

Fundamentos Parte IV

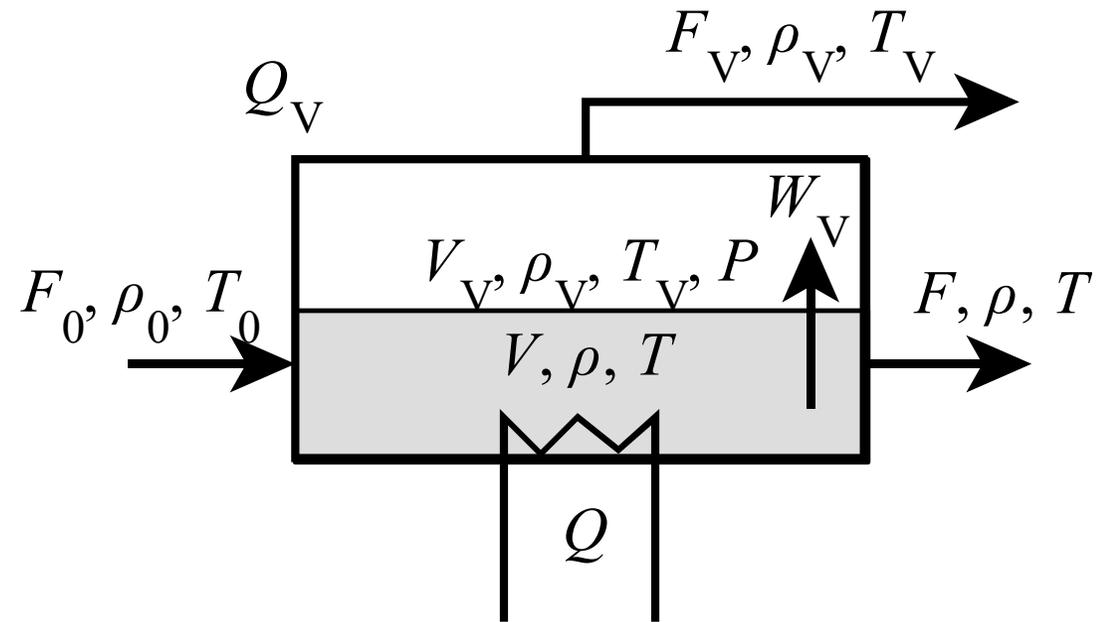
Enrique E. Tarifa, Facultad de Ingeniería, UNJu

Múltiples fases

Balance para fase líquida

- {vel. de acum.} = $\frac{d(V \rho h)}{dt}$
- {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

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

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

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

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

$$\lambda_v(T) = h_v(T) - h$$

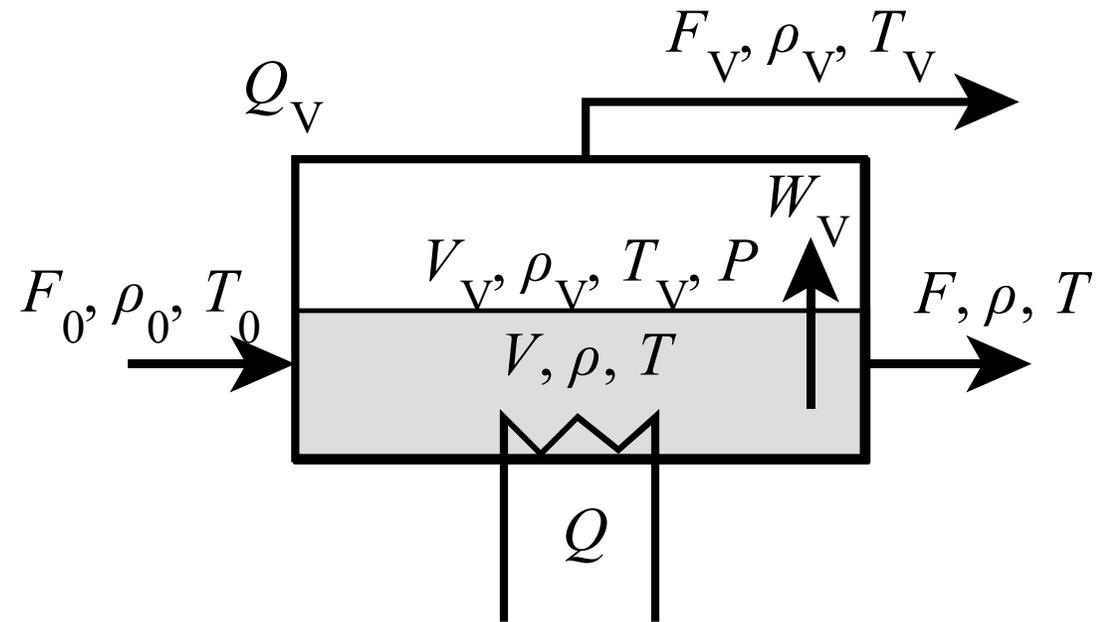
$$V \rho \frac{dh}{dt} = F_0 \rho_0 (h_0 - h) + Q - W_v (h_v(T) - h)$$

$$V \rho C_p \frac{dT}{dt} = F_0 \rho_0 C_{p_0} (T_0 - T) + Q - W_v \lambda_v(T)$$

Balance para fase vapor

- {vel. de acum.} = $\frac{d(V_v \rho_v h_v(T_v))}{dt}$
- {vel. de entrada} = $W_v h_v(T)$
- {vel. de salida} = $F_v \rho_v h_v(T_v) + Q_v$

$$\frac{d(V_v \rho_v h_v(T_v))}{dt} = W_v h_v(T) - F_v \rho_v h_v(T_v) - Q_v$$



Variación de la propiedad intensiva

$$\frac{d(V_v \rho_v h_v(T_v))}{dt} = W_v h_v(T) - F_v \rho_v h_v(T_v) - Q_v$$

$$V_v \rho_v \frac{dh_v(T_v)}{dt} + h_v(T_v) \frac{d(V_v \rho_v)}{dt} = W_v h_v(T) - F_v \rho_v h_v(T_v) - Q_v$$
$$-h_v(T_v) \left\{ \frac{d(V_v \rho_v)}{dt} = W_v - F_v \rho_v \right\}$$

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

$$V_v \rho_v \frac{dh_v(T_v)}{dt} = W_v (h_v(T) - h_v(T_v)) - Q_v$$

$$V_v \rho_v C_{p_v} \frac{dT_v}{dt} = W_v C_{p_v} (T - T_v) - Q_v$$

Balance pseudoestacionario

Modelo de espacio de estados

- ODEs:

- Balances dinámicos
- Variables de estado

- AEs:

- Balances pseudoestacionarios
- Ecuaciones constitutivas

ODEs

$$\frac{dX}{dt} = F(X, U, D)$$

AEs

$$Y = H(X, U, D)$$

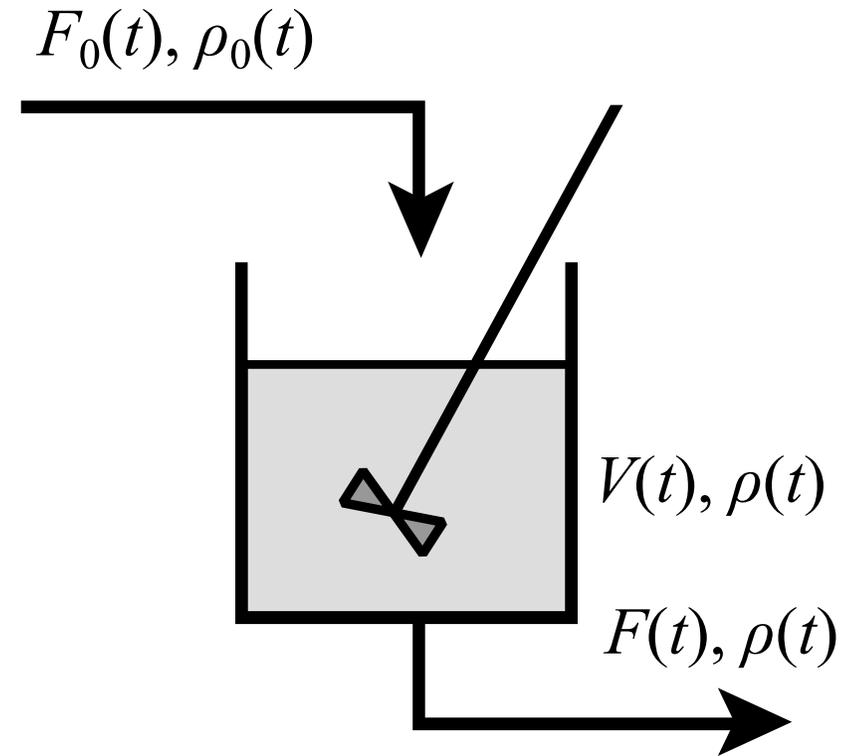
Condición inicial

$$X(0) = X_0$$

Balance estacionario

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

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

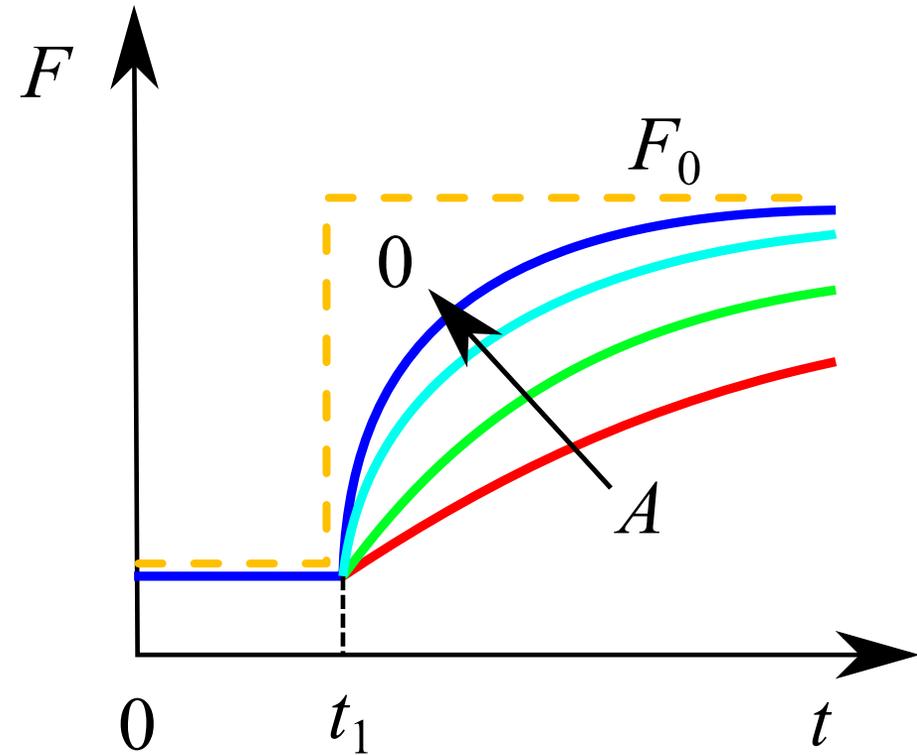


Balance pseudoestacionario

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

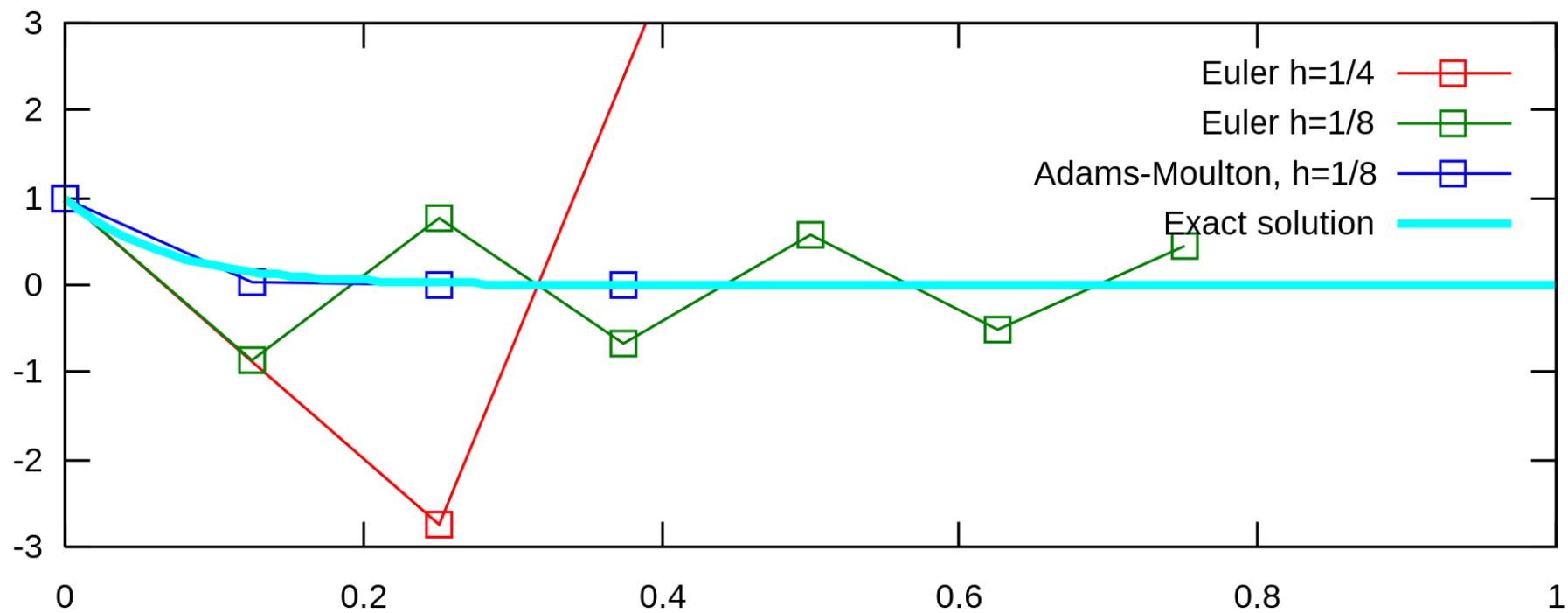
$$A \frac{dL}{dt} = F_0 - F = 0$$

$$F_0(+)\rightarrow L(+)\rightarrow F(+)$$



Se emplean los balances en estado estacionario.

Ecuación *stiff*



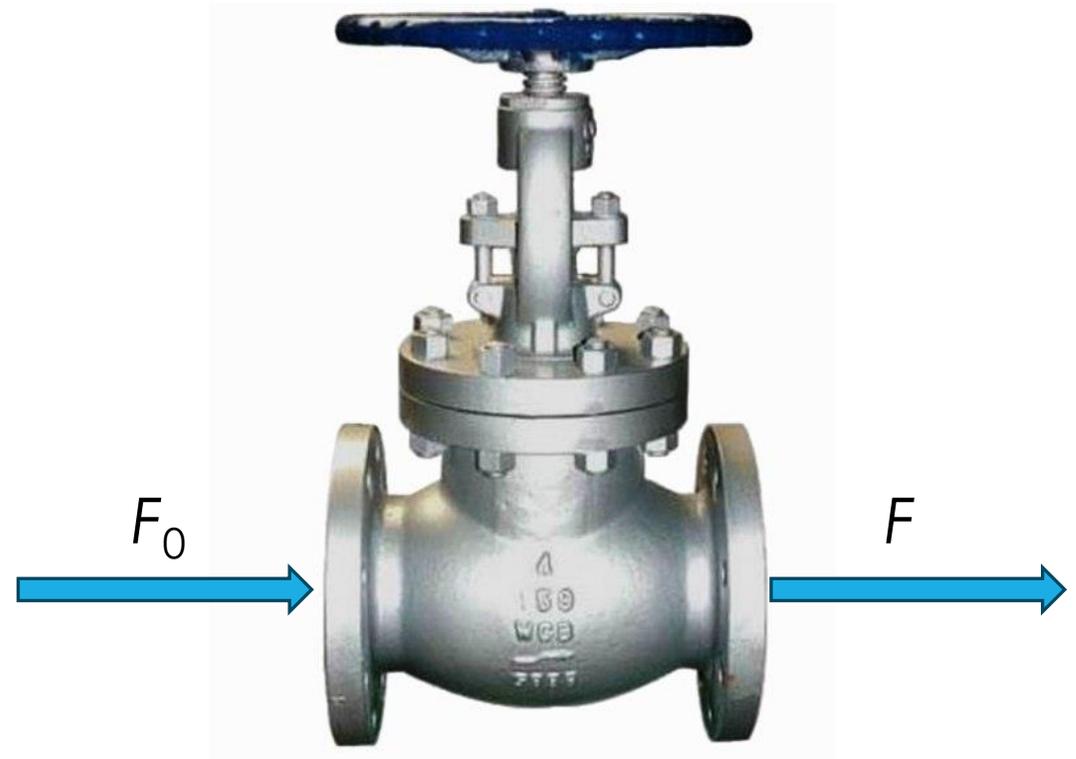
Simplificación

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



Válvula

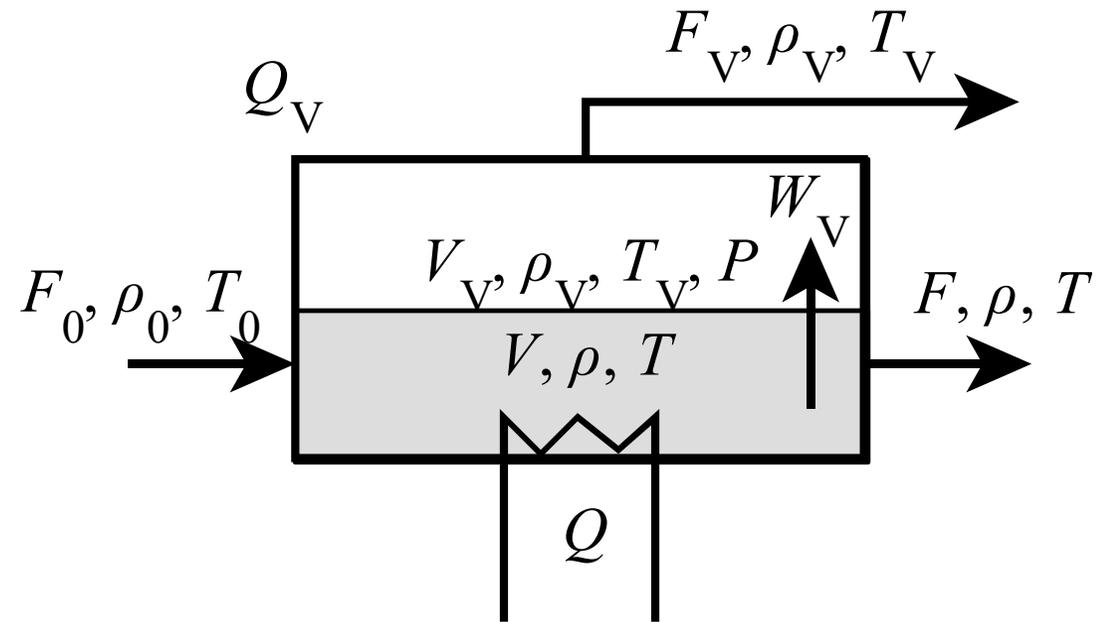
- $\frac{dV}{dt} = F_0 - F$
- ~~$A \frac{dL}{dt} = F_0 - F = 0$~~
- $F = F_0$



Balance para fase vapor

- {vel. de acum.} = $\frac{d(V_v \rho_v h_v(T_v))}{dt}$
- {vel. de entrada} = $W_v h_v(T)$
- {vel. de salida} = $F_v \rho_v h_v(T_v) + Q_v$

$$\frac{d(V_v \rho_v h_v(T_v))}{dt} = W_v h_v(T) - F_v \rho_v h_v(T_v) - Q_v$$



Variación de la propiedad intensiva

$$\frac{d(V_v \rho_v h_v(T_v))}{dt} = W_v h_v(T) - F_v \rho_v h_v(T_v) - Q_v$$

$$V_v \rho_v \frac{dh_v(T_v)}{dt} + h_v(T_v) \frac{d(V_v \rho_v)}{dt} = W_v h_v(T) - F_v \rho_v h_v(T_v) - Q_v$$
$$-h_v(T_v) \left\{ \frac{d(V_v \rho_v)}{dt} = W_v - F_v \rho_v \right\}$$

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

$$\cancel{V_v \rho_v} \frac{dh_v(T_v)}{dt} = W_v (h_v(T) - h_v(T_v)) - Q_v = 0$$

$$\cancel{V_v \rho_v} C_{p_v} \frac{dT_v}{dt} = W_v C_{p_v} (T - T_v) - Q_v = 0$$

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: $fr = \frac{2f \rho v^2}{D} AL$

- Energía: $Q = UA\Delta T$

- 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: $C_p = a + bT + cT^2$

- 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: $\frac{d \ln(K)}{dT} = \frac{\Delta H^0}{RT^2}$

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:

$$\ln(P_j^0) = a - \frac{b}{T + c}$$

Cinética

○ Velocidad para j :

$$r_j = \frac{1}{V} \frac{dn_j}{dt}$$

○ Velocidad de reacción:

$$r = \frac{r_j}{\alpha_j}$$

○ Ley de acción de masas:

$$r = k \prod_{\forall j \in R} C_j^{\beta_j}$$

○ Arrhenius:

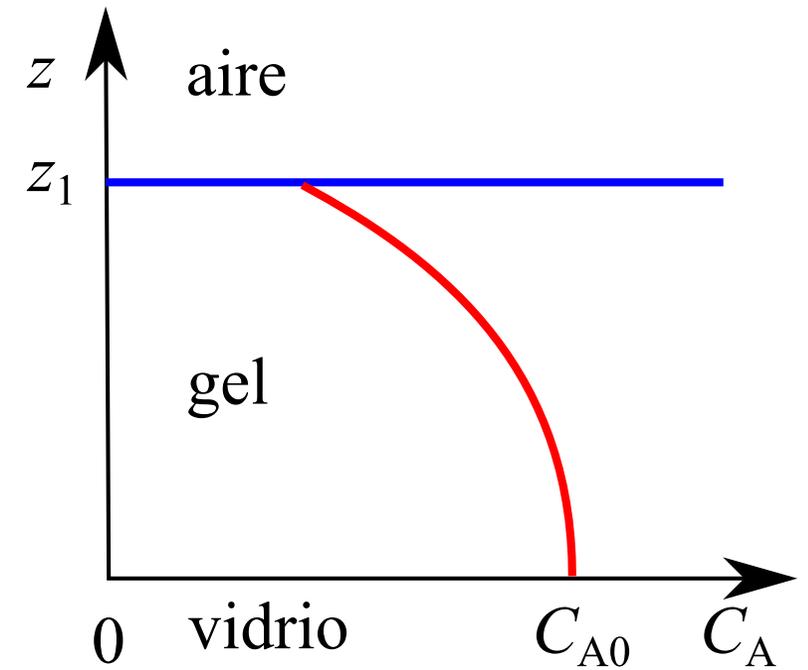
$$k = \alpha e^{-\frac{E}{RT}}$$

Otras

- Condiciones de frontera:
- Especificaciones de diseño:

$$\left. \frac{\partial C_j}{\partial z} \right|_{z=0} = 0$$

$$T_v - T = 10$$



Método de Bender-Schmidt

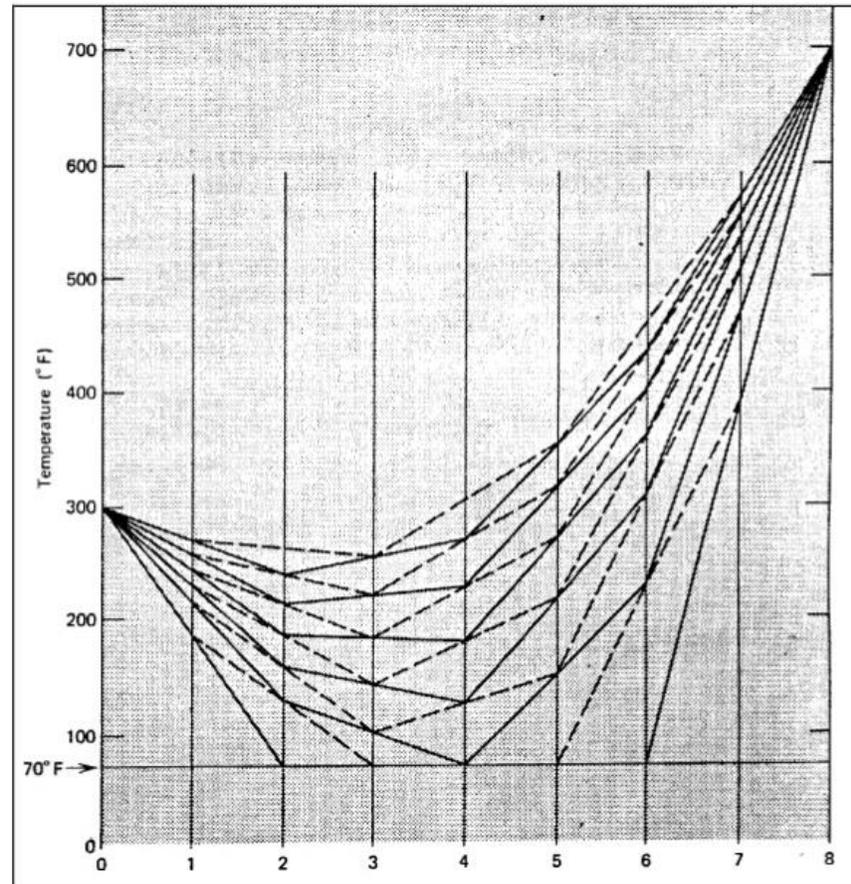


Fig. 3.12 Ejemplo de gráfico de temperaturas obtenido por el método de Bender-Schmidt.