Simulación y Optimización

# Fundamentos
# Parte III

Enrique E. Tarifa, Facultad de Ingeniería, UNJu

# Mapa curricular de la materia

Simulación

Optimización

# Mapa curricular de la materia

- Simulación
  - Optimización

# Mapa curricular de Simulación

- Definiciones
- Modelo de espacio de estados
- Resolución de modelos
- Simulación de plantas

# Mapa curricular de Simulación

- Definiciones
- Modelo de espacio de estados
- Resolución de modelos
- Simulación de plantas

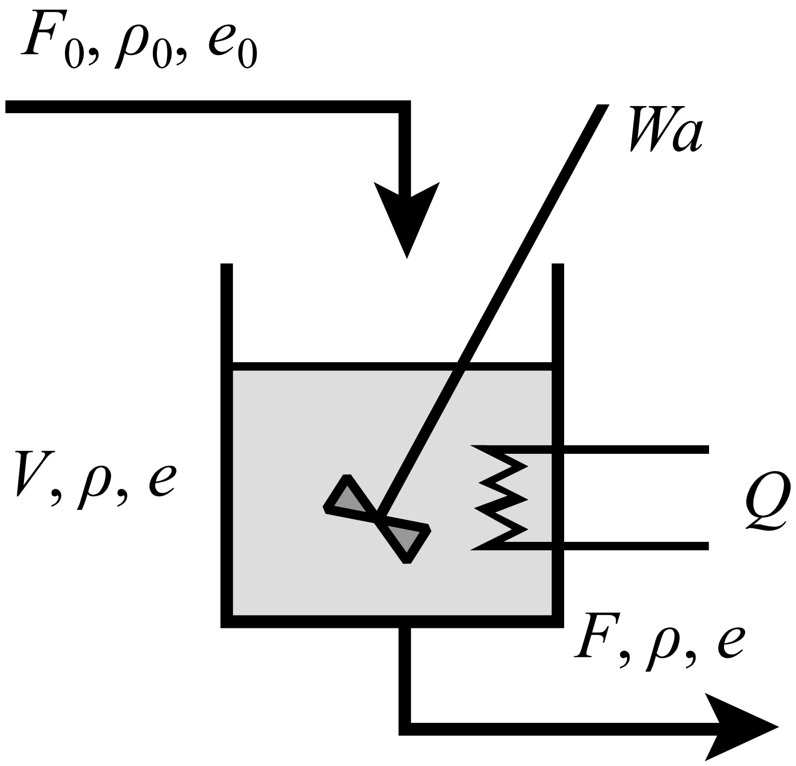
# Mapa curricular de balance de energía

1. Balance de energía
2. Balance de energía térmica
3. Estado de referencia
4. Variación de temperatura
5. Análisis dinámico cualitativo
6. Calor de reacción
7. Balance de cantidad de movimiento

# 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.

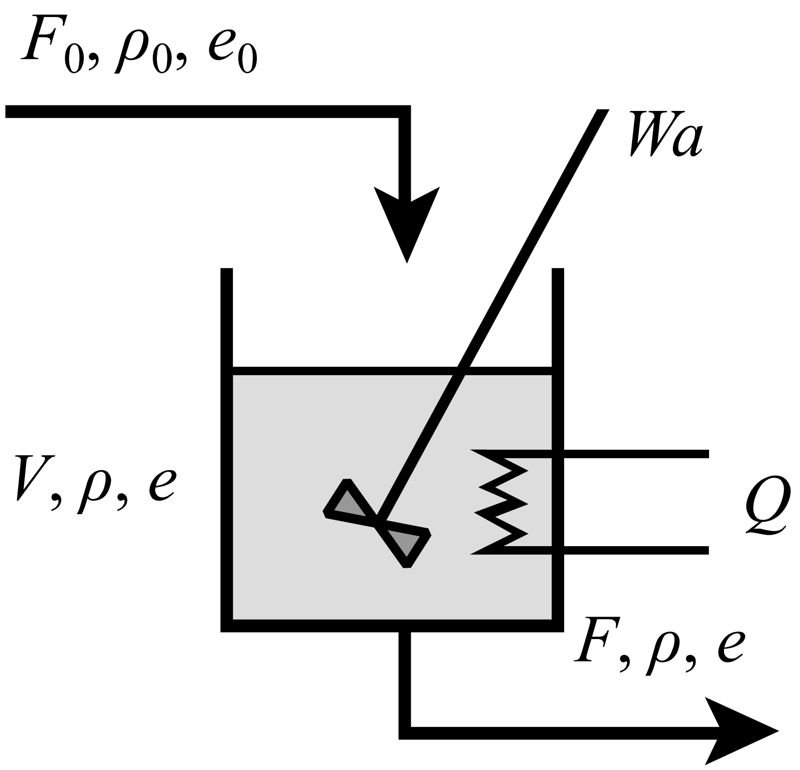


# Balance de energía

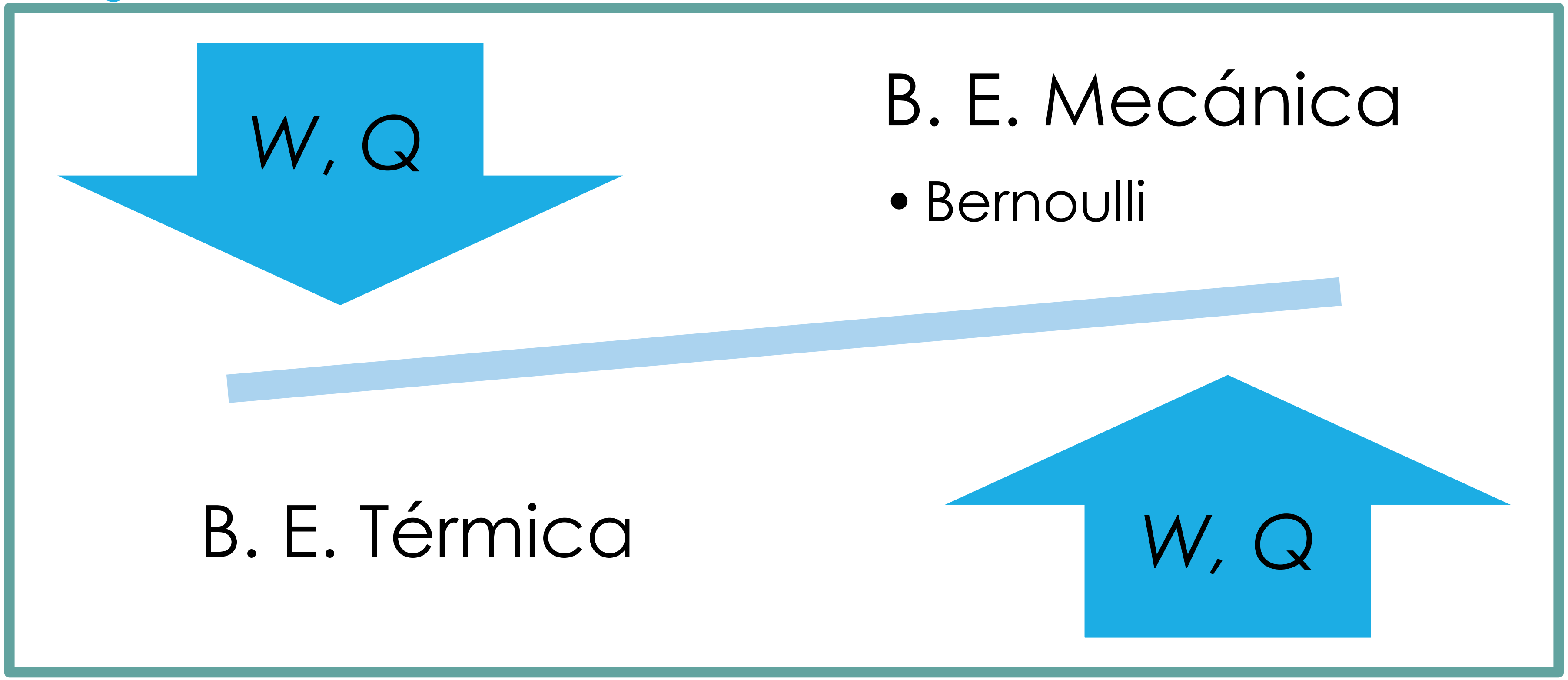
- {vel. de acum.} $= \dfrac{d(V\rho e)}{dt}$
- {vel. de entrada} $= F_0 \rho_0 e_0 + Q + Wn$
- {vel. de salida} $= F \rho e$

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

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



# 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

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

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

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

$$h_1 - h_0 = \int_{T_0}^{T_1} Cp(T)\,dT \qquad V\rho\frac{dh}{dt} + (h - hr)\frac{d(V\rho)}{dt} = F_0\rho_0(h_0 - hr) + Q + Wa - F\rho(h - hr)$$

$$hr = h \qquad \boxed{V\rho\frac{dh}{dt} = F_0\rho_0(h_0 - h) + Q + Wa} \quad \boxed{V\rho Cp\frac{dT}{dt} = F_0\rho_0 Cp_0(T_0 - T) + Q + Wa}$$

# Variación de la temperatura

- El volumen puede variar.
- No depende del caudal de salida.
- El *Cp* puede depender de la composición.

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

# Análisis dinámico cualitativo

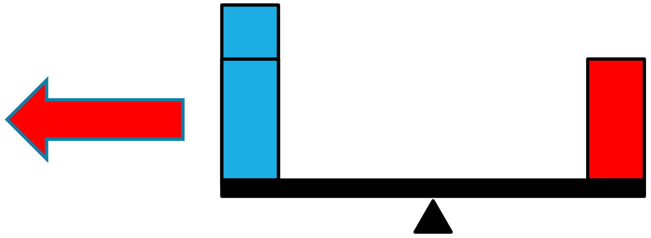
- Estado estacionario:
  - $dT/dt = 0$
- Disminuye $F_0$:
  - Aumenta $T(+)$.

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

# Análisis dinámico cualitativo

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

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



# Análisis dinámico cualitativo

- Estado estacionario:
  - $dT/dt = 0$
- 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

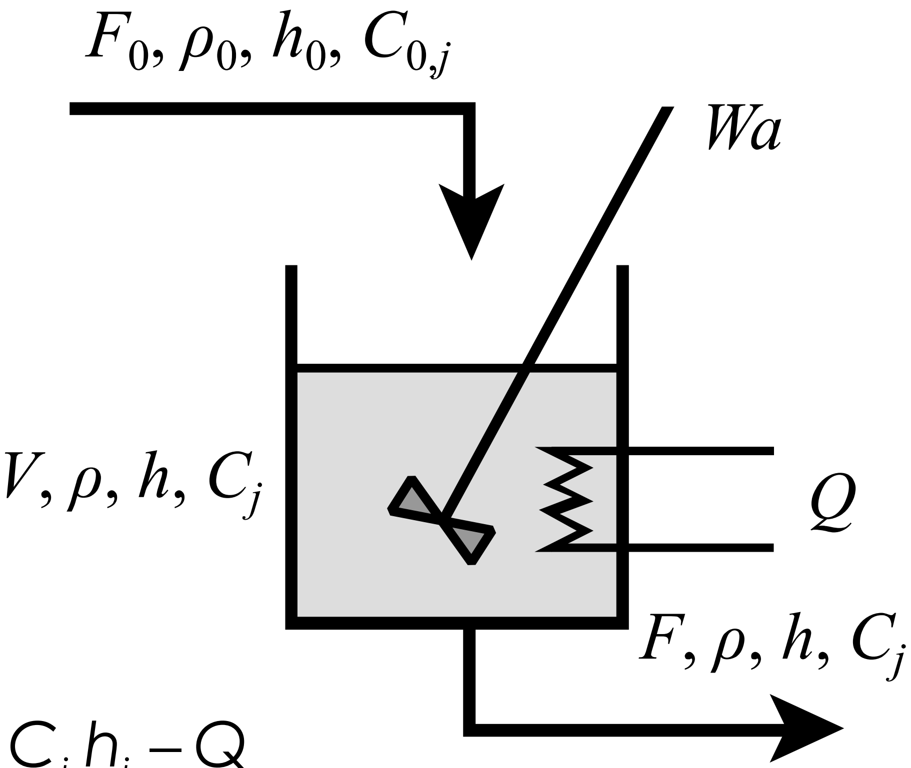
# Solución ideal

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

# 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

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

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

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

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

Regla de mezcla

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

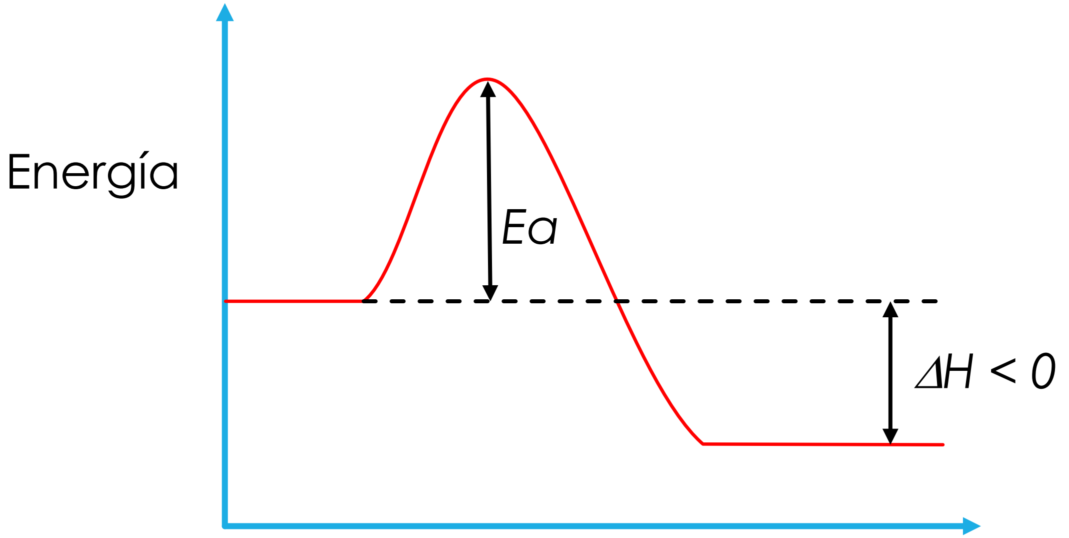
$$C_j = x_j\, C$$

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

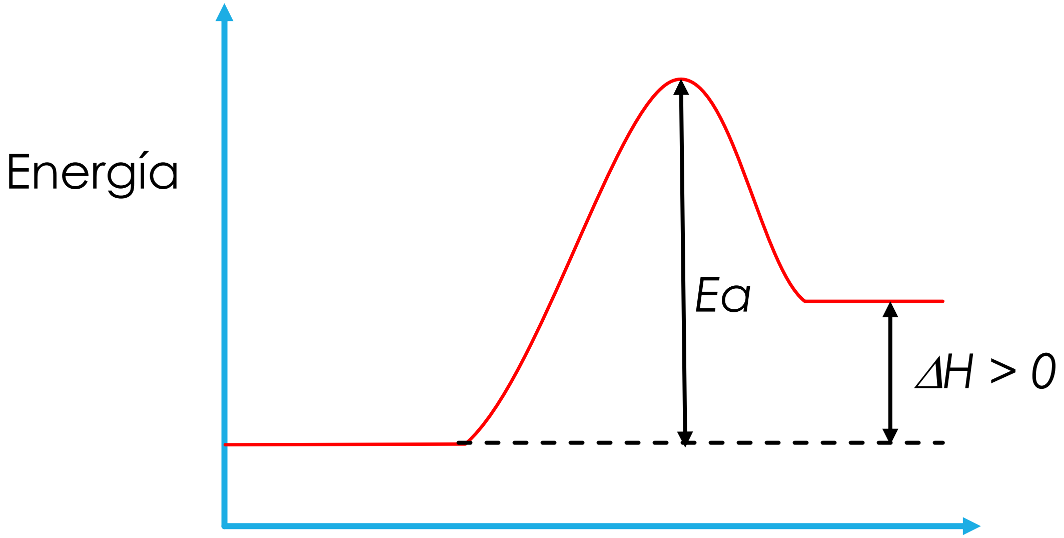
$$\boxed{V\,\rho\, Cp \frac{dT}{dt} = \sum_{\forall i \in E} F_i\, \rho_i\, Cp_i\left(T_i - T\right) + V \sum_{\forall k \in R} r_k\left(-\Delta H_k\right) + Wa - Q}$$

# Calor de reacción

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




Coordenada de reacción
Exotérmica




Coordenada de reacción
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):

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

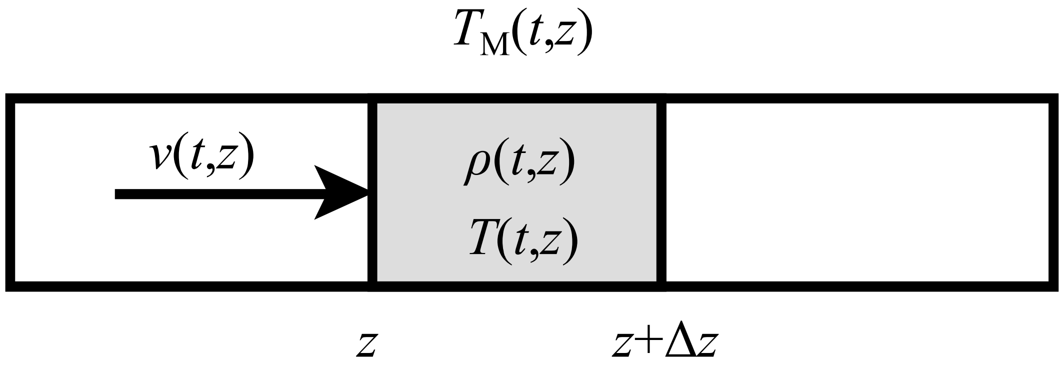
### ✅ En estado estacionario:

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

# Balance de energía en un sistema con parámetros distribuidos

# Balance de energía

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




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

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

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

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

# 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 |

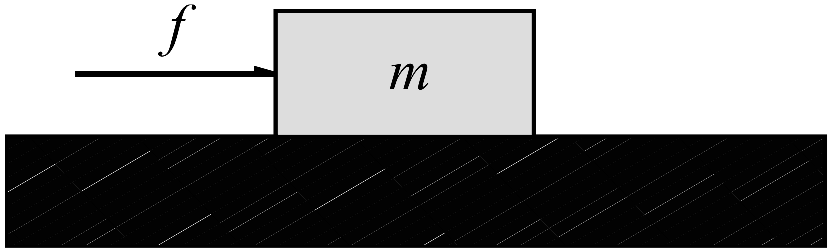
### 🔷 Si hay una **camisa térmica a temperatura fija** $T_c$ con coeficiente de transferencia $U$**:

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

# Balance de cantidad de movimiento

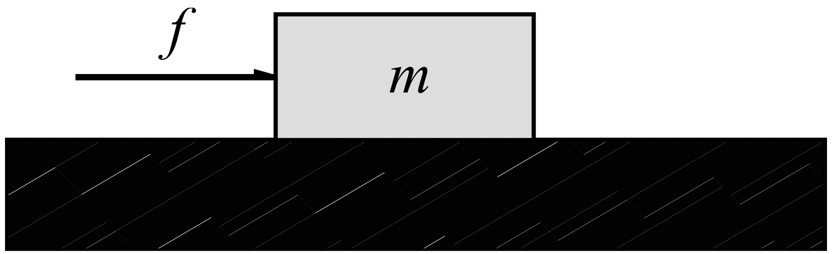
# Balance de cantidad de movimiento

- {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

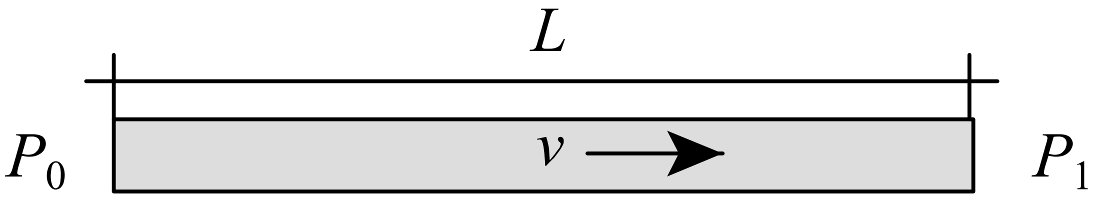
- {vel. de acum.} $= \dfrac{d(mv)}{dt}$
- {vel. de entrada} $= 0$
- {vel. de gener.} $= f$
- {vel. de salida} $= 0$




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

# Una tubería

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




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

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

# Mapa curricular de balance de energía

1. Balance de energía
2. Balance de energía térmica
3. Estado de referencia
4. Variación de temperatura
5. Análisis dinámico cualitativo
6. Calor de reacción
7. Balance de cantidad de movimiento