Simulación y Optimización

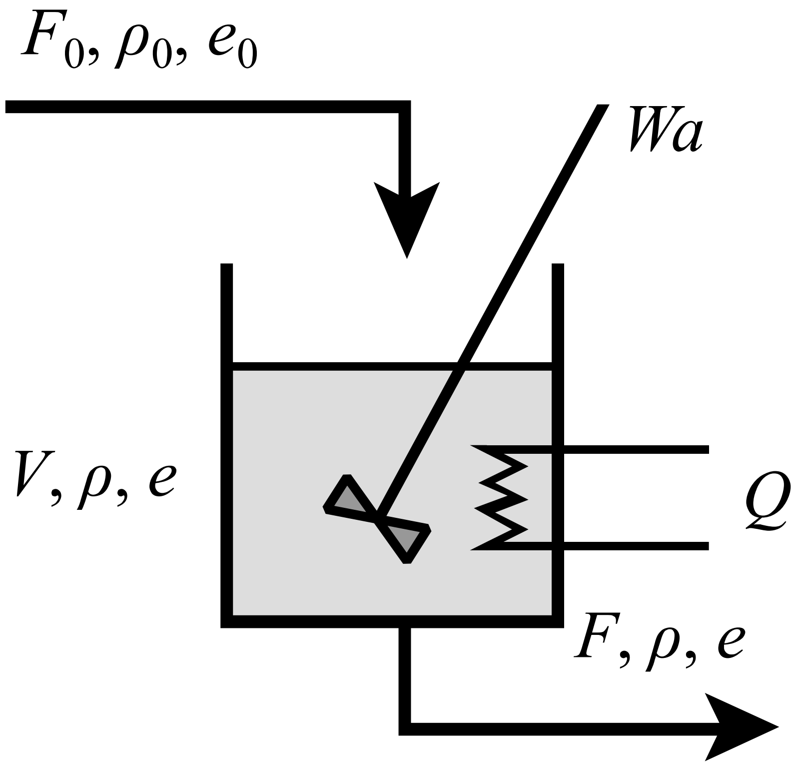
Fundamentos
Parte III

Enrique E. Tarifa, Facultad de Ingeniería, UNJu

Balance de energía

Balance de energía

- {vel. de acumulación de energía} =
  {velocidad de entrada de energía}
  -{velocidad de salida de energía}
- No existe generación.
- [energía]/[tiempo]: J/h
- Un único balance por volumen de control.

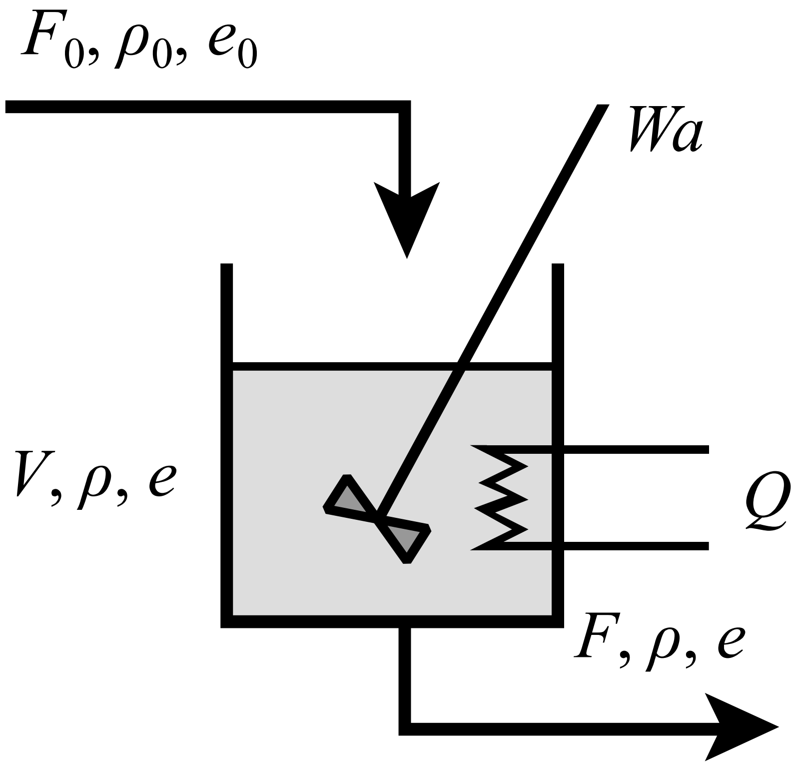


Balance de energía

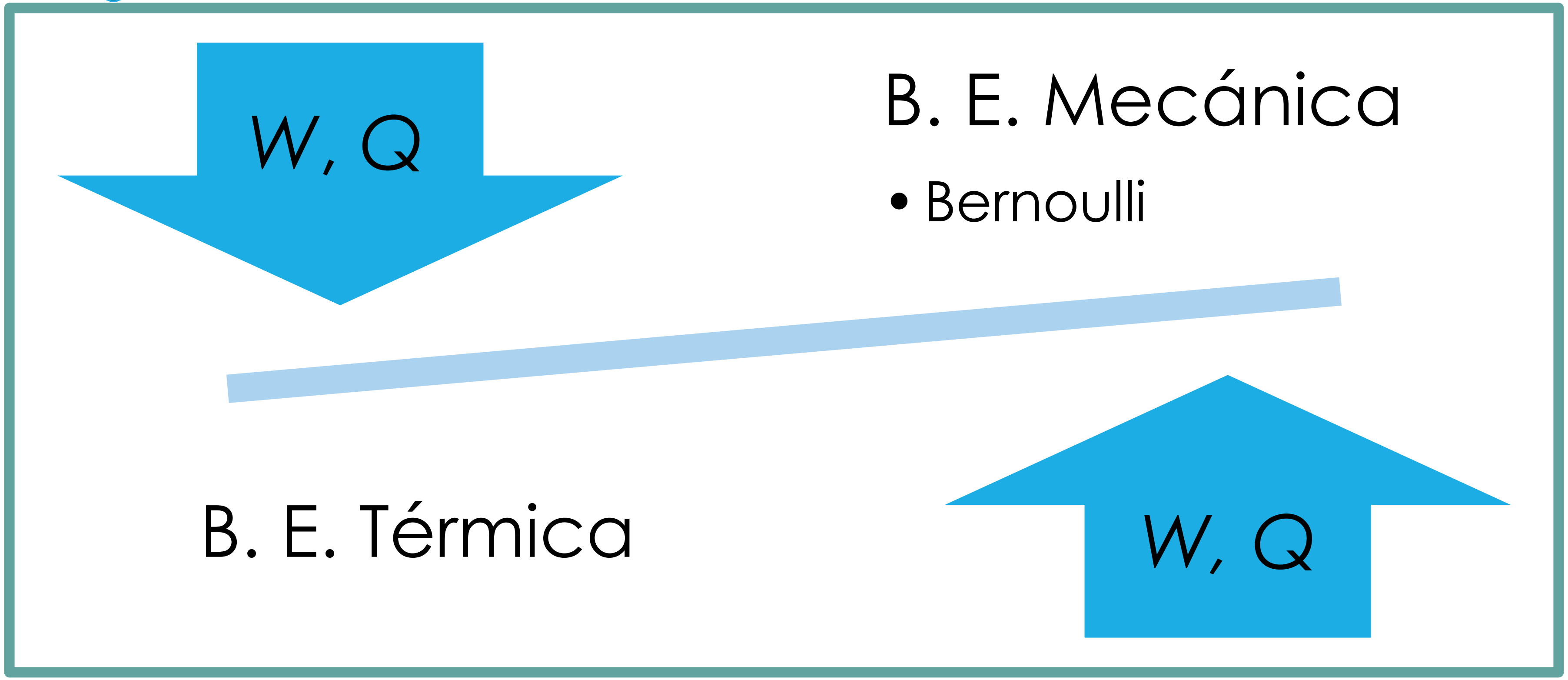
- {vel. de acum.} $= \dfrac{d(V\rho e)}{dt}$
- {vel. de entrada} $= F_0 \rho_0 e_0 + Q + Wn$
- {vel. de salida} $= F \rho e$

$$\frac{d(V\rho e)}{dt} = F_0 \rho_0 e_0 + Q + Wn - F \rho e$$

$$e = u + \cancel{ek + ep} \qquad ek = \tfrac{1}{2}v^2,\ \ ep = gy$$



Energía mecánica y térmica



Balance de energía total

Balance de energía

$$Wn = F_0 P_0 + Wa - F P$$

$$f\, v = P\, A\, v = P\, F$$

$$h = u + \frac{P}{\rho}$$

$$\frac{d(VP)}{dt} = \cancel{V \frac{dP}{dt}} + \cancel{P \frac{dV}{dt}}$$

$$\frac{d(V \rho u)}{dt} = F_0 \rho_0 u_0 + Q + Wn - F \rho u$$

$$\frac{d(V \rho u)}{dt} = F_0 \rho_0 \left(u_0 + \frac{P_0}{\rho_0} \right) + Q + Wa - F \rho \left(u + \frac{P}{\rho} \right)$$

$$\frac{d(V \rho h)}{dt} - \frac{d(VP)}{dt} = F_0 \rho_0 h_0 + Q + Wa - F \rho h$$

$$\boxed{\frac{d(V \rho h)}{dt} = F_0 \rho_0 h_0 + Q + Wa - F \rho h}$$

Estado de referencia

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

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

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

$$h_1 - h_0 = \int_{T_0}^{T_1} Cp(T)\,dT$$

$$V\rho\frac{dh}{dt} + (h - hr)\frac{d(V\rho)}{dt} = F_0\rho_0(h_0 - hr) + Q + Wa - F\rho(h - hr)$$

$$hr = h$$

$$\boxed{V\rho\frac{dh}{dt} = F_0\rho_0(h_0 - h) + Q + Wa}$$

$$\boxed{V\rho Cp\frac{dT}{dt} = F_0\rho_0 Cp_0(T_0 - T) + Q + Wa}$$

Análisis dinámico cualitativo

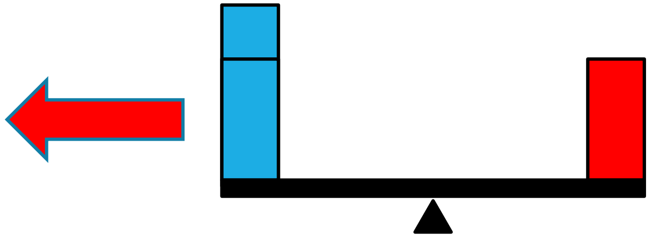
- Estado estacionario:
  - $dT/dt = 0$
- Disminuye F_0:
  - Aumenta T(+).

$$V\rho Cp\underbrace{\frac{dT}{dt}}_{>0} = \underbrace{F_0\,\rho_0\,Cp_0\left(T_0 - T\right)}_{<0} + \underbrace{Q + Wa}_{>0} = 0$$

Análisis dinámico cualitativo

- Estado estacionario:
  - $dT/dt = 0$
- Aumenta x, dado $F_0 = kx$:
  - Disminuye T(-).

$$\underbrace{V\rho Cp\frac{dT}{dt}}_{<0} = \underbrace{F_0\,\rho_0\,Cp_0\left(T_0 - T\right)}_{<0} + \underbrace{Q + Wa}_{>0} = 0$$



Análisis dinámico cualitativo

- Estado estacionario:
  - $dT/dt = 0$
- Disminuye F, dado $\frac{dV}{dt} = F_0 - F$:
  - No cambia $T(0)$.

$$V\,\rho\,Cp\,\underbrace{\frac{dT}{dt}}_{=\,0} = \underbrace{F_0\,\rho_0\,Cp_0\left(T_0 - T\right)}_{<\,0} + \underbrace{Q + Wa}_{>\,0} = 0$$

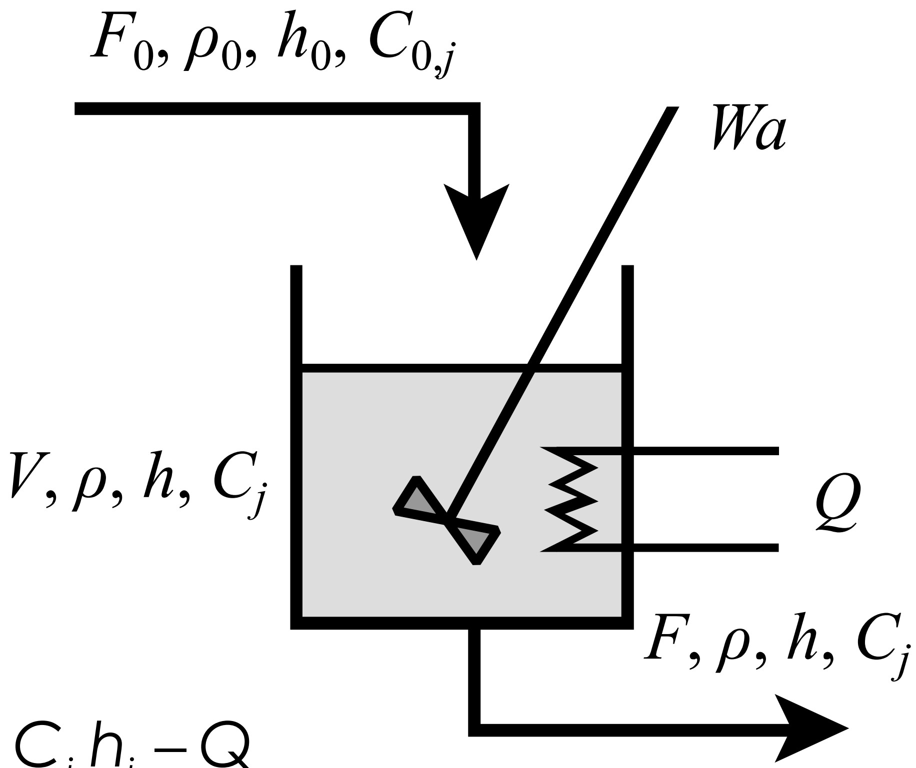
Calor de reacción en un sistema con parámetros concentrados

Solución ideal

- {vel. de acum.} $= \dfrac{d}{dt}\left(V C_A h_A + V C_B h_B\right)$
- {Vel. de acum.} $= \dfrac{d}{dt}\left(V\left(C_A h_A + C_B h_B\right)\right)$
- {Vel. de acum.} $= \dfrac{d}{dt}\left(V \sum_{j=1}^{NC} C_j h_j\right)$

Calor de reacción

- {vel. de acum.} $= \dfrac{d}{dt}\left(V \sum_{j=1}^{NC} C_j h_j \right)$
- {vel. de entrada} $= F_0 \sum_{j=1}^{NC} C_{0,j} h_{0,j} + Wa$
- {vel. de salida} $= F \sum_{j=1}^{NC} C_j h_j + Q$



$$\frac{d}{dt}\left(V \sum_{j=1}^{NC} C_j h_j \right) = F_0 \sum_{j=1}^{NC} C_{0,j} h_{0,j} + Wa - F \sum_{j=1}^{NC} C_j h_j - Q$$

Derivada de un producto

$$\frac{d}{dt}\left(V\sum_{j=1}^{NC} C_j h_j\right)$$

$$=\frac{d}{dt}\left(\sum_{j=1}^{NC} V C_j h_j\right)$$

$$=\sum_{j=1}^{NC} V C_j \frac{dh_j}{dt}+\sum_{j=1}^{NC} h_j \frac{d\left(V C_j\right)}{dt}$$

$$=V\sum_{j=1}^{NC} C_j \frac{dh_j}{dt}+\sum_{j=1}^{NC} h_j \frac{d\left(V C_j\right)}{dt}$$

$$\frac{d}{dt}\left(V\left(C_A h_A + C_B h_B\right)\right)$$

$$=\frac{d}{dt}\left(V C_A h_A + V C_B h_B\right)$$

$$=\left(V C_A \frac{dh_A}{dt}+h_A \frac{d\left(V C_A\right)}{dt}\right)+\left(V C_B \frac{dh_B}{dt}+h_B \frac{d\left(V C_B\right)}{dt}\right)$$

$$=V\left(C_A \frac{dh_A}{dt}+C_B \frac{dh_B}{dt}\right)+\left(h_A \frac{d\left(V C_A\right)}{dt}+h_B \frac{d\left(V C_B\right)}{dt}\right)$$

Calor de reacción

$$\frac{d}{dt}\left(V\sum_{j=1}^{NC}C_j\,h_j\right)=F_0\sum_{j=1}^{NC}C_{0,j}\,h_{0,j}+Wa-F\sum_{j=1}^{NC}C_j\,h_j-Q$$

$$V\sum_{j=1}^{NC}C_j\frac{dh_j}{dt}+\sum_{j=1}^{NC}h_j\frac{d\left(V\,C_j\right)}{dt}=F_0\sum_{j=1}^{NC}C_{0,j}\,h_{0,j}+Wa-F\sum_{j=1}^{NC}C_j\,h_j-Q$$

$$\sum_{j=1}^{NC}h_j\left\{\frac{d\left(V\,C_j\right)}{dt}=F_0\,C_{0,j}+\alpha_j\,r\,V-F\,C_j\right\}$$

$$-\left\{\sum_{j=1}^{NC}h_j\frac{d\left(V\,C_j\right)}{dt}=F_0\sum_{j=1}^{NC}h_j\,C_{0,j}+V\,r\sum_{j=1}^{NC}\alpha_j\,h_j-F\sum_{j=1}^{NC}h_j\,C_j\right\}$$

$$\Delta H=\sum_{j=1}^{NC}\alpha_j\,h_j$$

$$V\sum_{j=1}^{NC}C_j\frac{dh_j}{dt}=F_0\sum_{j=1}^{NC}C_{0,j}\left(h_{0,j}-h_j\right)+V\,r\left(-\Delta H\right)+Wa-Q$$

$$\Delta H=\Delta Hr+\int_{Tr}^{T}\Delta Cp\left(\xi\right)d\xi \qquad \Delta Cp\left(T\right)=\sum_{j=1}^{NC}\alpha_j\,Cp_j\left(T\right)$$

Ley de Kirchhoff

Calor de reacción

$$V\sum_{j=1}^{NC} C_j \frac{dh_j}{dt} = F_0 \sum_{j=1}^{NC} C_{0,j}\left(h_{0,j} - h_j\right) + V\,r\left(-\Delta H\right) + Wa - Q$$

$$h_1 - h_0 = \int_{T_0}^{T_1} Cp(T)\,dT$$

$$V\sum_{j=1}^{NC} C_j\,Cp_j \frac{dT}{dt} = F_0 \sum_{j=1}^{NC} C_{0,j}\,Cp_j\left(T_0 - T\right) + V\,r\left(-\Delta H\right) + Wa - Q$$

$$Cp = \sum_{j=1}^{NC} x_j\,Cp_j$$

$$V\,C\,Cp\frac{dT}{dt} = F_0\,C_0\,Cp_0\left(T_0 - T\right) + V\,r\left(-\Delta H\right) + Wa - Q$$

Regla de mezcla

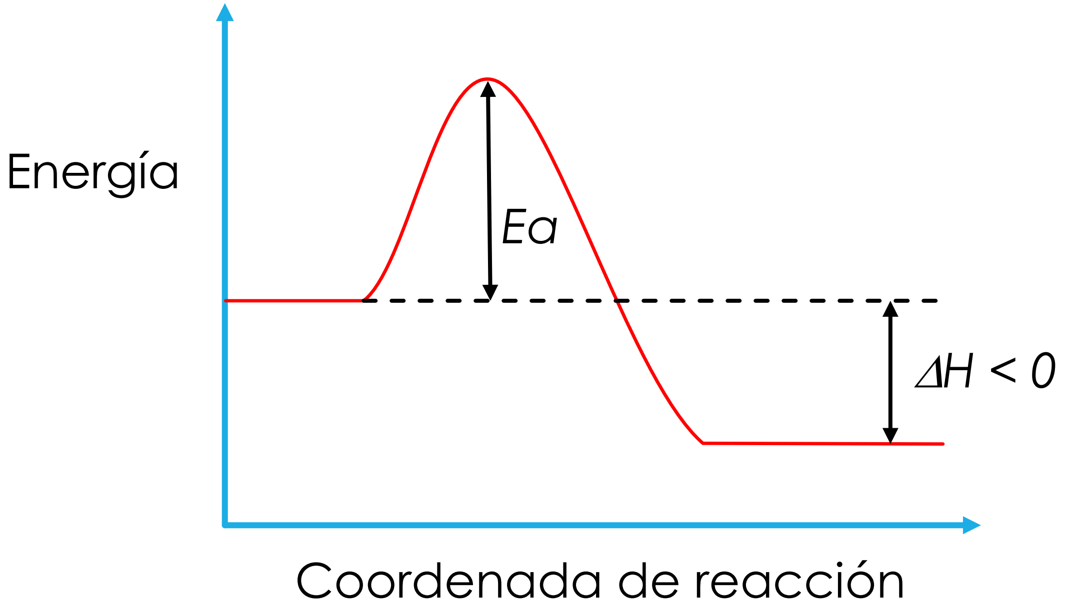
$$V\,\rho\,Cp\frac{dT}{dt} = F_0\,\rho_0\,Cp_0\left(T_0 - T\right) + V\,r\left(-\Delta H\right) + Wa - Q$$

$$C_j = x_j\,C$$

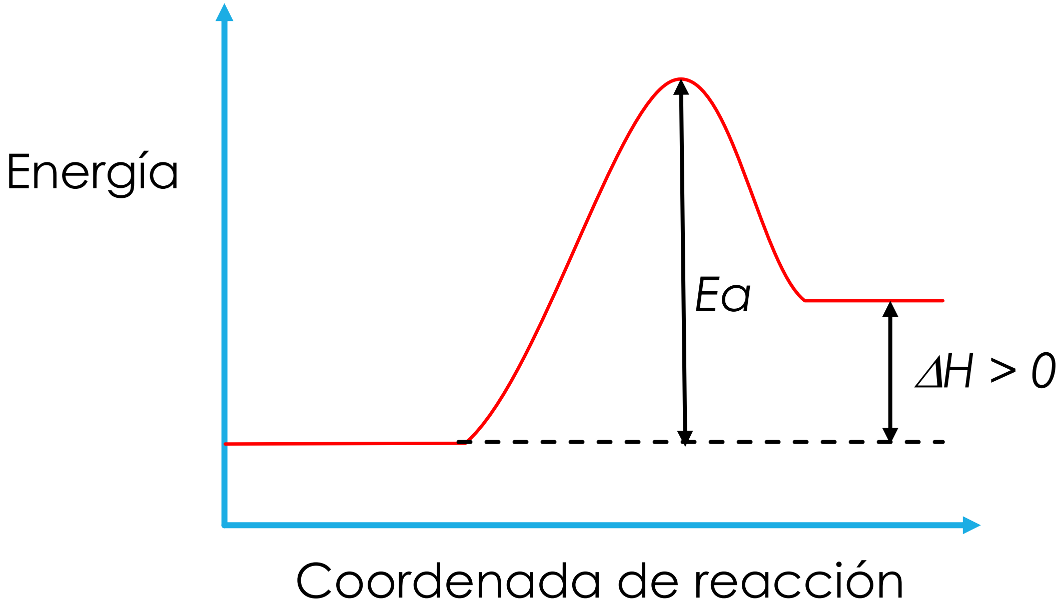
$$\boxed{V\,\rho\,Cp\frac{dT}{dt} = \sum_{\forall i \in E} F_i\,\rho_i\,Cp_i\left(T_i - T\right) + V\sum_{\forall k \in R} r_k\left(-\Delta H_k\right) + Wa - Q}$$

Calor de reacción

$$V\,\rho\,Cp\frac{dT}{dt}=\sum_{\forall i\in E}F_i\,\rho_i\,Cp_i\left(T_i-T\right)+V\sum_{\forall k\in R}r_k\left(-\Delta H_k\right)+Wa-Q$$



Exotérmica



Endotérmica

ChatGPT 4o

Plantea el balance de energía para un reactor tanque agitado continuo.

Claro, vamos a plantear el **balance de energía para un reactor tanque agitado continuo** (**CSTR**), uno de los balances fundamentales en ingeniería química para el diseño, operación y control de reactores.

✅ Hipótesis típicas:

- Fluido **incompresible**
- No hay cambios en la energía cinética ni potencial
- Reactor **perfectamente agitado** (temperatura uniforme en el tanque)
- Intercambio de calor con una **camisa o serpentín** a través de un flujo de calor Q
- Puede haber una o más reacciones exotérmicas o endotérmicas

✅ Balance de energía total (forma general):

$$\boxed{\rho C_p V \frac{dT}{dt} = F C_p (T_{\text{in}} - T) + Q + V \sum_j (-\Delta H_j) r_j}$$

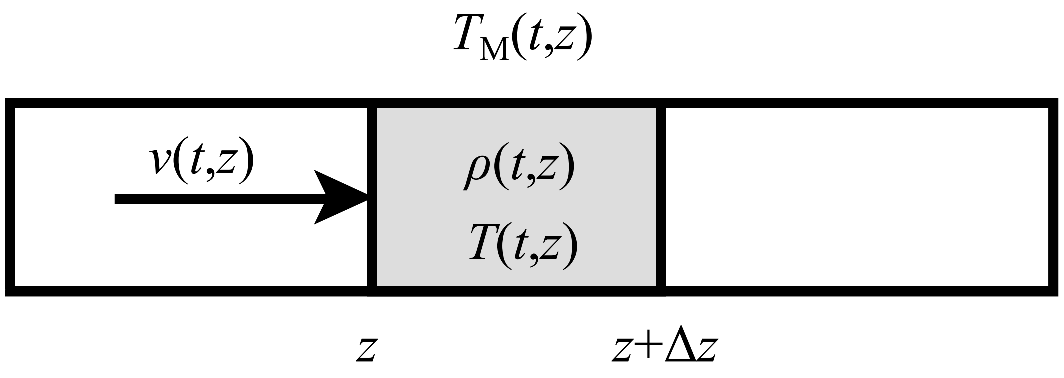
✅ En estado estacionario:

$$0 = F C_p (T_{\text{in}} - T) + Q + V \sum_j (-\Delta H_j) r_j$$

Balance de energía en un sistema con parámetros distribuidos

Balance de energía

- {vel. de acum.} $= \dfrac{\partial\left(A\,\Delta z\,\rho\,h\right)}{\partial t}$
- {vel. de entrada} $= v\,A\,\rho\,h\big|_z + A\,q\big|_z + \Delta Q$
- {vel. de salida} $= v\,A\,\rho\,h\big|_{z+\Delta z} + A\,q\big|_{z+\Delta z}$



$$\frac{\partial\left(A\,\Delta z\,\rho\,h\right)}{\partial t} = v\,A\,\rho\,h\big|_z + A\,q\big|_z + \Delta Q - v\,A\,\rho\,h\big|_{z+\Delta z} - A\,q\big|_{z+\Delta z}$$

$$\frac{\partial\left(\rho\,h\right)}{\partial t} = -\frac{v\,\rho\,h\big|_{z+\Delta z} - v\,\rho\,h\big|_z}{\Delta z} - \frac{q\big|_{z+\Delta z} - q\big|_z}{\Delta z} + \frac{1}{A}\frac{\Delta Q}{\Delta z}$$

$$\Delta z\frac{\partial\left(\rho\,h\right)}{\partial t} = v\,\rho\,h\big|_z + q\big|_z + \frac{1}{A}\Delta Q - v\,\rho\,h\big|_{z+\Delta z} - q\big|_{z+\Delta z}$$

$$\boxed{\cancel{\frac{\partial\left(\rho\,h\right)}{\partial t}} = -\frac{\partial\left(v\,\rho\,h\right)}{\partial z} - \frac{\partial q}{\partial z} + \frac{1}{A}\frac{\partial Q}{\partial z} = 0}$$

Variación de la propiedad intensiva

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} = -\frac{\partial(v\rho h)}{\partial z} - \frac{\partial q}{\partial z} + \frac{1}{A}\frac{\partial Q}{\partial z}$$

$$\rho\frac{\partial h}{\partial t} + h\frac{\partial \rho}{\partial t} = -h\frac{\partial(v\rho)}{\partial z} - v\rho\frac{\partial h}{\partial z} - \frac{\partial q}{\partial z} + \frac{1}{A}\frac{\partial Q}{\partial z}$$

$$-h\left\{\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial(v\rho)}{\partial z}\right\}$$

$$\boxed{\rho\frac{\partial h}{\partial t} = -v\rho\frac{\partial h}{\partial z} - \frac{\partial q}{\partial z} + \frac{1}{A}\frac{\partial Q}{\partial z}}$$

$$\frac{dh}{dt} = \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_P \frac{dT}{dt} = Cp\frac{dT}{dt}$$

$$\boxed{\rho Cp\frac{\partial T}{\partial t} = -v\rho Cp\frac{\partial T}{\partial z} - \frac{\partial q}{\partial z} + \frac{1}{A}\frac{\partial Q}{\partial z}}$$

ChatGPT 4o

Plantea el balance de energía para un reactor tubular con flujo pistón.

✅ Balance de energía diferencial (forma general)

$$\boxed{\rho C_p v \frac{dT}{dz} = \sum_j (-\Delta H_j) r_j + q(z)}$$

✳️ Desglose:

Término	Significado
$\rho C_p v \frac{dT}{dz}$	Cambio de energía sensible del fluido (transporte axial de energía)
$\sum(-\Delta H_j) r_j$	Calor generado o absorbido por las reacciones químicas
$q(z)$	Calor ganado o perdido con el entorno por transferencia

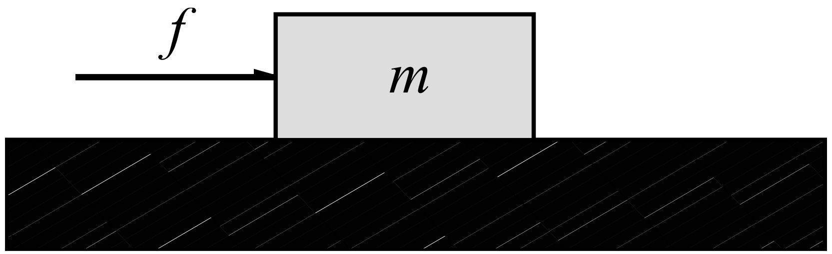
🔷 Si hay una **camisa térmica a temperatura fija** T_c con coeficiente de transferencia U**:

$$q(z) = \frac{UP}{A}(T_c - T)$$

Balance de cantidad de movimiento

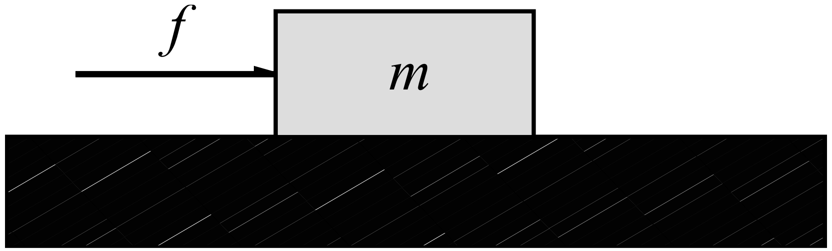
Balance de cantidad de movimiento

- {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

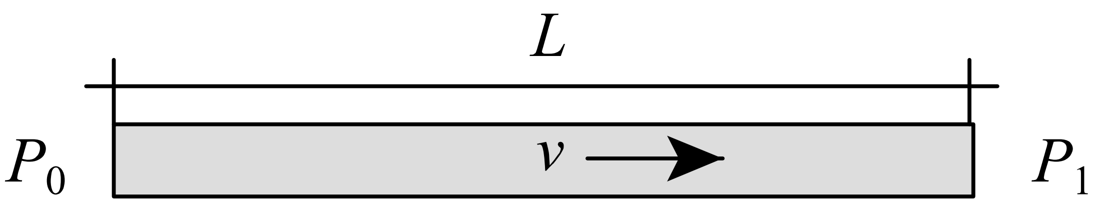
- {vel. de acum.} $= \dfrac{d(mv)}{dt}$
- {vel. de entrada} $= 0$
- {vel. de gener.} $= f$
- {vel. de salida} $= 0$



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

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} $= Av\rho v\big|_L$



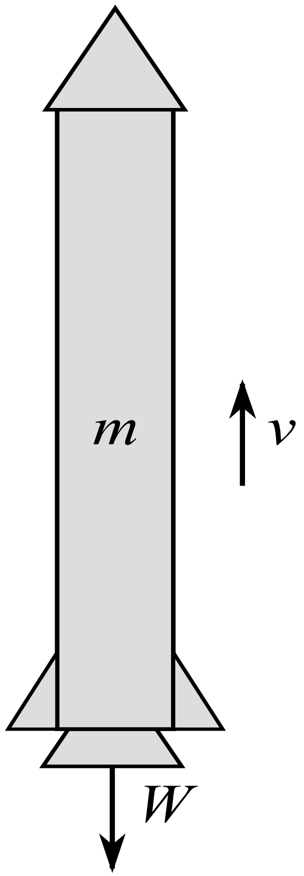
$$\frac{d\left(AL\rho v\right)}{dt} = Av\rho v + AP_0 - AP_1 - fr - Av\rho v$$

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

Una cohete

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

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



Variación de la propiedad intensiva

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

$$m\frac{dv}{dt} + v\frac{dm}{dt} = -W v_g - g m$$

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

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

$$m\frac{dv}{dt} = -W v_g^{*} - g m$$