

Caso de estudio: Neutralización de una solución de H₂SO₄ al 25 % m/m

Reacción química



Coefficiente estequiométricos

$$\alpha := (-1 \ -2 \ 1 \ 2)^T$$

$$(\text{H}_2\text{SO}_4 \ \text{NaOH} \ \text{Na}_2\text{SO}_4 \ \text{H}_2\text{O}) := (0 \ 1 \ 2 \ 3)$$

Pesos moleculares de los componentes

$$M := (98 \ 40 \ 142 \ 18)^T \cdot \frac{\text{gm}}{\text{mole}}$$

Datos iniciales de composición

solución de H₂SO₄ que contiene el tanque

$$\begin{pmatrix} x_{0as} \\ x_{0ag} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} 0.25 \\ 0.75 \end{pmatrix}$$

Cantidad de solución de ácido sulfúrico a tratar Cas := 100kg

$$T_0 := 303\text{K} \quad \text{o sea } 30 \text{ }^\circ\text{C}$$

Solución de NaOH que ingresa al tanque

$$\begin{pmatrix} x_{1hs} \\ x_{1ag} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} 0.10 \\ 0.90 \end{pmatrix}$$

Cantidad de solución que NaOH que ingresa al tanque $F := 10 \cdot \frac{\text{kg}}{\text{min}}$

$$T_1 := 293\text{K} \quad \text{o sea } 25 \text{ }^\circ\text{C}$$

Datos del sistema de refrigeración

$$A_s := 0.2 \cdot \text{m}^2$$

$$T_s := 288\text{K} \quad \text{o sea } 15 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$U := 300 \cdot \frac{\text{kcal}}{\text{hr} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{K}}$$

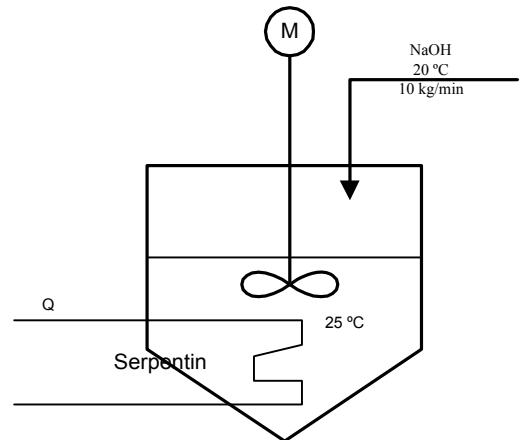
Balance e materia en el reactor

Ecuación general:

$$\frac{d(m \cdot x_i)}{dt} \cdot \frac{1}{M_i} = n_{1,i} + \alpha_i \cdot R \quad \underline{m} \text{ es la masa total en un tiempo } t$$

Escribiendo para cada componente, resulta lo siguiente:

$$\text{H}_2\text{SO}_4 : \quad \frac{d}{dt} \left[(m \cdot x_{\text{H}_2\text{SO}_4}) \cdot \frac{1}{M_0} \right] = \alpha_0 \cdot R$$



$$\text{NaOH : } \frac{d}{dt} \left[(m \cdot x_{\text{NaOH}}) \cdot \frac{1}{M_1} \right] = \frac{F \cdot x_{1\text{hs}}}{M_1} + \alpha_1 \cdot R$$

$$\text{Na}_2\text{SO}_4 : \frac{d}{dt} \left[(m \cdot x_{\text{Na}_2\text{SO}_4}) \cdot \frac{1}{M_2} \right] = \alpha_2 \cdot R$$

$$\text{H}_2\text{O : } \frac{d}{dt} \left[(m \cdot x_{\text{H}_2\text{O}}) \cdot \frac{1}{M_3} \right] = \frac{F \cdot x_{1\text{ag}}}{M_3} + \alpha_3 \cdot R$$

Se tiene así un sistema con cuatro ecuaciones y con cinco incógnitas. Como la neutralización es muy rápida, se puede fijar que no tiene tiempo para acumularse, es decir $x_{\text{NaOH}}=0$

Entonces se obtiene R:

$$R := 15 \cdot \frac{\text{mole}}{\text{sec}}$$

Given

$$\frac{F \cdot x_{1\text{hs}}}{M_1} + \alpha_1 \cdot R = 0$$

$$R := \text{Find}(R) \quad R = 0.208 \cdot \frac{\text{mole}}{\text{sec}} \quad \text{No es infinito, coincide con el caudal molar de alimentación}$$

Por otra parte a partir de las ecuaciones anteriores se deduce que:

$$\text{Condiciones iniciales: } m_0 := 100 \cdot \text{kg}$$

$$\Delta t := 1 \cdot \text{sec} \quad j := 0 .. 9210 \quad t_j := j \cdot \Delta t$$

$$\frac{d}{dt} m = F \quad \text{esto implica que } m := F \cdot t + m_0$$

Entonces reemplando en las ecuaciones anteriores se tiene que:

$$\frac{d}{dt} x_i = \frac{\left(\frac{F \cdot x_{1i}}{M_i} + \alpha_i \cdot R \right) \cdot M_i - F \cdot x_i}{F \cdot t + m_0}$$

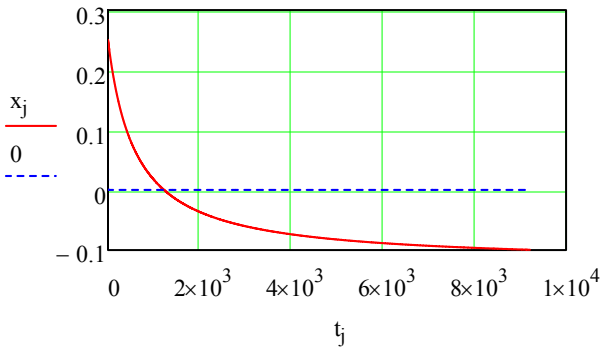
Resolviendo para el **ácido sulfúrico** se tiene:

$$\frac{d}{dt} x_i = \frac{(\alpha_0 \cdot R) \cdot M_0 - F \cdot x_i}{F \cdot t + m_0} \quad x_0 := x_{0\text{as}}$$

Mediante Euler se obtiene

$$F_x(x, t) := \frac{\alpha_0 \cdot R \cdot M_0 - F \cdot x}{F \cdot t + m_0}$$

$$\begin{pmatrix} x_{j+1} \\ t_{j+1} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} x_j + F_x(x_j, t_j) \cdot \Delta t \\ t_j + \Delta t \end{pmatrix}$$



$$x_{1225} = -1.713 \times 10^{-4}$$

Tiempo de neutralización: $t_N := 1225s$

$$t_N = 20.417 \cdot \text{min}$$

$$t_N = 0.34 \cdot \text{hr}$$

Balance de energía

El calor de reacción y el correspondiente a la disolución es: $\Delta H := -1.38 \cdot 10^5 \cdot \frac{\text{J}}{\text{mole}}$ $T_r := 298K$

$$\frac{d}{dt}[m \cdot C_p \cdot (T - T_r)] = F \cdot C_p \cdot (T_1 - T_r) + \alpha_0 \cdot R \cdot \Delta H - Q \quad \text{De esta ecuación se deduce la siguiente:}$$

$$m \cdot C_p \cdot \frac{dT}{dt} = F \cdot C_p \cdot (T_1 - T) + \alpha_0 \cdot R \cdot \Delta H - Q(T) \quad C_p := 1 \cdot \frac{\text{cal}}{\text{gm} \cdot \text{K}}$$

$$Q(T) := U \cdot A_s \cdot (T - T_s)$$

Por integración con el método de Euler se obtiene:

$$FT(T, t) := \frac{F \cdot C_p \cdot (T_1 - T) + \alpha_0 \cdot R \cdot \Delta H - Q(T)}{(F \cdot t + m_0) \cdot C_p} \quad T_0 := T_0$$

$$T_{j+1} := T_j + FT(T_j, t_j) \cdot \Delta t$$

$$T_{1225} = 322.069 \text{ K}$$

Segunda Etapa: se suspende el agregado de NaOH y se deja enfriar hasta los 37 °C

Al finalizar la neutralización, las composiciones de los reactivos y productos son:

$$x_{\text{H}_2\text{SO}_4} := 0 \quad x_{\text{Na}_2\text{SO}_4} := 0.119$$

$$x_{\text{NaOH}} := 0 \quad x_{\text{H}_2\text{O}} := 0.879$$

$$m(t) := m_0 + F \cdot t$$

$$\frac{d}{dt}m = 0$$

$$m(1225 \cdot \text{sec}) = 304.167 \text{ kg} \quad \text{es la masa al final de la etapa de neutralización}$$

Balance de energía

$$\frac{d}{dt}[m \cdot C_p \cdot (T - T_r)] = -Q(T) \quad m \cdot C_p \cdot \frac{dT}{dt} = -U \cdot A_s \cdot (T - T_s)$$

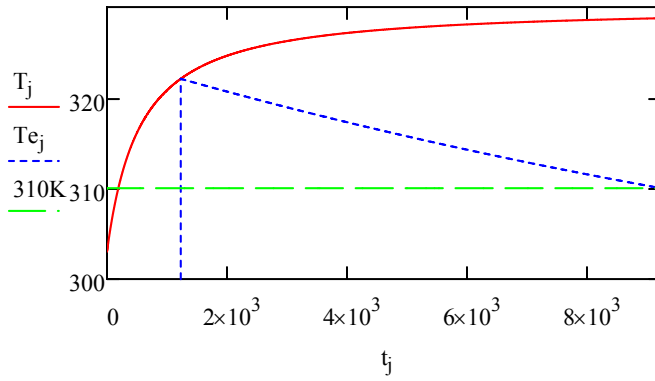
Resolviendo la ecuación se tiene: $t_n := t_{1225}$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{-Q(T)}{C_p \cdot (m_0 + F \cdot t_{1225})}$$

$$g(T) := \frac{-U \cdot A_s \cdot (T - T_s)}{C_p \cdot m(t_n)}$$

$$k := 1225 .. 9210 \quad T_{e_{1225}} := T_{1225}$$

$$T_{e_{k+1}} := T_{e_k} + g(T_{e_k}) \cdot \Delta t$$



$$T_{e_{9206}} = 310 \text{ K}$$

Tiempo de enfriamiento:

$$tE := 9206s - 1225s$$

$$tE = 133.017 \cdot \text{min}$$

$$tE = 2.217 \cdot \text{hr}$$