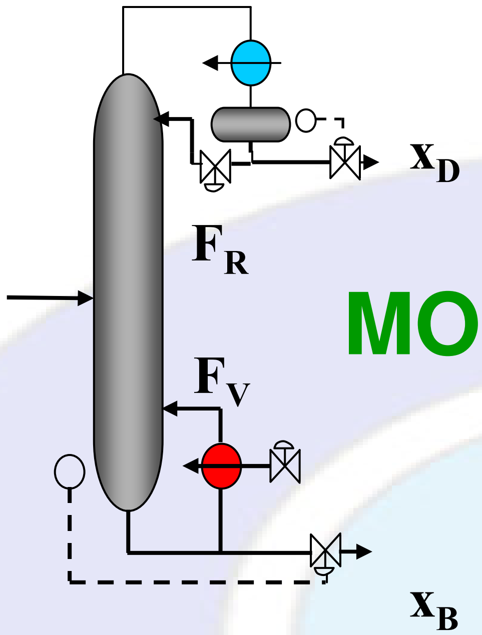


MODELACION DE PROCESOS

Vía

Fenomenológica

Prof: FRANCISCO CUBILLOS

Modelación

Modelo Matemático (Eykhoff, 1974)

"Una representacion de los aspectos esenciales de un sistema existente (o un sistema a ser construido) que representa conocimiento de utilidad"

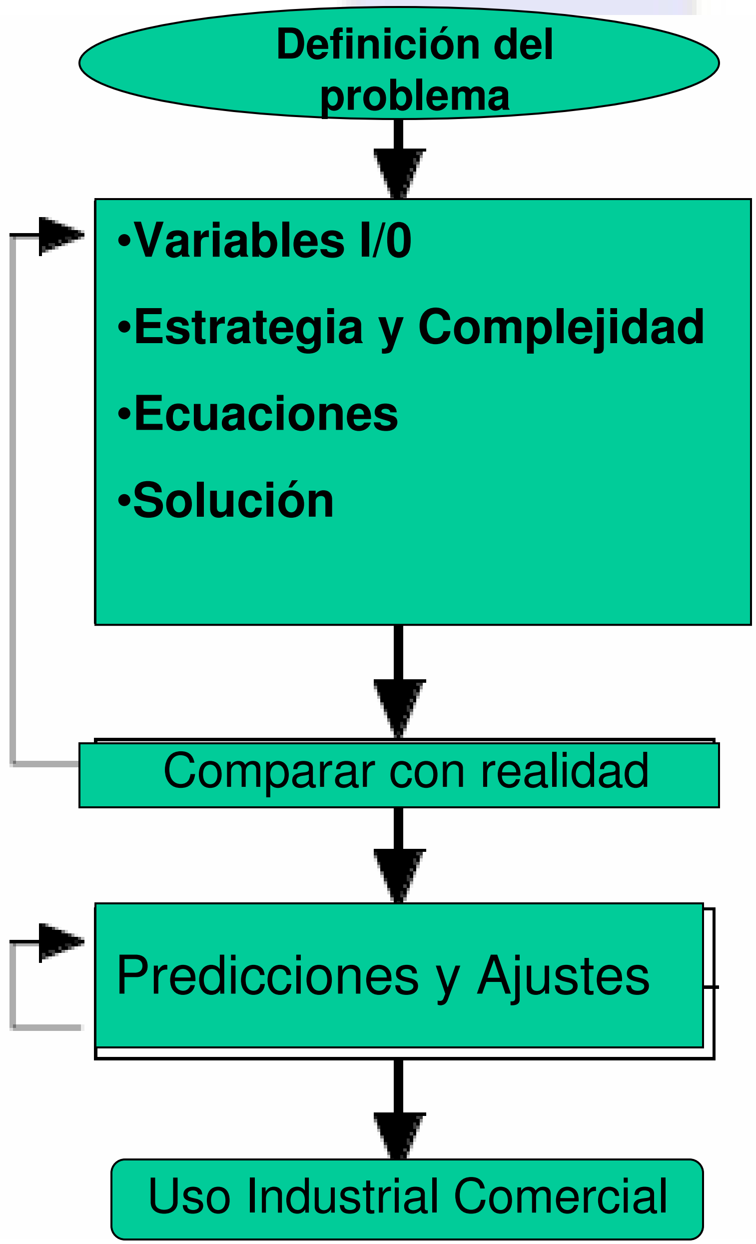
Usos de Modelos Matemáticos

- Mejorar la comprensión de los procesos
- Optimizar diseño y condiciones de operación
- Para diseñar y mejorar estrategias de control
- Entrenamiento de personal
- Planificación de operaciones
- Paradas y puesta en marcha

Principios generales de modelación

- Las ecuaciones del modelo son una aproximación al proceso real
- *Pero* .... "todos los modelos son inexactos pero útiles "
- La construcción de un modelo envuelve un compromiso entre exactitud y complejidad (costo de desarrollo v/s costo de uso.
- La modelación de procesos es tanto un arte como una ciencia . Se requiere creatividad para diseñarlo y conocimientos para asumir las simplificaciones correctas
- Los modelos de procesos resultan en sistemas de ecuaciones no lineales, diferenciales totales y/o parciales más relaciones algebraicas (sistemas álgebro-diferenciales) .

ETAPAS EN LA MODELACIÓN Y SIMULACION DE PROCESOS



GUIA SISTEMATICA DE DESARROLLO

1. Definir los alcances y objetivos del modelo . ¿Que se desea?¿para que lo usare?
2. Poner el problema es un esquema de sistema. : Diagrama de información, variables Entrada/Salida.
3. Seleccionar los límites de análisis : El (los) Volumen de control. (microscópico – distribuido)
4. Enumere todas las suposiciones realizadas. Tratar de simplificar en lo posible para alcanzar los objetivos de modelación.
5. Escriba las ecuaciones de conservación necesarias (masa, componente, energía, y Cantidad de movimiento) para cada V.C.

6. Incorpore las ecuaciones constitutivas que relacionan las cantidades conservativas con las entradas y salidas: termodinámicas, de transporte, cinéticas, geométricas , etc. Ej: $\mathbf{Q = h\,A\,(\Delta T)}$ $\mathbf{r_A = k_0\, e^{-E/RT}}$
7. Análisis del modelo (G de libertad, dimensional)
8. Simplificar y ordenar el modelo para fines de solución. (reducción de ecuaciones, arreglos matriciales, etc.
9. Solución del modelo.
10. Análisis de resultados

LEYES DE CONSERVACION (BALANCES)

Las bases de los modelos fenomenológicos son los balances a propiedades conservativas en el VOLUMEN DE CONTROL

$$\begin{Bmatrix}\text{Acumulacion de} \\ \text{S en el v.c}\end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix}\text{flujo de S} \\ \text{entrada}\end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix}\text{flujo de S} \\ \text{salida}\end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix}\text{generacion de S} \\ \text{en el v.c.}\end{Bmatrix}$$

$$\{dS/dt\} = \left\{\dot{S}\ ent\right\} - \left\{\dot{S}\ sal\right\} + \left\{\dot{G}\ vc\right\}$$

Conservación de Masa

$$\begin{Bmatrix} \text{Acumulacion de masa} \\ \text{en el vol} \quad \text{de control} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \text{flujo masico} \\ \text{entrada} \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} \text{flujo masico} \\ \text{salida} \end{Bmatrix}$$

Conservación de Componente i

$$\begin{Bmatrix} \text{Acumulacion de} \\ \text{i en el v.c} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \text{flujo de i} \\ \text{entrada} \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} \text{flujo de i} \\ \text{salida} \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} \text{generacion de i} \\ \text{en el v.c.} \end{Bmatrix}$$

Conservación de Energía

La energía total asociada a la masa de un sistema , U_{tot}, es la suma de la energía interna cinética y potencial.

$$U_{tot} = U_{\text{int}} + U_{KE} + U_{PE}$$

$$\begin{Bmatrix} \text{Acumulacion} \\ \text{U + PE + KE} \end{Bmatrix} = \{\text{H + PE + KE}_{\text{ in}}\} - \{\text{H + PE + KE}_{\text{ out}}\}$$

$$+ \text{Q} + \text{G} - \text{W}_\text{s}$$

Ws : Trabajo de eje   H : Entalpía

G : Generación en el V.C ej: = λ(-Ra)V

Q : Calor transferido ej: = hA(Tw-Ts)

•Notar que $H = U + PV$ y que $W = W_s + PV$

•En sistemas con efectos térmicos $\Delta U >> \Delta(KE+PE)$ luego una expresión útil es

$$\{dU/dt\} = \{-\Delta H\} + Q + G - W_s$$

Caso particular (Habitual) : Fluido incompresible o P Cte

$$dU = dH = c_p dT$$

BALANCE DE C. DE MOVIMIENTO

(Balance de Fuerzas)

$$\left\{ d(M * \overrightarrow{V} /dt \right\} = \left\{ \sum \overrightarrow{F}_{ext} \right\}$$

- Tres componentes (x,y,z)
- Se utiliza para especificar campos de presión o velocidad

Relaciones constitutivas : Describen el fenómeno en términos de las variables de interés

1. Transport Rates

Mass Transport

Molecular

$$N_A = -DA\frac{dC_A}{dz}$$

Fick's Law

Convective Interphase

$$N_A = k_C\, A(C^* - C)$$

$$N_A = K_{OC}\, A(C^* - C)$$

Energy Transport

$$q = -kA\frac{dT}{dz}$$

Fourier's Law

$$q = hA\Delta T$$

$$q = UA\Delta T$$

Momentum Transport

$$\tau = -\mu\frac{dv}{dz}$$

Newton's Viscosity Law

$$v = -\frac{K}{\mu}\frac{dp}{dz}$$

Darcy's Law

$$\tau_w = f\frac{\rho v^2}{2}$$

Shear Stress at Pipe Wall

2. Chemical Reaction Rates

First Order

$r = k_r C_A$

Second Order

$r = k_r C_A^{\,2} = k_r C_A C_B$

3. Drag and Friction in Viscous Flow

Sphere

$$C_D = \frac{24}{Re}$$

$$F_D = C_D A_C \frac{\rho v^2}{2}$$

Pipe

$$f = \frac{16}{Re}$$

$$\Delta p = 4f\rho \frac{v^2}{2}\frac{L}{D}$$

4. Equations of State for Gases

Ideal Gas

$pV = nRT$

Real Gas

$pV = z(T_r, p_r)RT$

5. Physical Equilibria

Henry's Law

$y = Hx$

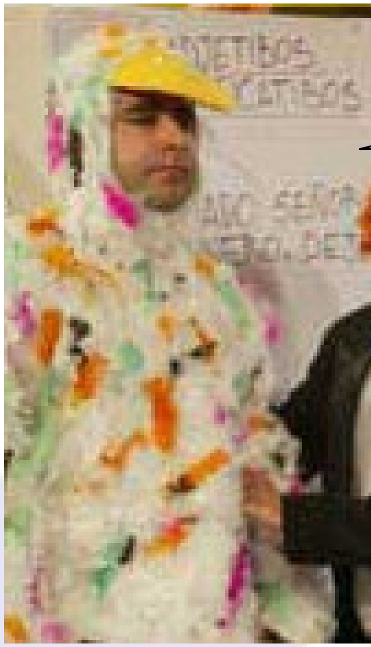
Vapor-Liquid Equilibrium

$yP_T = \gamma \times P^o$

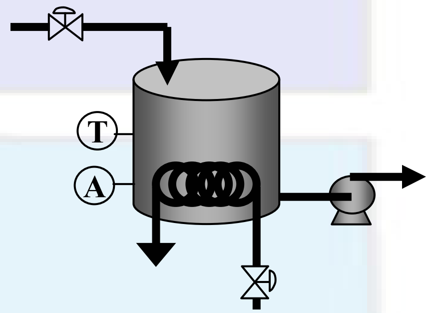
6. Thermodynamics

Enthalpy

$\Delta H = Cp\Delta T$



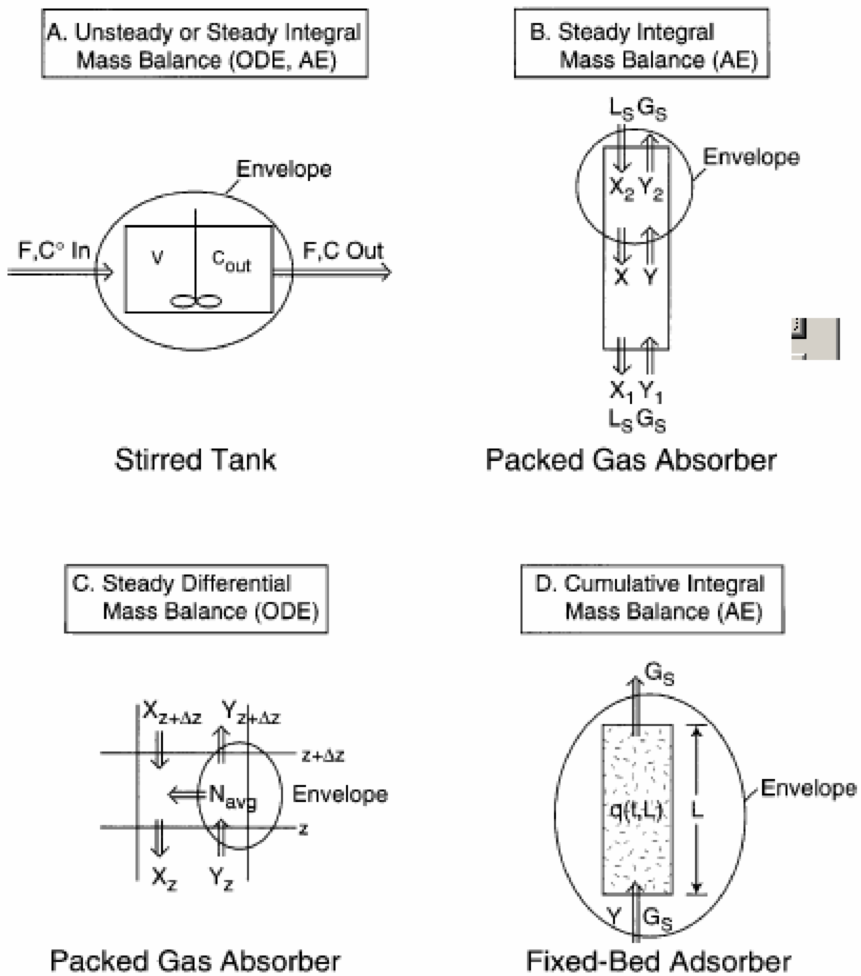
¿Cual balance debo utilizar?



Ejemplos de relación entre variables y balance

Nivel, Masa	→	**B de Masa Total**
Presión, Velocidad	→	**B comp – B.CM**
Temperatura	→	**B de Energía**
Concentracion	→	**B Comp.**

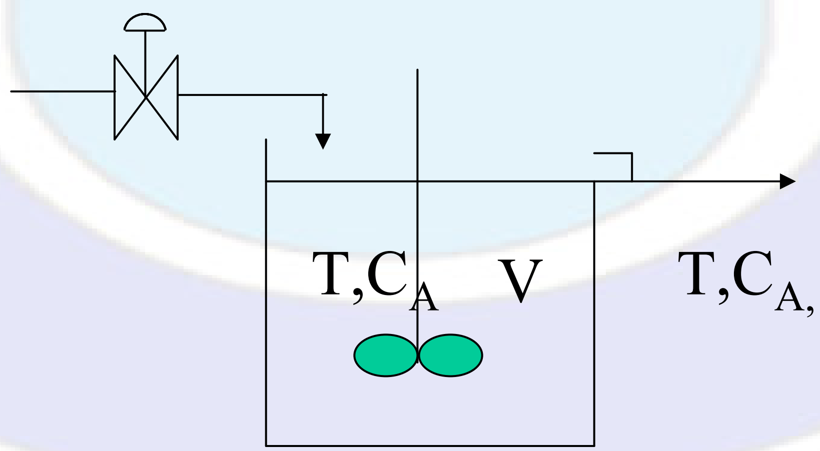
Volumen de control VC: Volumen específico donde se aplican los balances. Puede ser el equipo completo, o una porción de este



El Volumen de Control V.C

Volumen Macroscópico

- Modelo de mezcla perfecta
- Volumen de control = V
- Los estados no varían con la posición S(t)



Modelo matemático de la forma

No estacionario :

$$dS/dt = g(u,p,t)$$

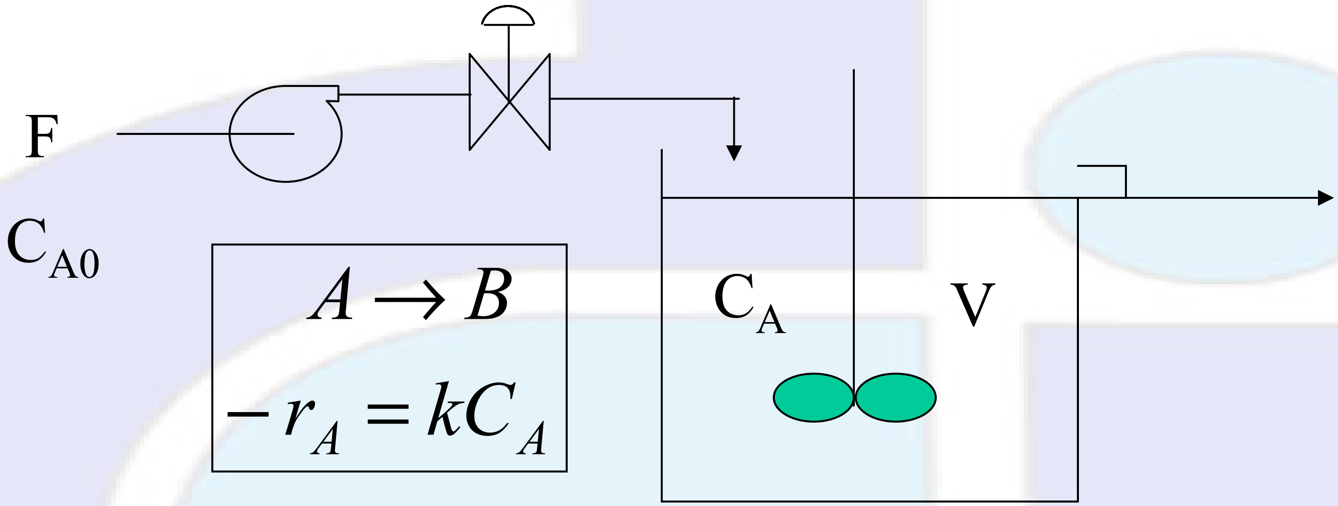
Sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias

Estacionario :

$$g(u,p,y)= 0$$

Sistemas de ecuaciones no lineales

Ejemplo clásico : RTAC 1º Orden



$$A \rightarrow B$$

$$-r_A = kC_A$$

$$V\frac{dC_A}{dt} = F(C_{A0} - C_A) - VkC_A$$

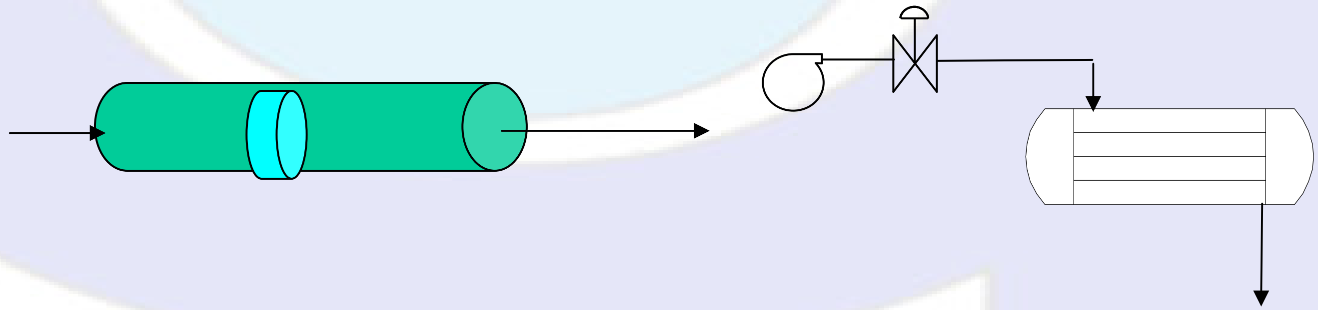
$$V\frac{dC_B}{dt} = F(0 - C_B) + VkC_A$$

El Volumen de Control V.C

Volumen Microscópico

- Sistema distribuido (contacto continuo)
- VC diferencial = dV
- Los estados varían espacialmente S(x,y,z,t)
- Modelo matemático de la forma (pde)

$$\partial S / \partial t + v \nabla S = G$$



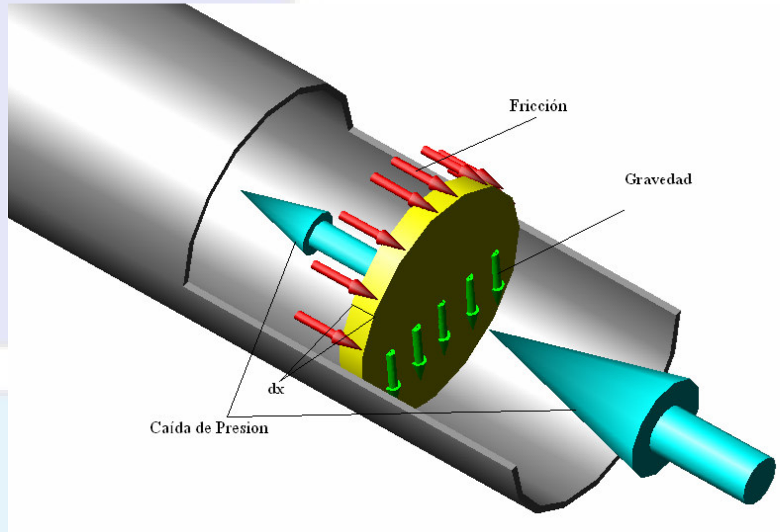
Modelo matemático descrito por las ecuaciones de variación:

Son ecuaciones volumétricas aplicables al medio continuo.
La interacción con los límites aparece en las condiciones de borde.

Dan origen a problemas específicos en ingeniería

Continuidad

$$\frac{dA\rho}{dt} + \frac{d(A\rho v)}{dx} = 0$$



Cantidad de Movimiento

$$\frac{\partial(\rho \cdot v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \cdot v^2 + P)}{\partial x} = \rho \cdot g \cdot \sin(\theta) - \frac{f \cdot \rho \cdot v \cdot |v|}{2} \cdot \frac{S}{A} - \frac{\rho v^2}{A}\frac{\partial A}{\partial x}$$

Energía

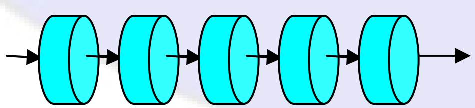
$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho H v)}{\partial x} = k \cdot (T_{wall} - T) \cdot \frac{S}{A} - \rho \cdot g \cdot \sin(\theta) - \frac{1}{2} f \cdot \rho \cdot v^2 |v| \cdot \frac{S}{A} - \rho \cdot H \cdot v \frac{1}{A} \cdot \frac{dA}{dx}$$

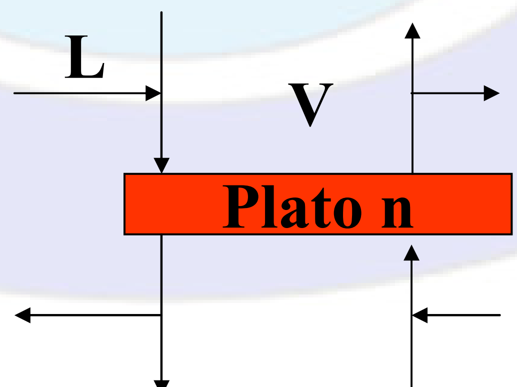
El Volumen de Control V.C

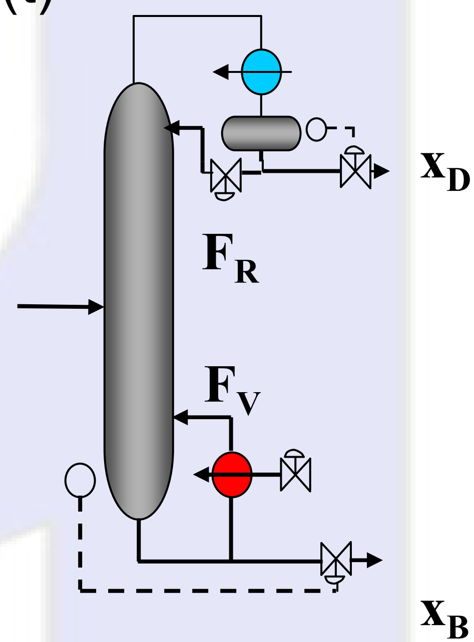
Sistemas en etapas

- Sistema Macro- distribuido (***n*** RTAC)
- VC finito = ΔV o V/***n***
- Los estados varían en cada etapa $S_j(t)$
- Modelo matemático de la forma

  $dS_i/dt=g(S,t)$ i=1:n (n odes)

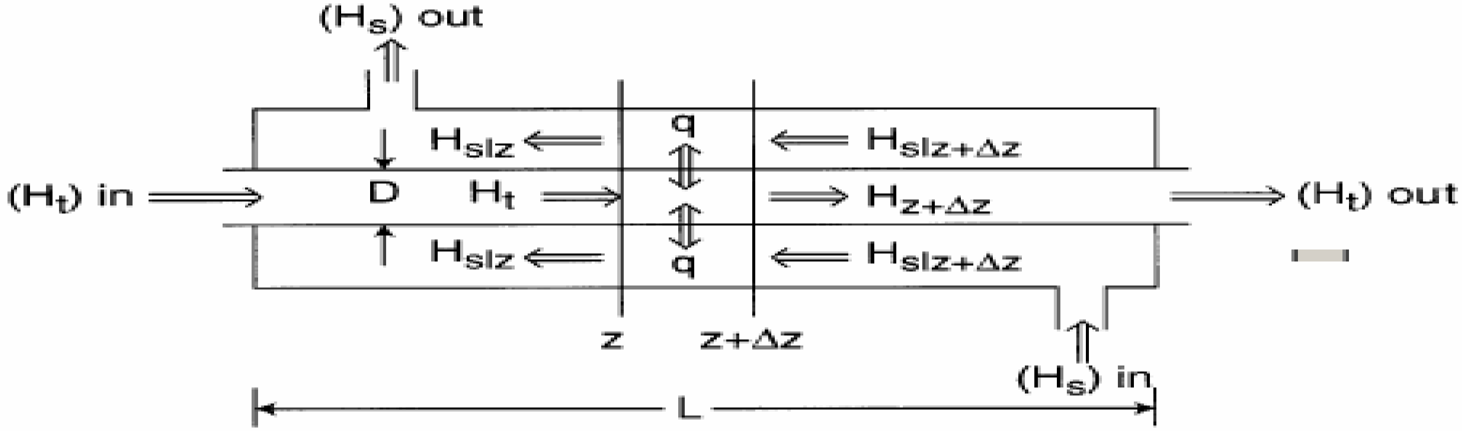






EJEMPLOS ILUSTRATIVOS

Intercambiador de calor estacionario



$$\frac{d(T_s - T_t)}{dz} = U\pi d\left[\frac{1}{F_s C_{ps}} - \frac{1}{F_t C_{pt}}\right]$$

which when integrated by separation of variables over the
yields:

$$\frac{T_t - T_{t\,in}}{T_{sin} - T_{t\,in}} = \frac{F_s C_{ps}}{F_t C_{pt}} \frac{\exp U\pi dz\left(\frac{1}{F_s C_{ps}} - \frac{1}{F_t C_{pt}}\right) - 1}{\exp U\pi dL\left(\frac{1}{F_x C_{px}} - \frac{1}{F_t C_{pt}}\right) - \frac{F_s C_{ps}}{F_t C_{pE}}}$$

$$\ln\frac{(T_s - T_t)_L}{(T_s - T_t)_0} = U\pi dL\left[\frac{1}{F_s C_{ps}} - \frac{1}{F_t C_{pt}}\right]$$

$$NTU = \frac{UA}{(FC_p)_{Min}}$$

$$q = UA\frac{(T_s - T_t)_L - (T_s - T_t)_0}{\ln\frac{(T_s - T_s)_L}{(T_s - T_t)_0}}$$

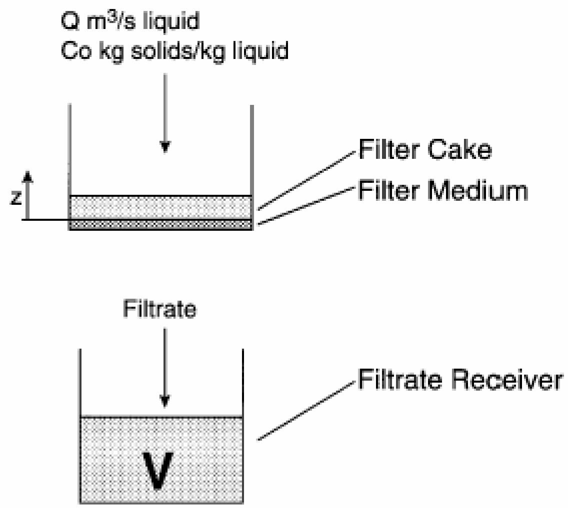
$$\varepsilon = \frac{C_h[(T_h) - (T_h)_{out}]}{C_{min}[(T_h)_{in} - (T_c)_{in}]} = \frac{C_c[(T_c) - (T_c)_{in}]}{C_{Min}[(T_h)_{in} - (T_c)_{in}]}$$

EJEMPLOS ILUSTRATIVOS

Filtración

Rate in of solids – Rate out of solids = Rate of change in contents

$$QC_o - 0 = \frac{d}{dt} Az(1-\varepsilon)\rho_s$$



Solids previously in filtrate volume V = Solids retained in cake

$$C_0 V = zA(1-\varepsilon)\rho_s$$

$$\frac{V^2}{2} = \frac{A^2 \Delta p}{\alpha \mu C_0} t$$

Transferencia de calor por convección de un fluído en una tubería en estado no estacionario

$$v(t)\rho Cp(\pi d^2 / 4)\frac{\partial T}{\partial x} + U(t)(\pi d)[T_s - T] = \rho Cp\frac{\pi d^2}{4}\frac{\partial T}{\partial t}$$

$$-v(t)\frac{\partial T}{\partial x} + K(t)[T_s - T] = \frac{\partial T}{\partial t}$$

Reactor tubular con pared catalítica

$$v\frac{\partial C_A}{\partial z} = D_{AB}\left[\frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial C}{\partial r}\right]$$

Three boundary conditions are required, which are as follows:

At the inlet: $C_A(r,0) = (C_A)^0$

At the axis: $\frac{\partial C_A}{\partial r}(0,z) = 0$

At the wall: $-D_{AB}\frac{\partial C_A}{\partial r}(R,z) = k_r C_A(R,z)$

Agentes Toxicos en seres vivos

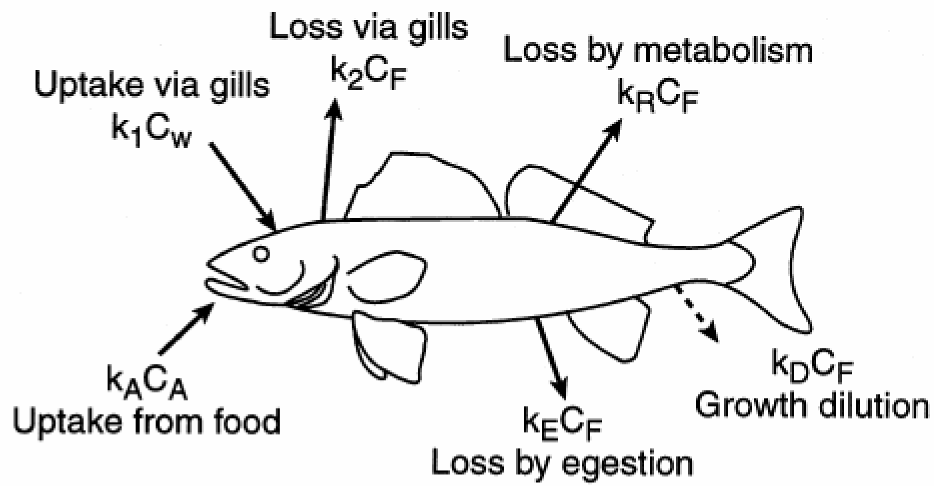


FIGURE 6.12 Uptake and loss of a toxic substance in fish. (D. Mackay, *Multimedia Environmental Models, The Fugacity Approach,* Lewis Publishers, Chelsea, MI, 1991. With permission.)

$$\frac{dC_F}{dt} = k_1C_W - k_2C_F \tag{6.2.16}$$

For uptake:

$$C_F/C_W = k_1/k_2[1 - \exp(-k_2t)]$$

For clearance ($k_1 = 0$):

$$C_F/C_{Fo} = \exp(-k_2t)$$