

## Raices de ecuaciones

1. Un proyecto de diseño en ingeniería química requiere que se calcule exactamente el volumen molar ( $v$ ) del dióxido de carbono y del oxígeno para diferentes combinaciones de temperatura y presión, de tal forma que los recipientes que contengan dichos gases se puedan seleccionar apropiadamente. Usando la ley de los gases ideales es posible calcular el volumen molar:

$$v = \frac{V}{n} = \frac{RT}{p}. \quad (1)$$

Una ecuación de estado alternativa para los gases está dada por:

$$\left(p + \frac{a}{v^2}\right)(v - b) = RT, \quad (2)$$

conocida como la ecuación de van der Waals, donde  $v = V/n$  es el volumen molar,  $a$  y  $b$  son constantes empíricas que dependen del gas que se analiza. También es importante examinar qué tan bien se apega cada gas a la ley de los gases ideales, comparando el volumen molar calculado con las ecuaciones (1) y (2). Se proporcionan los siguientes datos:

- $R = 0.082054 \text{ L atm/(mol K)}$
- Bióxido de carbono:  $a = 3.59$ ,  $b = 0.04267$ .
- Oxígeno:  $a = 1.360$ ,  $b = 0.03183$ .

Las presiones de diseño de interés son de 1, 10 y 100 atmósferas para combinaciones de temperatura de 300, 500 y 700 K.

2. En ingeniería química, los reactores de flujo tipo tapón (es decir, aquellos en que el fluido va de un extremo al otro con una mezcla mínima a lo largo del eje longitudinal) se usan para convertir reactantes en productos. Se ha determinado que la eficiencia de la conversión algunas veces se mejora recirculando una porción de la corriente del producto, de tal forma que regrese a la entrada para un paso adicional a través del reactor (figura P8.2). La razón de recirculando se define como:

$$R = \frac{\text{volumen de fluido que regresa a la entrada}}{\text{volumen que sale del sistema}} \quad (3)$$

Suponga que se está procesando una sustancia química  $A$  para generar un producto  $B$ . Para el caso en que  $A$  forma a  $B$  de acuerdo con una reacción autocatalítica (es decir, en la cual uno de los productos actúa como catalizador o estimulante en la reacción), es posible demostrar que una razón óptima de recirculación debe satisfacer

$$\ln \left[ \frac{1 + R(1 - X_{Af})}{R(1 - X_{Af})} \right] = \frac{R + 1}{R[1 + R(1 - X_{Af})]} \quad (4)$$

donde  $X_A$  es la fracción del reactante  $A$  que se convierte en el producto  $B$ . La razón óptima de recirculación corresponde a un reactor de tamaño mínimo necesario para alcanzar el nivel deseado de conversión. Utilice un método numérico para determinar la razón de recirculación necesaria, de manera que se minimice el tamaño del reactor para una conversión fraccional de  $X_A = 0.95$ .

3. La ecuación de estado de Redlich-Kwong está dada por

$$p = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v(v + b)\sqrt{T}} \quad (5)$$

donde  $R$  = la constante universal de los gases [= 0.518 kJ/(kg K)],  $T$  = temperatura absoluta (K),  $p$  = presión absoluta (kPa) y  $v$  = volumen de un kg de gas (m<sup>3</sup>/kg). Los parámetros  $a$  y  $b$  se calculan mediante

$$a = 0.427 \frac{R^2 T_c^{2.5}}{p_c} \quad b = 0.0866 R \frac{T_c}{p_c} \quad (6)$$

donde  $p_c = 4580$  kPa y  $T_c = 191$  K. Como ingeniero químico, se le pide determinar la cantidad de combustible metano que se puede almacenar en un tanque de 3 m<sup>3</sup> a una temperatura de 50°C con una presión de 65 000 kPa. Emplee el método de localización de raíces de su elección para calcular  $v$  y luego determine la masa de metano contenida en el tanque.

4. La ecuación de Ergun, que se da abajo, sirve para describir el flujo de un líquido a través de un lecho empacado.  $\Delta P$  es la caída de presión,  $r$  es la densidad del fluido,  $G_O$  es la velocidad másica (el cociente del flujo de masa dividido entre el área de la sección transversal),  $D_p$  es el diámetro de las partículas dentro del lecho,  $\mu$  es la viscosidad del fluido,  $L$  es la longitud del lecho y  $\epsilon$  es la fracción vacía del lecho.

$$\frac{\Delta p \rho}{G_O^2} \frac{D_p}{L} \frac{\epsilon^3}{(1 - \epsilon)} = 150 \frac{(1 - \epsilon)}{\left(\frac{D_p G_O}{\mu}\right)} + 1.75 \quad (7)$$

Dados los siguientes valores para los parámetros encuentre la fracción vacía  $\epsilon$  del lecho.

$$\frac{D_p G_O}{\mu} = 1,000 \quad (8)$$

$$\frac{\Delta p \rho}{G_O^2} \frac{D_p}{L} = 10 \quad (9)$$