

**fcfm**

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA  
QUÍMICA, BIOTECNOLOGÍA  
Y MATERIALES  
FACULTAD DE CIENCIAS  
FÍSICAS Y MATEMÁTICAS  
UNIVERSIDAD DE CHILE

# Auxiliar Pre-C3

IQ3301 - Análisis de Procesos

**BM y BE no estacionario con y  
sin reacción**

# Balance de masa

Acumulación = Entrada - Salida + Generación - Consumo

**Con densidades**

$$\frac{d(m)}{dt} = \frac{d(\rho \times V)}{dt} = \rho_{in} \times F_{in} - \rho_{out} \times F_{out}$$

**Con concentraciones**

$$\frac{d(m)}{dt} = \frac{d(C \cdot V)}{dt} = C_{in} \cdot F_{in} - C \cdot F_{out}$$

Despreciando flujos por otras superficies\*

# Balance de masa

Acumulación = Entrada - Salida + Generación - Consumo

Con densidades  $\frac{d(m)}{dt} = \frac{d(\rho \times V)}{dt} = \rho_{in} \times F_{in} - \rho_{out} \times F_{out}$

Con concentraciones  $\frac{d(m)}{dt} = \frac{d(C \cdot V)}{dt} = C_{in} \cdot F_{in} - C \cdot F_{out}$

Despreciando flujos por otras superficies\*

Llegar a la EDO  
y resolver

$$\frac{dx}{dt} + a(t)x = b(t) \rightarrow u(t) = e^{\int a(t) dt}$$

# Balance de masa

**Con Reacción:** Acumulación = Entrada - Salida + Generación - Consumo

$$\frac{d(m_A)}{dt} = \frac{d(C_A \times V)}{dt} = C_{A,in} \times F - C_{A,out} \times F + r_A \times V$$



1. Elemental

$$r_C = -\frac{c}{a} r_A = \frac{c}{a} k \times C_A^a \times C_B^b$$

2. Primer orden

$$r_C = -\frac{c}{a} r_A = \frac{c}{a} \times k \times C_A$$

# Balance de energía

Acumulación = Entrada - Salida + Calor - Trabajo

**Ecuación original:**

$$\frac{d(\rho V(\hat{U} + \hat{E}_K + \hat{E}_P))}{dt} = \rho_e q_e (\hat{U} + \hat{E}_K + \hat{E}_P)_{S1} - \rho_s q_s (\hat{U} + \hat{E}_K + \hat{E}_P)_{S2} + B + \dot{Q} - \dot{W}_T$$

# Balance de energía

Acumulación = Entrada - Salida + Calor - Trabajo

**Ecuación original:**

$$\frac{d(\rho V(\hat{U} + \hat{E}_K + \hat{E}_P))}{dt} = \rho_e q_e (\hat{U} + \hat{E}_K + \hat{E}_P)_{S1} - \rho_s q_s (\hat{U} + \hat{E}_K + \hat{E}_P)_{S2} + B + \dot{Q} - \dot{W}_T$$

**Ecuación simplificada**

- $E_k \ll U$
- $E_p \ll U$

- $U = H + pV$
- $W_t = pV + W_e$

- $B = 0$
- $W_e = 0$

- $d(pV) = 0$   
en sistemas líquidos

# Balance de energía

Acumulación = Entrada - Salida + Calor - Trabajo

## Ecuación simplificada

- $E_k \ll U$
- $E_p \ll U$

- $U = H + pV$
- $W_t = pV + W_e$

- $B = 0$
- $W_e = 0$

- $d(pV) = 0$   
en sistemas líquidos

$$\frac{dH}{dt} = \frac{d(\rho V \bar{C}_p T)}{dt} = \rho_e q_e \hat{H}_e - \rho_s q_s \hat{H}_s + \dot{Q}$$

# Balance de energía

Acumulación = Entrada - Salida + Calor - Trabajo

Ecuación original:

$$\frac{d(\rho V(\hat{U} + \hat{E}_K + \hat{E}_P))}{dt} = \rho_e q_e (\hat{U} + \hat{E}_K + \hat{E}_P)_{S1} - \rho_s q_s (\hat{U} + \hat{E}_K + \hat{E}_P)_{S2} + B + \dot{Q} - \dot{W}_T$$

Ecuación simplificada

- $E_k \ll U$
- $E_p \ll U$
- $U = H + pV$
- $W_t = pV + W_e$
- $B = 0$
- $W_e = 0$
- $d(pV) = 0$   
en sistemas líquidos

$$\frac{dH}{dt} = \frac{d(\rho V \bar{C}_p T)}{dt} = \rho_e q_e \hat{H}_e - \rho_s q_s \hat{H}_s + \dot{Q}$$

## Recordando Entalpía

### Sin cambio de fase

$$H(T) = \rho V \Delta \hat{H}_f + \rho V \bar{C}_p (T - T_{ref})$$

### Con cambio de fase

$$H(T) = \rho V \Delta \hat{H}_f + \rho V \bar{C}_{p, fase1} (T_{cf} - T_{ref}) + \lambda + \rho V \bar{C}_{p, fase2} (T - T_{cf})$$

$\Delta H_{fi}^0$ : calor de formación estándar de  $i$  a  $25^\circ\text{C}$  ( $T_{Ref}$ ) y 1 atm

$C_{pi}$ : calor específico o capacidad calorífica

$\lambda_i$ : calor de cambio de fase de  $i$  a la temperatura de cambio de fase (ej,  $\Delta H_{fusion}$ )

$T_{cf}$ : temperatura de cambio de fase

$T_f$ : temperatura final

$T_{Ref}$ : temperatura de referencia

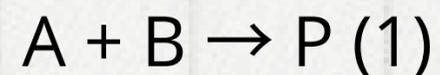
Llegar a la EDO  
y resolver

$$\frac{dx}{dt} + a(t)x = b(t) \longrightarrow u(t) = e^{\int a(t) dt}$$

# Ejercicio 1

# Pregunta 1

Usted se encuentra realizando su primera practica profesional en la Farmacéutica PharmAnalysis, la que se dedica a la producción del P-Fármaco (P), muy utilizado en el tratamiento de una enfermedad relevante. No obstante, se han reportado síntomas adversos relacionados a la exposición al producto secundario de reacción, R-Farmaco (R) en concentraciones sobre  $C \star R$ . Debido a lo anterior, la ingeniera jefe de la planta de producción documenta el siguiente mecanismo de reacción:



La producción se realiza en un reactor Batch. Su labor en Farmacéutica PharmAnalysis corresponde a la limpieza segura del reactor y la propuesta de mejora del proceso. Por su lado, usted investiga que ambas reacciones son de primer orden con respecto al reactante en común A. Para cumplir con lo solicitado, usted propone el siguiente montaje experimental:

# Pregunta 1

Llenar el reactor con una concentración inicial  $[A]_0$  y  $[B]_0$  [mol/L] de A y B respectivamente en un volumen inicial  $V_0$  [L], y a continuación, permitir un flujo de evacuación del reactor constante  $F_S$  [L/h]. Considere que el volumen del reactor puede ser descrito por la expresión  $V(t) = V_0 - F_S \cdot t$ . Cabe destacar que cada reacción tiene constante cinéticas  $k_1$  y  $k_2$  [1/h], respectivamente.

a) Plantee el balance de masa para describir el cambio en la concentración del reactivo A en función del tiempo e integre para obtener  $C_A(t)$  y una expresión para la conversión de A  $\alpha(t)$ .

b) Plantee el balance de masa para describir el cambio en la concentración del producto indeseado R en función del tiempo e integre para obtener  $C_R(t)$  en función de los datos y variables conocidas.

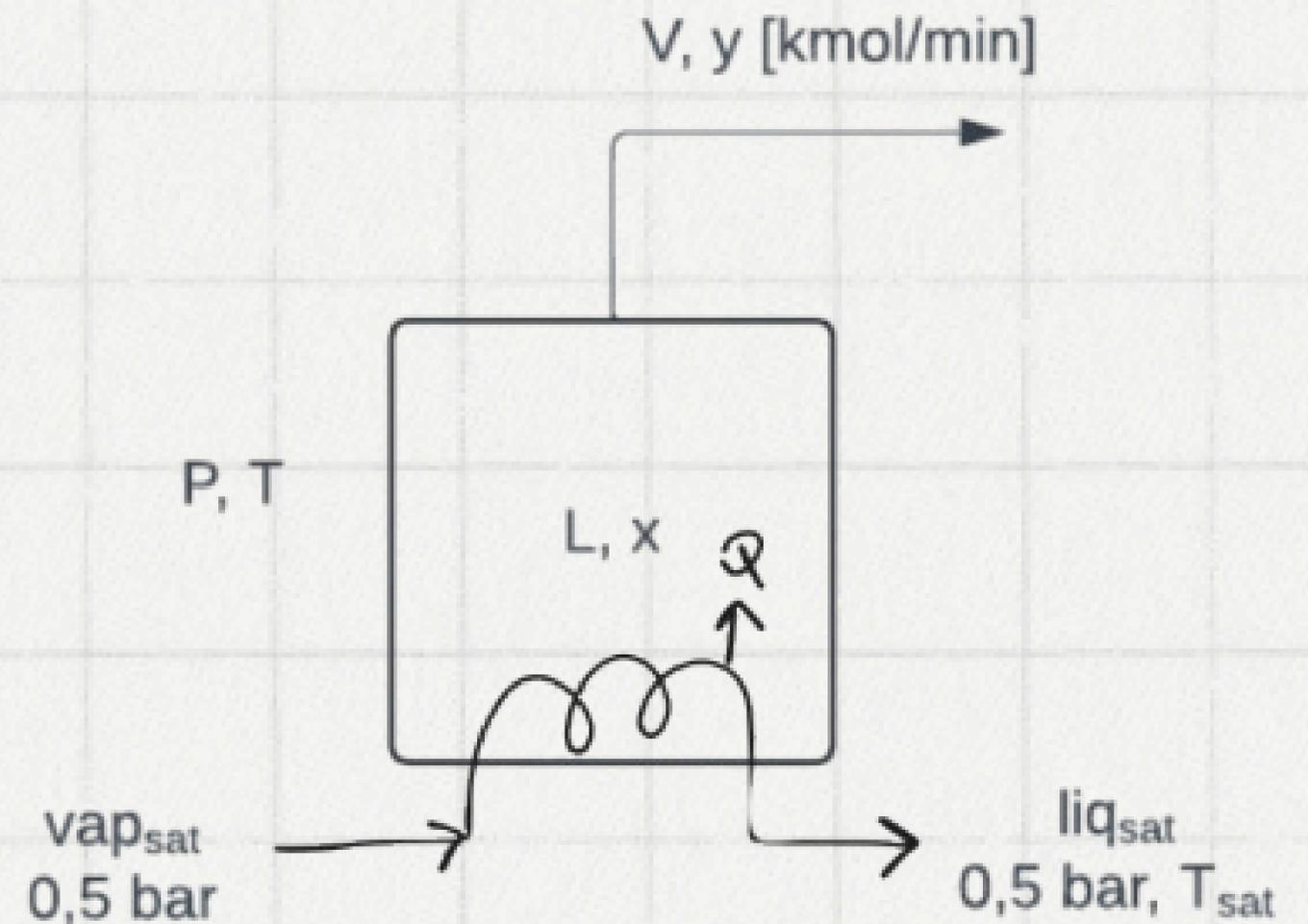
c) Considerando  $k_1 = 0.07$  [1/h],  $k_2 = 0.002$  [1/h],  $[A]_0 = [B]_0 = 1$  [mol/L],  $V_0 = 1000$  [L], y  $F_S = 50$  [L/h]. Determine la conversión del reactivo A cuando se alcanza el valor crítico  $C \cdot R = 0.01$  [mol/L] y si esta condición se alcanza antes de vaciarse el reactor.

# Ejercicio 2

# Pregunta 2

Una mezcla líquida (1000 kmol) que contiene, en un inicio 70 % molar de n-pentano y 30 % molar de n-hexano a 25°C, se vaporiza en forma parcial en un aparato de destilación semibatch de una etapa conocido como alambique de Rayleigh.

La solución en el alambique se vaporiza a una velocidad de 1,7 kmol/min. El calor añadido al alambique lo proporciona un serpentín, y está dado por la expresión:  $\dot{Q} = UA(T_{\text{steam}} - T)$ , donde  $UA = 2700 \text{ kJ}/(\text{min} \cdot \text{K})$  es el coeficiente de transferencia de calor,  $T_{\text{steam}} [\text{K}]$  es la temperatura del agua que circula dentro del serpentín y  $T [\text{K}]$  es la temperatura de la solución líquida. Al serpentín ingresa vapor saturado a 0,5 bar y este emerge como líquido a la temperatura de saturación.



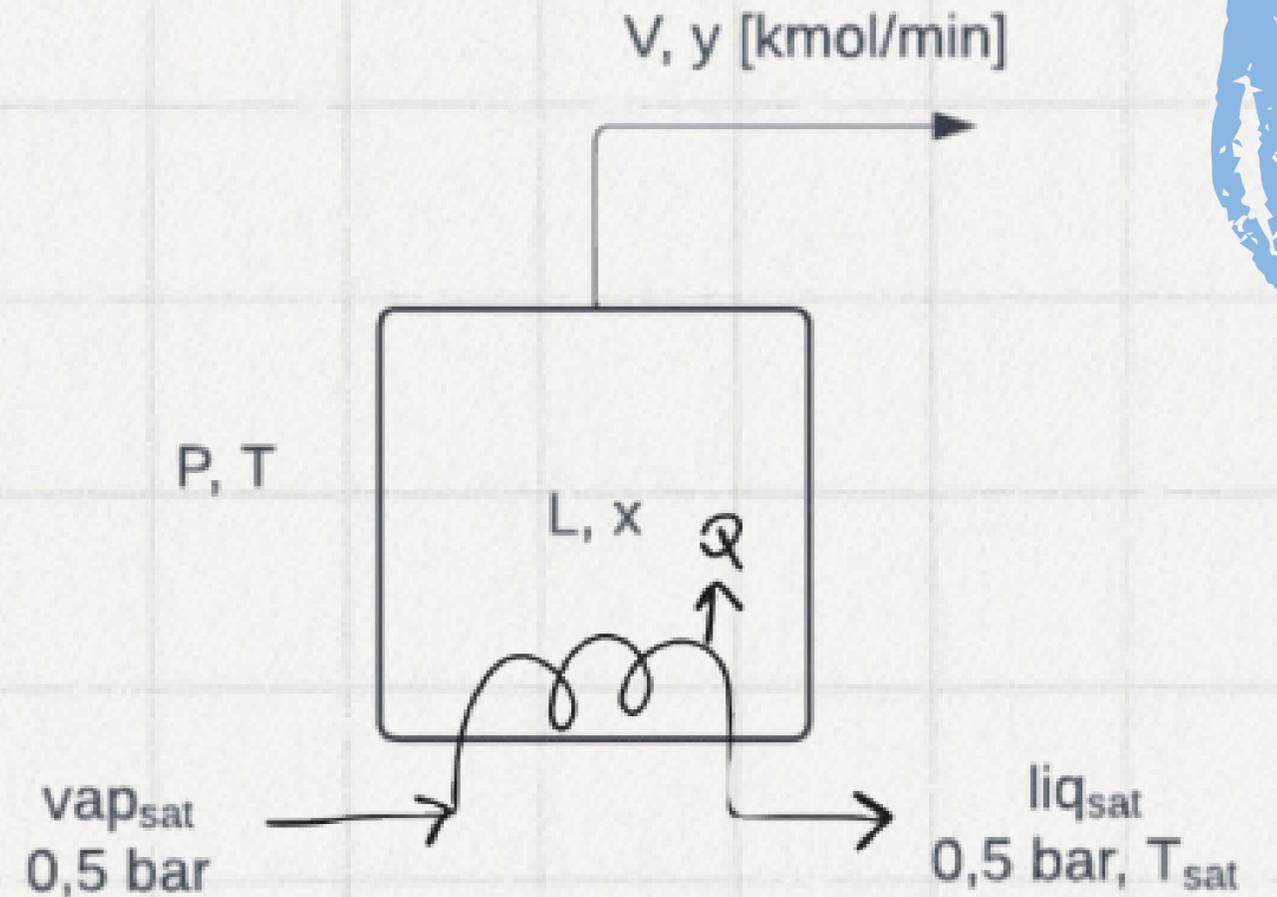
# Pregunta 2

a) Tomando el líquido residual dentro del alambique (L) como sistema:

- Escriba un balance diferencial de moles totales una vez iniciada la vaporización (balance global).
- Escriba un balance para el pentano y encuentre una expresión que permita obtener la fracción molar de pentano en el líquido ( $x$ ) como función del tiempo.

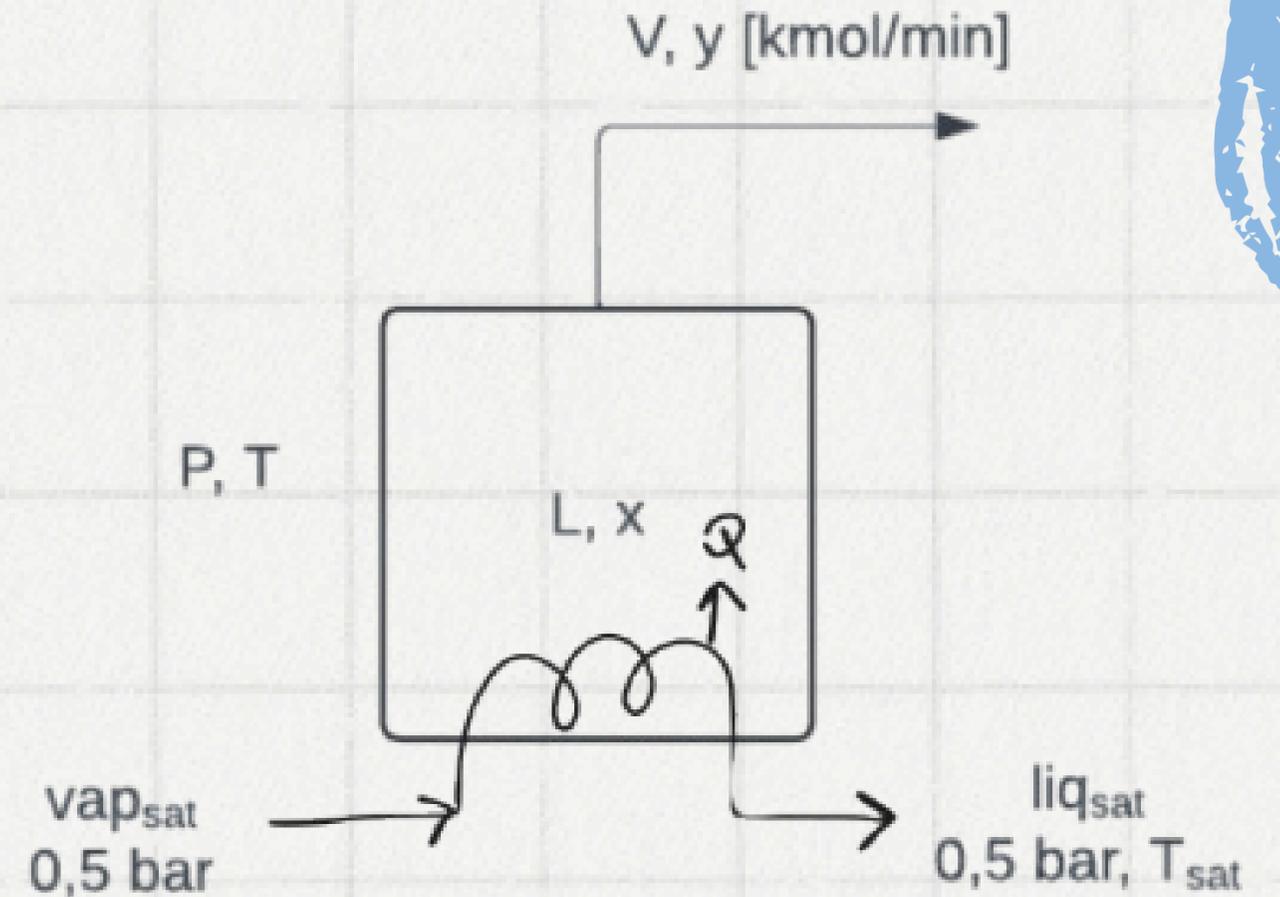
Considere que el producto en fase vapor y el líquido están en equilibrio y se relacionan mediante la expresión:

$$y = \frac{1,078x}{x + 0,078}$$



# Pregunta 2

- b) Plantee el balance de energía para el líquido dentro del alambique y determine una expresión para la variación de la temperatura al interior del sistema en función del tiempo, antes de que se inicie la vaporización.
- Determine la temperatura del sistema en estado estacionario y el tiempo requerido para alcanzar un **99% de ésta**.
- Si el sistema comienza a generar vapor al alcanzar los  $60,1^{\circ}\text{C}$ , determine el tiempo requerido para iniciar la vaporización desde que se carga el sistema.



$$\tau \frac{dT(t)}{dt} + T(t) = T_{SS}$$

$$T(t) = T_{SS} - (T_{SS} - T_0)e^{-t/\tau}$$

# Pregunta 2

Datos:

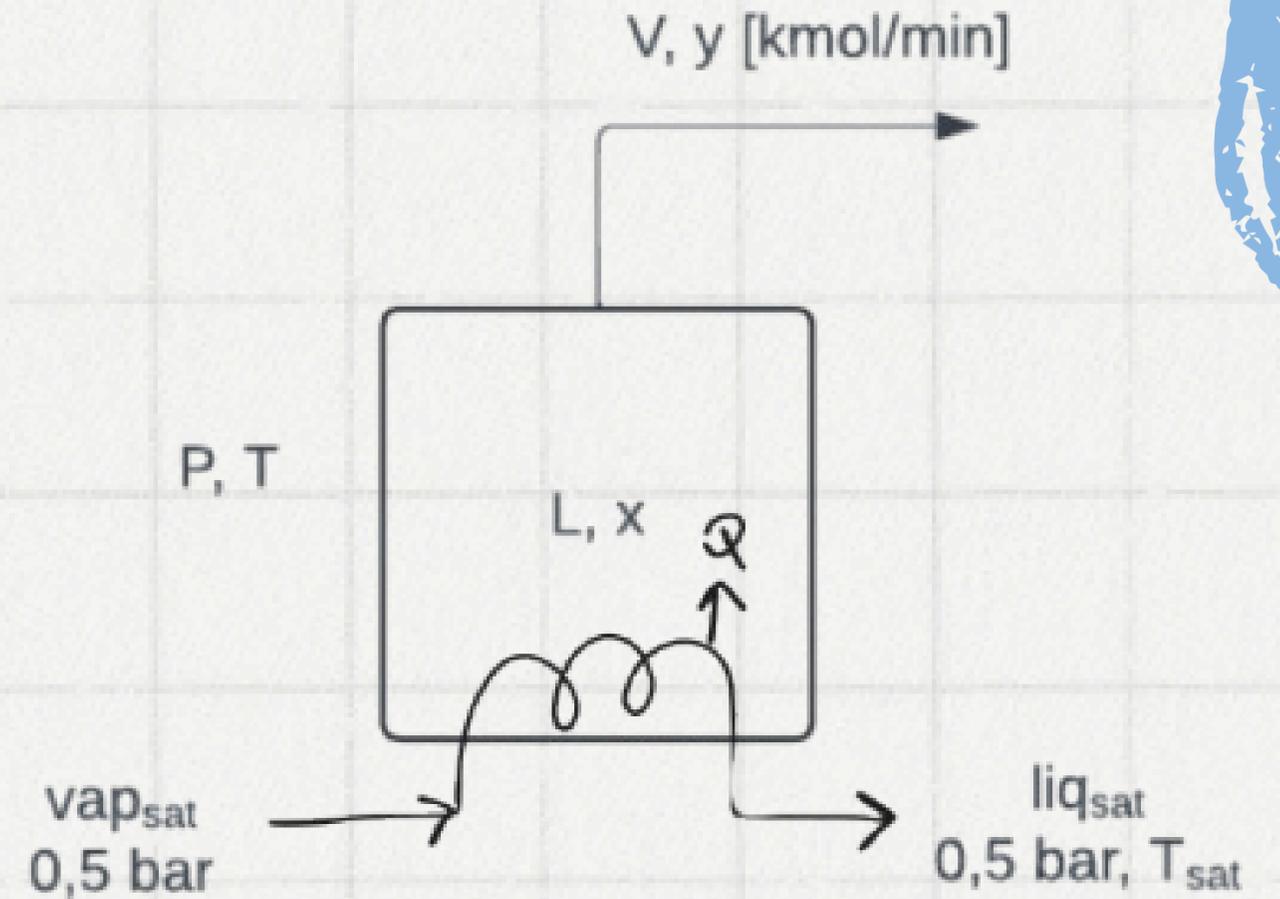
- $T_{sat} = 60,1 \text{ } ^\circ\text{C}$
- $C_{pL} = 190 \text{ kJ/kmol}\cdot\text{K}$
- $C_{pV} = 120 \text{ kJ/kmol}\cdot\text{K}$

$\hat{H}$ : [kJ/kg H<sub>2</sub>O]

P(bar) ( $T_{sat}$ , °C)	Agua sat.	Vapor sat.	Temperatura (°C) —							
			50	75	100	150	200	250	300	350
0.0 (—)	$\hat{H}$ — $\hat{O}$ — $\hat{V}$ —	— — —	2595 2446 —	2642 2481 —	2689 2517 —	2784 2589 —	2880 2662 —	2978 2736 —	3077 2812 —	3177 2890 —
0.1 (45.8)	$\hat{H}$ 191.8 $\hat{O}$ 191.8 $\hat{V}$ 0.00101	2584.8 2438.0 14.7	2593 2444 14.8	2640 2480 16.0	2688 2516 17.2	2783 2588 19.5	2880 2661 21.8	2977 2736 24.2	3077 2812 26.5	3177 2890 28.7
<b>0.5 (81.3)</b>	$\hat{H}$ 340.6 $\hat{O}$ 340.6 $\hat{V}$ 0.00103	2646.0 2484.0 3.24	209.3 209.2 0.00101	313.9 313.9 0.00103	2683 2512 3.41	2780 2586 3.89	2878 2660 4.35	2979 2735 4.83	3076 2811 5.29	3177 2889 5.75
1.0 (99.6)	$\hat{H}$ 417.5 $\hat{O}$ 417.5 $\hat{V}$ 0.00104	2675.4 2506.1 1.69	209.3 209.2 0.00101	314.0 313.9 0.00103	2676 2507 1.69	2776 2583 1.94	2875 2658 2.17	2975 2734 2.40	3074 2811 2.64	3176 2889 2.87
5.0 (151.8)	$\hat{H}$ 640.1 $\hat{O}$ 639.6 $\hat{V}$ 0.00109	2747.5 2560.2 0.375	209.7 209.2 0.00101	314.3 313.8 0.00103	419.4 418.8 0.00104	632.2 631.6 0.00109	2855 2643 0.425	2961 2724 0.474	3065 2803 0.522	3168 2883 0.571
10 (179.9)	$\hat{H}$ 762.6 $\hat{O}$ 761.5 $\hat{V}$ 0.00113	2776.2 2582 0.194	210.1 209.1 0.00101	314.7 313.7 0.00103	419.7 418.7 0.00104	632.5 631.4 0.00109	2827 2621 0.206	2943 2710 0.233	3052 2794 0.258	3159 2876 0.282
20 (212.4)	$\hat{H}$ 908.6 $\hat{O}$ 906.2 $\hat{V}$ 0.00118	2797.2 2598.2 0.09950	211.0 209.0 0.00101	315.5 313.5 0.00102	420.5 418.4 0.00104	633.1 603.9 0.00109	852.6 850.2 0.00116	2902 2679 0.111	3025 2774 0.125	3139 2862 0.139
40 (250.3)	$\hat{H}$ 1087.4 $\hat{O}$ 1082.4 $\hat{V}$ 0.00125	2800.3 2601.3 0.04975	212.7 208.6 0.00101	317.1 313.0 0.00102	422.0 417.8 0.00104	634.3 630.0 0.00109	853.4 848.8 0.00115	1085.8 1080.8 0.00125	2962 2727 0.0588	3095 2829 0.0665
60 (275.6)	$\hat{H}$ 1213.7 $\hat{O}$ 1205.8 $\hat{V}$ 0.00132	2785.0 2590.4 0.0325	214.4 208.3 0.00101	318.7 312.6 0.00103	423.5 417.3 0.00104	635.6 629.1 0.00109	854.2 847.3 0.00115	1085.8 1078.3 0.00125	2885 2668 0.0361	3046 2792 0.0422
80 (295.0)	$\hat{H}$ 1317.1 $\hat{O}$ 1306.0 $\hat{V}$ 0.00139	2759.9 2571.7 0.0235	216.1 208.1 0.00101	320.3 312.3 0.00102	425.0 416.7 0.00104	636.8 628.2 0.00109	855.1 845.9 0.00115	1085.8 1075.8 0.00124	2787 2593 0.0243	2990 2750 0.0299
100 (311.0)	$\hat{H}$ 1408.0 $\hat{O}$ 1393.5 $\hat{V}$ 0.00145	2727.7 2547.3 0.0181	217.8 207.8 0.00101	322.9 311.7 0.00102	426.5 416.1 0.00104	638.1 627.3 0.00109	855.9 844.4 0.00115	1085.8 1073.4 0.00124	1343.4 1329.4 0.00140	2926 2702 0.0224

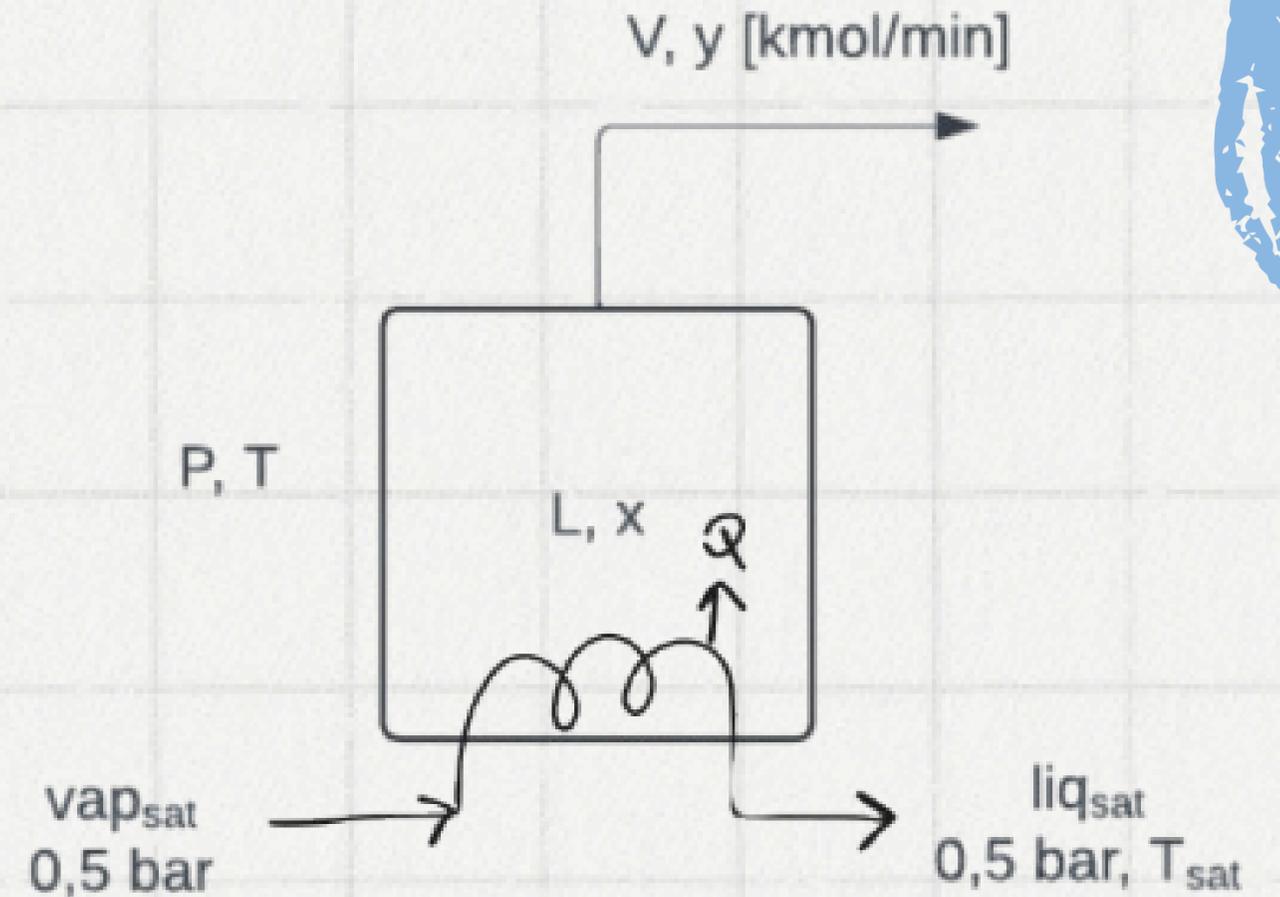
# Pregunta 2

- Grafique el perfil para la evolución de la temperatura del sistema en el tiempo, desde que se carga la solución. Indique en el gráfico



# Pregunta 2

c) Considerando que la mezcla pentano-hexano tiene un calor constante de vaporización  $\lambda_v$  de 27000 kJ/kmol, independiente de la composición y la temperatura, y que la temperatura al interior del líquido se mantiene constante una vez alcanzado el punto de ebullición, plantee el balance de energía para el líquido dentro del alambique una vez iniciada la vaporización y determine la temperatura a la que sale el vapor.





**fcfm**

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA  
QUÍMICA, BIOTECNOLOGÍA  
Y MATERIALES

FACULTAD DE CIENCIAS  
FÍSICAS Y MATEMÁTICAS  
UNIVERSIDAD DE CHILE

# Auxiliar Pre-Control 3

IQ3301 - Análisis de Procesos

**BM y BE no estacionario sin  
reacción**