Simulación y Optimización

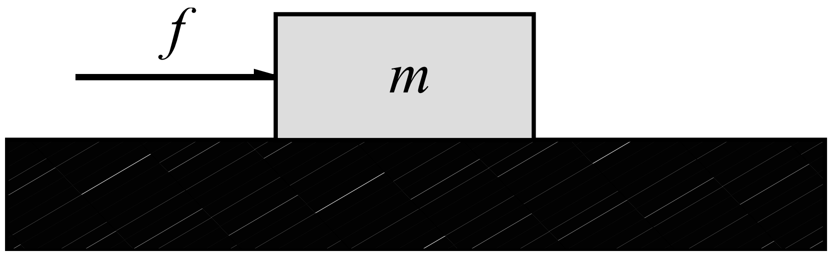
# Fundamentos
# Parte IV

Enrique E. Tarifa, Facultad de Ingeniería, UNJu

# Balance de cantidad de movimiento

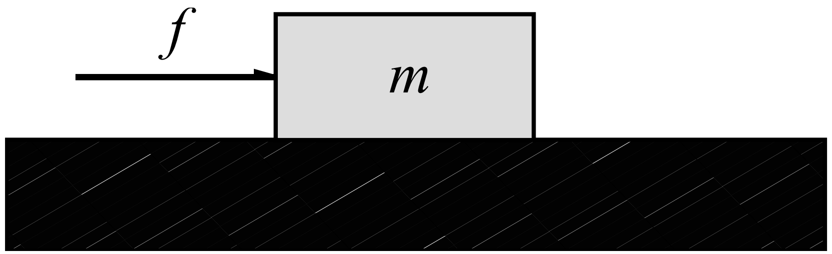
# Balance de cantidad de movimiento

- {vel. de acumulación de c. m.} =
  {velocidad de entrada de c. m.}
  +{fuerzas}
  -{velocidad de salida de c. m.}
- Las fuerzas generan c. m.
- [fuerza]: Newton
- Un único balance vectorial por volumen de control.



# Un bloque

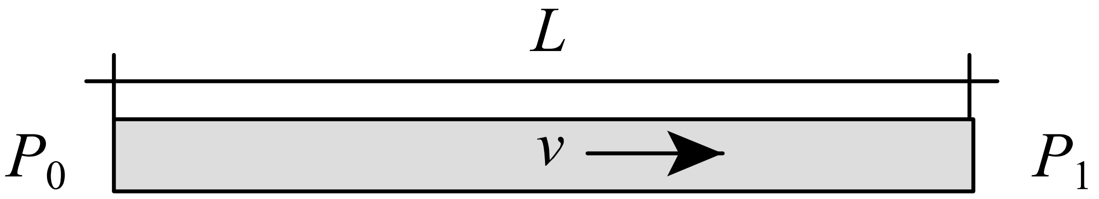
- {vel. de acum.} $= \dfrac{d(mv)}{dt}$
- {vel. de entrada} $= 0$
- {vel. de gener.} $= f$
- {vel. de salida} $= 0$




$$\frac{d(mv)}{dt} = f \qquad f = ma$$

# Una tubería

- {vel. de acum.} $= \dfrac{d\left(AL\rho v\right)}{dt}$
- {vel. de entrada} $= Av\rho v\big|_0$
- {vel. de gener.} $= AP_0 - AP_1 - fr$
- {vel. de salida} $= Av\rho v\big|_L$

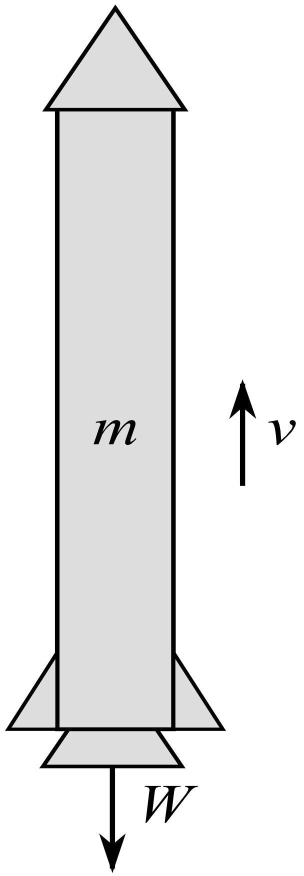



$$\frac{d\left(AL\rho v\right)}{dt} = Av\rho v + AP_0 - AP_1 - fr - Av\rho v$$

$$\rho\frac{dv}{dt} = \frac{P_0 - P_1}{L} - \frac{fr}{AL}$$

# Una cohete

- {vel. de acum.} $= \dfrac{d(mv)}{dt}$
- {vel. de entrada} $= 0$
- {vel. de gener.} $= -g\,m$
- {vel. de salida} $= W\,v_g$




$$\frac{d(mv)}{dt} = -W\,v_g - g\,m$$

# Variación de la propiedad intensiva

$$\frac{d(mv)}{dt} = -Wv_g - gm$$

$$m\frac{dv}{dt} + v\frac{dm}{dt} = -Wv_g - gm$$

$$-v\left\{\frac{dm}{dt} = -W\right\}$$

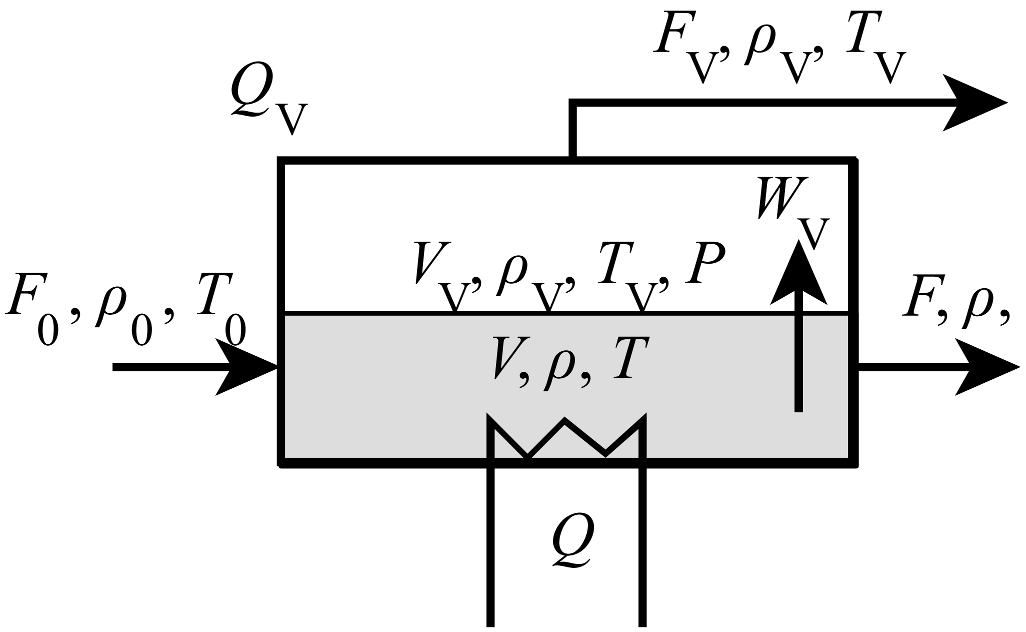
$$m\frac{dv}{dt} = -W\left(v_g - v\right) - gm$$

$$m\frac{dv}{dt} = -Wv_g^* - gm$$

# Múltiples fases

# Balance para fase líquida

- {vel. de acum.} $= \dfrac{d(V\rho h)}{dt}$
- {vel. de entrada} $= F_0\,\rho_0\,h_0 + Q$
- {vel. de salida} $= F\,\rho\,h + W_V\,h_V(T)$




$$\frac{d(V\rho h)}{dt} = F_0\,\rho_0\,h_0 + Q - F\,\rho\,h - W_V\,h_V(T)$$

# Variación de la propiedad intensiva

$$\frac{d(\rho V h)}{dt} = F_0\, \rho_0\, h_0 + Q - F\, \rho\, h - W_V\, h_V(T)$$

$$V\, \rho \frac{dh}{dt} + h \frac{d(V\, \rho)}{dt} = F_0\, \rho_0\, h_0 + Q - F\, \rho\, h - W_V\, h_V(T)$$

$$-h \left\{ \frac{d(V\, \rho)}{dt} = F_0\, \rho_0 - F\, \rho - W_V \right\}$$

---

$$V\, \rho \frac{dh}{dt} = F_0\, \rho_0 \left(h_0 - h\right) + Q - W_V \left(h_V(T) - h\right)$$

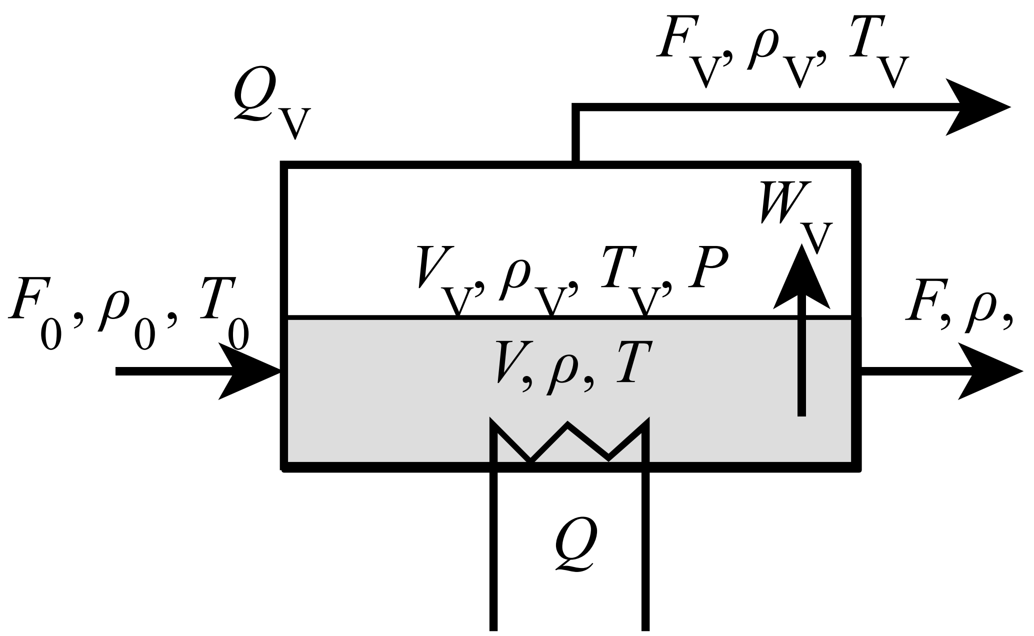
$$\lambda_V(T) = h_V(T) - h$$

$$V\, \rho\, Cp \frac{dT}{dt} = F_0\, \rho_0\, Cp_0 \left(T_0 - T\right) + Q - W_V\, \lambda_V(T)$$

# Balance para fase vapor

- {vel. de acum.} $= \dfrac{d\left(V_V \rho_V h_V(T_V)\right)}{dt}$
- {vel. de entrada} $= W_V h_V(T)$
- {vel. de salida} $= F_V \rho_V h_V(T_V) + Q_V$

$$\frac{d\left(V_V \rho_V h_V(T_V)\right)}{dt} = W_V h_V(T) - F_V \rho_V h_V(T_V) - Q_V$$



# Variación de la propiedad intensiva

$$\frac{d\left(V_V\,\rho_V\,h_V(T_V)\right)}{dt} = W_V\,h_V(T) - F_V\,\rho_V\,h_V(T_V) - Q_V$$

$$V_V\,\rho_V\,\frac{dh_V(T_V)}{dt} + h_V(T_V)\frac{d\left(V_V\,\rho_V\right)}{dt} = W_V\,h_V(T) - F_V\,\rho_V\,h_V(T_V) - Q_V$$

$$-h_V(T_V)\left\{\frac{d\left(V_V\,\rho_V\right)}{dt} = W_V - F_V\,\rho_V\right\}$$

---

$$V_V\,\rho_V\,\frac{dh_V(T_V)}{dt} = W_V\left(h_V(T) - h_V(T_V)\right) - Q_V$$

$$V_V\,\rho_V\,Cp_V\,\frac{dT_V}{dt} = W_V\,Cp_V\left(T - T_V\right) - Q_V$$

# Balance seudoestacionario

# Modelo de espacio de estados

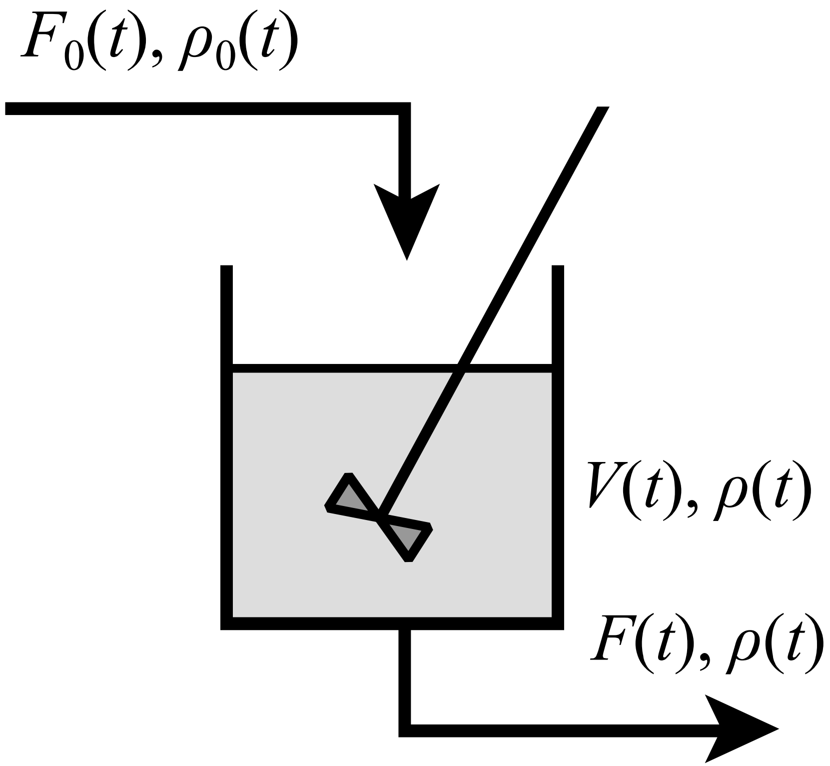
- ODEs:
  - Balances dinámicos
  - Variables de estado
- AEs:
  - Balances seudoestacionarios
  - Ecuaciones constitutivas

| | |
|---|---|
| ODEs | $\frac{dX}{dt} = F\left(X,U,D\right)$ |
| AEs | $Y = H\left(X,U,D\right)$ |
| Condición inicial | $X\left(0\right) = X_0$ |

# Balance estacionario

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

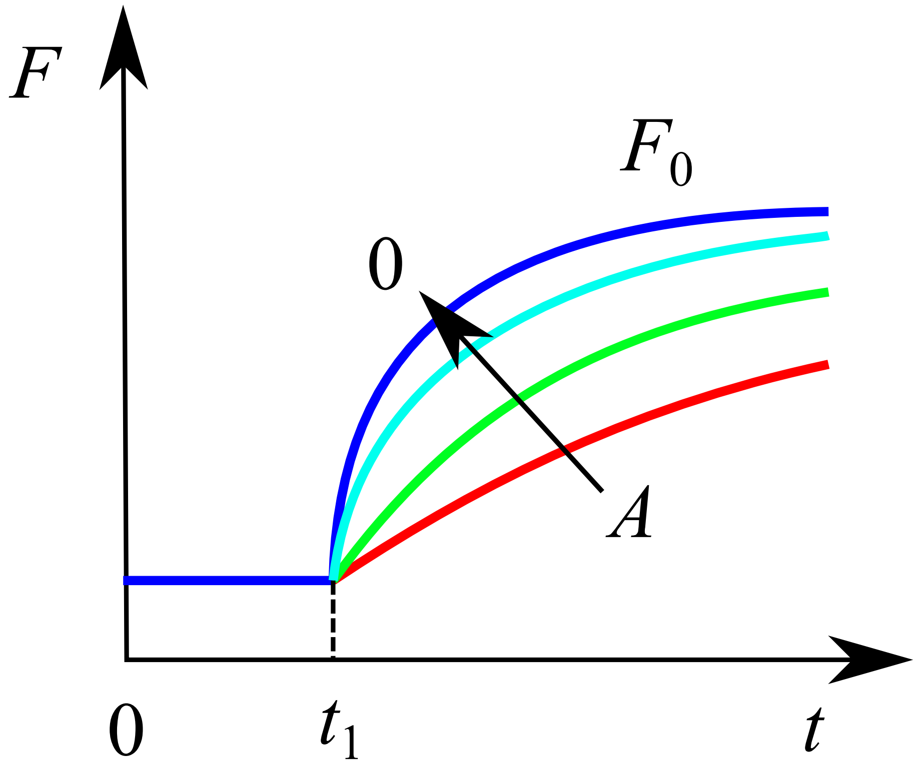
$$A\cancel{\frac{dL}{dt}} = F_0 - F = 0$$



# Balance seudoestacionario

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

$$\cancel{A}\frac{dL}{dt} = F_0 - F = 0$$




Se emplean los balances en estado estacionario.

# Simplificación

- Reactor: estado dinámico
- Serpentín: estado seudoestacionario
- Consecuencias:
  - Menos ecuaciones diferenciales
  - Paso de integración mayor

# Ecuaciones constitutivas

# Ecuaciones constitutivas

- Leyes físico-químicas y mecanismos:
  - Química
  - Termodinámica
  - Fenómenos de transporte
  - Físico-química
  - Operaciones
  - Reacciones
  - Control
  - Válvulas

# Propiedades de la materia

- Definiciones:
  - masa: $M = V\rho$
  - momento: $p = mv$
  - energía: $ep = gy$

# Velocidad de transporte

- Transporte molecular:
  - Ley de Newton: $\tau_{rz} = -\mu \frac{\partial v_z}{\partial r}$
  - Ley de Fourier: $q = -k \frac{\partial T}{\partial z}$
  - Ley de Fick: $J_A^* = -D_A \frac{\partial C_A}{\partial z}$

# Velocidad de transporte

- Transporte macroscópico:
  - Cantidad de movimiento: $$fr = \frac{2f\rho v^2}{D} A L$$
  - Energía: $$Q = U A \Delta T$$
  - Materia: $$N_A = K_L A \Delta C_A$$

# Relaciones físico-químicas

- Ecuaciones de estado:
  - Gases ideales: $PV = nRT$
  - Van der Waal: $\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$

# Relaciones físico-químicas

- Propiedades:
  - Correlación: $Cp = a + bT + cT^2$
  - Andrade: $\mu = e^{\frac{a}{T+b}+c}$

# Relaciones físico-químicas

- Equilibrio químico:
  - Condición: $\sum_{j=1}^{NC} \alpha_j \, \mu_j = 0$
  - van't Hoff: $\dfrac{d\ln(K)}{dT} = \dfrac{\Delta H^0}{RT^2}$

# Relaciones físico-químicas

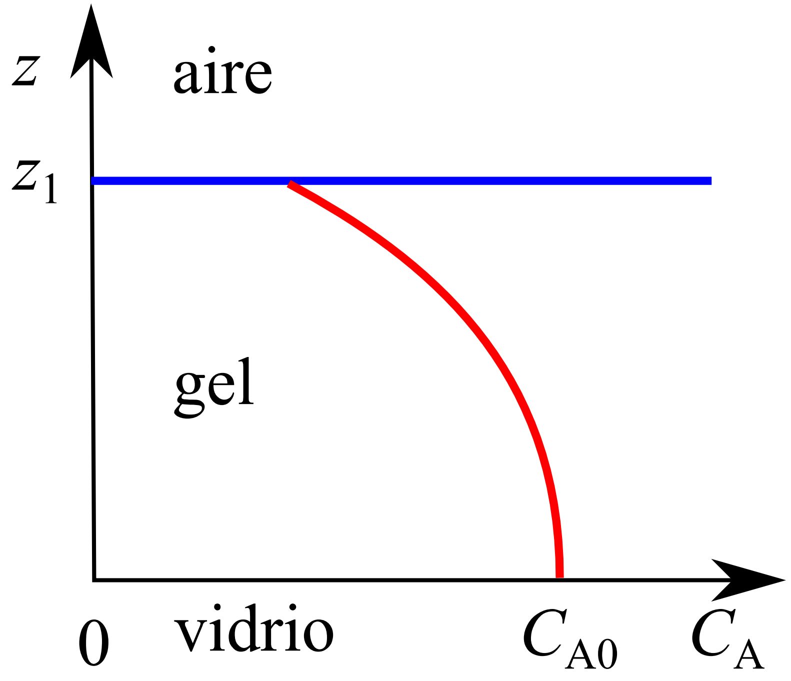
- Equilibrio entre fases:
  - Condición: $\mu_j^{I} = \mu_j^{II}$
  - Ley de Dalton y Raoult: $y_j P = x_j P_j^0$
  - Antoine: $\ln\left(P_j^0\right) = a - \frac{b}{T + c}$

# Cinética

- Velocidad para *j*: $$r_j = \frac{1}{V}\frac{dn_j}{dt}$$
- Velocidad global: $$r = \frac{r_j}{\alpha_j}$$
- Ley de reacción: $$r = k \prod_{\forall j \in R} C_j^{\beta_j}$$
- Arrhenius: $$k = \alpha e^{-\frac{E}{RT}}$$

# Otras

- Condiciones de frontera: $\left.\frac{\partial C_j}{\partial z}\right|_{z=0} = 0$
- Especificaciones de diseño: $T_V - T = 10$



# Método de Binder-Schmidt

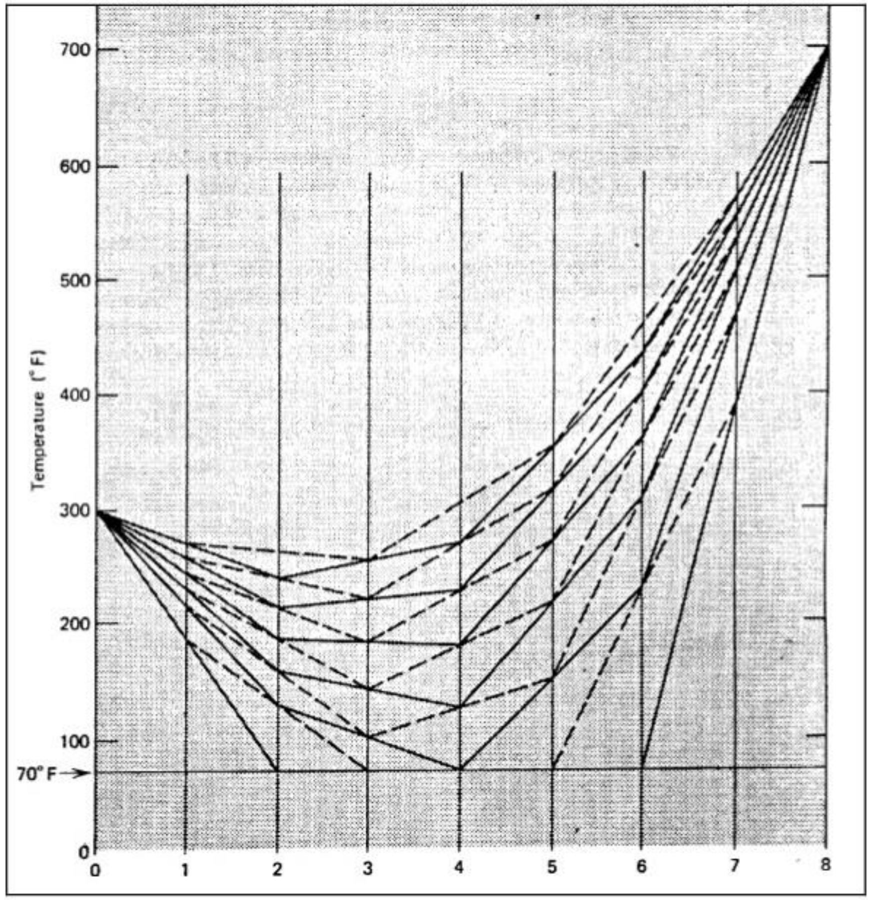



*Fig. 3.12 Ejemplo de gráfico de temperaturas obtenido por el método de Binder-Schmidt.*