

Unidad 2: Balances macroscópicos de materia en procesos metalúrgicos y de materiales

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA METALÚRGICA

PROFESOR: LUIS ENRIQUE JARDÓN PÉREZ

Índice

- Introducción
- Conceptos previos
- Ley de conservación de la materia
- Ecuación de balance macroscópico de materia
- Pasos para realizar un balance macroscópico de materia
- Ejemplo de un balance macroscópico de materia

Introducción

¿Qué es un balance de materia?

¿Qué es un balance macroscópico?

¿Para qué sirve un balance macroscópico de materia?

Introducción

Los **balances de materia** están fundamentados en la **ley de conservación de la materia**.

Son útiles en el control de procesos metalúrgicos, porque en su mayoría involucran el **transporte**, la **transformación** y la **mezcla** y/o **separación** de diversos materiales.

Nos permiten controlar **la composición química** y el **flujo másico** o **masa total** de los productos y reactivos de un determinado proceso metalúrgico.

Existen **ecuaciones** para **describir** tanto el **transporte de masa** como el **transporte de especies químicas** dentro de un sistema dado.

Introducción

La **aproximación macroscópica** nos permite realizar balances en sistemas independientemente de la dimensión de los mismos, de manera rápida y concisa.

Permiten un **control rápido** de proceso pero a costa de **no poder “visualizar”** a detalle lo que ocurre dentro del mismo.

Se realizan por medio de **conjuntos de ecuaciones algebraicas o diferenciales**, recientemente pudiendo aplicarse aprendizaje automático a los mismos.

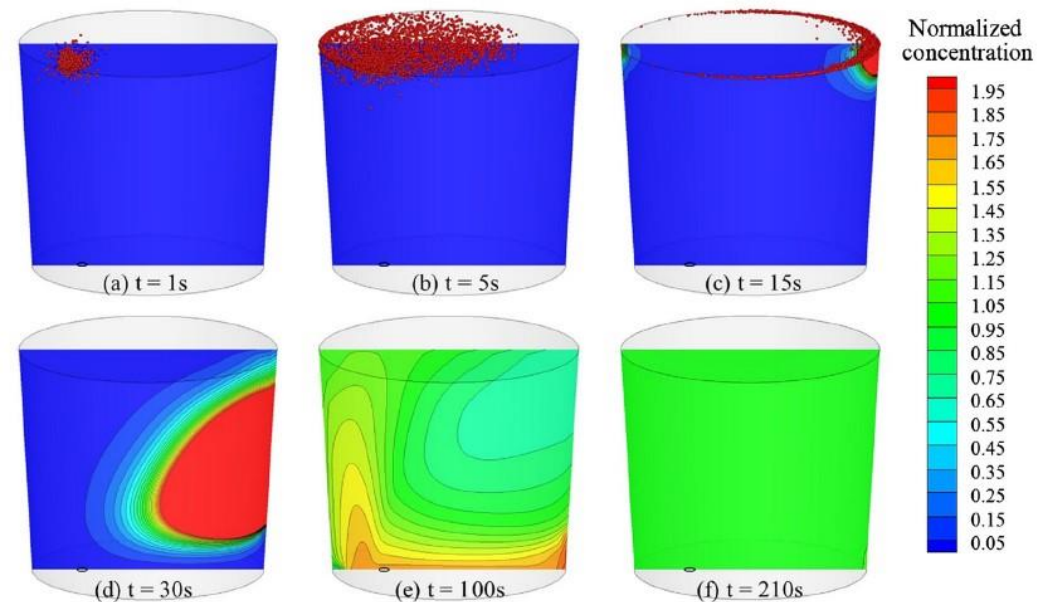


Introducción

La **aproximación microscópica** permite **aproximarse a conocer**, con mayor o menor certeza, a **lo que ocurre “dentro”** de un determinado proceso.

Son **relativamente complejos** de desarrollar, involucrando suposiciones para aproximarse a la realidad del proceso, aunque, cada vez son más accesibles por la mayor disponibilidad de software y hardware computacional.

Se realizan a partir de resolver **ecuaciones diferenciales**, muchas veces mediante software CFD, permitiendo entender los **fenómenos que gobiernan un proceso**.



Introducción

Sus aplicaciones en ingeniería metalúrgica son muy variadas, por ejemplo:

- Balances de carga en hornos de fundición
- Control de basicidad de escoria en procesos siderúrgicos
- Control de la composición química durante procesos de electro refinación
- Cálculos de flujos durante procesos de beneficio de minerales

Conceptos previos

- Dimensiones
- Sistemas de unidades
- Conversión de unidades
- Composición química
- Ley de los gases ideales
- Estequiometria
- Reacción química
- Reactivo limitante y reactivo en exceso
- Unidades molares

Conceptos previos

Morris, A. E., Geiger, G., & Fine, H. A. (2012). *Handbook on material and energy balance calculations in material processing*. John Wiley & Sons.

Dimensiones

La mayoría de los cálculos y mediciones que se realizan en la ciencia e ingeniería implican la determinación o manipulación de ciertas cantidades básicas denominadas dimensiones.

Una **dimensión** es una **descripción** de un **concepto abstracto**, como el tiempo o la velocidad, o bien de las **características** de un sistema, como la masa o la densidad.

Las dimensiones se especifican dando la magnitud de la misma en comparación con un **estándar o patrón** asociado al concepto o característica que se desea determinar o manipular. Este estándar se denomina unidad.

De tal manera que las dimensiones se **especifican** mediante un **número** y una **unidad**:

$$\textit{Dimensión} \left\{ \begin{array}{cc} 3 & g \\ \uparrow & \uparrow \\ \textit{Número} & \textit{Unidad} \end{array} \right.$$

Sistemas de unidades

Las unidades se han desarrollado en sistemas en los que una unidad o la combinación de unidades básicas se usan para describir una dimensión.

Hay una gran cantidad de sistemas de unidades, dentro de los que destacan tres:

- CGS: Sistema cegesimal de unidades
- AES: Sistema americano de unidades ingenieriles
- SI: Sistema internacional de unidades

Sistemas de unidades (Unidades fundamentales del SI)

Dimensión	Unidad	Símbolo
Longitud (L)	Metro	m
Masa (M)	Kilogramo	kg
Tiempo (t)	Segundo	s
Corriente eléctrica (I)	Ampere	A
Temperatura (T)	Kelvin	K
Cantidad de sustancia	Mol	mol
Intensidad luminosa	Candela	cd

Sistemas de unidades (Unidades auxiliares del SI)

Dimensión	Unidad	Símbolo	Definición (análisis dimensional)
Frecuencia	Hertz	Hz	t^{-1}
Fuerza	Newton	N	$M L t^{-2}$
Presión/Esfuerzo	Pascal	Pa	$M L^{-1} t^{-2}$
Trabajo/Energía/Calor	Joule	J	$M L^2 t^{-2}$
Potencia	Watt	W	$M L^2 t^{-3}$
Carga eléctrica	Coulomb	C	$I t$
Diferencia de potencial	Volt	V	$M L^2 I^{-1} t^{-3}$
Capacitancia eléctrica	Faradio	F	$M^{-1} L^{-2} I^2 t^4$
Resistencia eléctrica	Ohm	Ω	$M L^2 I^{-2} t^{-3}$
Conductancia eléctrica	Siemens	S	$M^{-1} L^{-2} I^2 t^3$

Sistemas de unidades (Dimensiones adicionales del SI)

Dimensión	Símbolo	Definición (análisis dimensional)
Área	m^2	L^2
Volumen	m^3	L^3
Velocidad/Rapidez	$m s^{-1}$	$L t^{-1}$
Aceleración	$m s^{-2}$	$L t^{-2}$
Densidad	$kg m^{-3}$	$M L^{-3}$
Conductividad térmica	$W m^{-1} K^{-1}$	$M L t^{-3} T^{-1}$
Coefficiente de transferencia de calor por convección	$W m^{-2} K^{-1}$	$M t^{-3} T^{-1}$
Capacidad calorífica	$J kg^{-1} K^{-1}$	$L^2 t^{-2} T^{-1}$

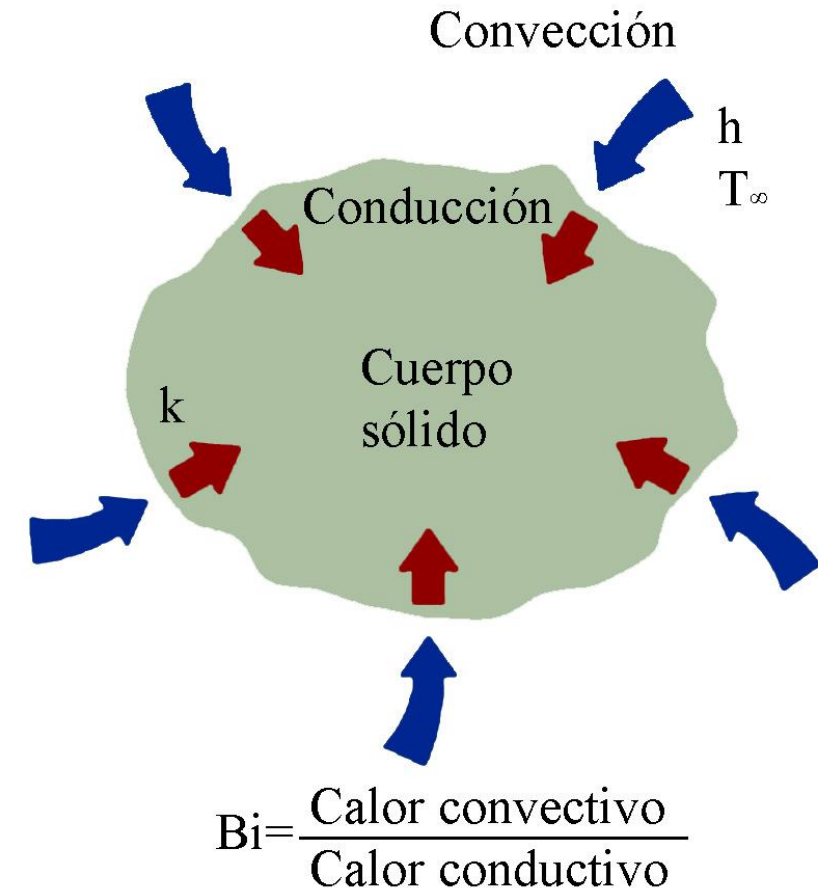
Sistemas de unidades (Análisis dimensional)

Número de Biot:

El número de Biot es un número adimensional que relaciona la transferencia de calor por conducción dentro de un cuerpo y la transferencia de calor por convección en la superficie de dicho cuerpo.

$$N_{Bi} = \frac{hL}{k}$$

$$N_{Bi} = \frac{\left(\frac{W}{m^2K}\right)m}{\left(\frac{W}{mK}\right)} = \frac{M t^{-3} T^{-1} * L}{M L t^{-3} T^{-1}}$$



Sistemas de unidades (prefijos del SI)

Prefijo	Símbolo	Factor
Tera	T	1×10^{12}
Giga	G	1×10^9
Mega	M	1×10^6
Kilo	k	1×10^3
Hecto	h	1×10^2
Deca	da	1×10^1
Deci	d	1×10^{-1}
Centi	c	1×10^{-2}
Mili	m	1×10^{-3}
Micro	μ	1×10^{-6}
Nano	n	1×10^{-9}

Conversión de unidades

Existen unidades no pertenecientes al sistema internacional que son aceptadas para describir determinadas dimensiones, por lo que muchas veces es necesario el conocer la equivalencia entre unidades para describir una misma dimensión.

Existen dos tipos de conversión de unidades:

- En el **primer tipo** de conversión, se **multiplica** la unidad por **una equivalencia**, la cual toma el valor del **neutro multiplicativo**, con lo que se pueden encadenar una gran cantidad de conversiones sin modificar el valor original de la dimensión.
- En el **segundo tipo** de conversión, además de **multiplicar por la equivalencia**, se debe **sumar una cantidad** debido al cambio de valor de referencia de un sistema u otro.

Conversión de unidades

Por ejemplo, para una conversión del primer tipo se parte de una equivalencia:

$$1 \text{ in} = 2.54 \text{ cm}$$

De la cual se pueden obtener factores de conversión, que son neutros multiplicativos:

$$\frac{1 \text{ in}}{2.54 \text{ cm}} = 1 \quad \frac{2.54 \text{ cm}}{1 \text{ in}} = 1$$

Los cuales se pueden emplear para convertir unidades, por ejemplo 45 cm a in:

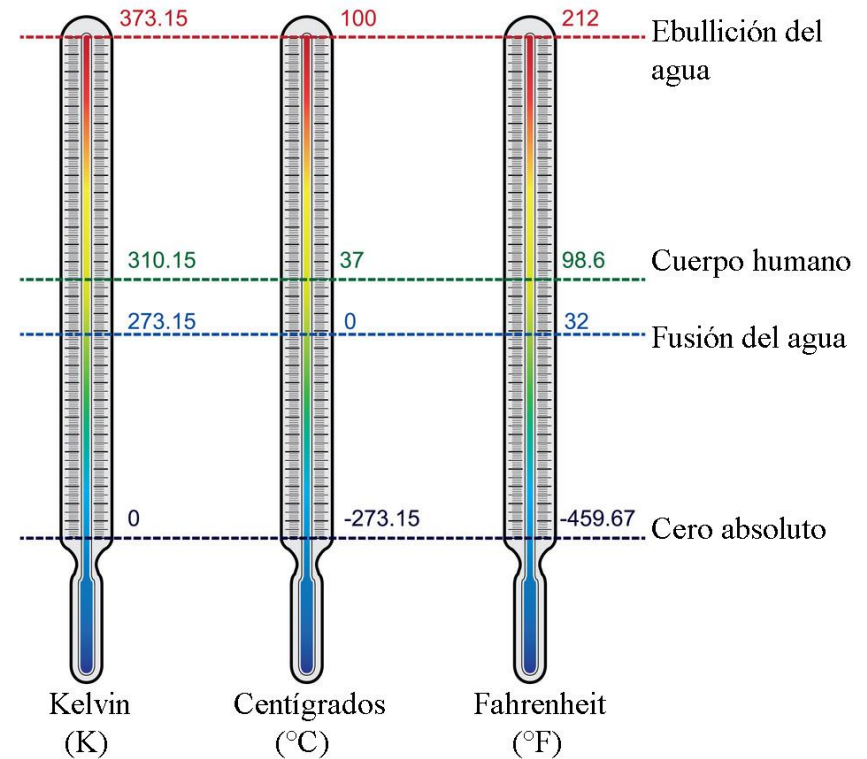
$$45 \text{ cm} \left(\frac{1 \text{ in}}{2.54 \text{ cm}} \right) = 17.72 \text{ in}$$

Conversión de unidades

Para el segundo tipo de conversión de unidades, además de realizar una multiplicación por un neutro multiplicativo, se debe sumar cierta cantidad, debido al cambio de referencia entre una unidad y otra.

Ejemplo de esto son las conversiones de temperatura, por ejemplo 50 °C a °F:

$$50 \text{ } ^\circ\text{C} \left(\frac{1.8 \Delta^\circ\text{F}}{1 \Delta^\circ\text{C}} \right) + 32 \text{ } ^\circ\text{F} = 122 \text{ } ^\circ\text{F}$$



Conversión de unidades

Se pueden usar varios factores de conversión de manera consecutiva, por ejemplo, convertir 7850 kg/m^3 a lb/in^3 :

$$7850 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \left(\frac{1 \text{ lb}}{0.454 \text{ kg}} \right) \left(\frac{1 \text{ m}}{100 \text{ cm}} \right)^3 \left(\frac{2.54 \text{ cm}}{1 \text{ in}} \right)^3 = 0.28 \frac{\text{lb}}{\text{in}^3}$$

La temperatura de fusión del aluminio puro es de $660 \text{ }^\circ\text{C}$ conviértala a $^\circ\text{F}$:

$$660 \text{ }^\circ\text{C} \left(\frac{1.8 \Delta^\circ\text{F}}{1 \Delta^\circ\text{C}} \right) + 32^\circ\text{F} = 1220 \text{ }^\circ\text{F}$$

Conversión de unidades

La capacidad calorífica del aluminio es de 900 J/kg °C realice la conversión a cal/mol K:

$$900 \frac{J}{kg \text{ } ^\circ C} \left(\frac{1 \text{ cal}}{4.185 J} \right) \left(\frac{1 \text{ kg}}{1000 \text{ g}} \right) \left(\frac{27 \text{ g}}{1 \text{ mol}} \right) \left(\frac{1 \Delta^\circ C}{1 \Delta K} \right) = 5.8065 \frac{\text{cal}}{\text{mol K}}$$

El coeficiente de transferencia de calor del aire por convección durante la convección natural varia entre 0.5 y 1000 W/m² K, convierta este rango a Btu/h ft² °F:

$$0.5 \frac{W}{m^2 K} \left(\frac{3.41 \text{ Btu/h}}{1 W} \right) \left(\frac{1 \text{ m}}{3.28 \text{ ft}} \right)^2 \left(\frac{1 \Delta K}{1.8 \Delta^\circ F} \right) = 0.0880 \frac{\text{Btu}}{h \text{ ft}^2 \text{ } ^\circ F}$$

$$1000 \frac{W}{m^2 K} \left(\frac{3.41 \text{ Btu/h}}{1 W} \right) \left(\frac{1 \text{ m}}{3.28 \text{ ft}} \right)^2 \left(\frac{1 \Delta K}{1.8 \Delta^\circ F} \right) = 176.0880 \frac{\text{Btu}}{h \text{ ft}^2 \text{ } ^\circ F}$$

Composición química

En la mayoría de los procesos no se trabaja con sustancias puras, sino que se emplean mezclas o soluciones de varios componentes, por lo que el control de la composición química es muy importante en dichos procesos.

Por convención, la composición química de los **sólidos** y los **líquidos** se da en **fracción masa** o **porcentaje másico**, a menos que se especifique lo contrario.

La composición química de los **gases**, se da en **porcentaje molar** o bien **fracción mol**, que es equivalente al porcentaje volumen en el caso de ser gases ideales.

Composición química

Fracción masa:

$$W_A = \frac{m_A}{m_T} = \frac{\text{masa del componente A}}{\text{masa total de la mezcla}}$$

Porcentaje másico:

$$W/\% = W_A * 100\%$$

Suma de fracciones masa de una mezcla:

$$\sum_{i=1}^n W_i = 1.0$$

Fracción mol:

$$X_A = \frac{n_A}{n_T} = \frac{\text{cantidad de sustancia de A}}{\text{cantidad de sustancia de la mezcla}}$$

Porcentaje molar:

$$\% = X_A * 100\%$$

Suma de fracciones molares de una mezcla:

$$\sum_{i=1}^n X_i = 1.0$$

Composición química

Se puede convertir entre fracción molar y másica, y viceversa con ayuda de la masa molar (M_i) de los componentes de la mezcla:

$$X_i = \frac{\frac{W_i}{M_i}}{\frac{W_A}{M_A} + \frac{W_B}{M_B} + \dots + \frac{W_i}{M_i} + \dots}$$

$$W_i = \frac{X_i M_i}{X_A M_A + X_B M_B + \dots + X_i M_i + \dots}$$

Composición química

La composición química del aire es 21% de O_2 y 79% de N_2 , ¿Cuál sería su composición química en % másico?

$$W_i = \frac{X_i M_i}{X_A M_A + X_B M_B + \dots + X_i M_i + \dots}$$

$$X_{O_2} = \frac{\%mol}{100\%} = \frac{21\%}{100\%} = 0.21$$

$$X_{N_2} = \frac{\%mol}{100\%} = \frac{79\%}{100\%} = 0.79$$

$$X_{O_2} + X_{N_2} = 1.0$$

$$M_{O_2} = 32 \text{ g/mol}$$

$$M_{N_2} = 28 \text{ g/mol}$$

Composición química

La composición química del aire es 21% de O_2 y 79% de N_2 , ¿Cuál sería su composición química en % másico?

$$W_{O_2} = \frac{X_{O_2} M_{O_2}}{X_{O_2} M_{O_2} + X_{N_2} M_{N_2}} = \frac{\left(0.21 \frac{\text{mol } O_2}{\text{mol aire}}\right) \left(32 \frac{\text{g } O_2}{\text{mol } O_2}\right)}{\left(0.21 \frac{\text{mol } O_2}{\text{mol aire}}\right) \left(32 \frac{\text{g } O_2}{\text{mol } O_2}\right) + \left(0.79 \frac{\text{mol } N_2}{\text{mol aire}}\right) \left(28 \frac{\text{g } N_2}{\text{mol } N_2}\right)}$$

$$W_{O_2} = \frac{6.72 \frac{\text{g } O_2}{\text{mol aire}}}{6.72 \frac{\text{g } O_2}{\text{mol aire}} + 22.12 \frac{\text{g } N_2}{\text{mol aire}}} = \frac{6.72 \text{ g } O_2}{6.72 \text{ g } O_2 + 22.12 \text{ g } N_2} = \frac{6.72 \text{ g } O_2}{28.84 \text{ g aire}} = 0.2330$$

$$W_{N_2} = \frac{X_{N_2} M_{N_2}}{X_{O_2} M_{O_2} + X_{N_2} M_{N_2}} = \frac{(0.79)(28)}{(0.21)(32) + (0.79)(28)} = \frac{22.12}{28.84} = 0.7670$$

Composición química

La composición química del aire es 21% de O_2 y 79% de N_2 , ¿Cuál sería su composición química en % másico?

$$W_{O_2} = 0.2330$$

$$W_{N_2} = 0.7670$$

$$W_{O_2} + W_{N_2} = 1.0$$

$$W / O_{O_2} = W_{O_2} * 100\% = 23.30 \%$$

$$W / O_{N_2} = W_{N_2} * 100\% = 76.70 \%$$

Composición química

La composición química promedio del acero inoxidable 316 es: 0.08% de C, 0.75% de Si, 2% de Mg, 0.04% de K, 0.03% de S, 17% de Cr, 7% de Ni y 2.5% de Mo siendo el balance Fe. ¿Cuál sería su composición química en % molar?

$$X_C = \frac{\frac{W_C}{M_C}}{\frac{W_C}{M_C} + \frac{W_{Si}}{M_{Si}} + \frac{W_{Mg}}{M_{Mg}} + \frac{W_K}{M_K} + \frac{W_S}{M_S} + \frac{W_{Cr}}{M_{Cr}} + \frac{W_{Ni}}{M_{Ni}} + \frac{W_{Mo}}{M_{Mo}} + \frac{W_{Fe}}{M_{Fe}}}$$

$$W_C + W_{Si} + W_{Mg} + W_K + W_S + W_{Cr} + W_{Ni} + W_{Mo} = \\ 0.0008 + 0.0075 + 0.02 + 0.0004 + 0.0003 + 0.17 + 0.07 + 0.025 = 0.294$$

$$W_C + W_{Si} + W_{Mg} + W_K + W_S + W_{Cr} + W_{Ni} + W_{Mo} + W_{Fe} = 1.0 \\ W_{Fe} = 1.0 - 0.294 = 0.706$$

Composición química

La composición química promedio del acero inoxidable 316 es: 0.08% de C, 0.75% de Si, 2% de Mg, 0.04% de K, 0.03% de S, 17% de Cr, 7% de Ni y 2.5% de Mo siendo el balance Fe. ¿Cuál sería su composición química en % molar?

$$X_C = \frac{\frac{W_C}{M_C}}{\frac{W_C}{M_C} + \frac{W_{Si}}{M_{Si}} + \frac{W_{Mg}}{M_{Mg}} + \frac{W_K}{M_K} + \frac{W_S}{M_S} + \frac{W_{Cr}}{M_{Cr}} + \frac{W_{Ni}}{M_{Ni}} + \frac{W_{Mo}}{M_{Mo}} + \frac{W_{Fe}}{M_{Fe}}}$$

$$X_C = \frac{\left[\frac{\left(\frac{g C}{g \text{ acero}} \right)}{\left(\frac{g C}{mol C} \right)} \right]}{\left[\frac{\left(\frac{g C}{g \text{ acero}} \right)}{\left(\frac{g C}{mol C} \right)} + \frac{\left(\frac{g Si}{g \text{ acero}} \right)}{\left(\frac{g Si}{mol Si} \right)} + \dots \right]} = \frac{\left[\frac{mol C}{g \text{ acero}} \right]}{\left[\frac{mol C}{g \text{ acero}} + \frac{mol Si}{g \text{ acero}} + \dots \right]} = \frac{[mol C]}{[mol C + mol Si + \dots]} = \frac{[mol C]}{[mol \text{ acero}]}$$

Composición química

La composición química promedio del acero inoxidable 316 es: 0.08% de C, 0.75% de Si, 2% de Mg, 0.04% de K, 0.03% de S, 17% de Cr, 7% de Ni y 2.5% de Mo siendo el balance Fe. ¿Cuál sería su composición química en % molar?

$$X_C = \frac{\frac{0.0008}{12}}{\frac{0.0008}{12} + \frac{0.0075}{28} + \frac{0.02}{24} + \frac{0.0004}{39} + \frac{0.0003}{32} + \frac{0.17}{52} + \frac{0.07}{58} + \frac{0.025}{95} + \frac{0.706}{56}}$$

$$X_C = \frac{0.0000667}{0.0000667 + 0.000267 + 0.00083 + 0.0000103 + 0.0000094 + 0.003269 + 0.001206 + 0.000263 + 0.012607}$$

$$X_C = \frac{0.0000667}{0.0185284}$$

$$X_C = 0.003599$$

Composición química

La composición química promedio del acero inoxidable 316 es: 0.08% de C, 0.75% de Si, 2% de Mg, 0.04% de K, 0.03% de S, 17% de Cr, 7% de Ni y 2.5% de Mo siendo el balance Fe. ¿Cuál sería su composición química en % molar?

$$X_{Si} = \frac{0.000267}{0.0185284} = 0.0144$$

$$X_{Mg} = \frac{0.00083}{0.0185284} = 0.0447$$

$$X_K = \frac{0.0000103}{0.0185284} = 0.00055$$

$$X_S = \frac{0.0000094}{0.0185284} = 0.000507$$

Composición química

La composición química promedio del acero inoxidable 316 es: 0.08% de C, 0.75% de Si, 2% de Mg, 0.04% de K, 0.03% de S, 17% de Cr, 7% de Ni y 2.5% de Mo siendo el balance Fe. ¿Cuál sería su composición química en % molar?

$$X_{Cr} = \frac{0.003269}{0.0185284} = 0.176$$

$$X_{Ni} = \frac{0.001206}{0.0185284} = 0.065$$

$$X_{Mo} = \frac{0.000263}{0.0185284} = 0.014$$

$$X_{Fe} = \frac{0.012607}{0.0185284} = 0.680$$

Composición química

La composición química promedio del acero inoxidable 316 es: 0.08% de C, 0.75% de Si, 2% de Mg, 0.04% de K, 0.03% de S, 17% de Cr, 7% de Ni y 2.5% de Mo siendo el balance Fe. ¿Cuál sería su composición química en % molar?

	C	Si	Mg	K	S	Cr	Ni	Mo	Fe	Total
W/o	0.08	0.75	2.0	0.04	0.03	17.0	7.0	2.5	70.6	100
W_i	0.0008	0.0075	0.02	0.0004	0.0003	0.17	0.07	0.025	0.706	1
M_i	12	28	24	39	32	52	58	95	56	----
X_i	0.003599	0.0144	0.0447	0.00055	0.000507	0.176	0.065	0.014	0.680	0.9988
$\% i$	0.3599	1.44	4.47	0.055	0.0507	17.6	6.5	1.4	68.0	99.88

$$\% = X_A * 100\%$$

Ley de los gases ideales

La mayoría de los **procesos metalúrgicos** se llevan a cabo con presiones relativamente bajas y temperaturas elevadas, por lo que los **gases** presentan un **comportamiento muy cercano al ideal**, por lo que se puede emplear la ley de gas ideal en los mismos:

$$PV = nRT$$

Donde:

P es la presión, V es el volumen, n es la cantidad de sustancia del gas, R es la constante de los gases y T es la temperatura.

Ley de los gases ideales

El sistema de enfriamiento de una máquina utiliza CO_2 para operar. Originalmente el gas tiene un flujo de 10L/min a 25°C y 1 atm de presión, tras pasar por el sistema de enfriamiento su temperatura aumenta a 200°C y su presión es de 1.25 atm

¿Cuál es el flujo volumínico del gas tras realizar su función de enfriar el componente?

¿A qué velocidad entra y sale el gas del sistema de enfriamiento? Consideré que este es transportado por una tubería redonda de una pulgada de diámetro.

$$\dot{V} = \frac{V}{t} = 10 \frac{L}{\text{min}}$$

$$PV = nRT$$

$$\frac{PV}{t} = \frac{nRT}{t}$$

$$P\dot{V} = \dot{n}RT$$

Ley de los gases ideales

El sistema de enfriamiento de una maquina utiliza CO₂ para operar. Originalmente el gas tiene un flujo de 10L/min a 25°C y 1 atm de presión, tras pasar por el sistema de enfriamiento su temperatura aumenta a 200 °C y su presión es de 1.25 atm

¿Cuál es el flujo volumínico del gas tras realizar su función de enfriar el componente?

¿A qué velocidad entra y sale el gas del sistema de enfriamiento? Consideré que este es transportado por una tubería redonda de una pulgada de diámetro.

$$\dot{V} = \frac{V}{t} = 10 \frac{L}{min}$$

$$P\dot{V} = \dot{n}RT$$

$$\dot{n} = \frac{P\dot{V}}{RT} = \frac{\left[atm \left(\frac{L}{min} \right) \right]}{\left[\left(\frac{L atm}{mol K} \right) K \right]} = \left[\frac{mol}{min} \right]$$

Ley de los gases ideales

El sistema de enfriamiento de una maquina utiliza CO₂ para operar. Originalmente el gas tiene un flujo de 10L/min a 25°C y 1 atm de presión, tras pasar por el sistema de enfriamiento su temperatura aumenta a 200 °C y su presión es de 1.25 atm

¿Cuál es el flujo volumínico del gas tras realizar su función de enfriar el componente?

¿A qué velocidad entra y sale el gas del sistema de enfriamiento? Consideré que este es transportado por una tubería redonda de una pulgada de diámetro.

$$\dot{n} = \frac{1 \text{ atm} \left(10 \frac{L}{\text{min}} \right)}{\left(0.082 \frac{L \text{ atm}}{\text{mol K}} \right) 298.15 \text{ K}} = 0.409026 \frac{\text{mol}}{\text{min}}$$

$$\dot{n}_{ENTRADA} = \dot{n}_{SALIDA} = \dot{n}$$

$$\dot{V} = \frac{\dot{n}RT}{P} = \frac{\left(0.409026 \frac{\text{mol}}{\text{min}} \right) \left(0.082 \frac{L \text{ atm}}{\text{mol K}} \right) (473.15 \text{ K})}{1.25 \text{ atm}} = 12.695 \frac{L}{\text{min}}$$

Ley de los gases ideales

El sistema de enfriamiento de una maquina utiliza CO_2 para operar. Originalmente el gas tiene un flujo de 10L/min a 25°C y 1 atm de presión, tras pasar por el sistema de enfriamiento su temperatura aumenta a 200°C y su presión es de 1.25 atm

¿Cuál es el flujo volumínico del gas tras realizar su función de enfriar el componente?

¿A qué velocidad entra y sale el gas del sistema de enfriamiento? Consideré que este es transportado por una tubería redonda de una pulgada de diámetro.


$$\dot{V} = \frac{V}{t}$$
$$V = A_{\perp} L$$
$$\dot{V} = \frac{A_{\perp} L}{t} = A_{\perp} \bar{v}$$
$$\bar{v} = \frac{\dot{V}}{A_{\perp}}$$
$$A_{\perp} = \pi \frac{D^2}{4}$$
$$A_{\perp} = \pi \frac{(1 \text{ in})^2}{4} = 0.785 \text{ in}^2$$

Ley de los gases ideales

El sistema de enfriamiento de una maquina utiliza CO_2 para operar. Originalmente el gas tiene un flujo de 10L/min a 25°C y 1 atm de presión, tras pasar por el sistema de enfriamiento su temperatura aumenta a 200°C y su presión es de 1.25 atm

¿Cuál es el flujo volumínico del gas tras realizar su función de enfriar el componente?

¿A qué velocidad entra y sale el gas del sistema de enfriamiento? Consideré que este es transportado por una tubería redonda de una pulgada de diámetro.


$$\dot{V} = 10 \frac{L}{\text{min}} \left(\frac{1 \text{ min}}{60 \text{ s}} \right) \left(\frac{1 \text{ m}^3}{1000 \text{ L}} \right)$$
$$\dot{V} = 0.000166 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$$
$$\bar{v} = \frac{\dot{V}}{A_{\perp}} = \frac{0.000166 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}}{0.000506 \text{ m}^2} = 0.328 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$
$$A_{\perp} = 0.785 \text{ in}^2 \left(\frac{2.54 \text{ cm}}{1 \text{ in}} \right)^2 \left(\frac{1 \text{ m}}{100 \text{ cm}} \right)^2$$
$$A_{\perp} = 0.000506 \text{ m}^2$$
$$\dot{V} = 12.695 \frac{L}{\text{min}} \left(\frac{1 \text{ min}}{60 \text{ s}} \right) \left(\frac{1 \text{ m}^3}{1000 \text{ L}} \right)$$
$$\dot{V} = 0.0002115 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$$
$$\bar{v} = \frac{\dot{V}}{A_{\perp}} = \frac{0.0002115 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}}{0.000506 \text{ m}^2} = 0.417 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

Estequiometria

Muchos de los problemas de balance que existen en metalurgia se pueden resolver con conocimientos de estequiometria, que incluyen; las relaciones cuantitativas entre los reactivos y productos en el transcurso de una reacción química; la proporción de los distintos elementos en un compuesto químico; o bien la composición de mezclas químicas.

La **masa molar (M)** es información muy importante para realizar **cálculos estequiométricos**, que para un compuesto A_xB_y es decir, para un compuesto formado por “x” moles del elemento A y “y” moles del elemento B:

$$M_{A_xB_y} = xM_A + yM_B$$

Estequiometría

La calcopirita es un sulfuro de hierro y cobre con la siguiente fórmula química: CuFeS_2 ¿Cuál es su masa molar?

$$M_{\text{Cu}} = 63.5 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$M_{\text{Fe}} = 55.85 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$M_{\text{S}} = 32 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$M_{\text{CuFeS}_2} = M_{\text{Cu}} + M_{\text{Fe}} + 2M_{\text{S}} = 183.35 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

Estequiometría

La calcopirita es un sulfuro de hierro y cobre con la siguiente fórmula química: CuFeS_2 ¿Cuál es su masa molar?

¿Cuál es la composición química en % molar y % másico de los elementos que componen la calcopirita?

$$\% \text{Cu} = \frac{n_{\text{Cu}}}{n_{\text{CuFeS}_2}} \times 100\% = \frac{1 \text{ mol}}{4 \text{ mol}} \times 100\% = 25\% \text{ Cu}$$

$$\% \text{Fe} = \frac{n_{\text{Fe}}}{n_{\text{CuFeS}_2}} \times 100\% = \frac{1 \text{ mol}}{4 \text{ mol}} \times 100\% = 25\% \text{ Fe}$$

$$\% \text{S} = \frac{n_{\text{S}}}{n_{\text{CuFeS}_2}} \times 100\% = \frac{2 \text{ mol}}{4 \text{ mol}} \times 100\% = 50\% \text{ S}$$

Estequiometría

La calcopirita es un sulfuro de hierro y cobre con la siguiente fórmula química: CuFeS_2 ¿Cuál es su masa molar?

¿Cuál es la composición química en % molar y % másico de los elementos que componen la calcopirita?

$$W_{\text{Cu}} = \frac{X_{\text{Cu}}M_{\text{Cu}}}{X_{\text{Cu}}M_{\text{Cu}} + X_{\text{Fe}}M_{\text{Fe}} + X_{\text{S}}M_{\text{S}}} = \frac{0.25 \left(63.5 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \right)}{0.25 \left(63.5 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \right) + 0.25 \left(55.85 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \right) + 0.50 \left(32 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \right)}$$

$$W_{\text{Cu}} = \frac{15.875}{15.875 + 13.9625 + 16} = \frac{15.875}{45.8375} = 0.346$$

$$W_{\text{Fe}} = \frac{13.9625}{45.8375} = 0.304$$

$$W_{\text{S}} = \frac{16}{45.8375} = 0.349$$

Estequiometría

La calcopirita es un sulfuro de hierro y cobre con la siguiente fórmula química: CuFeS_2 ¿Cuál es su masa molar?

¿Cuál es la composición química en % molar y % másico de los elementos que componen la calcopirita?

$$W_{Cu} + W_{Fe} + W_S = 0.999$$

$$\%_{Cu} = 34.6\% \text{ Cu}$$

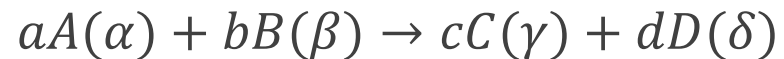
$$\%_{Fe} = 30.4\% \text{ Fe}$$

$$\%_S = 34.9\% \text{ S}$$

Reacción química

Las reacciones químicas suceden cuando se rompen o se forman enlaces químicos entre varios átomos. Las sustancias que se consumen en una reacción química se conocen como reactivos, y las sustancias que se generan debido a la reacción se conocen como productos.

Una **reacción química** se puede representar mediante una **ecuación química**, la cual muestra la relación estequiométrica entre reactivos y productos, cuyo caso general es:



Donde; a, b, c y d son los coeficientes estequiométricos que permiten cumplir con la ley de conservación de masa; A, B C y D son los elementos o compuestos químicos que participan en la reacción; y α , β , γ y δ son los estados de agregación de dichas sustancias.

Reactivo limitante y reactivo en exceso

En muchos procesos se agrega un exceso de un reactivo o reactivos, con respecto a la estequiometría de reacción, para asegurar de esta manera que otro reactivo reaccione completamente, asegurando con esto un porcentaje de conversión elevado.

Bajo estas condiciones, el reactivo presente en **menor cantidad estequiométrica** es denominado **reactivo limitante**. Por otra parte el reactivo en **mayor cantidad estequiométrica** se denomina **reactivo en exceso**.

$$\% \text{ de exceso} = \left(\frac{\text{masa agregada} - \text{masa estequiométrica}}{\text{masa estequiométrica}} \right) \times 100\%$$

$$\% \text{ de conversión} = \frac{\text{masa producida}}{\text{masa potencialmente producida}} \times 100\%$$

Unidades molares

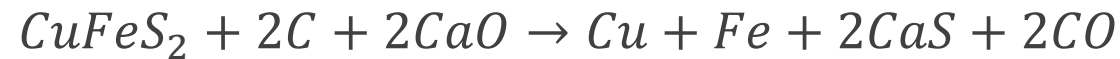
Las **unidades molares** son equivalencias entre **cantidad de sustancia** y **masa**, son particularmente útiles en el caso de los procesos metalúrgicos al trabajarse con masas muy grandes en las cuales muchas veces existen reacciones químicas.

Las unidades molares están basadas siempre en la masa atómica o masa molar de las sustancias, por ejemplo:

$$\frac{55.845 \text{ g Fe}}{1 \text{ g-mol Fe}} \quad \frac{55.845 \text{ kg Fe}}{1 \text{ kg-mol Fe}} \quad \frac{55.845 \text{ lb Fe}}{1 \text{ lb-mol Fe}}$$

Ejemplo de reactivo limitante y en exceso

Tras realizar pruebas a nivel laboratorio, se encontró que la calcopirita se puede reducir con C y CaO para recuperar el Cu y el Fe de la misma. En una mina, se desean procesar 3 toneladas diarias de mineral que contienen un 15% de calcopirita. ¿Qué cantidad de C y CaO se necesitan para procesar el mineral, si se quiere agregar un 200% de la cantidad estequiométrica de dichos insumos?

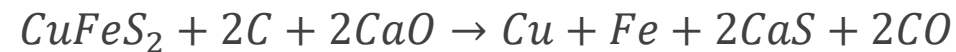


$$m_{\text{CuFeS}_2, \text{Mineral}} = 3000 \text{ kg mineral} \left(\frac{15 \text{ kg CuFeS}_2}{100 \text{ kg mineral}} \right) = 450 \text{ kg CuFeS}_2$$

$$M_{\text{CuFeS}_2} = 183.35 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \rightarrow \frac{183.35 \text{ kg CuFeS}_2}{1 \text{ kg - mol CuFeS}_2}$$

Ejemplo de reactivo limitante y en exceso

Tras realizar pruebas a nivel laboratorio, se encontró que la calcopirita se puede reducir con C y CaO para recuperar el Cu y el Fe de la misma. En una mina, se desean procesar 3 toneladas diarias de mineral que contienen un 15% de calcopirita. ¿Qué cantidad de C y CaO se necesitan para procesar el mineral, si se quiere agregar un 200% de la cantidad estequiométrica de dichos insumos?



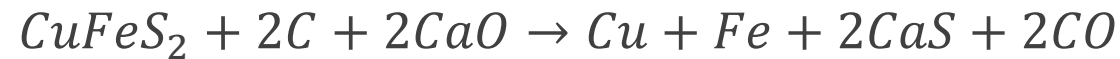
$$n_{\text{CuFeS}_2} = 450 \text{ kg CuFeS}_2 \left(\frac{1 \text{ kg - mol CuFeS}_2}{183.35 \text{ kg CuFeS}_2} \right) = 2.4543 \text{ kg - mol CuFeS}_2$$

$$n_{\text{C}} = 2.4543 \text{ kg - mol CuFeS}_2 \left(\frac{2 \text{ kg - mol C}}{1 \text{ kg - mol CuFeS}_2} \right) = 4.9086 \text{ kg - mol C}$$

$$n_{\text{CaO}} = 2.4543 \text{ kg - mol CuFeS}_2 \left(\frac{2 \text{ kg - mol CaO}}{1 \text{ kg - mol CuFeS}_2} \right) = 4.9086 \text{ kg - mol CaO}$$

Ejemplo de reactivo limitante y en exceso

Tras realizar pruebas a nivel laboratorio, se encontró que la calcopirita se puede reducir con C y CaO para recuperar el Cu y el Fe de la misma. En una mina, se desean procesar 3 toneladas diarias de mineral que contienen un 15% de calcopirita. ¿Qué cantidad de C y CaO se necesitan para procesar el mineral, si se quiere agregar un 200% de la cantidad estequiométrica de dichos insumos?

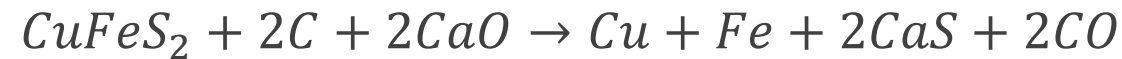


$$m_{\text{C},est} = 4.9086 \text{ kg} - \text{mol C} \left(\frac{12 \text{ kg C}}{1 \text{ kg} - \text{mol C}} \right) = 58.90 \text{ kg C}$$

$$m_{\text{CaO},est} = 4.9086 \text{ kg} - \text{mol CaO} \left(\frac{56 \text{ kg CaO}}{1 \text{ kg} - \text{mol CaO}} \right) = 274.88 \text{ kg CaO}$$

Ejemplo de reactivo limitante y en exceso

Tras realizar pruebas a nivel laboratorio, se encontró que la calcopirita se puede reducir con C y CaO para recuperar el Cu y el Fe de la misma. En una mina, se desean procesar 3 toneladas diarias de mineral que contienen un 15% de calcopirita. ¿Qué cantidad de C y CaO se necesitan para procesar el mineral, si se quiere agregar un 200% de la cantidad estequiométrica de dichos insumos?



$$m_{\text{C},est} = 58.90 \text{ kg C} \left(\frac{200 \text{ kg}}{100 \text{ kg est}} \right) = 117.80 \text{ kg C}$$

$$m_{\text{CaO},est} = 274.88 \text{ kg CaO} \left(\frac{200 \%}{100 \% est} \right) = 549.76 \text{ kg CaO}$$

Ley de conservación de la materia

¿Cuál es la ley de conservación de la materia?

Ley de conservación de la materia

La ley de conservación de la masa, **ley de conservación de la materia** o ley de Lomonósov-Lavoisier se puede postular de muchas formas:

- “La materia ni se crea ni se destruye, sólo se transforma.”
- “La **masa** de un **sistema** **permanece invariable** cualquiera que sea la transformación que ocurra dentro de él.”
- “En un sistema aislado, durante toda reacción química ordinaria, **la masa total en el sistema permanece constante**, es decir, la **masa consumida** de los reactivos es igual a la **masa** de los productos **obtenidos**”

Ley de conservación de la materia

- Cualquiera que sea la forma en la que se postula, esta ley se cumple en la mayoría de los sistemas, y en el caso de los sistemas con **reacciones nucleares** hay que considerar la **equivalencia entre masa y energía**.
- Esta ley es el principio sobre el que se **fundamentan los balances de materia**, siendo de nuestro interés los balances **macroscópicos** de materia.

Ecuación de balance macroscópico de materia

¿Cómo utilizamos la conservación de la materia para analizar un proceso?

¿Cómo planteamos un balance macroscópico de materia?

¿Cuál es el objetivo de un balance macroscópico de materia?

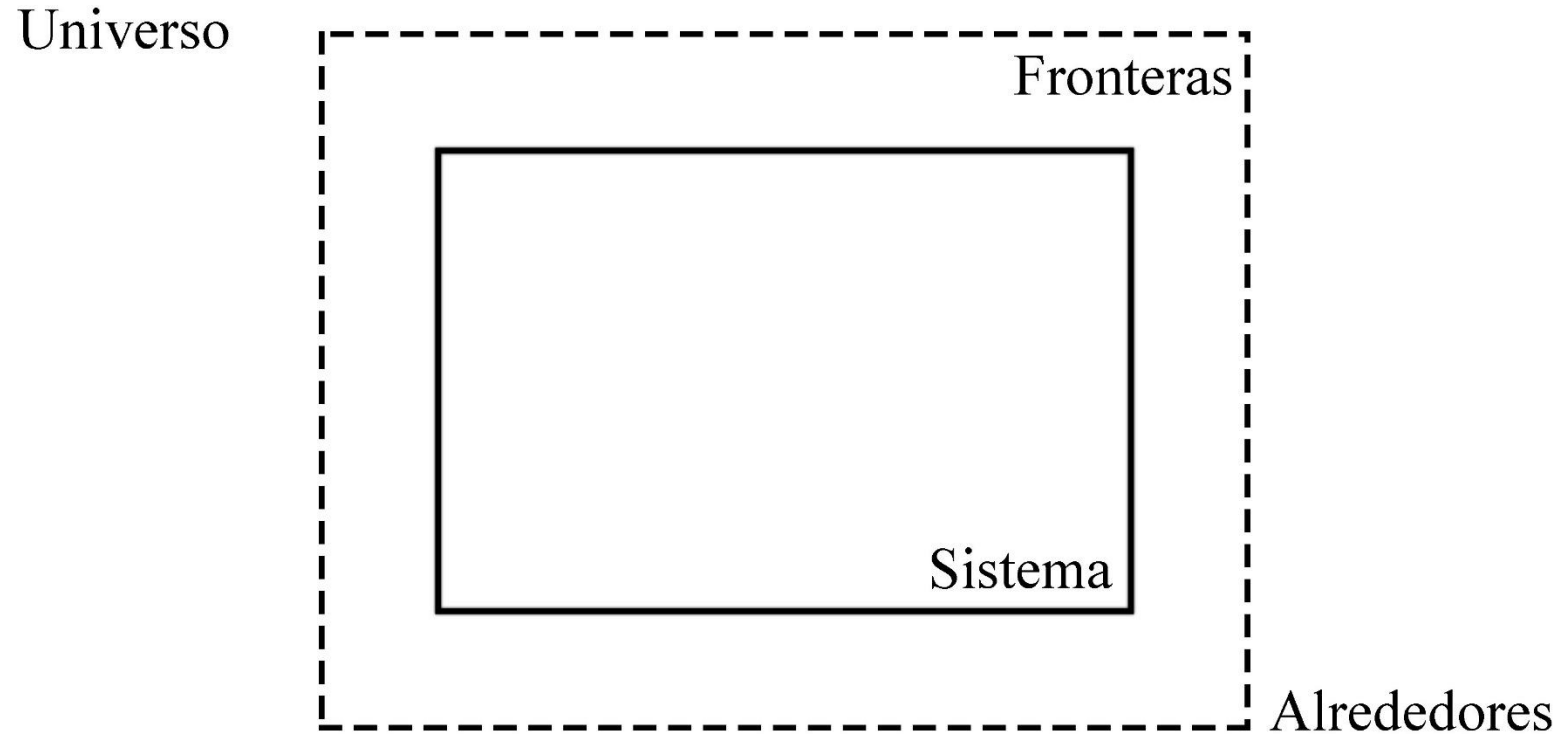
Ecuación de balance macroscópico de materia

El objetivo de los balances macroscópicos de materia, es obtener información de mi proceso que no conozco para realizar ajustes, variaciones u optimizar el mismo.

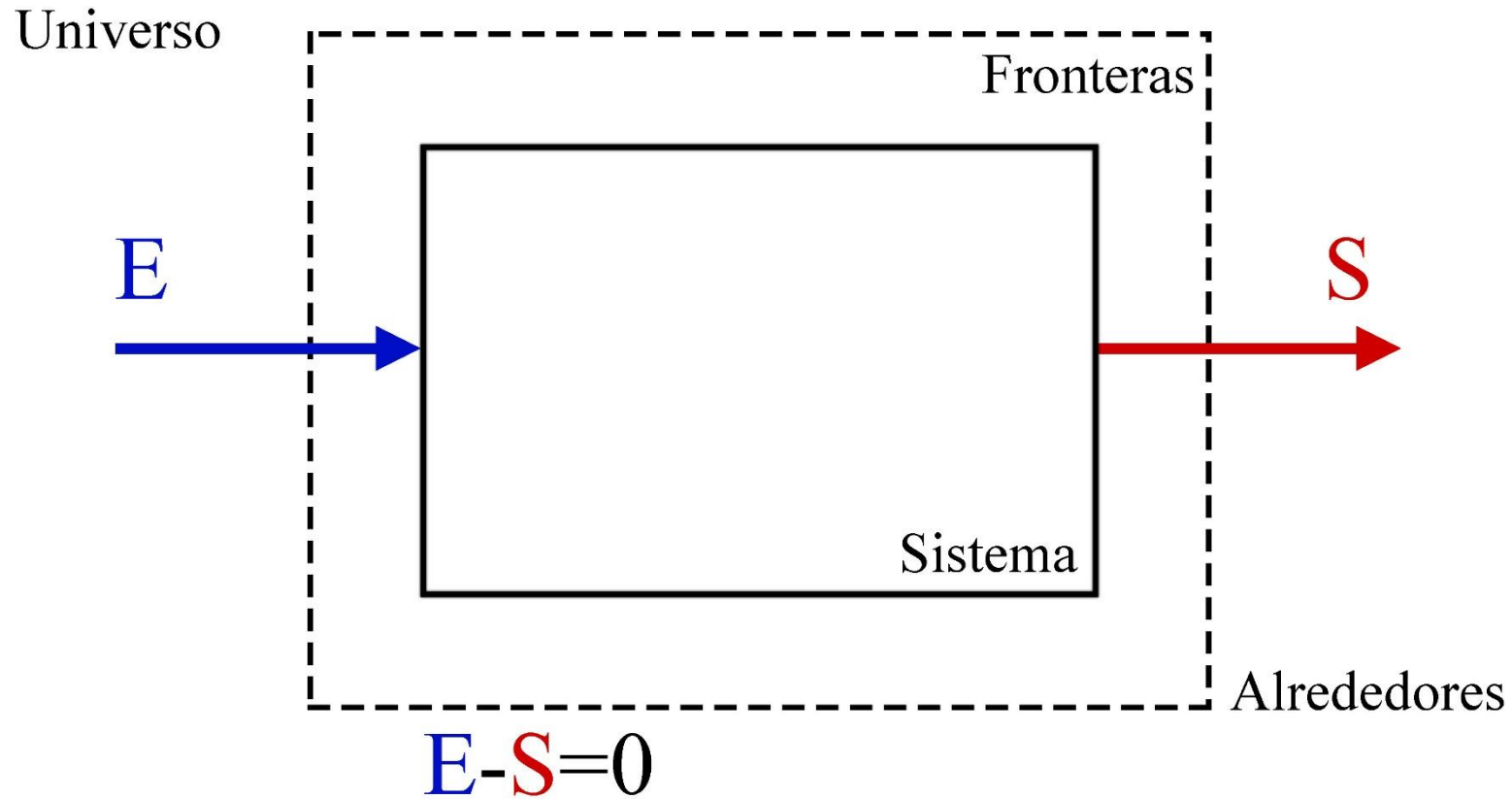
La información que obtengo de un balance macroscópico de materia es:

- Masas, número de moles, flujos máscicos o flujos molares de las corrientes que participan en el proceso
- Composiciones químicas de las corrientes del proceso
- Términos fuente de las reacciones químicas del proceso

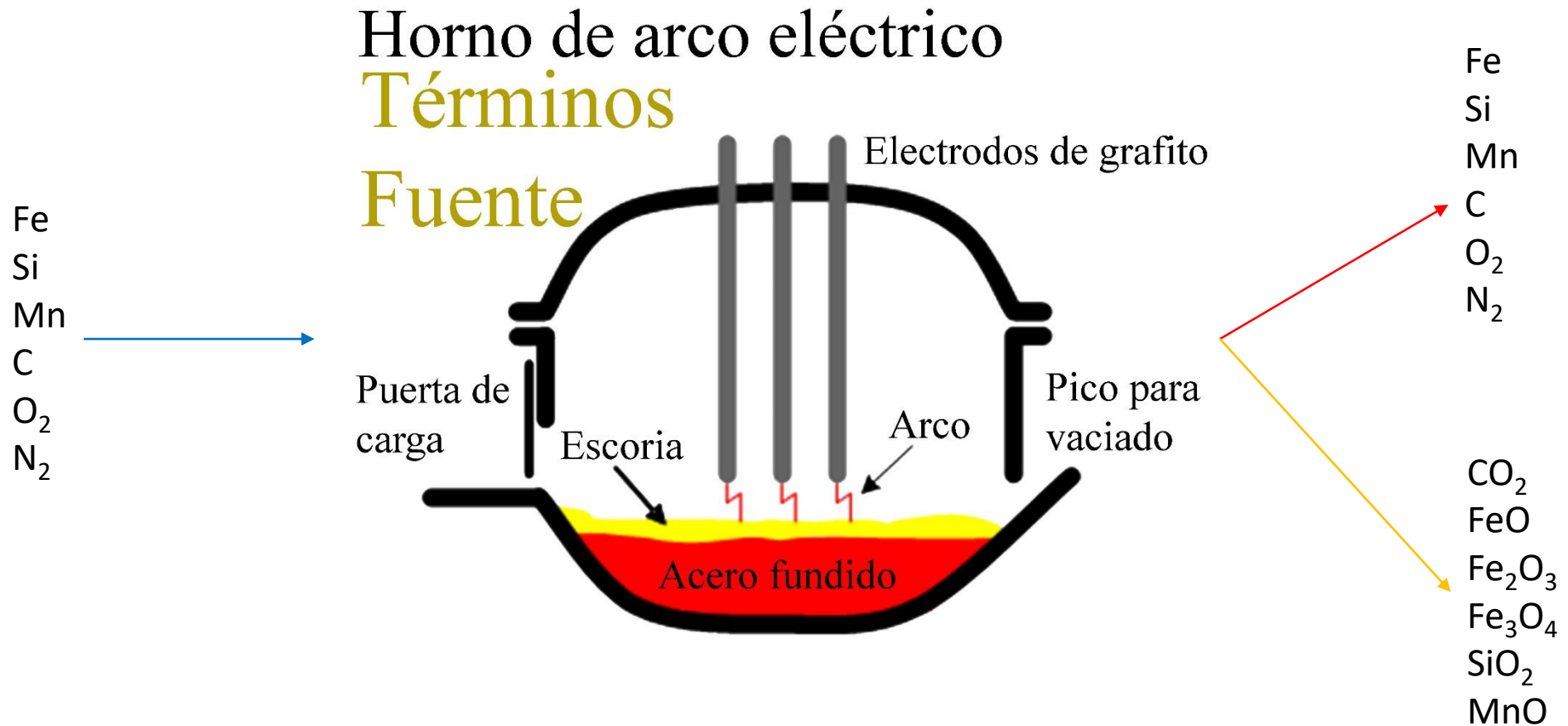
Ecuación de balance macroscópico de materia



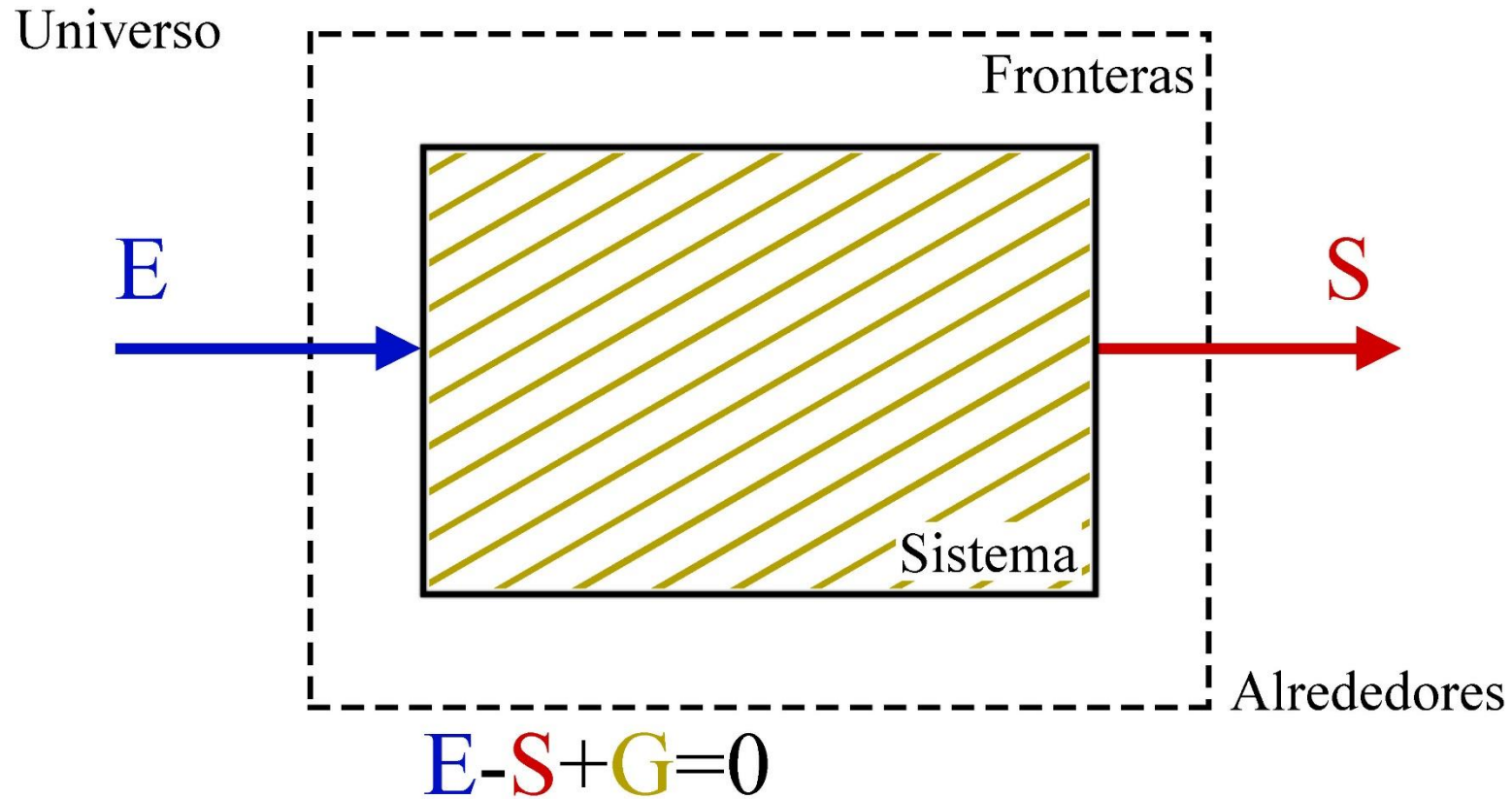
Ecuación de balance macroscópico de materia



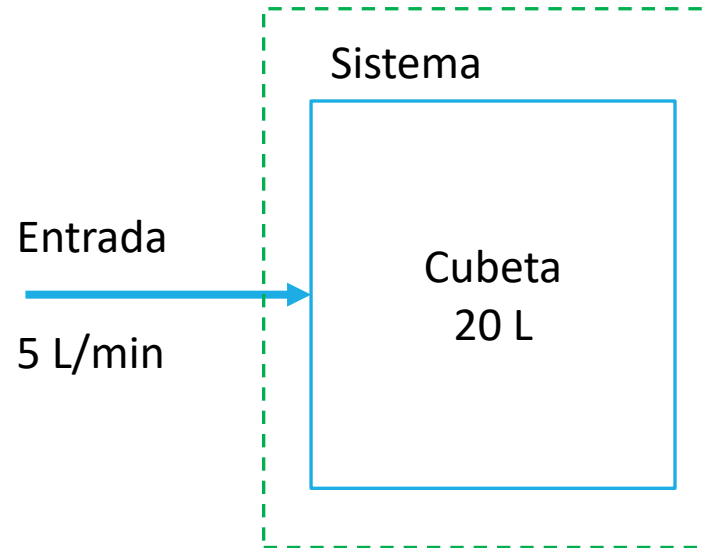
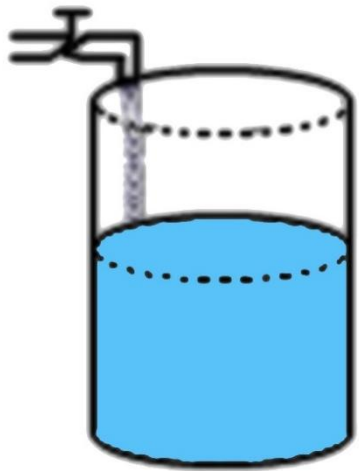
Ecuación de balance macroscópico de materia



Ecuación de balance macroscópico de materia



Ecuación de balance macroscópico de materia



Supongamos que tenemos una cubeta vacía, la cual colocamos bajo un flujo de agua constante, de manera que la misma comienza a llenarse.

La ecuación de balance de materia nos indica:

$$E - S + G = 0$$

En este caso no hay salida de agua:

$$S = 0$$

No hay nada que produzca o consuma agua dentro de la cubeta:

$$G = 0$$

Por lo que la ecuación quedaría:

$$E = 0$$

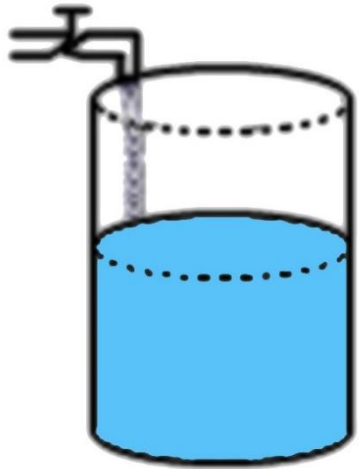
Sin embargo, no es así:

$$E \neq 0$$

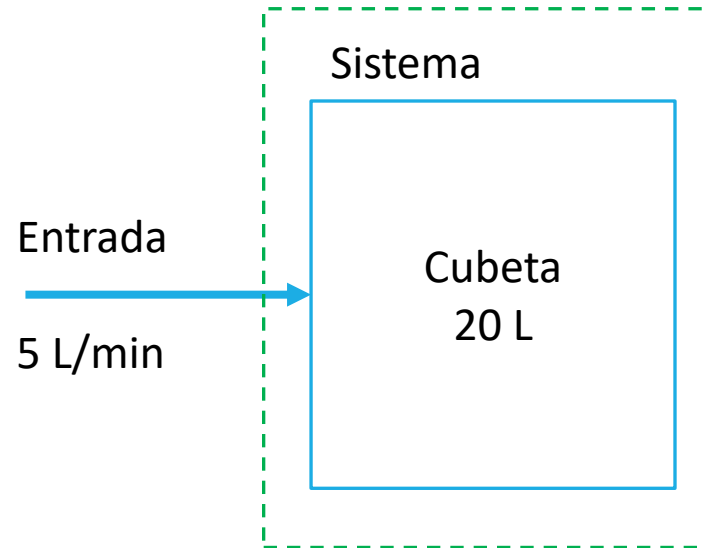
¿Qué está pasando con el agua que introduzco al sistema?

Se está **acumulando**

Ecuación de balance macroscópico de materia



Supongamos que tenemos una cubeta vacía, la cual colocamos bajo un flujo de agua constante, de manera que la misma comienza a llenarse.



Por lo tanto este sistema va a estar en estado **transitorio**:

$$Ac \neq 0$$

Por lo que:

$$E = Ac$$

En este caso la cubeta va a tardar 4 minutos en llenarse de agua.

Tras este tiempo comenzará a desbordarse, por lo que:

$$S \neq 0$$

Hasta que:

$$E - S = 0$$

En ese momento, se dice que el sistema alcanza el estado **estacionario** y por lo tanto:

$$Ac = 0$$

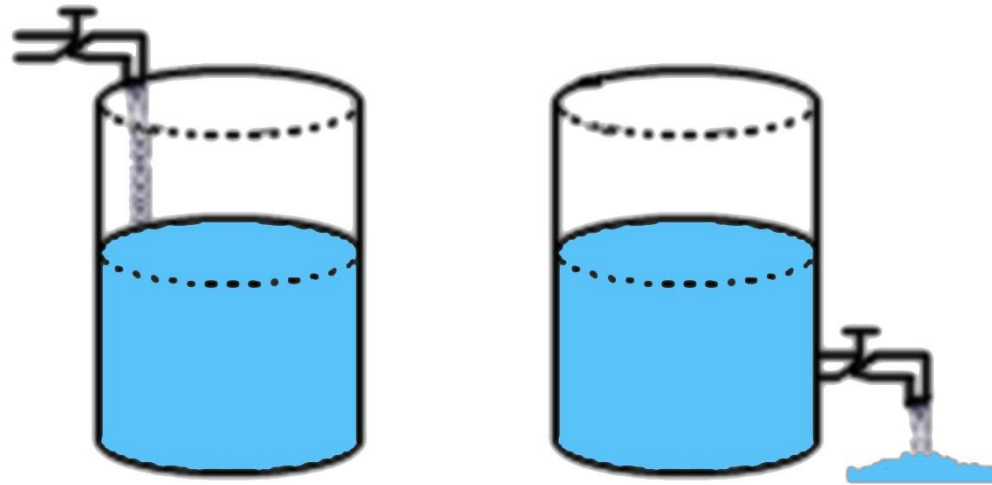
Ecuación de balance macroscópico de materia

Acumulación

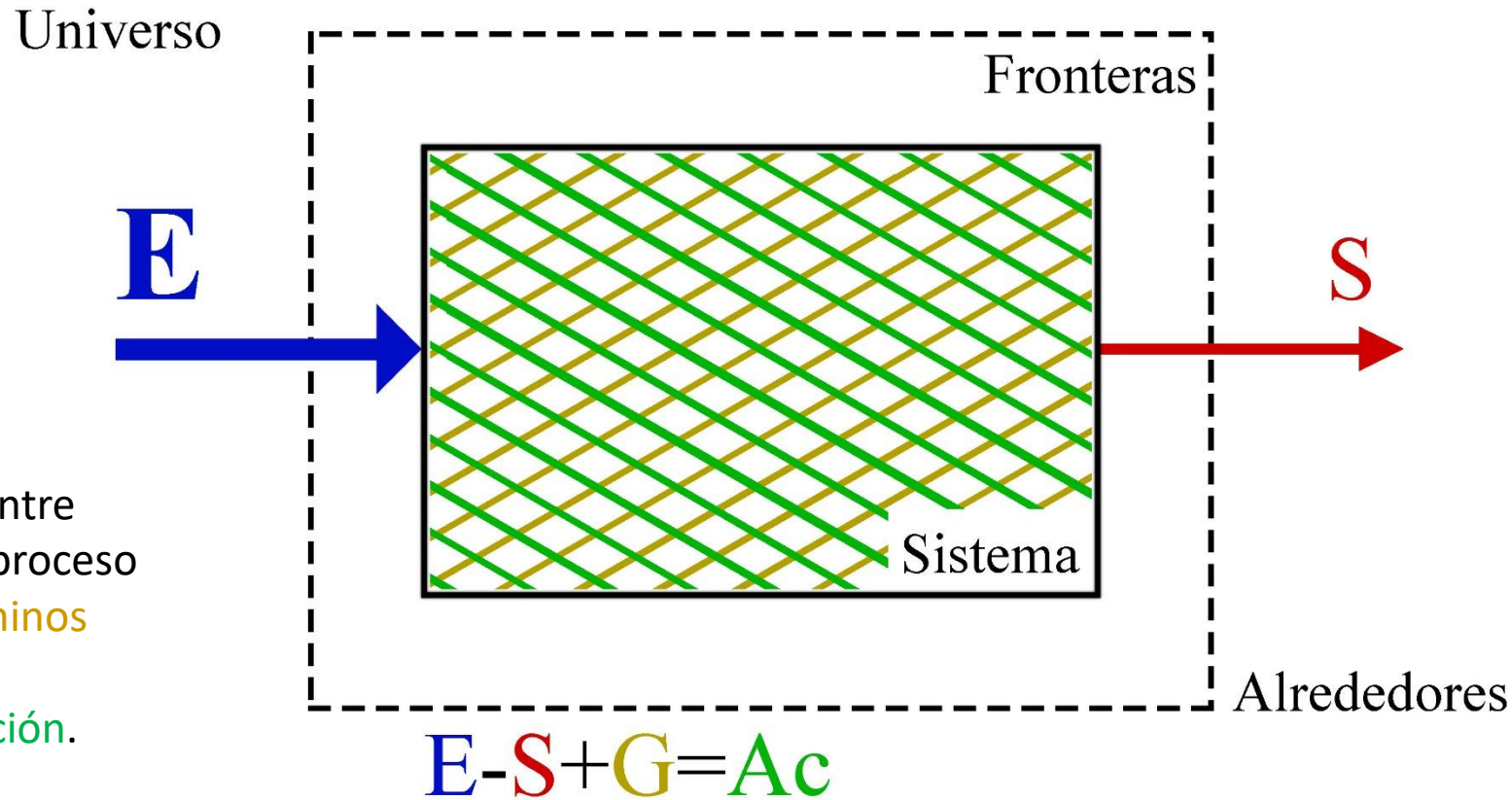
$$Ac = \frac{\partial \star}{\partial t}$$

En un balance de materia

$$Ac = \frac{\partial m}{\partial t}$$

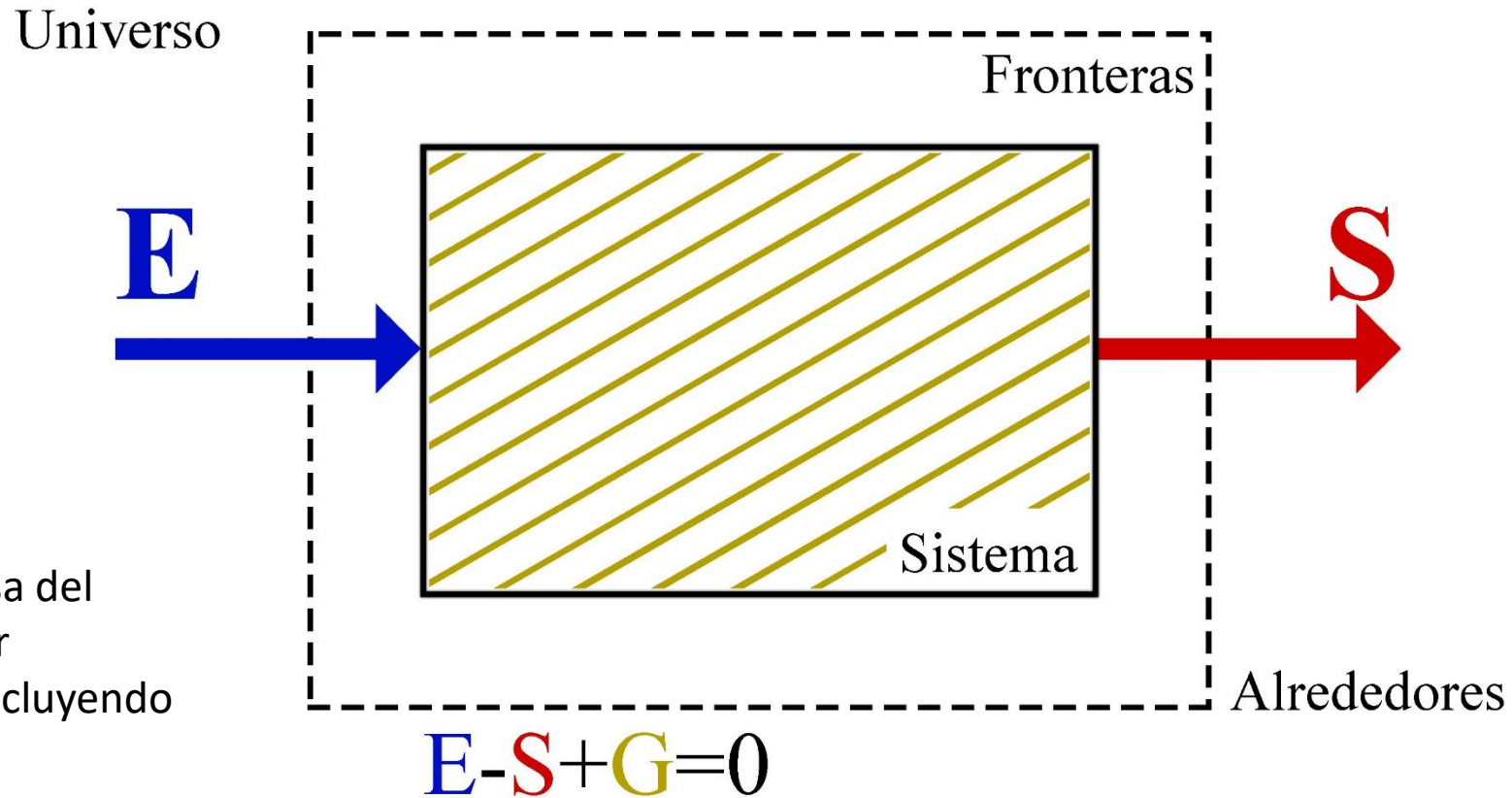


Ecuación de balance macroscópico de materia



Si hay una diferencia entre **entradas** y **salidas** del proceso (considerando los **términos fuente**), tenemos que considerar la **acumulación**.

Ecuación de balance macroscópico de materia



Si se conserva la masa del proceso al considerar **entradas** y **salidas** (incluyendo **términos fuente**), la **acumulación** es cero.

Ecuación de balance macroscópico de materia

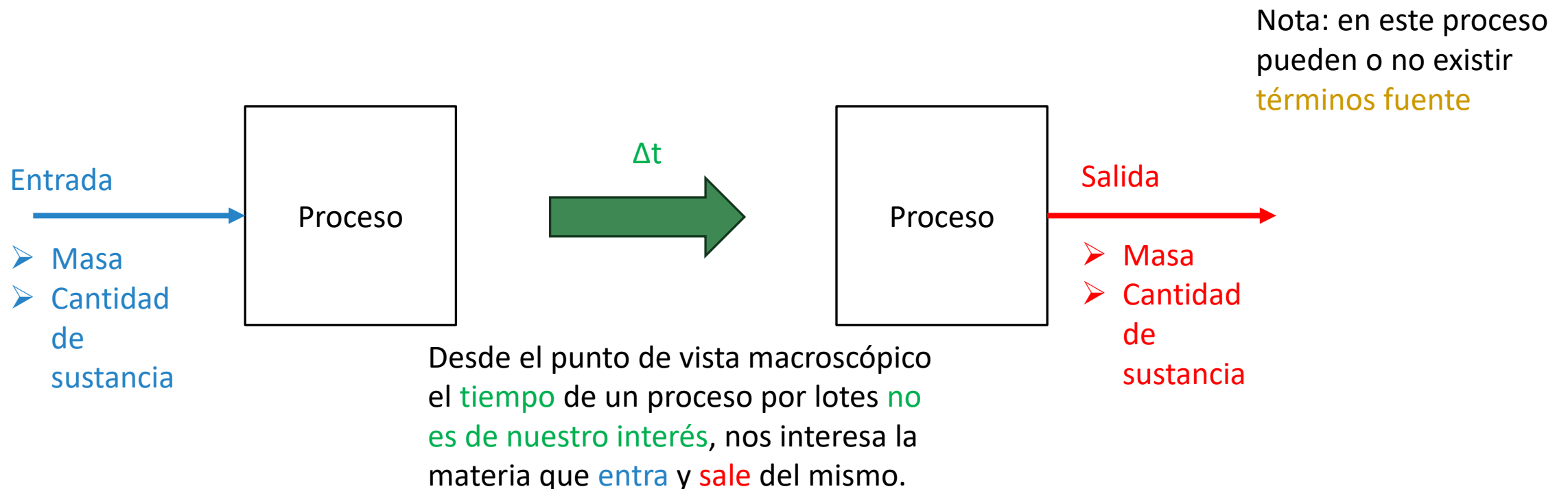
En cuanto al efecto del **tiempo** en los procesos, se pueden considerar dos tipos de procesos:

- Los procesos **por lotes** (también llamados batch).
- Los procesos **continuos**.

Esta clasificación es importante para saber como cuantificar la **acumulación** en un cálculo.

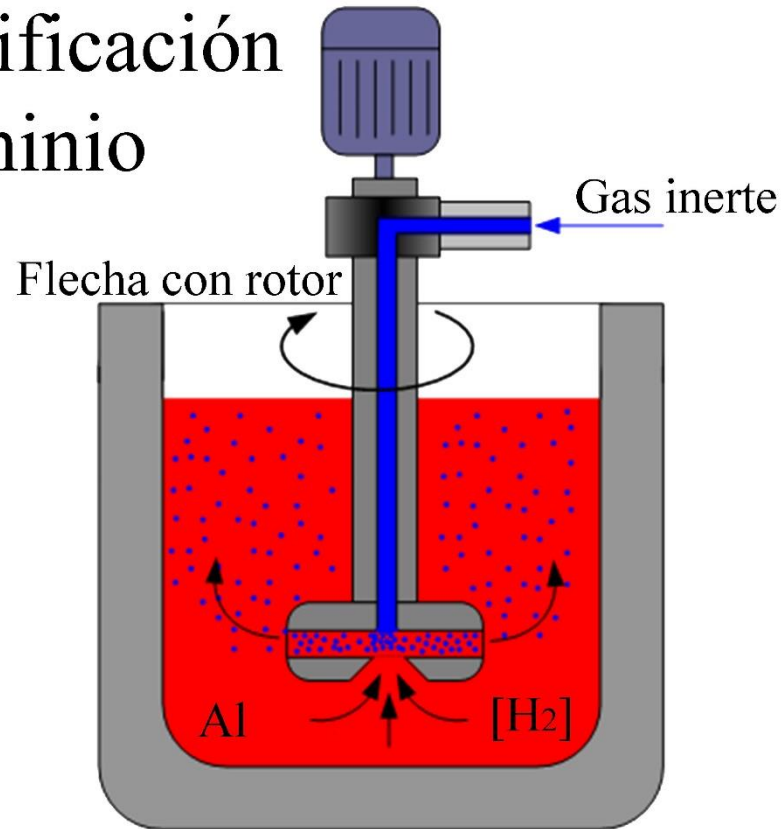
Ecuación de balance macroscópico de materia

Los procesos por lotes son aquellos, en los que se alimentan **masas o cantidad de sustancia de entrada** y tras **cierto tiempo de procesamiento** se obtienen **masas o cantidad de sustancia de salida**.



Ecuación de balance macroscópico de materia

Desgasificación
de aluminio



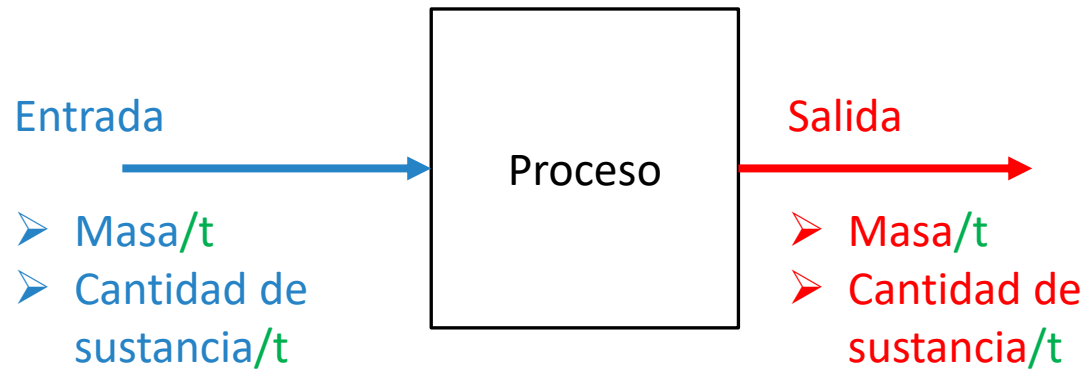
Ejemplo de **proceso**
por lotes o
proceso **batch**

Por definición
 $Ac = 0$

Ecuación de balance macroscópico de materia

Los procesos continuos son aquellos, en los que se alimentan **flujos másicos o molares de entrada** y se obtienen **flujos másicos o molares de salida**, ya que el proceso se lleva a cabo a lo largo del **tiempo**.

Nota: en este proceso pueden o no existir **términos fuente**

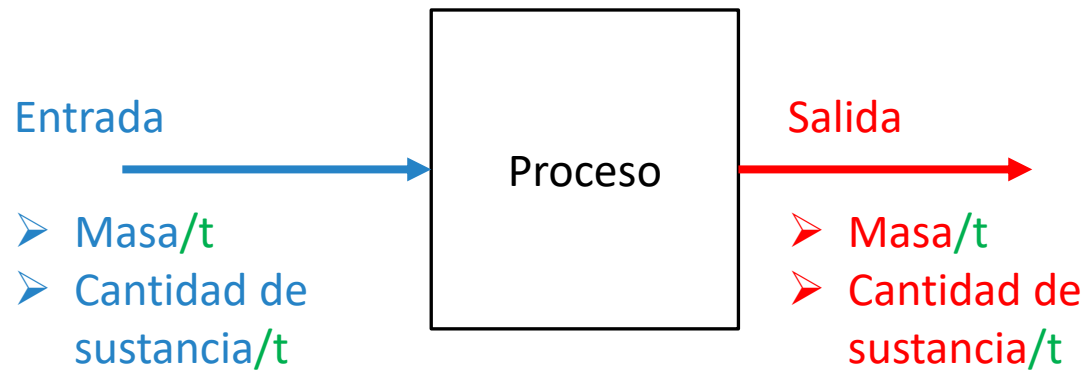


Desde el punto de vista macroscópico en este tipo de procesos el **tiempo** siempre se tiene que considerar, ya que continuamente **entran** y **salen** corrientes de materia.

Ecuación de balance macroscópico de materia

Los procesos continuos pueden ser **estacionarios** o **transitorios**.

Nota: en este proceso pueden o no existir **términos fuente**

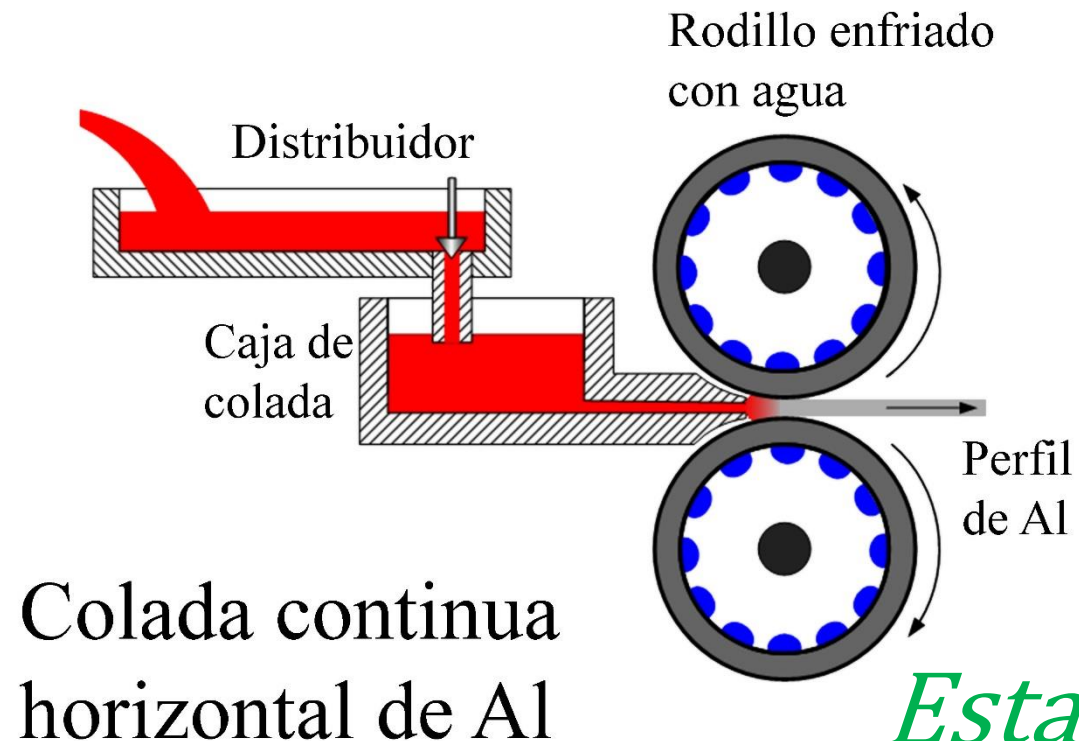


Si los flujos de **entrada** y **salida** permanecen **constantes a lo largo del tiempo**, es un proceso en estado **estacionario**.

En cambio, si tenemos **variaciones** en los flujos de **entrada** o **salida** del proceso **a lo largo del tiempo**, es un procesos en estado **transitorio**.

Ecuación de balance macroscópico de materia

Ejemplo de **proceso continuo**

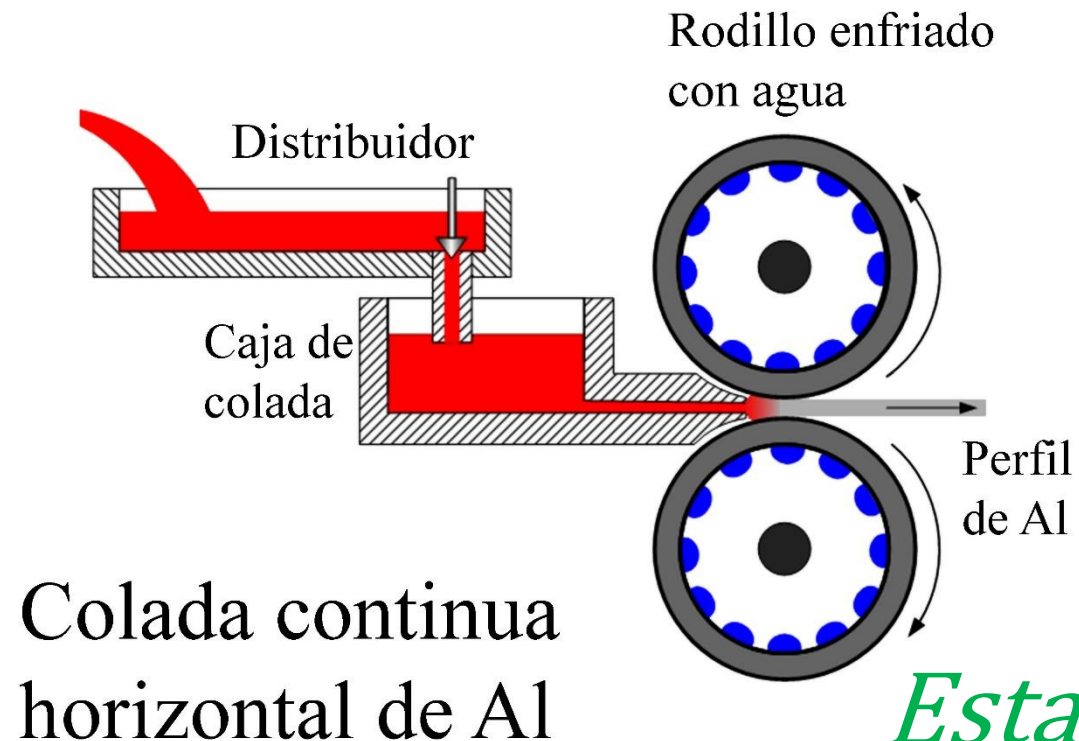


Estado estacionario

$$Ac = 0$$

Ecuación de balance macroscópico de materia

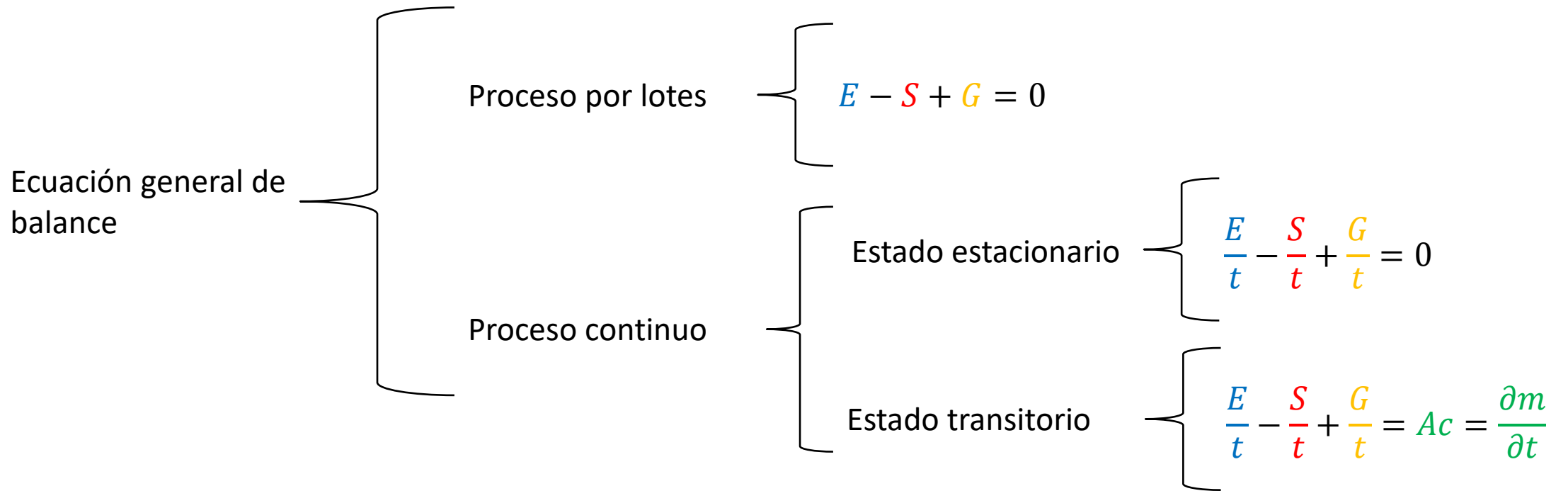
Ejemplo de **proceso continuo**



Estado transitorio

$$A_c \neq 0$$

Ecuación de balance macroscópico de materia



Ecuación de balance macroscópico de materia

$$E - S + G = Ac$$

Entradas:

Pasan por las fronteras

$$\frac{E}{A_{\perp}}$$

Para un proceso continuo

$$\text{Flujo } \frac{E}{t}$$

$$\text{Flux } \frac{E}{A_{\perp} t}$$

Salidas:

Pasan por las fronteras

$$\frac{S}{A_{\perp}}$$

Para un proceso continuo

$$\text{Flujo } \frac{S}{t}$$

$$\text{Flux } \frac{S}{A_{\perp} t}$$

Términos Fuente:

Dentro del volumen

$$\frac{G}{V}$$

Para un proceso continuo

$$\frac{G}{V t}$$

Acumulación:

Dentro del volumen

$$\frac{Ac}{V}$$

Solo en proceso continuo

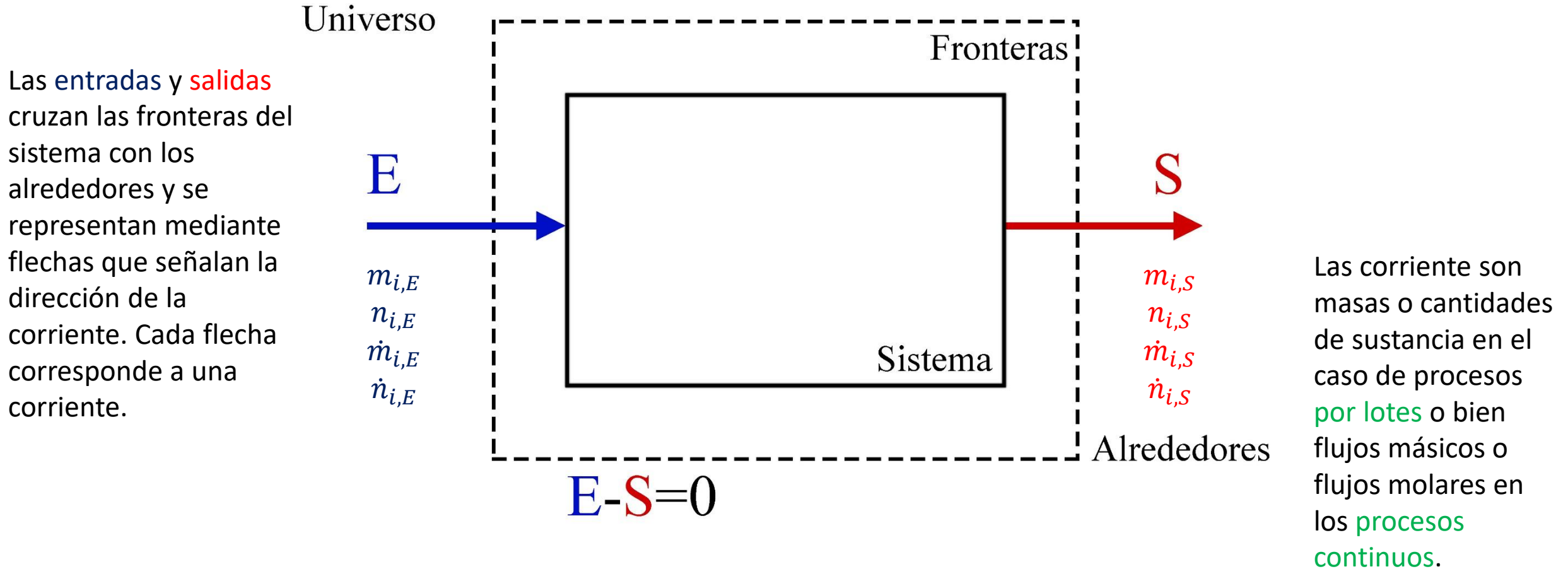
$$\frac{\partial \star}{V \partial t}$$

Nomenclatura para los balances

¿A que corresponde cada término dentro de mi ecuación general de balance?

$$E - S + G = Ac$$

Nomenclatura para los balances



Nomenclatura para los balances

BALANCE MÁSIKO

Los balances se dan sobre corrientes (entradas o salidas) y se debe considerar ya sea cada elemento o cada compuesto que intervenga en el proceso.

m_i masa del elemento o compuesto i

m_T masa total de la corriente T

$W_{i,T} = \frac{m_i}{m_T}$ fracción masa del elemento o compuesto i en la corriente T

$m_{i,T}$ masa del elemento o compuesto i en la corriente T

BALANCE MOLAR

Los balances de materia se pueden llevar a cabo considerando masa o cantidad de sustancia, siendo un balance másico o molar respectivamente.

n_i cantidad de sustancia del elemento o compuesto i

n_T cantidad de sustancia total de la corriente T

$X_{i,T} = \frac{n_i}{n_T}$ fracción mol del elemento o compuesto i en la corriente T

$n_{i,T}$ cantidad de sustancia del elemento o compuesto i en la corriente T

Nomenclatura para los balances

BALANCE MÁSIKO

En el caso de un proceso continuo se debe considerar que se balancean flujos.

$\dot{m}_i = \frac{m_i}{t}$ flujo másico del elemento o compuesto i

$\dot{m}_T = \frac{m_T}{t}$ flujo másico total de la corriente T

$W_{i,T} = \frac{\dot{m}_i}{\dot{m}_T}$ fracción masa del elemento o compuesto i en la corriente T

$\dot{m}_{i,T}$ flujo másico del elemento o compuesto i en la corriente T

BALANCE MOLAR

Los flujos pueden ser másicos o molares dependiendo del balance que se desee realizar.

$\dot{n}_i = \frac{n_i}{t}$ flujo molar del elemento o compuesto i

$\dot{n}_T = \frac{n_T}{t}$ flujo molar total de la corriente T

$X_{i,T} = \frac{\dot{n}_i}{\dot{n}_T}$ fracción mol del elemento o compuesto i en la corriente T

$\dot{n}_{i,T}$ flujo molar del elemento o compuesto i en la corriente T

Nomenclatura para los balances

BALANCE MÁSIKO

Relación entre corrientes y fracción

$$m_{i,T} = W_{i,T} m_T = \frac{m_i}{m_T} m_T$$

$$\dot{m}_{i,T} = W_{i,T} \dot{m}_T = \frac{\dot{m}_i}{\dot{m}_T} \dot{m}_T$$

Porcentaje másico

$$w/o = W_{i,T} * 100\%$$

Generalmente para sólidos y líquidos

BALANCE MOLAR

Relación entre corrientes y fracción

$$n_{i,T} = X_{i,T} n_T = \frac{n_i}{n_T} n_T$$

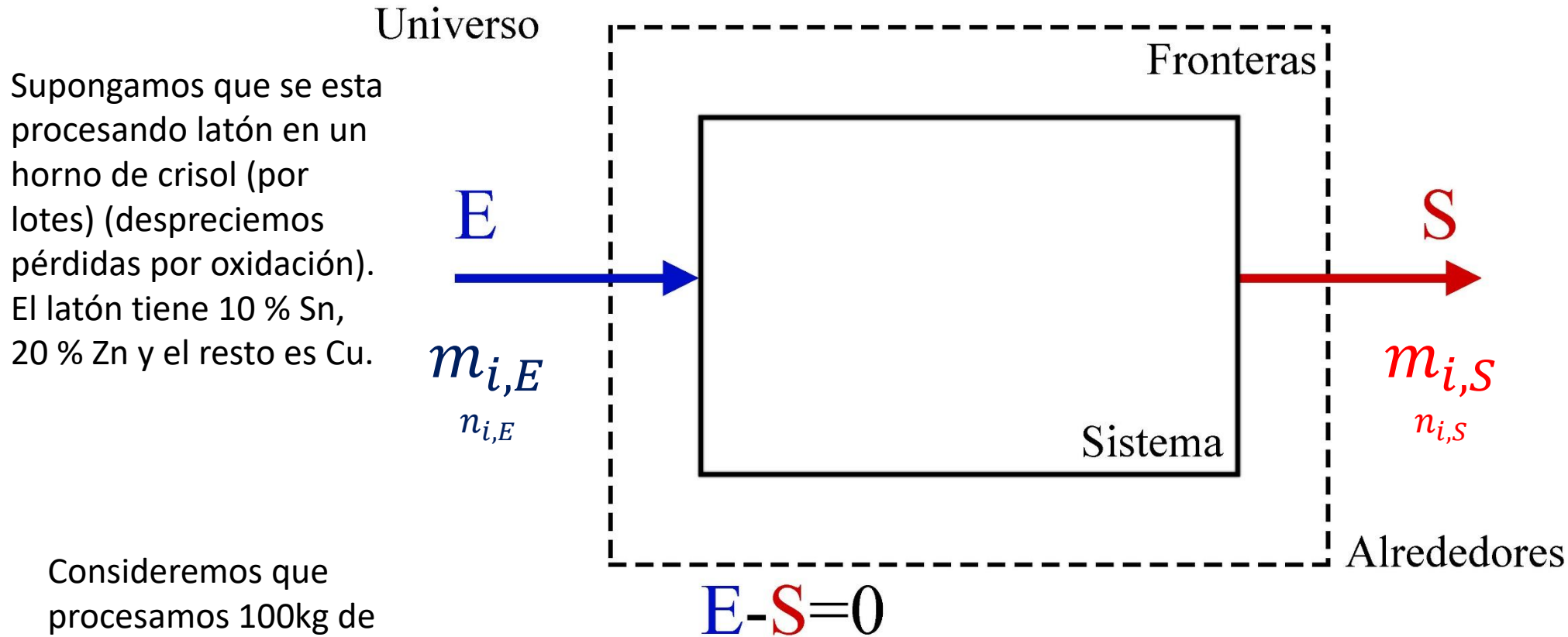
$$\dot{n}_{i,T} = X_{i,T} \dot{n}_T = \frac{\dot{n}_i}{\dot{n}_T} \dot{n}_T$$

Porcentaje molar

$$o/o = X_{i,T} * 100\%$$

Generalmente para gases

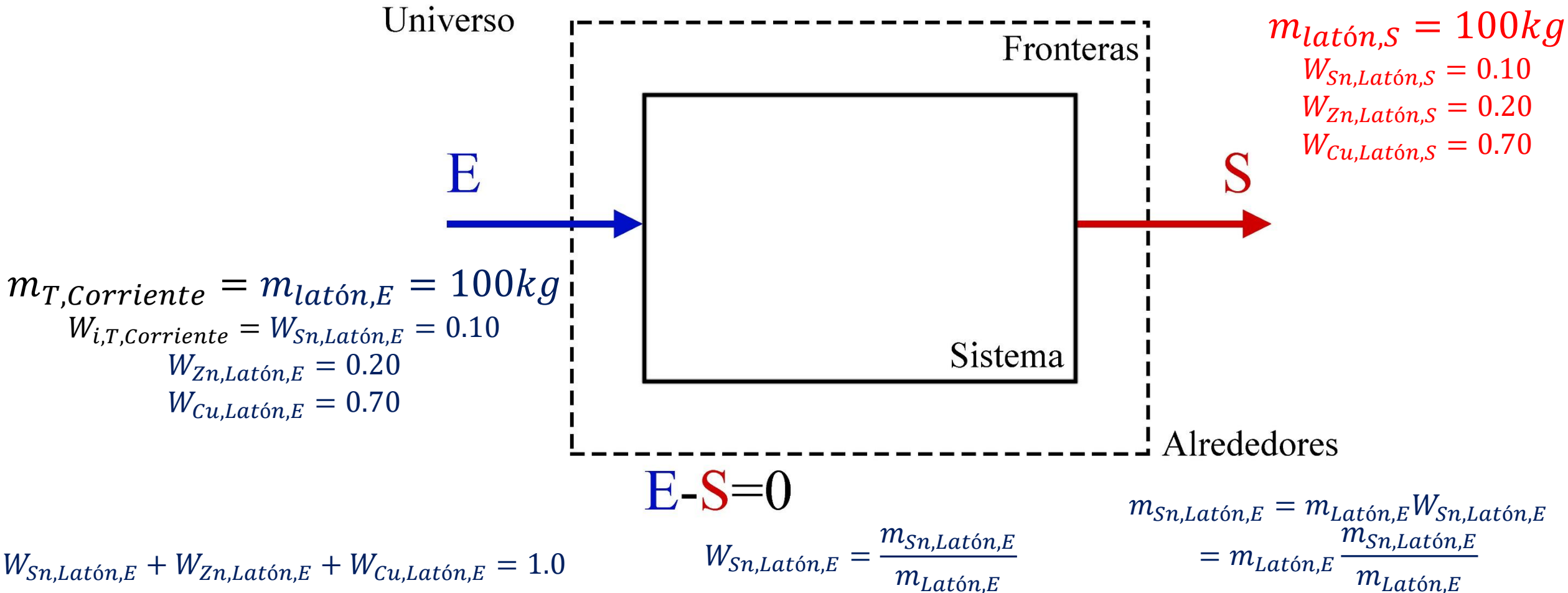
Nomenclatura para los balances



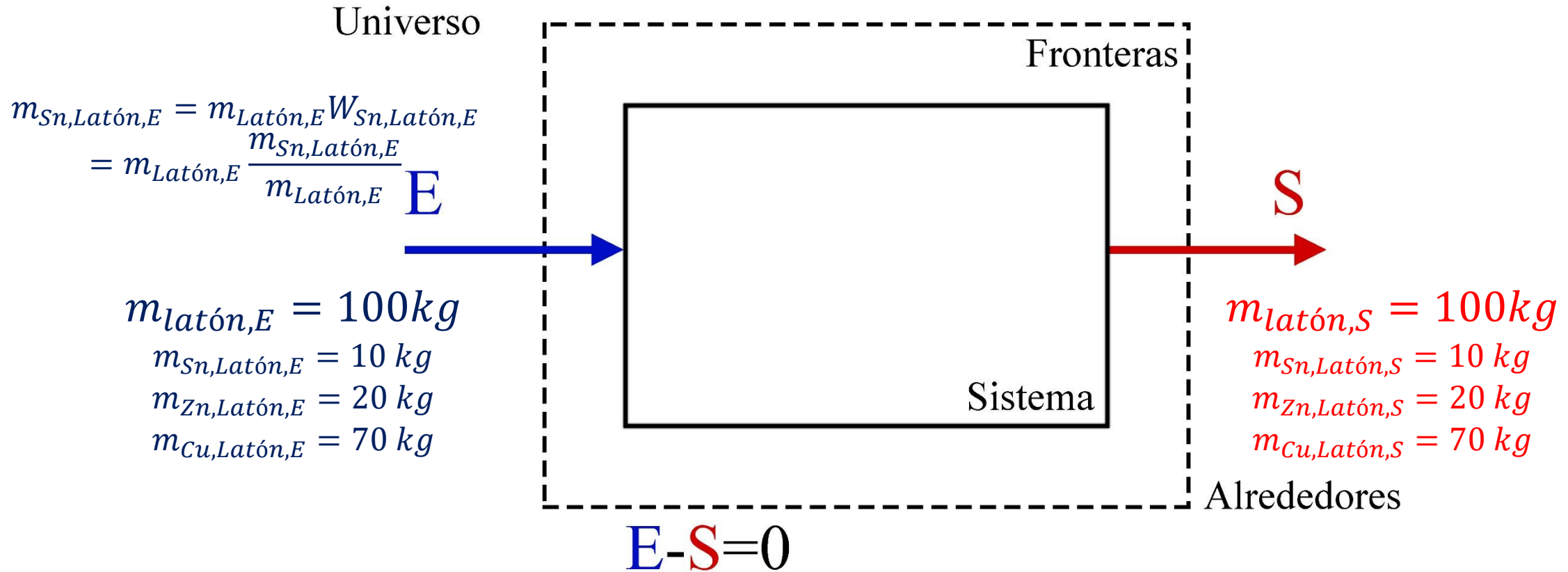
En este caso las entradas y salidas son masas y vamos a considerar que son iguales.

Nota: el balance también puede ser molar, pero habría que realizar las conversiones correspondientes.

Nomenclatura para los balances



Nomenclatura para los balances



Nomenclatura para los balances

Dimensión	Másico	Molar	Energía térmica
Componente i-ésimo	m_i	n_i	Q_i o H_i
Flujo	$\dot{m}_i = \frac{m_i}{t}$	$\dot{n}_i = \frac{n_i}{t}$	Q_i o H_i
Flux	$J_i = \frac{\dot{m}_i}{A_{\perp}} = \frac{m_i}{A_{\perp} t}$	$\dot{N}_i = \frac{\dot{n}_i}{A_{\perp}} = \frac{n_i}{A_{\perp} t}$	$q_i = \frac{Q_i}{A_{\perp}}$
Fracción	$W_{i,T} = \frac{m_i}{m_T}$	$X_{i,T} = \frac{n_i}{n_T}$ Para gases $X_{i,T} = \frac{V_i}{V_T} = \frac{n_i}{n_T}$	----

Nomenclatura para los balances

Para el termino fuente del elemento o compuesto i debido a la reacción j se puede usar la siguiente nomenclatura:

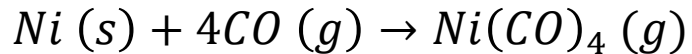
$$G_{i,RXN j}$$

Los términos fuente se pueden relacionar entre sí, esto se hace considerando la estequiometria de la reacción, hay que verificar que las unidades empleadas para el balance se respeten.

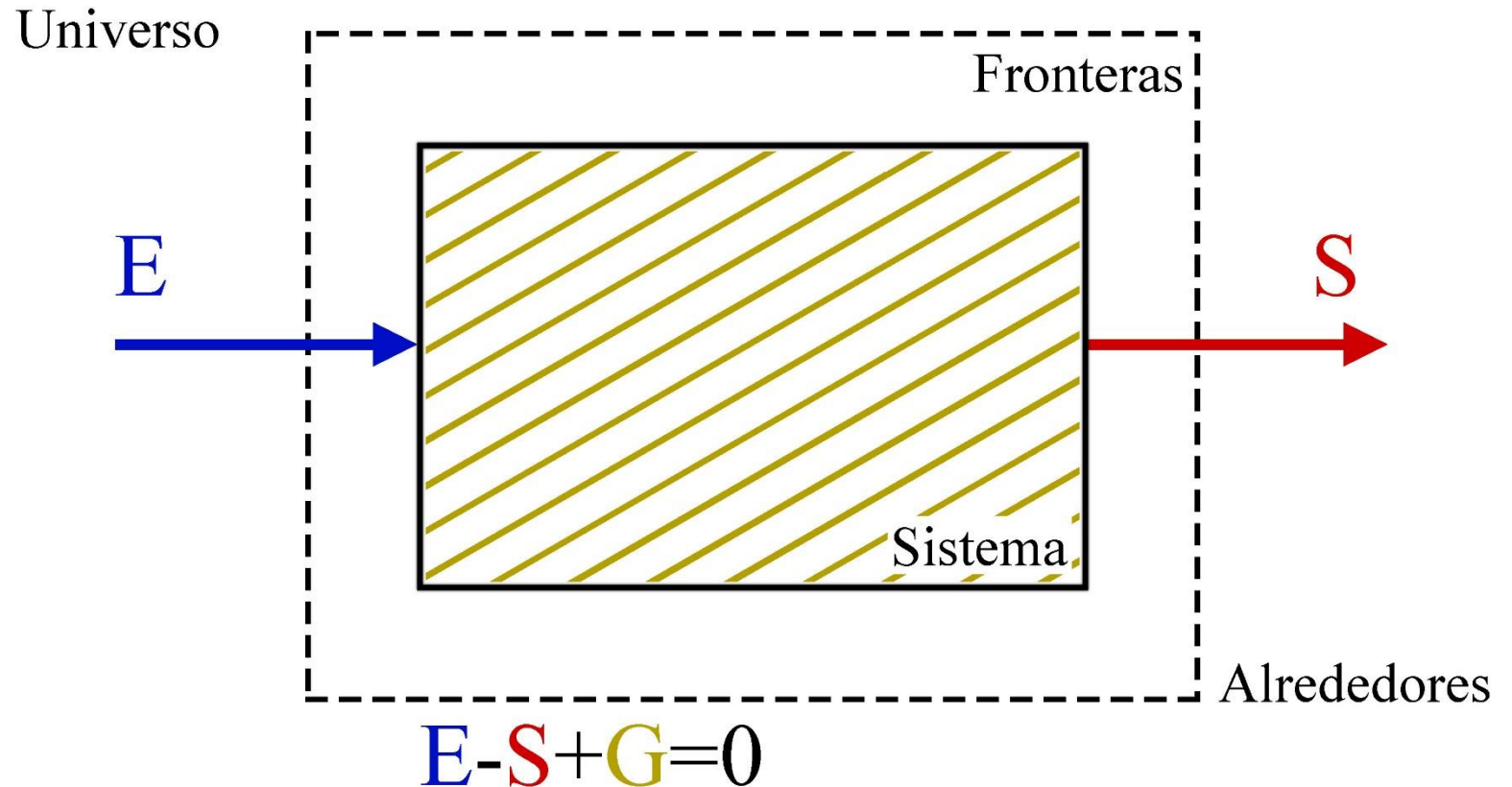
Ecuación de balance macroscópico de materia

Consideremos el siguiente ejemplo:

Se puede purificar níquel con CO (g) a elevadas presiones, formando Ni(CO)₄ (g). En un experimento de laboratorio, 150 ft³/min en condiciones estándar de temperatura y presión (STP) de CO se alimentan a un horno de lecho fluidizado junto con 5 lb/min de Ni el cual contiene 12% de impurezas. Considere que la reacción química que se lleva a cabo es:

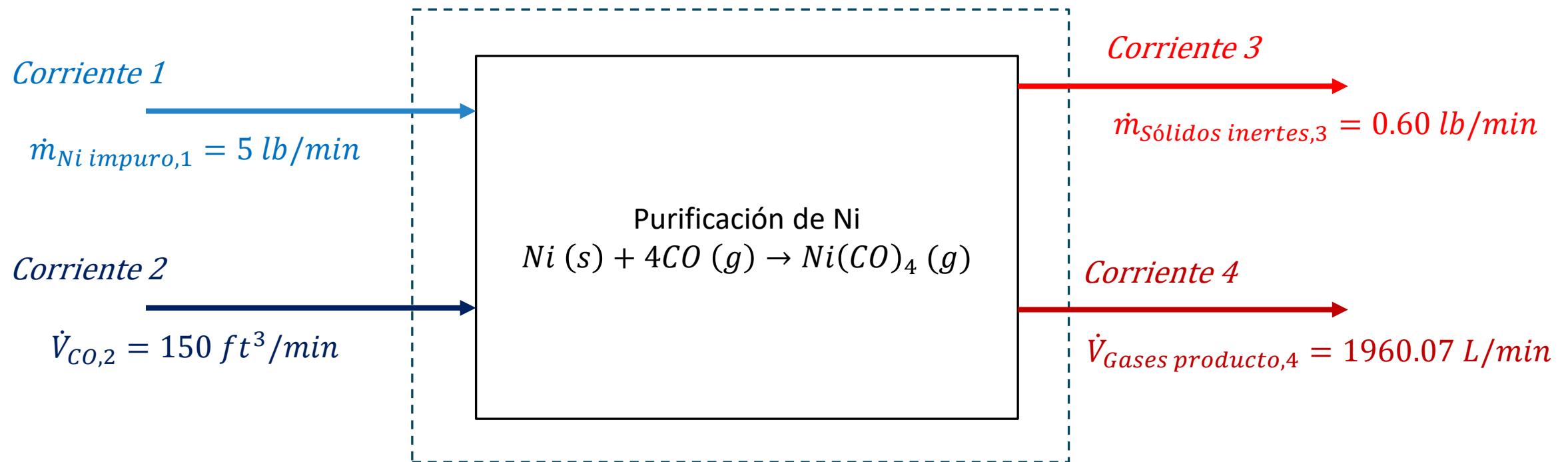


Nota: Los datos y resolución del problema se encuentran en el apunte correspondiente.



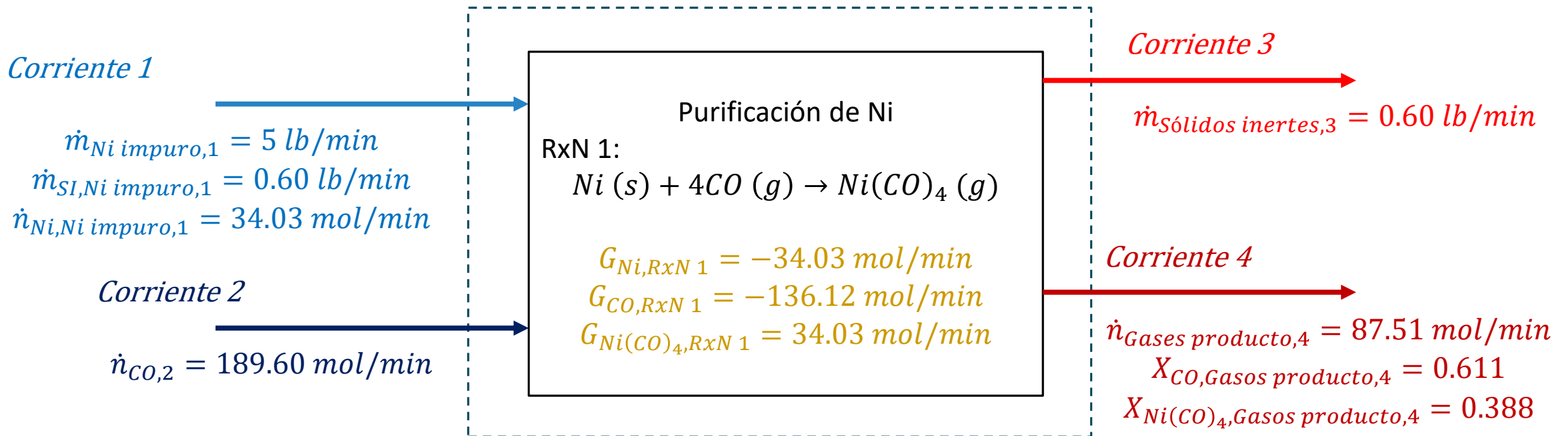
Nomenclatura para los balances

De la resolución del problema conocemos:



Nomenclatura para los balances

Si consideramos los datos de los flujos molares quedaría:

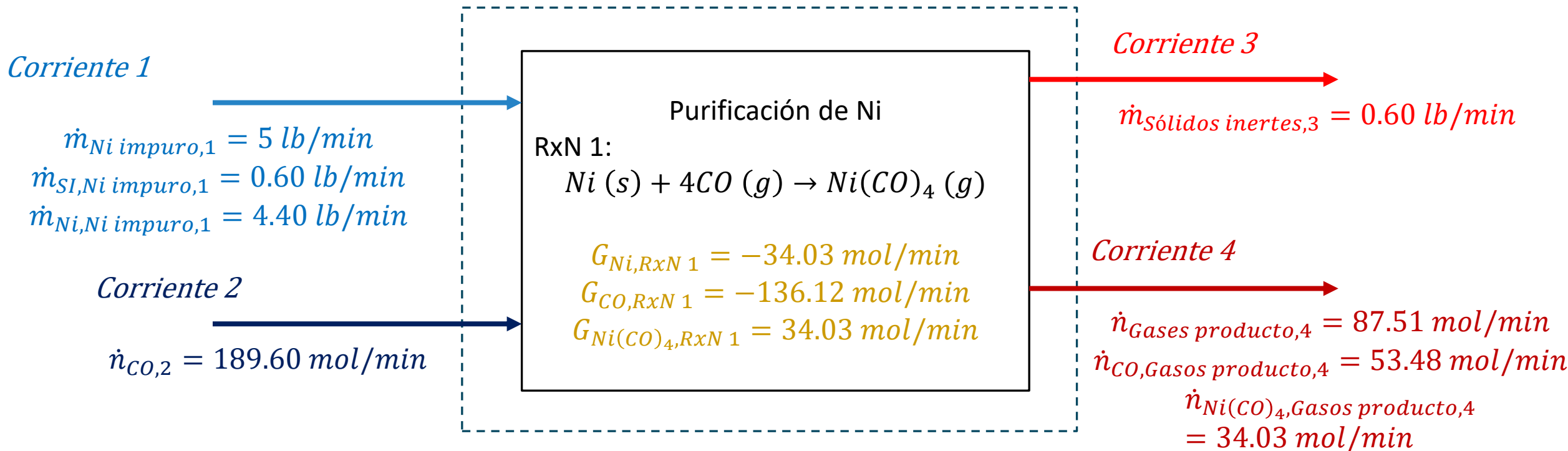


Los **términos fuente** siempre se colocan al interior del sistema y llevan signo negativo o positivo si se trata de reactivos o productos respectivamente.

Nota: cuando el balance se realiza con la cantidad de sustancia, frecuentemente los moles de entrada y salida no coinciden, por la diferencia debido a la estequiometría.

Nomenclatura para los balances

Si consideramos los datos de los flujos molares quedaría:



$$\dot{m}_{Ni, Ni \text{ impuro},1} = \left(34.03 \frac{\text{mol}}{\text{min}} \right) \left(\frac{58.69 \text{ g}}{1 \text{ mol}} \right) \left(\frac{1 \text{ lb}}{454 \text{ g}} \right)$$

Nota: Para verificar el balance es una buena practica convertir todos los datos a masa o flujos másicos.

Nomenclatura para los balances

Si consideramos los datos de los flujos molares quedaría:

Corriente 1

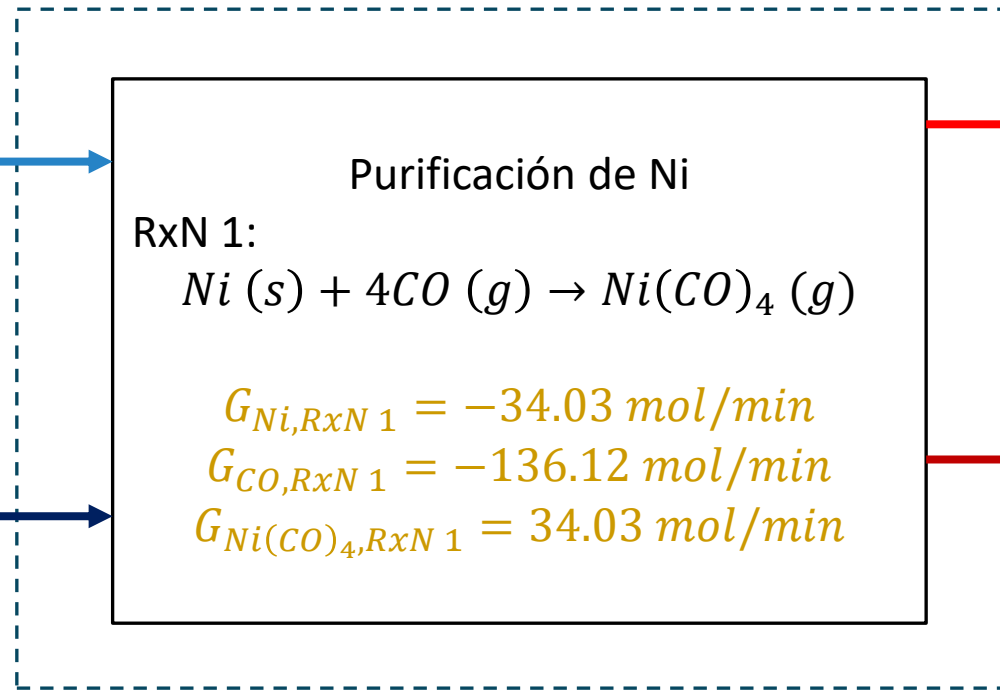
$$\dot{m}_{Ni \text{ impuro},1} = 5 \text{ lb/min}$$

$$\dot{m}_{SI, Ni \text{ impuro},1} = 0.60 \text{ lb/min}$$

$$\dot{m}_{Ni, Ni \text{ impuro},1} = 4.40 \text{ lb/min}$$

Corriente 2

$$\dot{m}_{CO,2} = 11.69 \text{ lb/min}$$



Corriente 3

$$\dot{m}_{\text{Sólidos inertes},3} = 0.60 \text{ lb/min}$$

Corriente 4

$$\dot{n}_{\text{Gases producto},4} = 16.09 \text{ mol/min}$$

$$\dot{m}_{CO, \text{Gases producto},4} = 3.30 \text{ lb/min}$$

$$\dot{m}_{Ni(CO)_4, \text{Gases producto},4} = 12.79 \text{ lb/min}$$

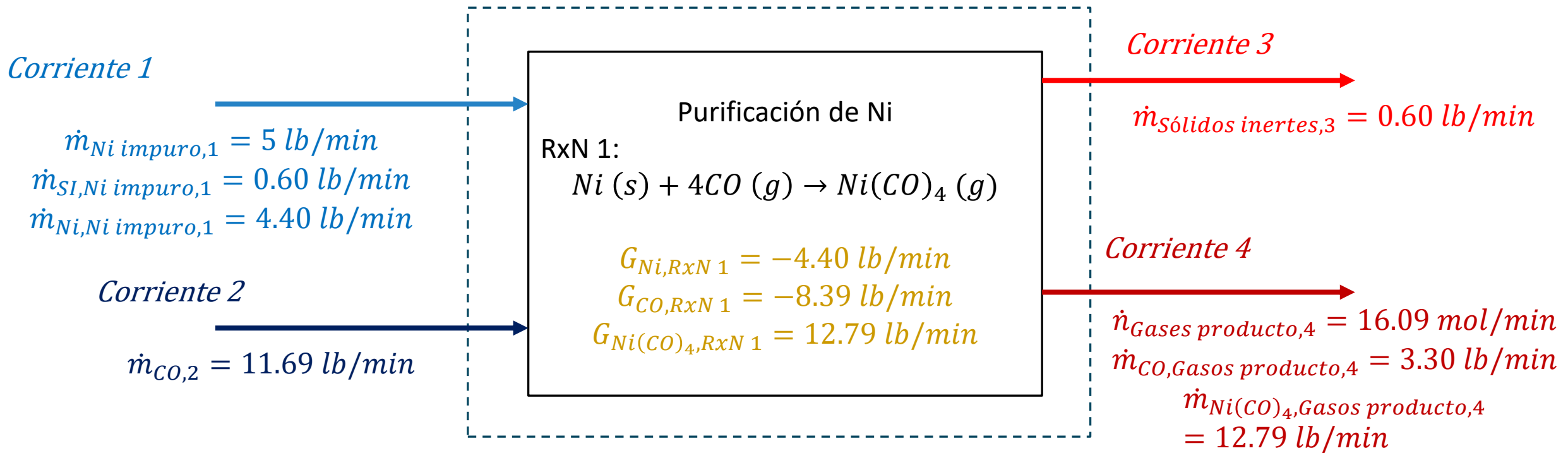
$$\dot{m}_{CO,2} = \left(189.60 \frac{\text{mol}}{\text{min}} \right) \left(\frac{28 \text{ g}}{1 \text{ mol}} \right) \left(\frac{1 \text{ lb}}{454 \text{ g}} \right)$$

$$\dot{m}_{CO,4} = \left(53.48 \frac{\text{mol}}{\text{min}} \right) \left(\frac{28 \text{ g}}{1 \text{ mol}} \right) \left(\frac{1 \text{ lb}}{454 \text{ g}} \right)$$

$$\dot{m}_{Ni(CO)_4,4} = \left(34.03 \frac{\text{mol}}{\text{min}} \right) \left(\frac{170.73 \text{ g}}{1 \text{ mol}} \right) \left(\frac{1 \text{ lb}}{454 \text{ g}} \right)$$

Nomenclatura para los balances

Si consideramos los datos de los flujos molares quedaría:



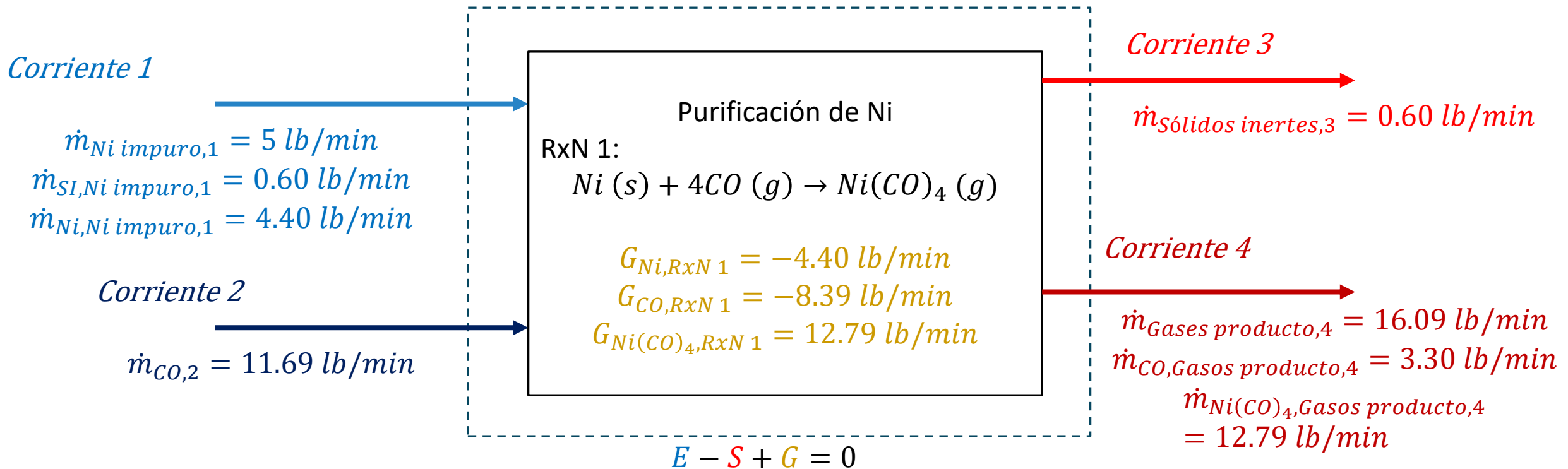
$$G_{Ni, RxN 1} = - \left(34.03 \frac{\text{mol}}{\text{min}} \right) \left(\frac{58.69 \text{ g}}{1 \text{ mol}} \right) \left(\frac{1 \text{ lb}}{454 \text{ g}} \right)$$

$$G_{CO, RxN 1} = - \left(136.12 \frac{\text{mol}}{\text{min}} \right) \left(\frac{28 \text{ g}}{1 \text{ mol}} \right) \left(\frac{1 \text{ lb}}{454 \text{ g}} \right)$$

$$G_{Ni(CO)_4, RxN 1} = \left(34.03 \frac{\text{mol}}{\text{min}} \right) \left(\frac{170.73 \text{ g}}{1 \text{ mol}} \right) \left(\frac{1 \text{ lb}}{454 \text{ g}} \right)$$

Nomenclatura para los balances

Si consideramos los datos de los flujos molares quedaría:



$$\dot{m}_{Ni \text{ impuro},1} + \dot{m}_{CO,2} - \dot{m}_{\text{sólidos inertes},3} - \dot{m}_{\text{Gases producto},4} + G_{Ni, RxN 1} + G_{CO, RxN 1} + G_{Ni(CO)_4, RxN 1} = 0$$

$$5 \text{ lb/min} + 11.69 \text{ lb/min} - 0.60 \text{ lb/min} - 16.09 \text{ lb/min} + (-4.40 \text{ lb/min}) + (-8.39 \text{ lb/min}) + 12.79 \text{ lb/min} = 0$$

Pasos para realizar un balance macroscópico de materia

¿Cómo realizo un balance macroscópico de materia?

¿Qué consideraciones debo tener?

Pasos para realizar un balance macroscópico de materia

- 1.- Conocer el proceso y definir el sistema a estudiar, incluyendo las suposiciones que se tendrán en el mismo.
- 2.- Realizar un esquema del proceso, en el cual se observen todas las entradas, salidas, términos fuente y las fronteras del sistema. En este punto se puede realizar una nueva definición del sistema simplemente colocando las fronteras del proceso donde sea más conveniente.
- 3.- Colocar todos los datos conocidos del proceso en el esquema previamente realizado, es decir, todos los flujos, composiciones químicas y reacciones químicas que se lleven a cabo en el mismo, colocar además toda la información extra que se tenga del proceso.

Pasos para realizar un balance macroscópico de materia

- 4.- Seleccionar si es mejor realizar el **balance másico o molar** y si es **necesario** se debe seleccionar una **base de cálculo** para realizar el mismo.
- 5.- **Definir todas las ecuaciones de balance** que se realizarán. En este punto se puede realizar el cálculo de los **grados de libertad** del sistema si se considera necesario.
- 6.- **Escribir todas las ecuaciones de balance**, sustituyendo los datos conocidos en las mismas y de ser necesario dejándolas en función de la composición química y los flujos involucrados.

Pasos para realizar un balance macroscópico de materia

7.- **Resolver el sistema de ecuaciones obtenido**, si es posible se pueden resolver las ecuaciones de balance conforme se van escribiendo.

8.- **Analizar el proceso** o realizar cambios al mismo con base en el balance de materia, también nos puede servir para obtener esquemas o gráficas de control del proceso.

Los pasos antes descritos, si bien **son una metodología que permite la resolución** de muchos balances de materia, **no son rígidos**, es decir, no tienen un orden fijo y se pueden realizar modificaciones en el balance conforme se va realizando el mismo, siempre y cuando se respete la ley de conservación de la materia.

Pasos para realizar un balance macroscópico de materia

Ejemplo de la aplicación de la metodología.

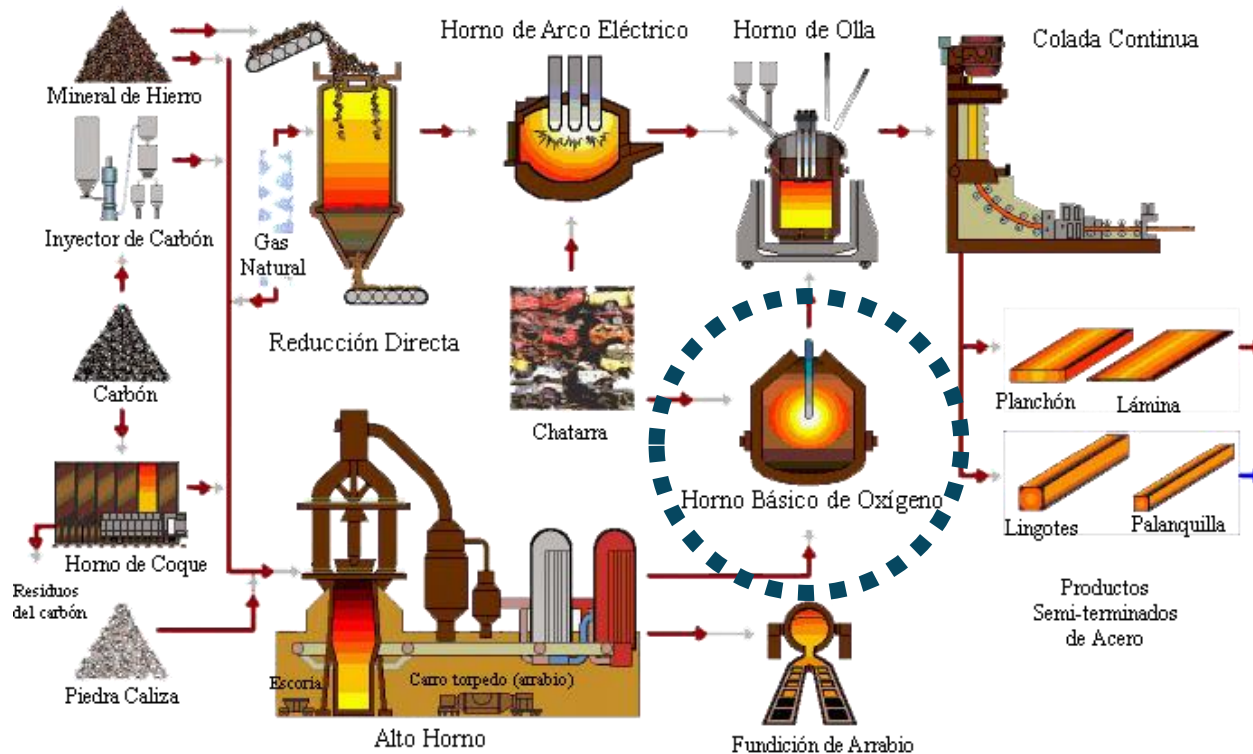
Pasos para realizar un balance macroscópico de materia

1.- **Conocer el proceso** y **definir el sistema** a estudiar, incluyendo las suposiciones que se tendrán en el mismo.

- Entender los fenómenos que ocurren en el proceso y como considerar los mismos en nuestro cálculo.
- Conocer las reacciones químicas del proceso, tanto termodinámicamente como la cinética de las mismas.
- Saber que parte del proceso es la más crítica ya sea en tiempo o costo para realizar el análisis sobre la misma.
- Definir el alcance del modelo, ya sea solo una parte del proceso, el proceso completo o si queremos definir subsistemas para un estudio más profundo.

Pasos para realizar un balance macroscópico de materia

1.- Conocer el proceso y definir el sistema a estudiar, incluyendo las suposiciones que se tendrán en el mismo.



¿Qué parte del proceso nos interesa analizar?

¿Qué reacciones químicas se llevan a cabo en ese proceso?

¿Cuál va a ser el alcance del balance?

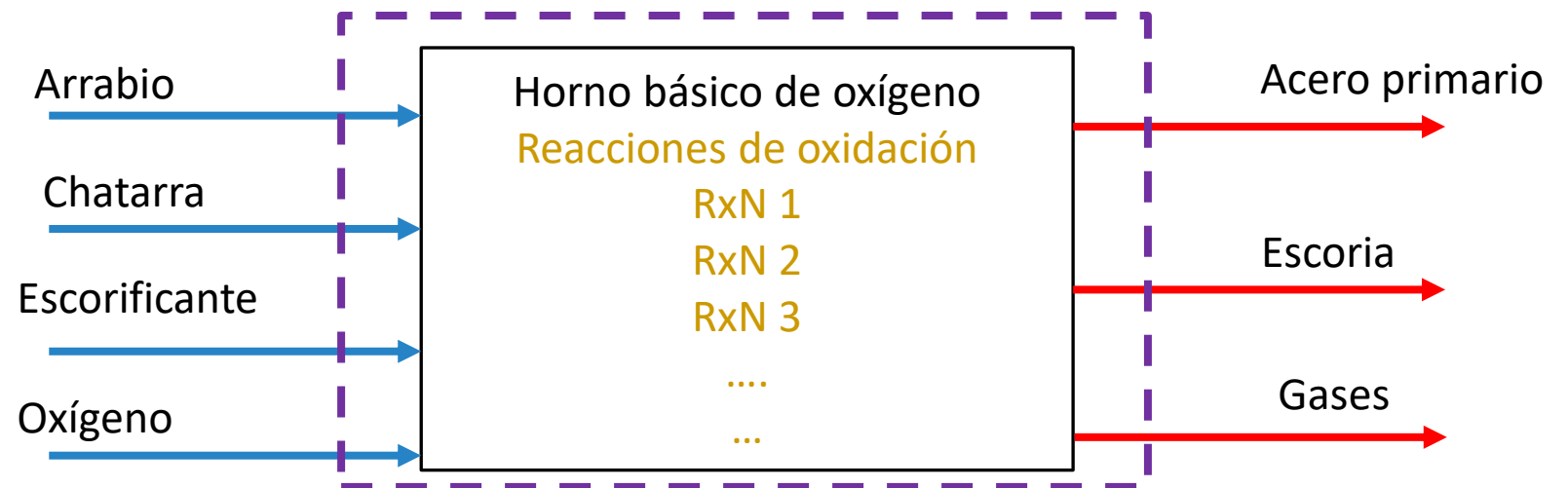
Por ejemplo, podríamos considerar dentro del proceso siderúrgico que nuestro objetivo es el horno básico de oxígeno, ya sea porque tenga un problema o por ser una parte crítica del proceso en costo o tiempo.

Pasos para realizar un balance macroscópico de materia

2.- Realizar un **esquema del proceso**, en el cual se observen todas las entradas, salidas, términos fuente y las fronteras del sistema. En este punto se puede realizar una nueva definición del sistema simplemente colocando las **fronteras** del proceso donde sea más conveniente.



Tenemos que hacer un esquema simplificado, donde coloquemos flujos de entrada y salida, así como términos fuente y acumulación.

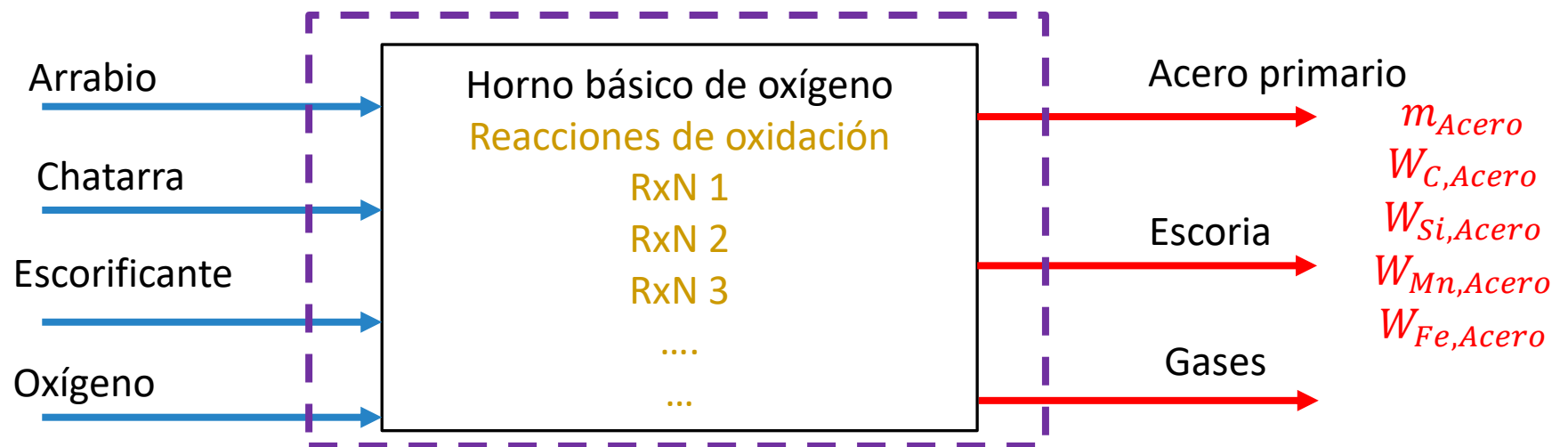


Pasos para realizar un balance macroscópico de materia

3.- Colocar **todos los datos conocidos** del proceso en el **esquema** previamente realizado, es decir, todos los flujos, composiciones químicas y reacciones químicas que se lleven a cabo en el mismo, colocar además toda la información extra que se tenga del proceso.

¿Qué datos coloco?

- Masas o Cantidad de sustancia
- Flujos másicos o flujos molares
- Composiciones químicas
- Estequiometría de las reacciones
- Términos fuente (si los conozco o los puedo calcular)
- Relación entre flujos
- Dato relevante para el balance



Pasos para realizar un balance macroscópico de materia

4.- Seleccionar si es mejor realizar el **balance másico o molar** y si es **necesario** se debe seleccionar una **base de cálculo** para realizar el mismo.

Elegir si el balance es mejor hacerlo con masa o con cantidad de sustancia, considerando:

- En que fase se encuentran la mayoría de los componentes de mi sistema
- La cantidad de reacciones químicas
- En que forma se me presentan los datos

Si hay mas sólidos y líquidos normalmente conviene que se lleve a cabo el balance en masa, si hay mas gases conviene en cantidad de sustancia.

Si hay muchas reacciones químicas también nos conviene en cantidad de sustancia.

Las bases de cálculo, son cantidad fijas de materia que se consideran para realizar el balance, es útil sobre todo cuando tenemos cantidades variables en las corrientes. Normalmente se usan en base 100 o 10.

Pasos para realizar un balance macroscópico de materia

5.- Definir todas las ecuaciones de balance que se realizarán. En este punto se puede realizar el cálculo de los **grados de libertad** del sistema si se considera necesario.

Considerar si el balance se hará por cada componente (compuestos y elementos) del sistema o por elemento.

Podemos calcular los grados de libertad si tenemos dudas con respecto a la cantidad de datos que poseemos.

Por componente:

- 1.- General
- 2.- Fe
- 3.- Si
- 4.- Mn
- 5.- C
- 6.- O₂
- 7.- FeO
- 8.- SiO₂
- 9.- MnO
- 10.- CO
- 11.- CO₂

Por elemento:

- 1.- General
- 2.- Fe (Fe, FeO)
- 3.- Si (Si, SiO₂)
- 4.- Mn (Mn, MnO)
- 5.- C (C, CO, CO₂)
- 6.- O (O₂, SiO₂, MnO, CO, CO₂)

Cuando se hace por elemento en las ecuaciones de balance se debe especificar si este elemento forma parte de un compuesto. También se pierde la información de los términos fuente.

Pasos para realizar un balance macroscópico de materia

6.- **Escribir todas las ecuaciones de balance**, sustituyendo los datos conocidos en las mismas y de ser necesario dejándolas en función de la composición química y los flujos involucrados.

Recordemos que la ecuación general de balance tiene la siguiente forma:

Las **entradas** y **salidas**, son las corrientes que participan en el proceso, es decir, aquellas masas, número de moles, flujos máxicos o flujos molares que cruzan las fronteras del sistema.

$$\begin{array}{ccc} m_{i,E} & m_{i,E} & G_{i,RxN} \# \\ n_{i,E} & n_{i,E} & + \textit{produce} \\ \dot{m}_{i,E} & \dot{m}_{i,E} & - \textit{consume} \\ \dot{n}_{i,E} & \dot{n}_{i,E} & \end{array}$$

La **acumulación** se considera únicamente en sistemas en esta transitorio

Los **términos fuente**, en este caso, corresponden a los componentes que participan en la reacciones químicas.

Pasos para realizar un balance macroscópico de materia

6.- **Escribir todas las ecuaciones de balance**, sustituyendo los datos conocidos en las mismas y de ser necesario dejándolas en función de la composición química y los flujos involucrados.

Por ejemplo, considerando el BOF, podríamos para el hierro (Fe) realizar la siguiente ecuación de balance **por componente**:

$$E - S + G = 0$$

$$m_{Fe,Arrabio} + m_{Fe,Chatarra} - m_{Fe,Acero\ primario} + G_{Fe,RxN\ Oxidación} = 0$$

$$W_{Fe,Arrabio}m_{Arrabio} + W_{Fe,Chatarra}m_{Chatarra} - W_{Fe,Acero\ primario}m_{Acero\ primario} + G_{Fe,RxN\ Oxidación} = 0$$

Pasos para realizar un balance macroscópico de materia

6.- **Escribir todas las ecuaciones de balance**, sustituyendo los datos conocidos en las mismas y de ser necesario dejándolas en función de la composición química y los flujos involucrados.

Por ejemplo, considerando el BOF, podríamos para el hierro (Fe) realizar la siguiente ecuación de balance **por elemento**:

$$E - S + O = 0$$

$$m_{Fe,Fe,Arrabio} + m_{Fe,Fe,Chatarra} - m_{Fe,Fe,Acero\ primario} - m_{Fe,FeO,Escoria} = 0$$

$$W_{Fe,Fe}W_{Fe,Arrabio}m_{Arrabio} + W_{Fe,Fe}W_{Fe,Chatarra}m_{Chatarra} - W_{Fe,Fe}W_{Fe,Acero\ primario}m_{Acero\ primario} - W_{Fe,FeO}W_{FeO,Escoria}m_{Escoria} = 0$$

Pasos para realizar un balance macroscópico de materia

7.- **Resolver el sistema de ecuaciones obtenido**, si es posible se pueden resolver las ecuaciones de balance conforme se van escribiendo.

Al terminar de escribir las ecuaciones de balance vamos a tener un conjunto de ecuaciones algebraicas, el cual podemos resolver por el método de nuestra elección.

Para validar el balance, se puede usar el balance general del sistema, el cual considera únicamente **las masas** de las corrientes de entrada y salida:

$$m_{\text{Arrabio}} + m_{\text{Chatarra}} + m_{\text{Escorificante}} + m_{\text{Oxígeno}} - m_{\text{Acero primario}} - m_{\text{Escoria}} - m_{\text{Gases}} = 0$$

Pasos para realizar un balance macroscópico de materia

8.- **Analizar el proceso** o realizar cambios al mismo con base en el balance de materia, también nos puede servir para obtener esquemas o gráficas de control del proceso.

A partir de los resultados del balance:

- Voy a conocer los flujos y composiciones de mi sistema.
- Conocer el efecto de modificar una variable en el comportamiento del proceso.
- Agilizar el proceso de evaluar cambios en mis variables de proceso.
- Puede ser la base para realizar optimizaciones de proceso.

Ejemplo de un balance macroscópico de materia

Ejemplo balance macroscópico de materia:

Separación

Cubilote

Reducción directa

BOF

Se encuentra en pdf dentro de la pagina AMyD de la Facultad de Química de la UNAM:

<https://amyd.quimica.unam.mx/course/view.php?id=354>