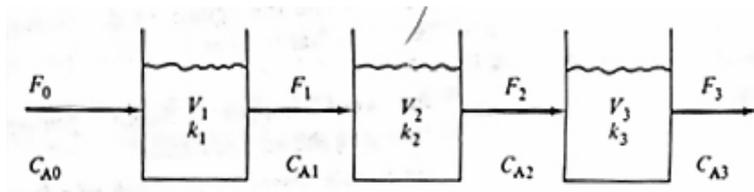


## CLASE XX

### PROCESOS Y SISTEMAS QUIMICOS

#### Algunos modelos matemáticos

##### I.- TAC en serie, isotérmicos, volumen constante



#### Hipótesis del modelo

- Tres tanques perfectamente mezclados, mezcla binaria de A y B, reacción de primer orden en el líquido.
- Temperaturas y volúmenes en los tres tanques pueden ser diferentes, pero constantes.
- Densidad se supone constante en el sistema.

#### 1. Ecuación de continuidad total

$$\frac{d(\rho V_1)}{dt} = \rho F_0 - \rho F_1 = 0$$

es decir,  $F_0 = F_1$ .

#### 2. Balances de masa total en los tanques 2 y 3

$$F_0 = F_1 = F_2 = F_3 = F$$

#### 3. Ecuaciones de continuidad por componentes

$$V_1 \frac{dC_{A1}}{dt} = F (C_{A0} - C_{A1}) - V_1 k_1 C_{A1}$$

$$V_2 \frac{dC_{A2}}{dt} = F (C_{A1} - C_{A2}) - V_2 k_2 C_{A2}$$

$$V_3 \frac{dC_{A3}}{dt} = F (C_{A2} - C_{A3}) - V_3 k_3 C_{A3}$$

### Velocidades específicas de reacción (Ley de Arrhenius)

$$k_n = \alpha e^{-E/RT_n}$$

con  $n = 1, 2, 3$

Con  $F$  constante y los volúmenes y temperaturas iguales en los tres tanques, las ecuaciones anteriores quedan:

$$\begin{aligned}\frac{dC_{A_1}}{dt} + \left(k + \frac{1}{\tau}\right) C_{A_1} &= \frac{1}{\tau} C_{A_0} \\ \frac{dC_{A_2}}{dt} + \left(k + \frac{1}{\tau}\right) C_{A_2} &= \frac{1}{\tau} C_{A_1} \\ \frac{dC_{A_3}}{dt} + \left(k + \frac{1}{\tau}\right) C_{A_3} &= \frac{1}{\tau} C_{A_2}\end{aligned}$$

Donde  $\tau = \frac{V}{F}$ , tiempo de residencia, se mide en u.de t.

### TAC con volumen variable

- Reactor 1

$$\begin{aligned}\frac{dV_1}{dt} &= F_0 - F_1 \\ \frac{d}{dt}V_1 C_{A_1} &= F_0 C_{A_0} - F_1 C_{A_1} - V_1 k_1 (C_{A_1})^n\end{aligned}$$

- Reactor 2

$$\begin{aligned}\frac{dV_2}{dt} &= F_1 - F_2 \\ \frac{d}{dt}V_2 C_{A_2} &= F_1 C_{A_1} - F_2 C_{A_2} - V_2 k_2 (C_{A_2})^n\end{aligned}$$

- Reactor 3

$$\begin{aligned}\frac{dV_3}{dt} &= F_2 - F_3 \\ \frac{d}{dt}V_3 C_{A_3} &= F_2 C_{A_2} - F_3 C_{A_3} - V_3 k_3 (C_{A_3})^n\end{aligned}$$

Se necesita también una relación entre la capacidad del tanque y el caudal.

$$\begin{aligned}F_1 &= f(V_1) \\ F_2 &= f(V_2) \\ F_3 &= f(V_3)\end{aligned}$$

### Dos tanques calefaccionados

- Dos tanques en serie perfectamente mezclados, sin RQ
- Datos:  $F = cte., \rho, c_P, V_1, V_2.$
- Temperaturas conocidas en el estado inicial, estacionario:  $T_0, T_1, T_2$
- Serpentina de calentamiento en el primer tanque, con vapor.
- $Q_1$  calor agregado en el tanque 1 por u. de t.

1. Balance de energía en el tanque 1

$$\frac{d(\rho C_P V_1 T_1)}{dt} = \rho C_P (F_0 T_0 - F_1 T_1) + Q_1$$

2. Balance de energía en el tanque 2

$$\frac{d(\rho C_P V_2 T_2)}{dt} = \rho C_P (F_1 T_1 - F_2 T_2)$$

Los caudales son constantes:

$$F_0 = F_1 = F_2 = F$$

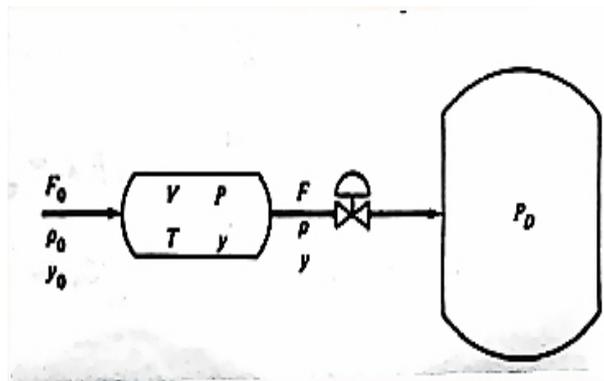
También son constantes  $\rho, V, C_P.$

Se obtiene

$$\rho C_P V_1 \frac{d(T_1)}{dt} = \rho C_P F (T_0 - T_1) + Q_1$$

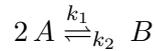
$$\rho C_P V_2 \frac{d(T_2)}{dt} = \rho C_P F (T_1 - T_2)$$

### TAC presurizado, fase gaseosa



- Reactor perfectamente mezclado
- $T = cte$ (sistema isotérmico),  $V = cte.$
- Reacción reversible.
- Presión en el recipiente:  $P$  (variable en el tiempo)

- Fracción molar del reactivo A en el recipiente:  $y$  (variable en el tiempo)
- Corriente de alimentación:  $F_0, \rho_0, y_0$
- Reacción:



- Caudal a través de la válvula de control

$$F = C_v \sqrt{\frac{P - P_D}{\rho}}$$

donde  $C_v$ : coef. de la válvula

- $\rho = f(P, \text{Composicion})$

$$\rho = \frac{MP}{RT} = [yM_A + (1-y)M_B] \frac{P}{RT}$$

donde:  $M$ : peso molecular promedio

$M_A$ : peso molecular de A

$M_B$ : peso molecular de B

- Concentración de A en el reactor

$$C_A = \frac{Py}{RT}$$

- Velocidad de la reacción directa

$$R_d = k_1 C_A^{1.5} = -\frac{1}{2V} \left( \frac{dn_A}{dt} \right)_{R_d} = \frac{1}{V} \left( \frac{dn_B}{dt} \right)_{R_d}$$

- Velocidad de la reacción inversa

$$R_i = k_2 C_B = \frac{1}{2V} \left( \frac{dn_A}{dt} \right)_{R_i} = -\frac{1}{V} \left( \frac{dn_B}{dt} \right)_{R_i}$$

### Balances de masa total y por componentes

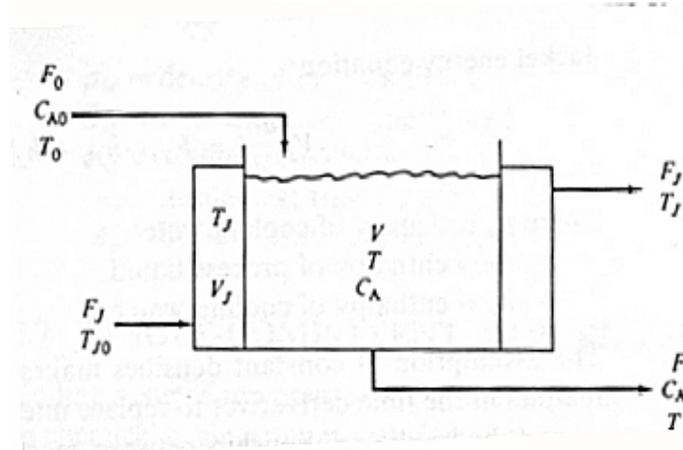
1. Balance total

$$V \frac{d\rho}{dt} = \rho_0 F_0 - \rho F$$

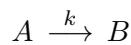
2. Balance del componente A

$$V \frac{dC_A}{dt} = F_0 C_{A0} - F C_A - 2V k_1 (C_A)^{1.5} + 2V k_2 C_B$$

**TAC no isotérmico**



- TAC perfectamente mezclado, temp. variable en el tiempo.
- Reacción irreversible, exotérmica
- Pérdidas de calor despreciables,  $\rho$  constante.
- Camisa de enfriamiento:  
Caudal  $F_j$ , Temp. de entrada  $T_{j0}$ , Vol. de agua  $V_j = cte.$



a.- Camisa de enfriamiento perfectamente mezclada  
Sup. temperatura  $T_j$  constante en la camisa.

$$Q = U A_H (T - T_j)$$

donde:  $Q$ : calor transferido por u. de T.  
 $U$ : coef. global de transf. de calor  
 $A_H$ : área de transf. de calor  
 $T$ : temp. del proceso  
 $T_j$ : temp. del agua de enfr.

- Ec. de continuidad total en el reactor

$$\frac{dV}{dt} = F_0 - F$$

- Ec. de continuidad del componente A en el reactor

$$\frac{dV C_A}{dt} = F_0 C_{A0} - F C_A - V k (C_A)^n$$

- Ec. de energía en el reactor

$$\rho \frac{dV h}{dt} = \rho(F_0 h_0 - F h) - \lambda V k (C_A)^n - U A_H (T - T_j)$$

- Ec. de energía en la camisa

$$\rho_j V_j \frac{dh_j}{dt} = \rho_j F_j (h_{j0} - h_j) + U A_H (T - T_j)$$

donde:  $\rho_j$ : densidad del agua de enfriamiento

$h$ : entalpía del líquido de proceso

$h_j$ : entalpía del agua

- Relación entre el caudal y el volumen

$$F = K_V (V - V_{min})$$

- Entalpía

$$h = C_p T$$

$$h_j = C_j T_j$$

Las cinco ecuaciones que describen el proceso son:

$$\begin{aligned} \frac{dV}{dt} &= F_0 - F \\ \frac{dV C_A}{dt} &= F_0 C_{A0} - F C_A - V (C_A)^n \alpha e^{-E/RT} \\ \rho C_P \frac{dV T}{dt} &= \rho C_P (F_0 T_0 - F T) - \lambda V (C_A)^n \alpha e^{-E/RT} - U A_H (T - T_j) \\ \rho_j V_j C_j \frac{dT_j}{dt} &= \rho_j F_j C_j (T_{j0} - T_j) + U A_H (T - T_j) \\ F &= K_V (V - V_{min}) \end{aligned}$$

#### b.- Camisa de enfriamiento flujo-tapón

- Temperatura media en la camisa

$$T_{jA} = \frac{T_{j0} + T_{js}}{2}$$

- La ecuación de energía en la camisa queda

$$\rho_j V_j C_j \frac{dT_{jA}}{dt} = \rho_j F_j C_j (T_{j0} - T_{js}) + U A_H (T - T_{jA})$$