necesario conocer cuál es:

$$\min \left(\frac{n_i^E}{\nu_i} \right) = \min \left(\frac{10}{1}, \frac{12}{1}, \frac{16,4}{3/2} \right) =$$

Handwritten red annotations above the equation:
100 · 0,1 (above 10)
100 · 0,12 (above 12)
100 · 0,78 · 0,21 (above 16,4)

$$= \min(10, 12, 10,9) = 10$$

C3H6 es el reactivo limitante



Ej. de BM con Rx

$$\text{BM } \text{C}_2\text{H}_6 \quad 0 = 10 - S_{\text{C}_2\text{H}_6} + 0 - 10 \cdot 0,3$$

$$\text{BM } \text{NH}_3 \quad 0 = 12 - S_{\text{NH}_3} + 0 - 10 \cdot 0,3 \left(\frac{1}{1}\right)$$

$$\text{BM } \text{O}_2 \quad 0 = 16,4 - S_{\text{O}_2} + 0 - 10 \cdot 0,3 \left(\frac{3}{1}\right)$$

$$\text{BM } \text{N}_2 \quad 0 = 61,6 - S_{\text{N}_2} + 0 - 0$$

$$\text{BM } \text{C}_3\text{H}_3\text{N} \quad 0 = 0 - S_{\text{C}_3\text{H}_3\text{N}} + 10 \cdot 0,3 - 0$$

$$\text{BM } \text{H}_2\text{O} \quad 0 = 0 - S_{\text{H}_2\text{O}} + 10 \cdot 0,3 \left(\frac{3}{1}\right)$$

Todos en unidades de mol/h



Ej. de BM con Rx

Al resolver el anterior sistema de ec:

$$S_{C_2H_6} = 7 \text{ mol/h}$$

$$S_{NH_3} = 9 \text{ mol/h}$$

$$S_{O_2} = 11,9 \text{ mol/h}$$

$$S_{N_2} = 61,6 \text{ mol/h}$$

$$S_{C_2H_5N} = 3 \text{ mol/h}$$

$$S_{H_2O} = 9 \text{ mol/h}$$



Ej. de BM con Rx

Comprobamos el BM total

