Modelación y Simulación de Procesos

Mauricio Amigo

DIMENSIONES SOBRE LAS ECUACIONES

ECUACIONES DEBEN SER DIMENSIONALMENTE HOMOGENEAS

VARIABLES FISICAS UNIDADES

BASICAS	COMPUESTAS
Longitud	Densidad
Masa	Velocidad
Tiempo	Fuerza
Etc	Etc

Mauricio Amigo

DATO

NUMERO + DIMENSION (Expresada en Unidades)

Por ejemplo: 50 Km/hr [L/T]

HOMOGENEIDAD DIMENSIONAL

SI A = B + C

B Y C Tienen las mismas dimensiones y,

A es dimensionalmente igual a B

A es dimensionalmente igual a C

Ejemplo: 3 kg+ 2 mol= ??????

$V = (2gh)^{0,5}$; L t-1[=] $(L\ t\text{-}2L)^{0,5}$⇒Correcto

Mauricio Amigo

CAMBIO DE UNIDADES Y CANTIDADES CON DIFERENTES UNIDADES

SOLO DEBE CONSIDERAR LAS DIFERENCIAS DEL CAMBIO

Ejemplo:(Cálculo puntual)

T°K = T°C + 273,15

Si, T = 20°C → T = 293.15°C

Ejemplo:(Cambio de Unidad)

C H_2O = 1 Cal/gr°C → C H_2O = 1 Cal/gr°K

T_2°K – T_1°K = T_2°C – T_1°C + (273,15 – 273,15)

Δ T°K = ΔT°C

Mauricio Amigo

CAMBIO DE UNIDADES Y CANTIDADES CON DIFERENTES UNIDADES

Ejemplo: Pueden nacer unidades compuetas al operar con valores

100Km / 2 Hr = 50 Km/Hr

Ejemplo: Cambio de unidades

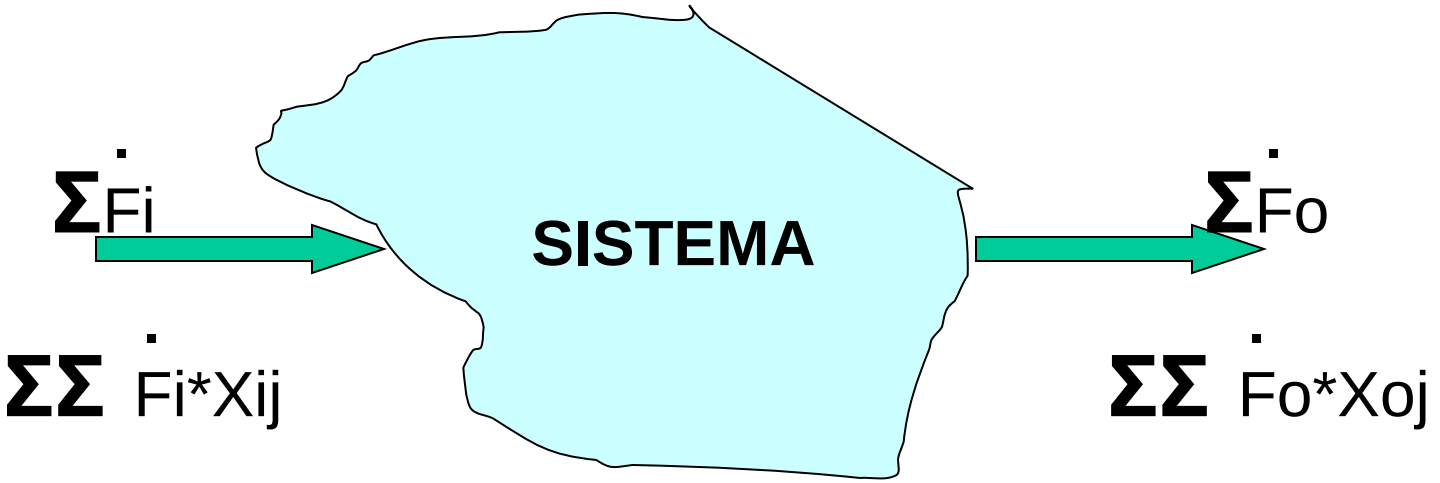
C H_2O = 1 cal/gr°c , llevarla a cal/kg°c

$$1 \quad \frac{cal}{gr°c} \quad \frac{1.000\ gr}{1kg} = 1.000 \quad \frac{cal}{kg°c}$$

Mauricio Amigo

BALANCE DE MASA

Masa se Conserva: Masa no puede ser creada o destruida



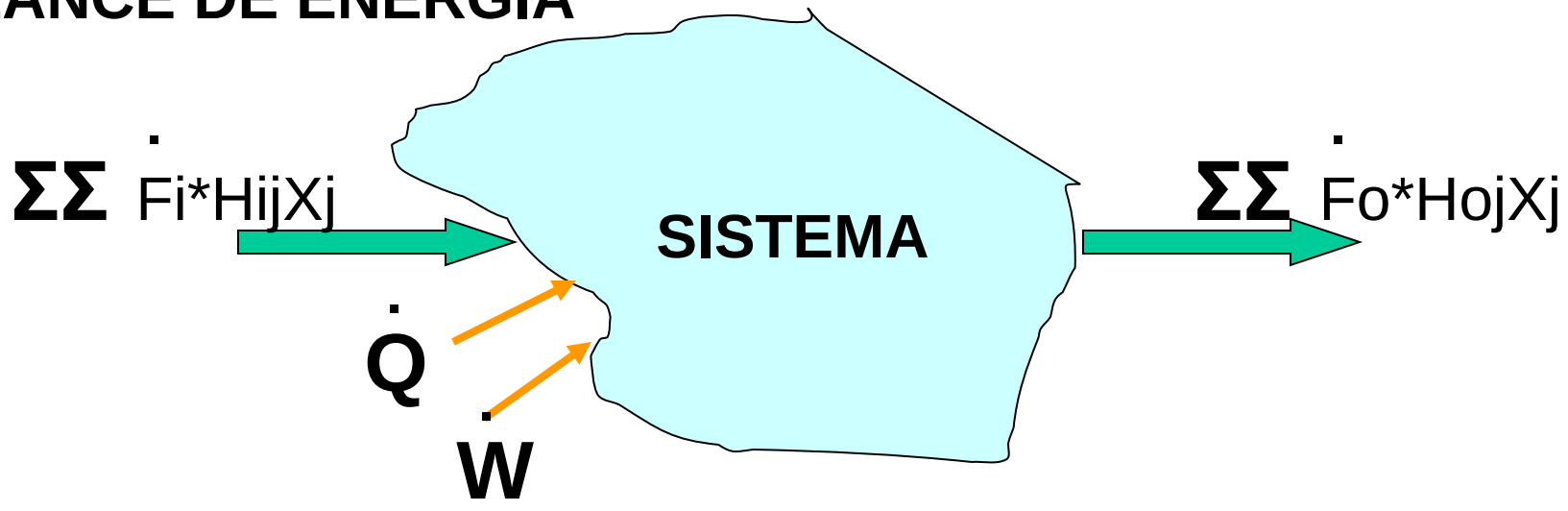
INGRESA – SALE = {ACUMULA o PIERDE EL SISTEMA}

$\dot{F}o$: Flujo molar del componente salida

$\dot{F}i$: Flujo molar del componente ingreso

Xj : Concentración molar del componente j

BALANCE DE ENERGIA



$$\dot{E} = \Sigma\Sigma\ \dot{F}i*HijXij - \Sigma\Sigma\ \dot{F}o*HojXoj + \dot{Q} + \dot{W}$$

{Variación de Energía} = {Energia Ingresa en el Flujo} – {Energía Sale en el Flujo}
+ {Calor agregado unidad de tiempo}
+ {Trabajo agregado unidad de tiempo}

Hij : Entalpía por unidad de masa molar en el ingreso del componente j

Hoj : Entalpía por unidad de masa molar en la salida del componente j

Xij : Concentración molar del componente j en el Flujo i

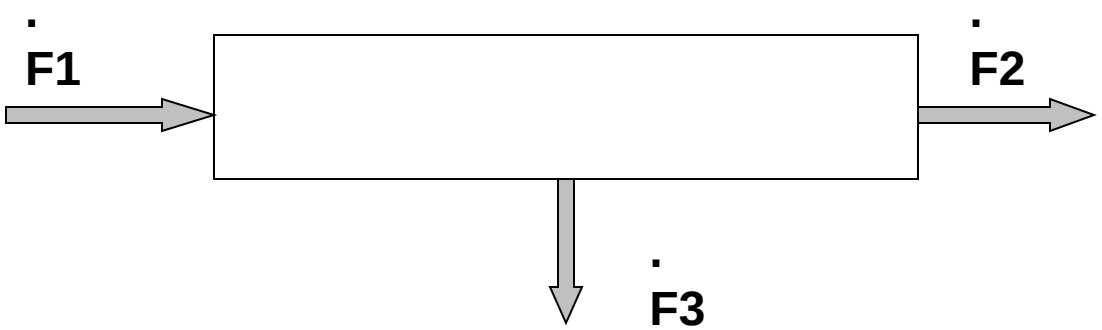
$\dot{F}o$: Flujo molar del componente salida

$\dot{F}i$: Flujo molar del componente ingreso

$\dot{E}$; Variación de energía en el sistema

UNA PRIMERA PLANTA

Supuesto 3 flujos con la presencia de: $X_1=H_20$ (%peso/peso)
X_2=Sólido cualquiera (%peso/peso)



Balance Masa Global

$$\dot{F}1 = \dot{F}2 + \dot{F}3 +/- \{Acumula\ o\ Pierde\}$$ (Acumula o Pierde = 0)

Balance de Energía Global

$$\dot{E} = \Sigma\Sigma\ Fi*HijXij - \Sigma\Sigma\ Fo*HojXoj + \dot{Q} + \dot{W}$$ ($\dot{E}$ = 0; $\dot{Q}$ = 0; $\dot{W}$ = 0)

Balance Masa por Especie

$$\dot{F}1* X_{11} = \dot{F}2* X_{21} + \dot{F}3\ X_{31}$$

$$\dot{F}1* X_{12} = \dot{F}2* X_{22} + \dot{F}3\ X_{32}$$

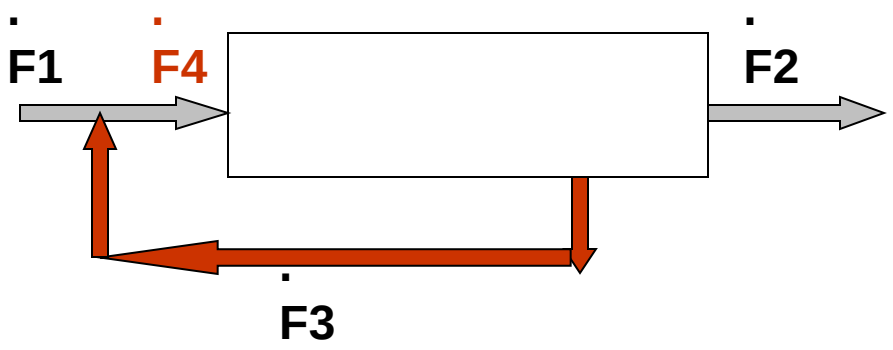
Balance Energía por Especie

$$\dot{F}1*X_{11}*H_{11} = \dot{F}2*X_{21}*H_{12} + \dot{F}3*X_{31}*H_{31}$$

$$\dot{F}1*X_{12}*H_{12} = \dot{F}2*X_{22}*H_{12} + \dot{F}3\ X_{32}*H_{32}$$

LA PLANTA RECICLO

Supuesto 3 flujos con la presencia de: $X_1=H_20$ (%peso/peso)
X_2=Sólido cualquiera (%peso/peso)



Balance Masa Global

$$\dot{F}4 = \dot{F}1 + \dot{F}3$$

$$\dot{F}4 = \dot{F}2 + \dot{F}3 +/- \{\text{Acumula o Pierde}\}$$ (0)

Balance de Energía Global

$$\dot{E} = \Sigma\Sigma\ Fi*HijXij - \Sigma\Sigma\ Fo*HojXoj + \dot{Q} + \dot{W}$$ ($\dot{E}$: 0; $\dot{Q}$: 0; $\dot{W}$: 0)

Balance Masa por Especie

$$\dot{F}1*X_{11} + \dot{F}3*X_{31} = \dot{F}4\,X_{41}$$

$$\dot{F}1*X_{12} = \dot{F}3*X_{32} + \dot{F}4\,X_{42}$$

$$\dot{F}4*X_{41} = \dot{F}3*X_{31} = \dot{F}2\,X_{21}$$

$$\dot{F}4*X_{42} = \dot{F}3*X_{32} + \dot{F}2\,X_{22}$$

Balance Energía por Especie

$$\dot{F}1*X_{11}*H_{11} + \dot{F}3*X_{31}*H_{31} = \dot{F}4*X_{41}*H_{41}$$

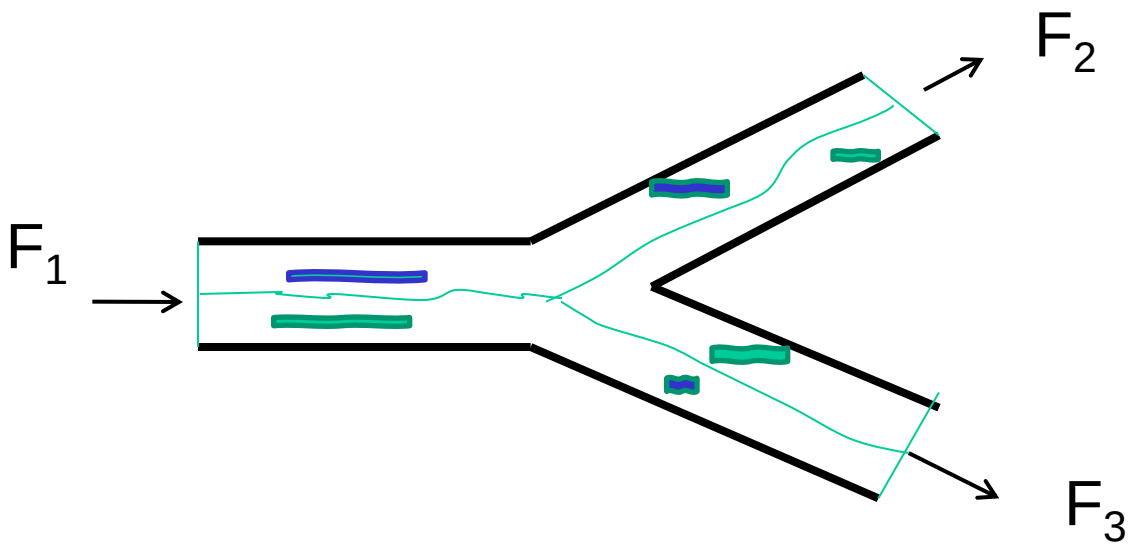
$$\dot{F}1*X_{12}*H_{12} + \dot{F}3*X_{32}*H_{32} = \dot{F}4\,X_{42}*H_{42}$$

$$\dot{F}4*X_{41}*H_{41} = \dot{F}3*X_{31}*H_{31} + \dot{F}2\,X_{21}*H_{21}$$

$$\dot{F}4*X_{42}*H_{42} = \dot{F}3*X_{32}*H_{32} + \dot{F}2\,X_{22}*H_{22}$$

Ejemplo 1

Una Balance de Masa sobre una separación de cañería como lo ilustra la figura.



El flujo contiene Agua (azul) y Benceno (verde) . Ambos no reaccionan entre sí y se separan de acuerdo a la figura en los flujos respectivos F2 y F3.

Balance Masa Global : $F_1 = F_2 + F_3$ (1)

Balance Masa Agua : $F_1X_{11} = F_2X_{21} + F_3X_{31}$ (2)

Balance Masa Benceno: $F_1X_{12} = F_2X_{22} + F_3X_{32}$ (3)

Es oportuno hacer notar que la suma de las ecuaciones (2)+(3) conforman la ecuación (1). Así, es (1) dependiente y no aportan las tres ecuaciones al sistema, sino sólo dos de las ecuaciones descritas a la solución de las incógnitas del sistema generado por el balance de masa.

Por que para todo $\sum_{j=1,n} Xij = 1$ dado un i

Podemos resolver el sistema para dos ecuaciones si sólo hay dos incógnitas.

Mauricio Amigo

Balance de Masa, Combustión

Balance de Masa en Kgmol/hr

$$CH_4 + 2\ O_2 = CO_2 + 2\ H_2O$$

$$16\ kg\ CH_4 + 64\ kg\ O_2 = 44\ kg\ CO_2 + 36\ kg\ H_2O$$

Balance de Masa, Combustión

Balance de Masa en Kgmol/hr o en Kg/hr

$$CH_4 + 2\ O_2 = CO_2 + 2\ H_2O$$

		Entrada		%	Salida	
				1		
PM		Kg/hr	Kgmol/hr		Kgmol/hr	Kg/hr
16	CH4	200,00	12,50		0,00	0,00
32	O2	932,00	29,13		4,13	132,00
28	N2	3068,00	109,57		109,57	3068,00
44	CO2				12,50	550,00
18	H20				25,00	450,00
	Σ	**4200,00**	**151,20**		**151,20**	**4200,00**

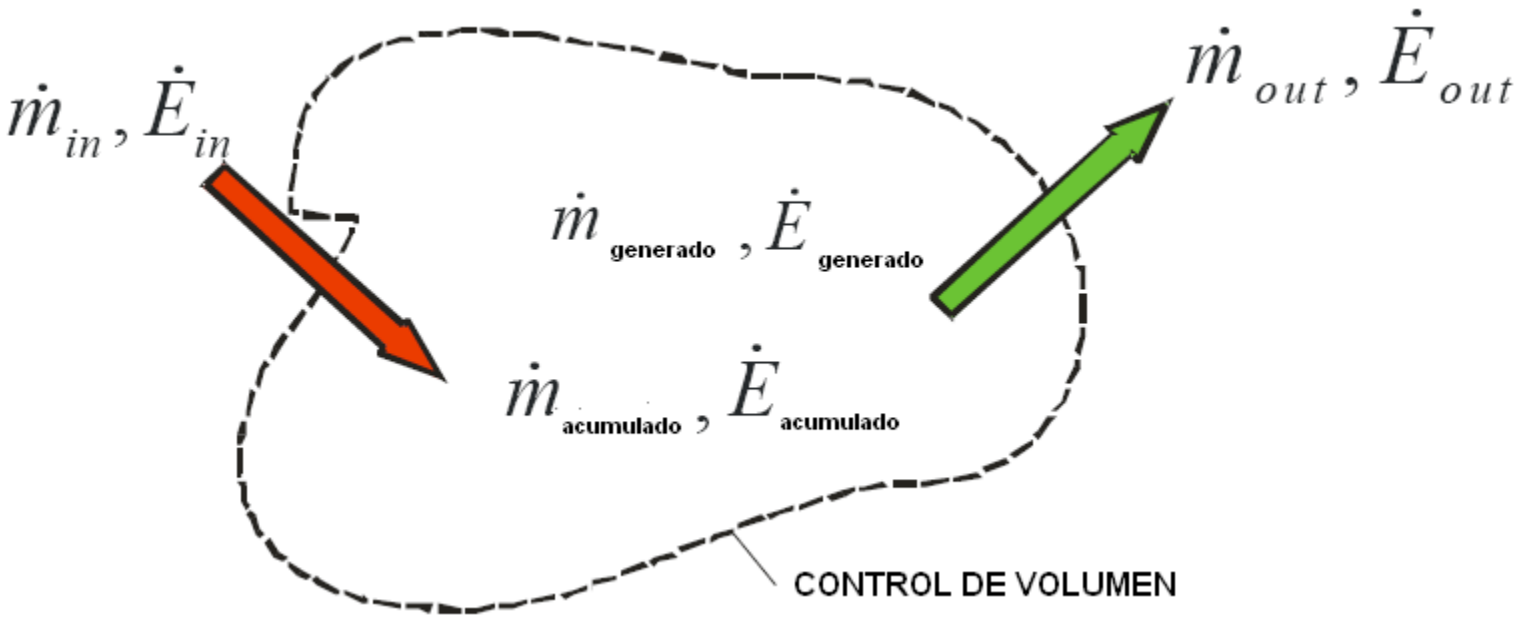
Balance de Masa, Combustión

Balance de Masa en Kgmol/hr o en Kg/hr

$$CH_4 + 2\ O_2 = CO_2 + 2\ H_2O$$

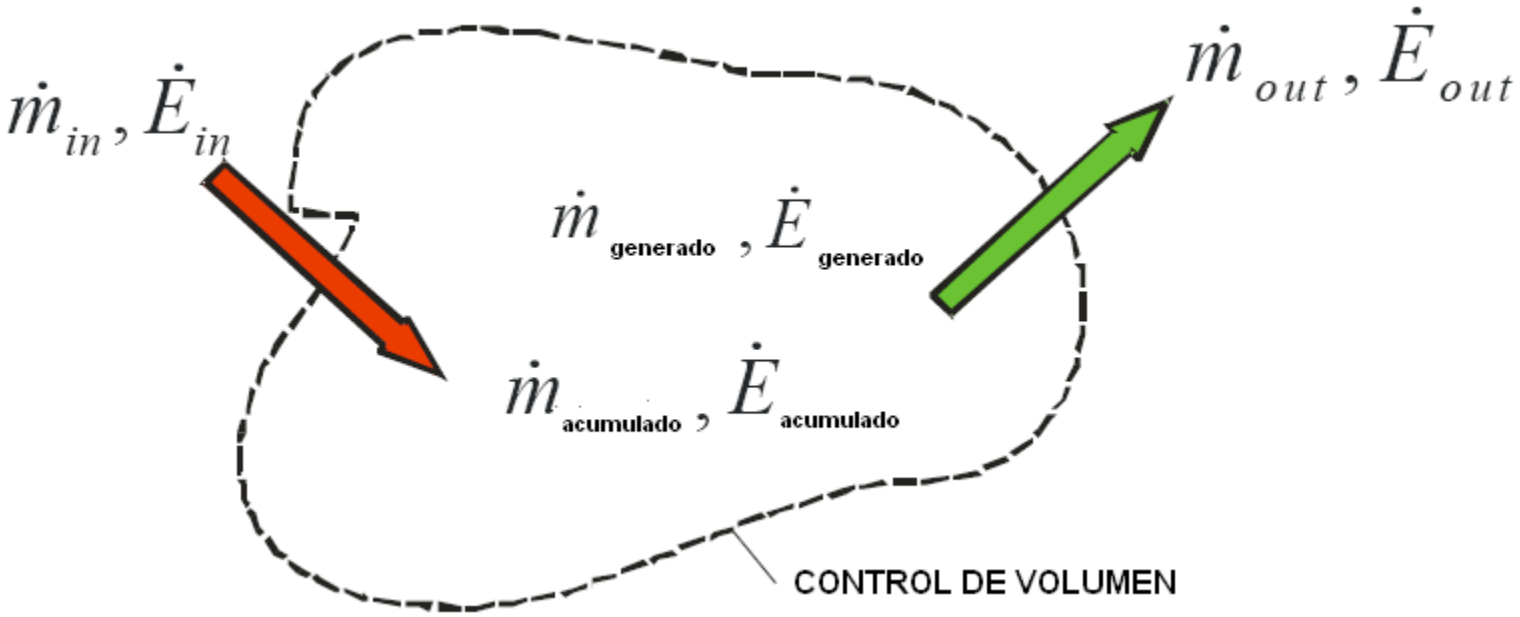
		Entrada				%	Salida			
						100,00%				
PM		F1	X1j	Kg/hr	Kgmol/hr		Kgmol/hr	Kg/hr	F2	X2j
16	CH4	12,50	0,08	200,00	12,50		0,00	0,00	0,00	0,00
32	O2	29,13	0,19	932,00	29,13		4,13	132,00	4,13	0,03
28	N2	109,57	0,72	3068,00	109,57		109,57	3068,00	109,57	0,72
44	CO2	0,00	0,00				12,50	550,00	12,50	0,08
18	H20	0,00	0,00				25,00	450,00	25,00	0,17
	Σ	**151,20**	**1,00**	**4200,00**	**151,20**		**151,20**	**4200,00**	**151,20**	**1,00**

Balance General de Masa y Energía



Lectura Opcional

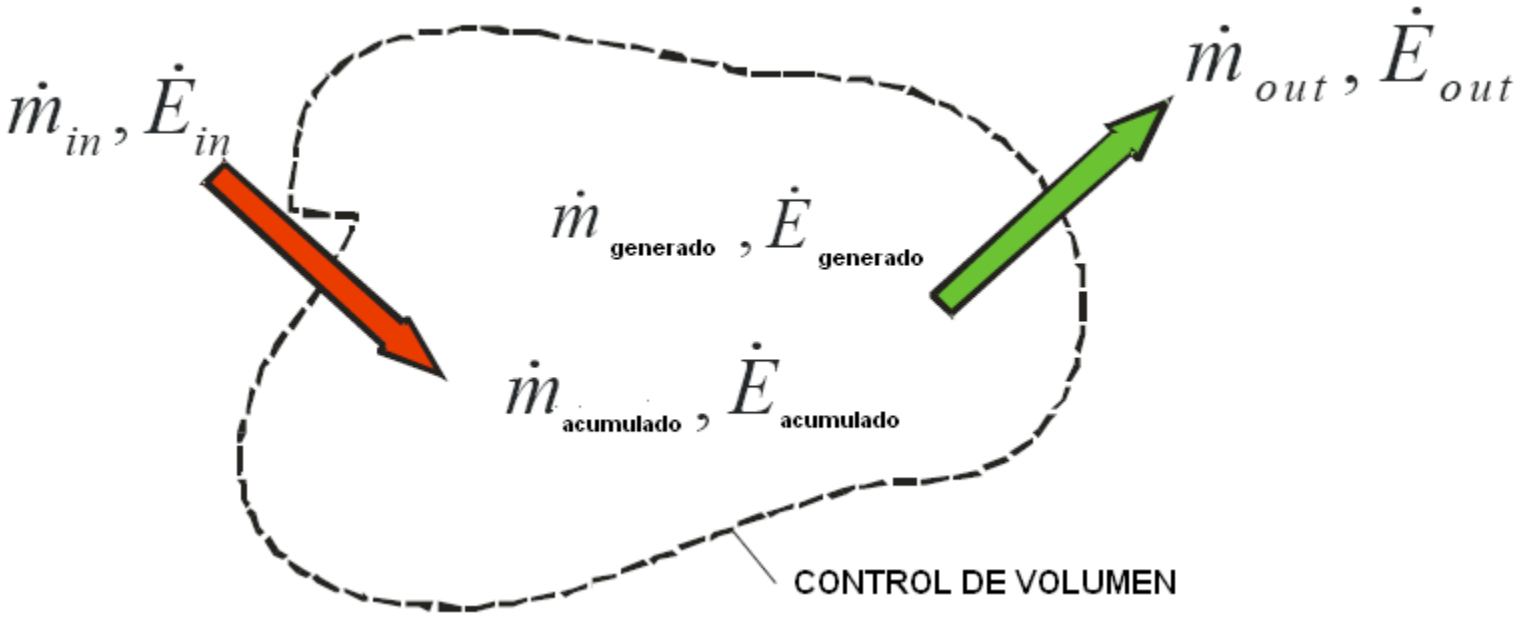
Balance General de Masa y Energía



Primera Identidad Control de Volumen

Lectura Opcional

Balance General de Masa y Energía



Primera Identidad Control de Volumen

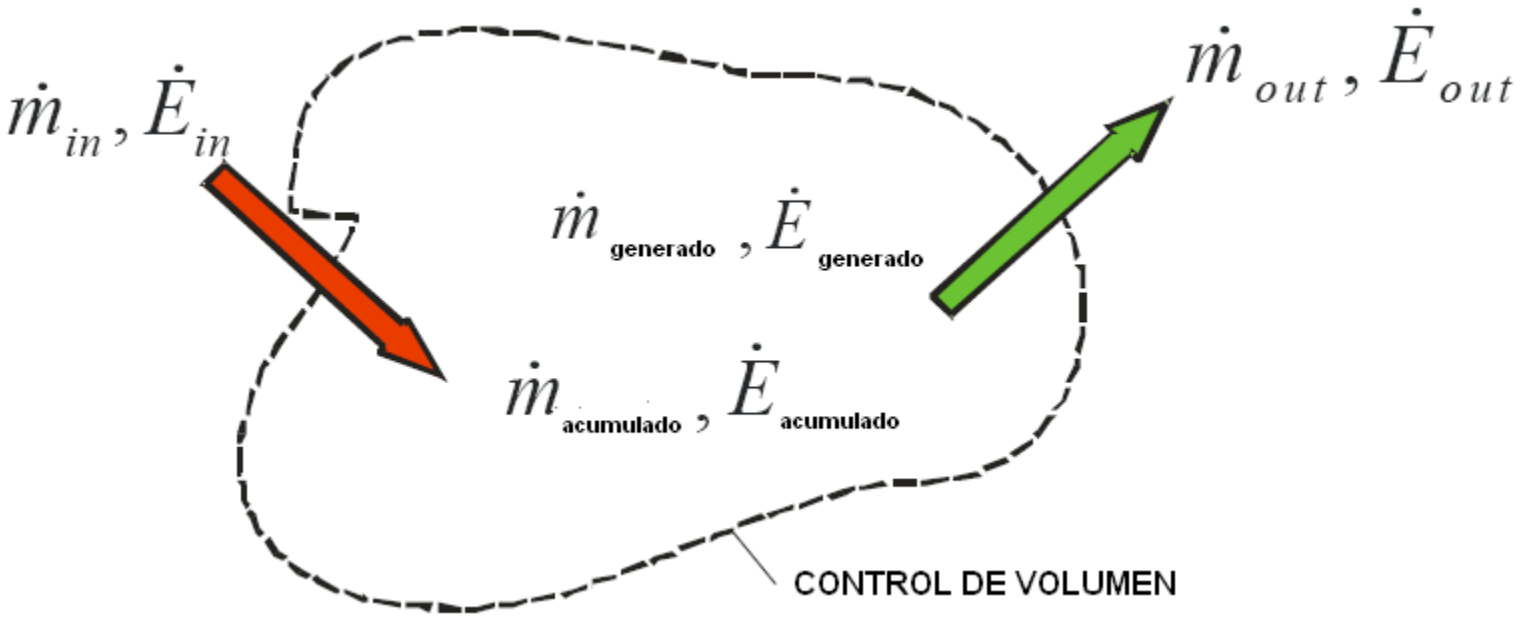
Especificar Tiempos Básicos:

Balance en un Instante

Balance en un Intervalo de tiempo

Lectura Opcional

Balance de Masa en un Instante

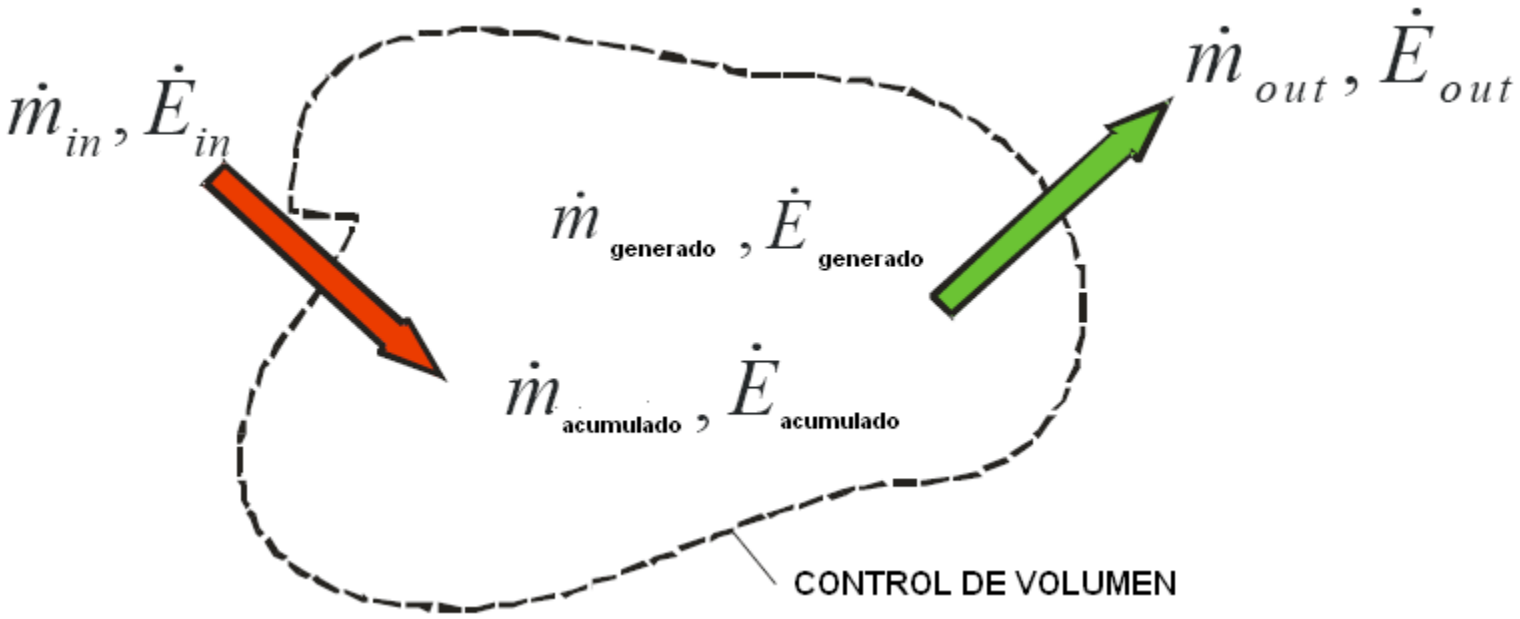


$$\dot{m}_{in} + \cancel{\dot{m}_g}^{0} - \dot{m}_{out} = \dot{m}_{acumulado} \equiv \frac{d(m)}{dt}$$

$$\dot{m}_{in} - \dot{m}_{out} = \dot{m}_{acumulado} \equiv \frac{d(m)}{dt}$$

Lectura Opcional

Balance de Energía en un Instante



$$\dot{E}_{in} + \dot{E}_{g} - \dot{E}_{out} = \dot{E}_{ac} \equiv \frac{d(E)}{dt}$$

Lectura Opcional

Balance de Masa y Energía en un Intervalo Tiempo

$$\Delta t = t_2 - t_1$$

Balance de Masa

$$\int_{t_1}^{t_2} \dot{m}_{in} \cdot dt - \int_{t_1}^{t_2} \dot{m}_{out} \cdot dt = \int_{t_1}^{t_2} \frac{d(m)}{dt} \cdot dt = \Delta m$$

$$m_{in} - m_{out} = \Delta m$$

Balance de Energía

$$\int_{t_1}^{t_2} \dot{E}_{in} \cdot dt + \int_{t_1}^{t_2} \dot{E}_g \cdot dt - \int_{t_1}^{t_2} \dot{E}_{out} \cdot dt = \int_{t_1}^{t_2} \frac{d(E)}{dt} \cdot dt = \Delta E$$

$$E_{in} + E_g - E_{out} = \Delta E$$

Lectura Opcional

Balance de Masa y Energía en Estado Estacionario

Balance de Masa

$$\int_{t_1}^{t_2} \dot{m}_{in} \cdot dt - \int_{t_1}^{t_2} \dot{m}_{out} \cdot dt = \int_{t_1}^{t_2} \frac{d(m)}{dt} \cdot dt = \Delta m$$

$$m_{in} - m_{out} = \cancel{\Delta m}^{0}$$

Balance de Energía

$$\int_{t_1}^{t_2} \dot{E}_{in} \cdot dt + \int_{t_1}^{t_2} \dot{E}_{g} \cdot dt - \int_{t_1}^{t_2} \dot{E}_{out} \cdot dt = \int_{t_1}^{t_2} \frac{d(E)}{dt} \cdot dt = \Delta E$$

$$E_{in} + E_{g} - E_{out} = \cancel{\Delta E}^{0}$$

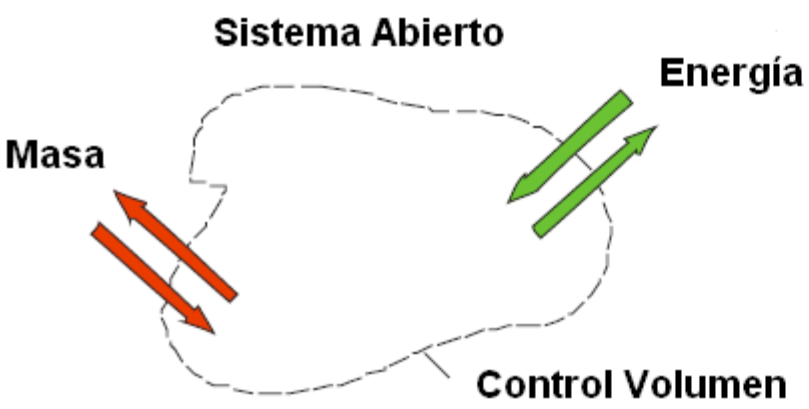
Lectura Opcional

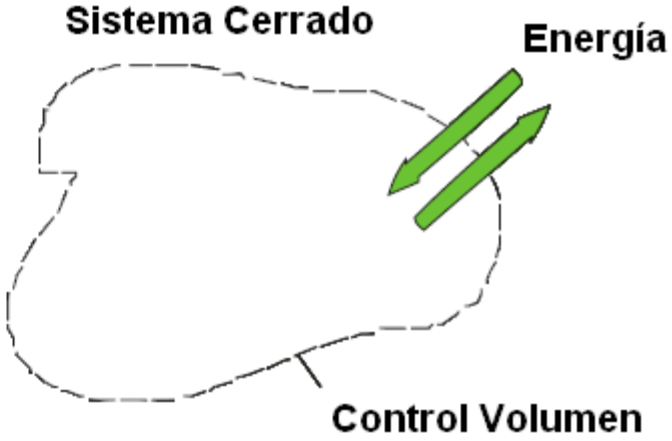
Primera Ley de Termodinámica

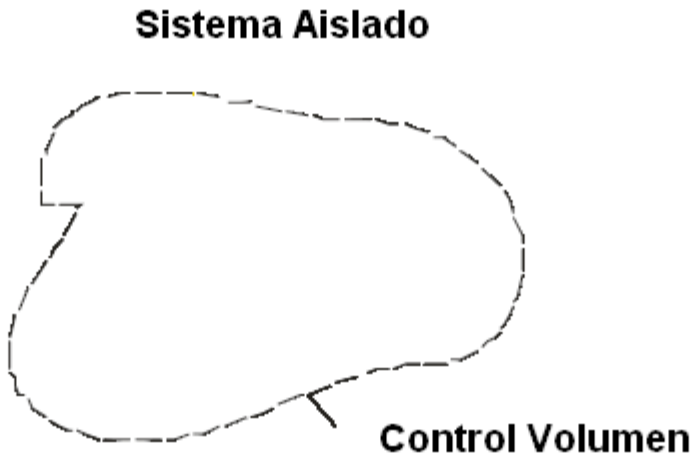
La primera ley de la termodinámica es una mirada global del balance de energía extendida a todas las posibles formas de energía.

Lectura Opcional

Sistemas Considerados







Lectura Opcional

Primera Ley de Termodinámica

Un Sistema Aislado $E_{in} - E_{out} = \Delta E$

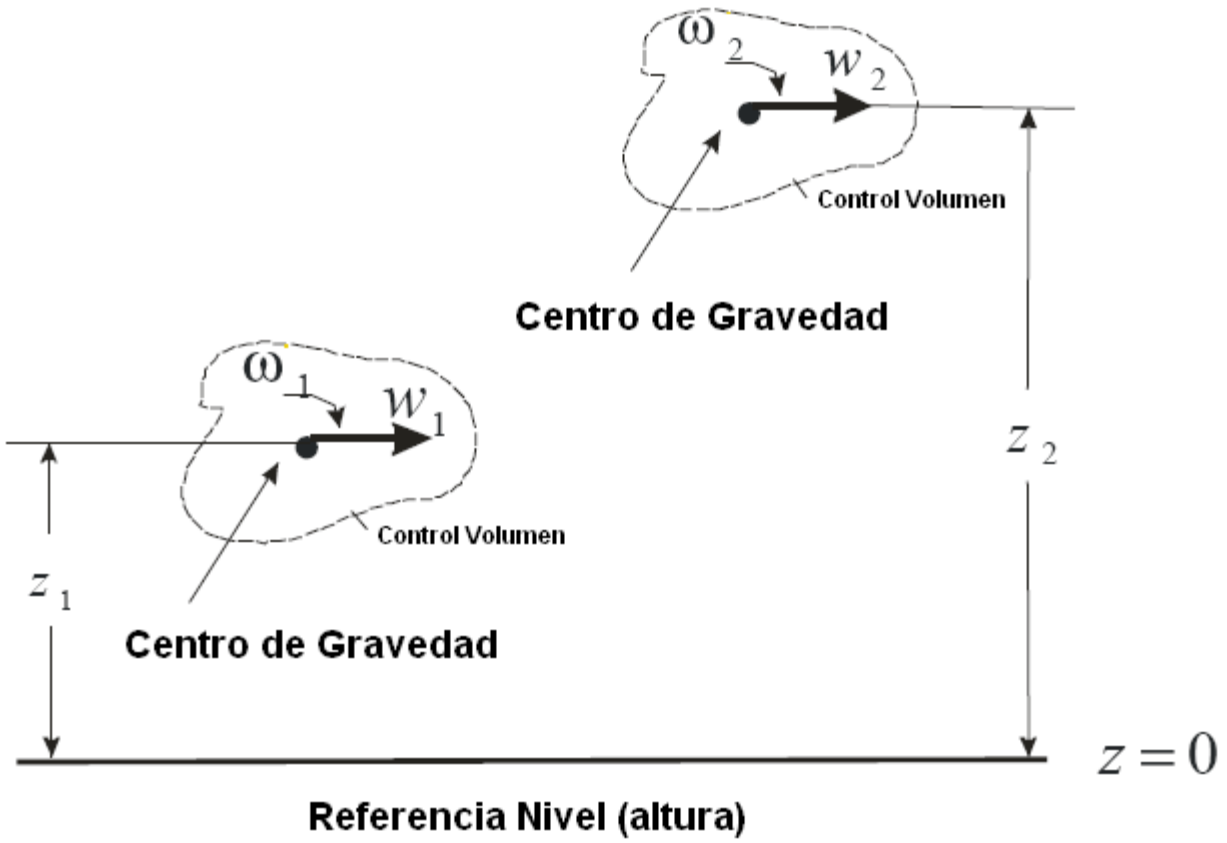
$E_{in} = 0$

$E_{out} = 0$

$\Delta E = 0$

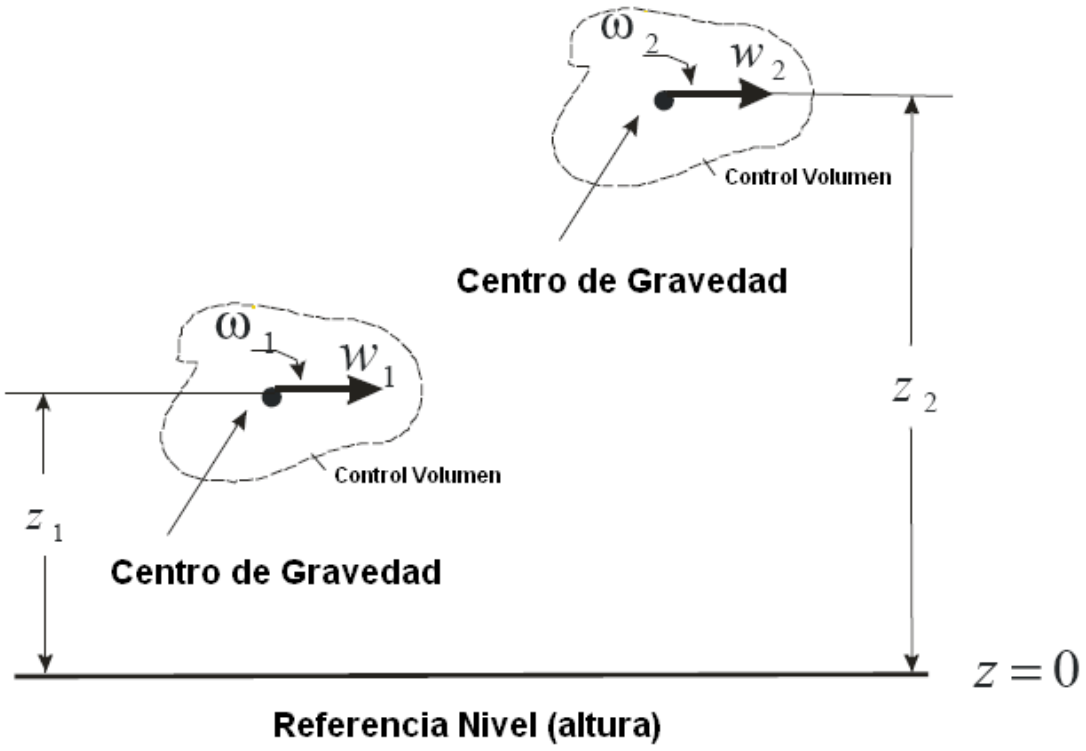
Lectura Opcional

Energía Sistema



Lectura Opcional

Energía Sistema



$$E = U + m \cdot \frac{w^2}{2} + I \cdot \frac{\omega^2}{2} + m \cdot g \cdot z$$

$$\Delta E = U_2 - U_1 + \frac{m}{2} \cdot (w_2^2 - w_1^2) + \frac{I}{2} \cdot (\omega_2^2 - \omega_1^2) + m \cdot g \cdot (z_2 - z_1)$$

Lectura Opcional

Energía Interna

$$U = m \cdot u(T, p) = m \cdot u(T, v) = m \cdot u(p, v)$$

$$dU = d(m \cdot u) = m \cdot du + u \cdot dm$$

Energía Interna Específica

$$du = \left.\frac{\partial u}{\partial T}\right|_v \cdot dT + \left.\frac{\partial u}{\partial v}\right|_T \cdot dv$$

$$du = c_v \cdot dT + \left(T \cdot \left.\frac{\partial p}{\partial T}\right|_v - p\right) \cdot dv$$

Lectura Opcional

No es posible calcular un valor absoluto de la energía interna.

$$u(T,v) = u_0 + \int_{T_0,v_0}^{T,v} du$$

Se puede calcular u_0 **en referencia a un** h_0

$$u_0 = h_0 - p_0 \cdot v_0$$

Ecuación de Estado

$$v_0 = v(T_0, p_0)$$

Lectura Opcional

Energía interna específica de un Gas Ideal.

$$v = \frac{R \cdot T}{M \cdot p}$$

$$u_0 = 0 - p_0 \cdot \frac{R \cdot T_0}{M \cdot p_0} = -\frac{R}{M} \cdot T_0$$

$$\left.\frac{\partial p}{\partial T}\right|_v = \frac{R}{v \cdot M}$$

$$u(T) = u_0 + \int_{T_0}^{T} c_v(T) \cdot dT = -\frac{R}{M} \cdot T_0 + \int_{T_0}^{T} c_v(T) \cdot dT$$

Lectura Opcional

El cambio de la Energía Interna ΔE

$$E_{in} = E_{out} + \Delta E$$

$$\Delta E = U_2 - U_1 + \frac{m}{2} \cdot (w_2^2 - w_1^2) + \frac{I}{2} \cdot (\omega_2^2 - \omega_1^2) + m \cdot g \cdot (z_2 - z_1)$$

$$u(T) = u_0 + \int_{T_0}^{T} c_v(T) \cdot dT = \overset{\Delta E}{-\frac{R}{M} \cdot T_0 + \int_{T_0}^{T} c_v(T) \cdot dT}$$

ΔE **Puede ser calculado**

Como puede calcularse $E_{in} - E_{out}$ **Lectura Opcional**

Energía Interna y Pasando en el Sistema

$$E_{in} = E_{out} + \Delta E$$

$$E_{in} - E_{out} \quad ?$$

a. Energía de la corriente de fluido
b. Trabajo mecánico
c. Calor
d. Energía eléctrica

Lectura Opcional

Energía de una corriente de Fluido

La entalpía es la energía de la corriente de fluido.

$$H = m \cdot h \qquad\qquad i = u + p \cdot v$$

Es la entalpía una variable de estado. Si es así, cuál?

h = h(T , p)

$$dh = \left.\frac{\partial h}{\partial T}\right|_p \cdot dT + \left.\frac{\partial h}{\partial p}\right|_T \cdot dp$$

Lectura Opcional

Energía de una corriente de Fluido

$$dh = \left.\frac{\partial h}{\partial T}\right|_p \cdot dT + \left.\frac{\partial h}{\partial p}\right|_T \cdot dp$$

$$dh = \left.\frac{\partial h}{\partial T}\right|_p \cdot dT + \left(v - T \cdot \left.\frac{\partial v}{\partial T}\right|_p \right) \cdot dp$$

0

Gas Ideal

$$h(T) = h_0 + \int_{T_0}^{T} c_p(T) \cdot dT$$

ho = 0, para T = 298.15 ºK

P = 1 atmósfera

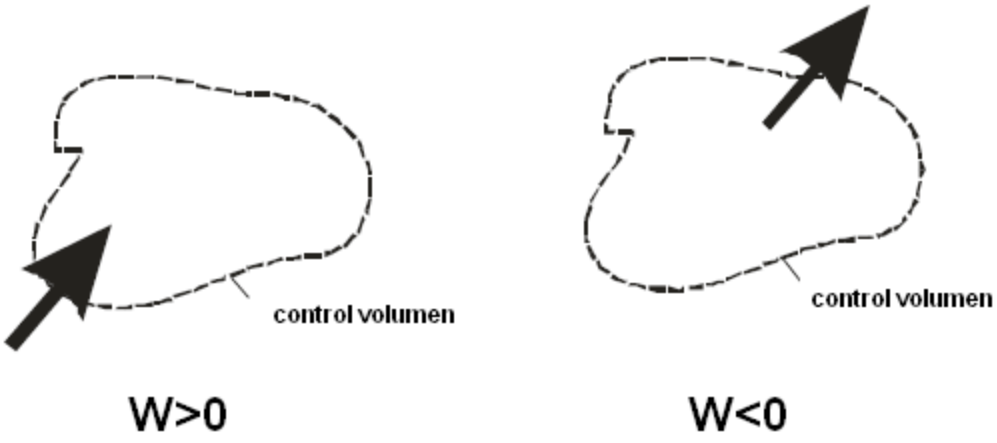
Lectura Opcional

Trabajo Mecánico

Trabajo de produce cuando un objeto es movido con una fuerza oponiéndose

Trabajo no es energía, es un medio para transmitir energía

Convención:

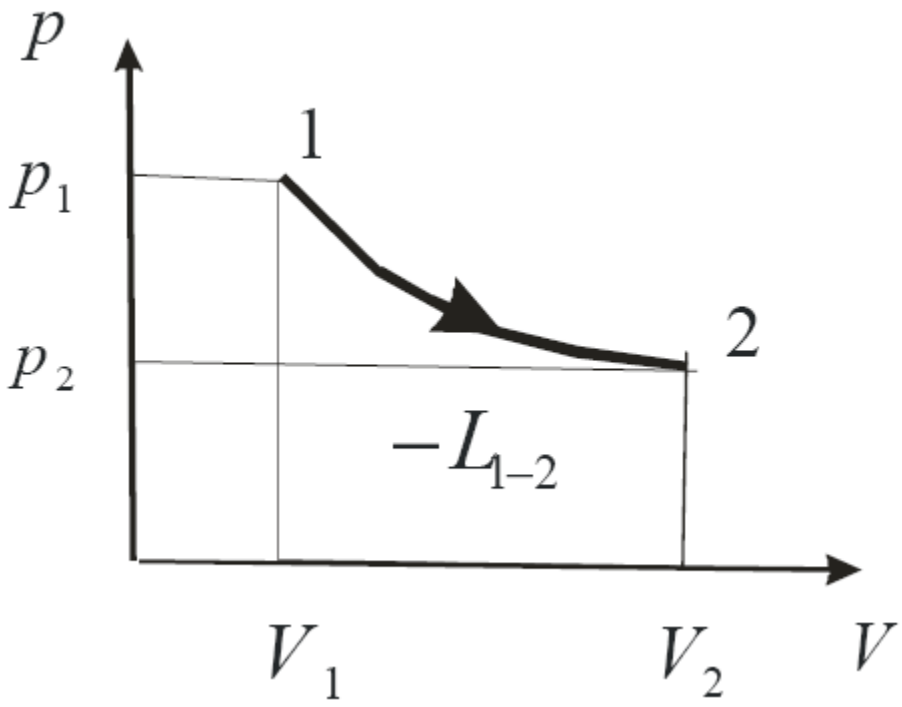


Lectura Opcional

Trabajo Mecánico

$$d\boldsymbol{w} = -p \cdot dV$$

$$\boldsymbol{w} = -\int_1^2 p \cdot dV$$



El trabajo es una variable de estado?

Lectura Opcional

Calor

El calor es una energía en transito, debido a diferencias de temperatura.

El calor es una energía en transito, debido a diferencias de temperatura.

Convención:

Cuando el calor se aplica al sistema Q >0

Cuando el calor es removido del sistema Q < 0

$$Q_t = Q + Q_f$$

Calor Total absorbido por el Sistema

Calor Aplicado desde el medio externo

Calor Generado dentro del Sistema debido a fricción

Lectura Opcional

Capacidad Calorífica

$$c = \frac{dq_t}{dT}$$

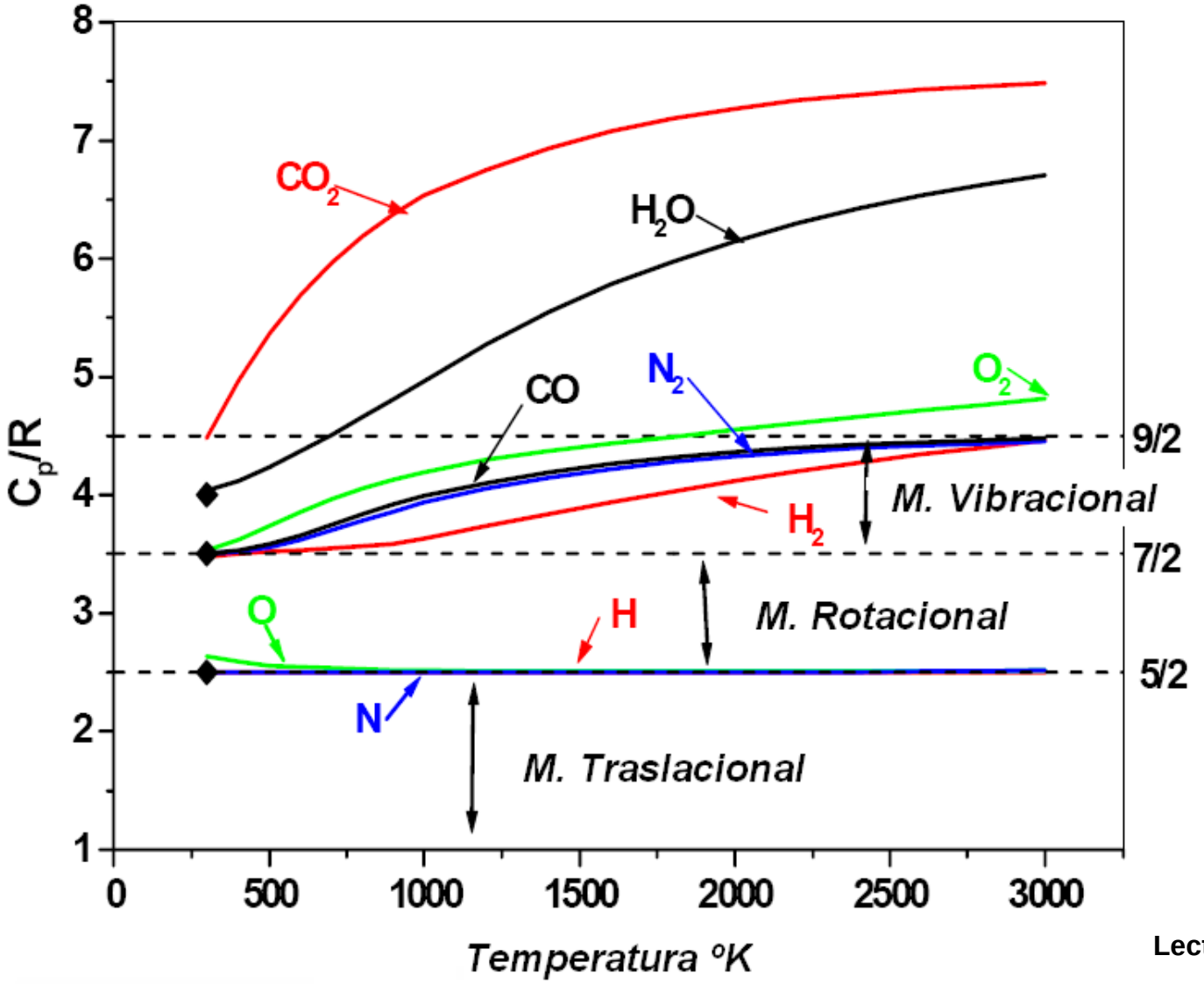
$$C_p - C_v = R$$

$$C_v = \frac{\text{number of degrees of freedom}}{2} \cdot R$$

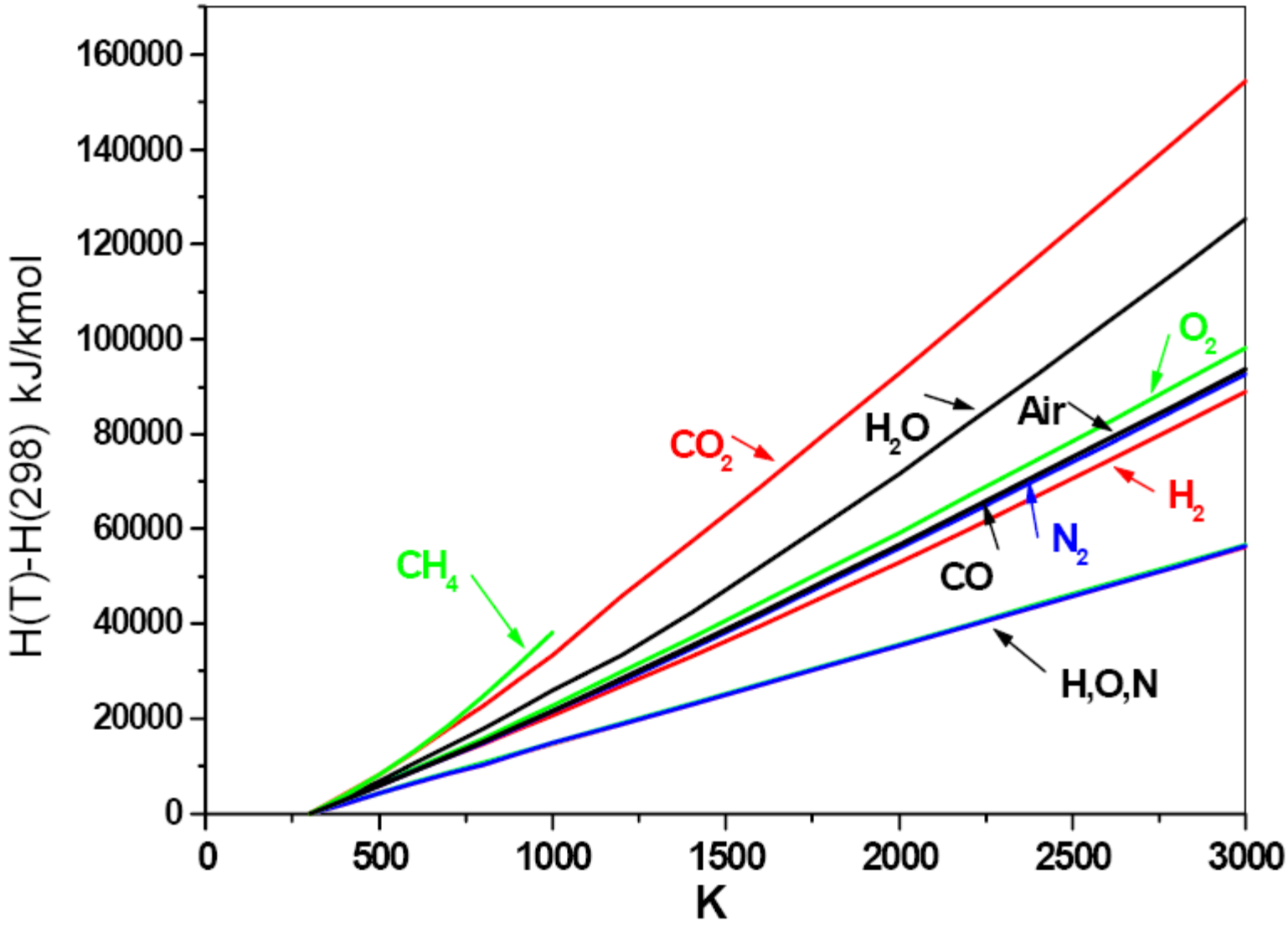
$$\frac{C_p}{R} = C_{p,1} + C_{p,2} \cdot T + C_{p,3} \cdot T^2 + C_{p,4} \cdot T^3 + C_{p,5} \cdot T^4$$

Lectura Opcional

Capacidad Calorífica



Lectura Opcional



Lectura Opcional

Capacidad Calorífica Media

$$C\Big|_0^T = \frac{1}{T} \cdot \int_0^T C(T') \cdot dT'$$

$$C\Big|_{T_1}^{T_2} = \frac{1}{T_2 - T_1} \cdot \int_{T_1}^{T_2} C(T') \cdot dT'$$

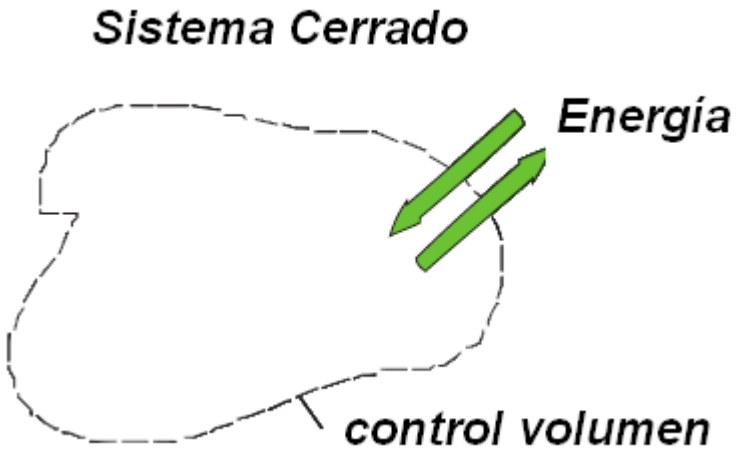
Lectura Opcional

Balance de Energía de Maquinas

$$dE_{in} - dE_{out} = dE$$

$$dQ_t + dL = dU$$

$$dQ_t - p \cdot dV = dU$$



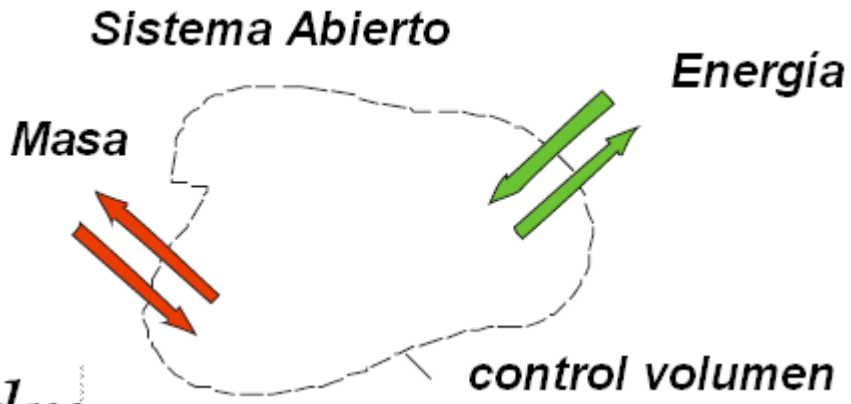
$$m \cdot dq_t - p \cdot d(m \cdot v) = d(m \cdot u)$$

$$dq_t - p \cdot dv = du$$

Lectura Opcional

Balance de Energía de Maquinas

$$dE_{in} - dE_{out} = dE$$



$$dU = dQ_t - p \cdot dV + h \cdot dm$$

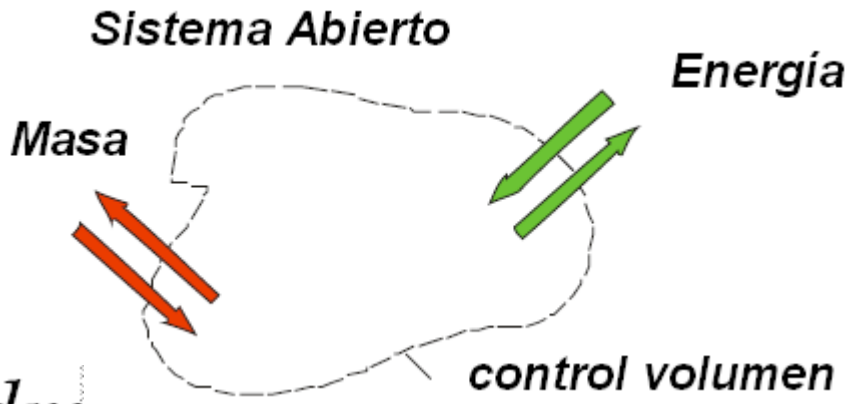
$$d(m \cdot u) = m \cdot dq_t - p \cdot d(m \cdot v) + (u + p \cdot v) \cdot dm$$

$$du = dq_t - p \cdot dv$$

Lectura Opcional

Balance de Energía de Maquinas

$$dE_{in} - dE_{out} = dE$$



$$dU = dQ_t - p \cdot dV + h \cdot dm$$

$$d(m \cdot u) = m \cdot dq_t - p \cdot d(m \cdot v) + (u + p \cdot v) \cdot dm$$

$$du = dq_t - p \cdot dv$$

Lectura Opcional

Para cualquier Sistema

$$du = dq_t - p \cdot dv$$

$$dh = dq_t + v \cdot dp$$

$$dh = dq_t$$ **Para p = cte**

$$du = dq_c$$ **Para v = cte**

Lectura Opcional

Entalpía de Reacción

Los cambios de entalpía en una reacción química es calculado como:

$$\Delta_R H\Big|_{\text{temperatura}}^{\text{prersión}} = \sum_i \upsilon_i \overline{H}_i$$

Para calcular Hi una referencia al estado cero es necesaria.

Los elementos puros son más estables y a T = 298.15ºK y P = 1 atm valen cero.

Ejemplo de elementos puros: O_2, N_2, H_2, C

Estándar Entalpía de Formación

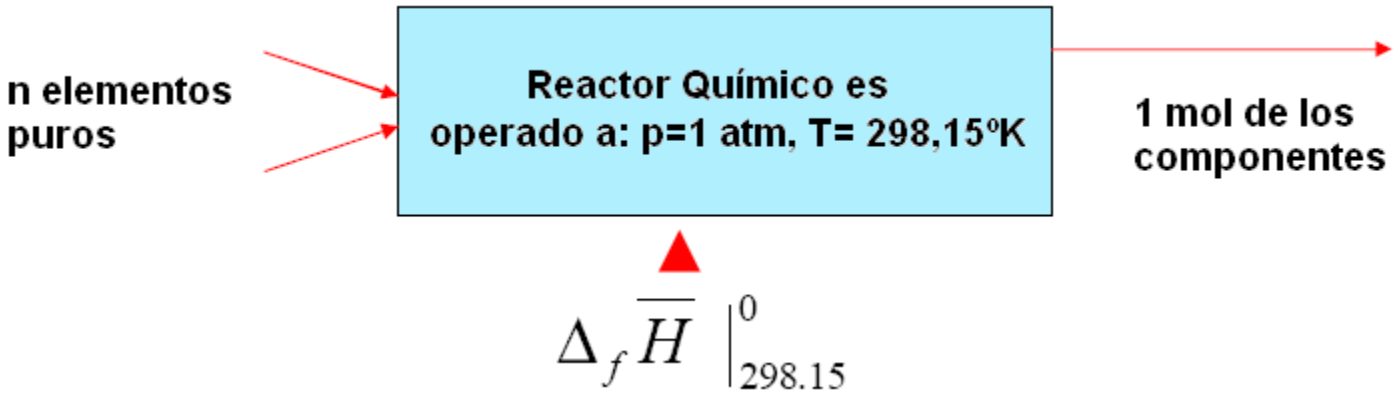
El concepto de estándar de entalpía de formación es para “medir” la entalpía de cualquier compuesto químico.

$$\Delta_R H\Big|_{\text{temperatura}}^{\text{prersión}} = \sum_i \upsilon_i \overline{H}_i$$

$$\upsilon_1 A_1 + \upsilon_2 A_2 + \ldots\ldots\ldots + \upsilon_n A_n = 0$$

or

$$\sum_{n=1}^{n} \upsilon_i A_i = 0$$



Dependencia Q con la Temperatura

Forma Integral

$$\mathbf{Q}\Big|_T^0 = \mathbf{Q}\Big|_{298.15}^0 - \sum_{i=1}^{i=4} \upsilon_i \int_{298.15}^{T} C_{p,i}\,dT$$

$$\mathbf{Q}\Big|_T^0 = \mathbf{Q}\Big|_{298.15}^0 + \sum_{i=1}^{\text{reactants}} |\upsilon_i| \int_{298.15}^{T} C_{p,i}\,dT - \sum_{k=1}^{\text{products}} |\upsilon_i| \int_{298.15}^{T} C_{p,i}\,dT$$

Dependencia Q con la Temperatura

Forma Diferencial

$$\frac{d(\ \mathbf{Q}\ )}{dT} = -\sum_{i=1}^{i=4} \upsilon_i C_{p,i}$$

$$\frac{d(\ \mathbf{Q}\ )}{dT} = \sum_{i=1}^{\text{reactants}} \left|\upsilon_i\right| C_{p,i} - \sum_{k=1}^{\text{products}} \left|\upsilon_i\right| C_{p,k}$$

Estándar de Entalpía de Formación de algunos componentes. **Tablas JANAF**

Compound	**Aggregation state**	$\Delta_f \overline{H}^0_{298.15}$ **(kJ/mol)**	S^0_{298} **(J/mol K)**
Oxygen	$O_2(g)$	0	205.04
Hydrogen	$H_2(g)$	0	130.57
Nitrogen	$N_2(g)$	0	191.50
Carbon	C(s,graphite)	0	5.74
Oxygen atoms	O(g)	249.2	160.95
Hydrogen atoms	H(g)	218.0	114.6
Water vapour	H_2O (g)	-241.81	188.72
Water	H_2O (l)	-285.83	69.95
Hydroxyl radicals	OH(g)	39.3	183.6
Nitrogen atoms	N(g)	472.68	153.19
Diamond	C(s,diamond)	1.9	2.38
Carbon	C(g)	716.6	157.99
Carbon monoxide	CO(g)	-110.53	197.6
Carbon dioxide	$CO_2(g)$	-393.5	213.7
Methane	$CH_4(g)$	-74.85	186.10
Ethane	$C_2H_6(g)$	-84.68	229.49
Propane	$C_3H_8(g)$	-103.85	269.91
Ethylen	$C_2H_4(g)$	52.10	219.45
Benzene	$C_6H_6(g)$	82.93	269.20
Ethanol	$C_2H_5OH(g)$	-235.31	282.00

Determinación Indirecta de la Entalpía de formación. Ley de Hess.

Dado que la Entalpía es una función de estado, esto puede ser determinado usando la entalpía de reacciones de oxidación que son relativamente fáciles de medir.

Determine la Entalpía de formación del CH4 puro conociendo la entalpía de otras reacciones de oxidación.

$$\mathbf{C + 2\ H_2 = CH_4} \qquad \Delta_{CH4}\overline{H}^{0}_{298.15} = \quad ?$$

(1)	**$C(s, graphite) + O_2 = CO_2$**	$\Delta_{R1}\overline{H}^{0}_{298} = -393.5$ kJ/mol
(2)	**$H_2(g) + 0.5\ O_2 = H_2O$**	$\Delta_{R2}\overline{H}^{0}_{298} = -241.81$ kJ/mol
(3)	**$CO_2 + 2\ H_2O = CH_4 + 2\ O_2$**	$\Delta_{R3}\overline{H}^{0}_{298} = 802.25$ kJ/mol

---

(1)+2(2)+(3) $\quad \mathbf{C+O_2+2H_2+O_2+CO_2+2H_2O = CO_2+2H_2O+CH_4+2O_2}$

$$\mathbf{C + 2\ H_2 = CH_4}$$

$$\Delta_{CH4}\overline{H}^{0}_{298.15} = \Delta_{R1}\overline{H}^{0}_{298} + 2\times\Delta_{R2}\overline{H}^{0}_{298} + \Delta_{R3}\overline{H}^{0}_{298} =$$

$$= -393.5 + 2\times(-241.81) + 802.25 = -74.87 \quad \text{kJ/mol of } CH_4$$

Calcular el valor de la entalpía de formación del metano por medio de las entalpías de formación.

$$CH_4 + 2\ O_2 \rightarrow CO_2 + 2\ H_2O\ (g)$$

$$-CH_4 - 2\ O_2 + CO_2 + 2\ H_2O\ (g) = 0$$

$$\Delta_R H = \sum_i \upsilon_i \overline{H}_i = (-1)\times \overline{H}_{CH4} + (-2)\times \overline{H}_{O2} +$$

$$+ (1)\times \overline{H}_{CO2} + (2)\times \overline{H}_{H2O} =$$

$$(-1)\times(-74.85) + (-2)\times(0) + (-393.5) +$$

$$2\times(-241.81) = -802.27 kJ$$

$$\mathbf{Q} = \left|-802.27\right| = 802.27 \quad \mathrm{kJ/mol\,CH_4}$$

Balance de Energía de un Horno

$$\dot{H}_{in} = \dot{H}_{out} + \dot{Q}$$

Si los flujos de masa son conocidos, o podemos conocerlos.

Una aproximación desde Ingeniería

$$\sum_{i}^{in_species} \dot{n}_i \left(\overline{H}_{f,i} + \int_{298.15}^{T_{in}} C_{p,i}\, dT \right) =$$

$$\sum_{k}^{out_species} \dot{n}_k \left(\overline{H}_{f,k} + \int_{298.15}^{T_{in}} C_{p,k}\, dT \right) + \dot{Q}$$

Balance de Energía de un Horno

Sabiendo que se retirarán 2 MW de energía por medio de calentar agua entrando a una temperatura Tin = 298,15ºK. Calcular la Tout.

Balance de Masa en Kgmol/hr o en Kg/hr

$$CH_4 + 2\,O_2 = CO_2 + 2\,H_2O$$

Asumiendo Gases Ideales:

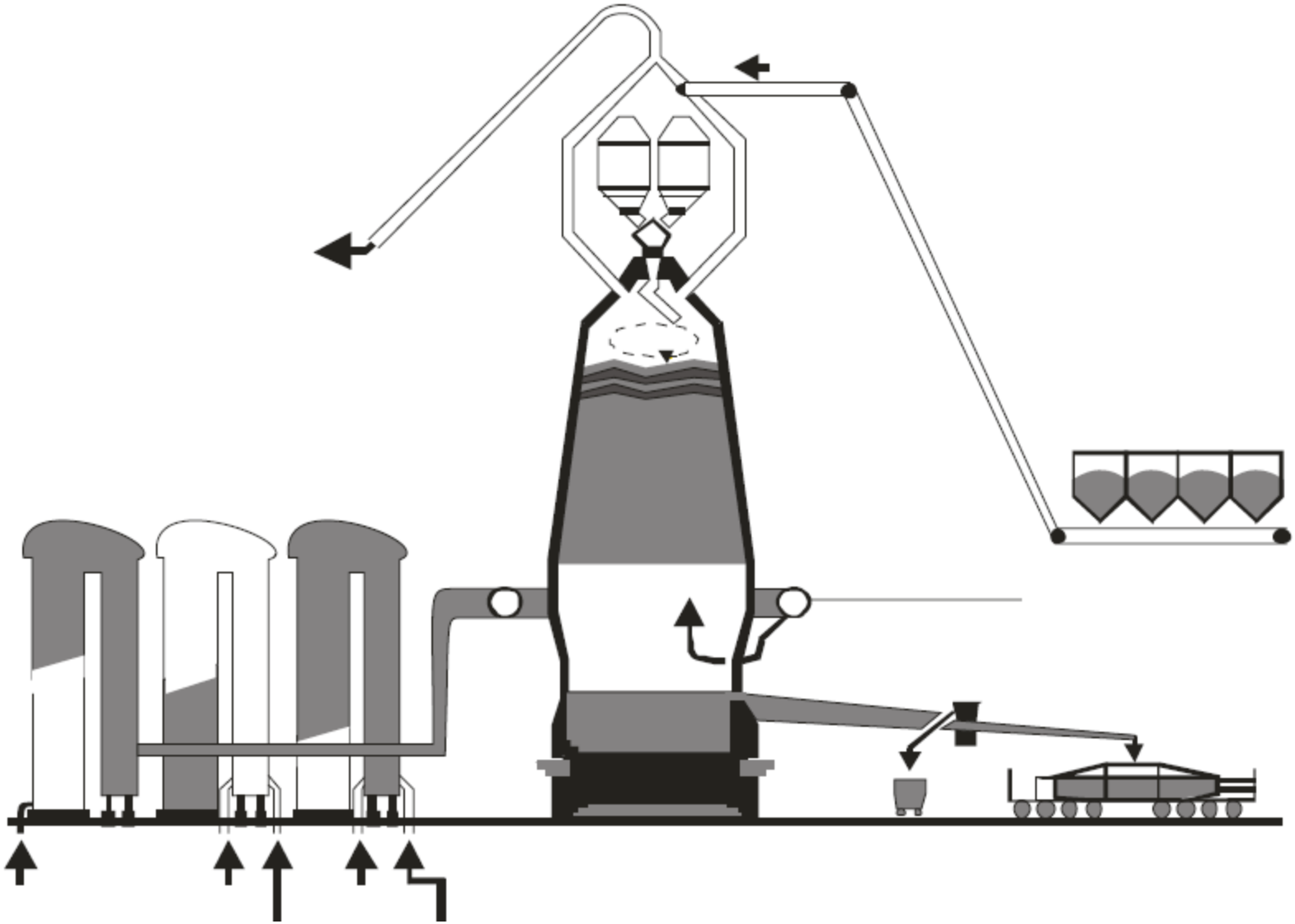
Para O_2 and N_2 $\quad C_p$=29.1 kJ/kmol K

Para CH_4, CO_2, H_2O $\quad C_p$=33.3 kJ/kmol K

Balance de Energía de un Horno

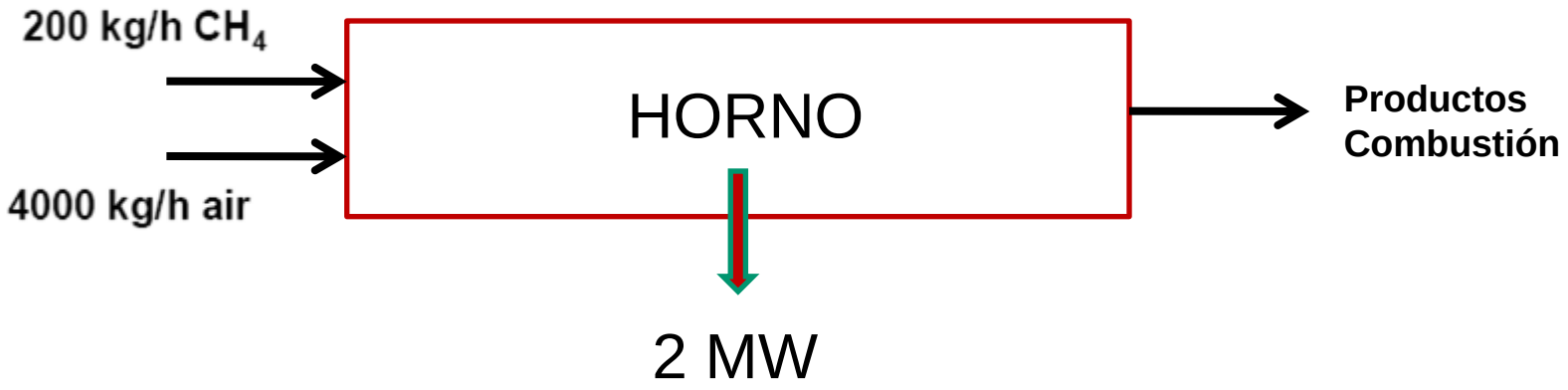
Balance de Energía
Calcular Temperatura de Salida
Eficiencia del Horno

HORNO

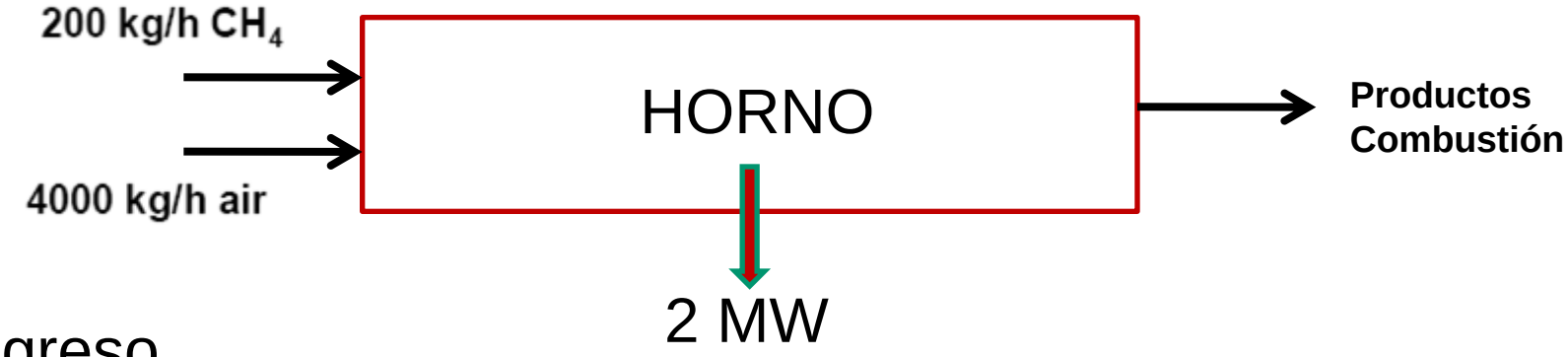


Balance de Energía de un Horno

Sabiendo que se retirarán 2 MW de energía por medio de calentar agua entrando a una temperatura Tin = 298,15ºK. Calcular la Tout.



Balance de Energía de un Horno



Ingreso

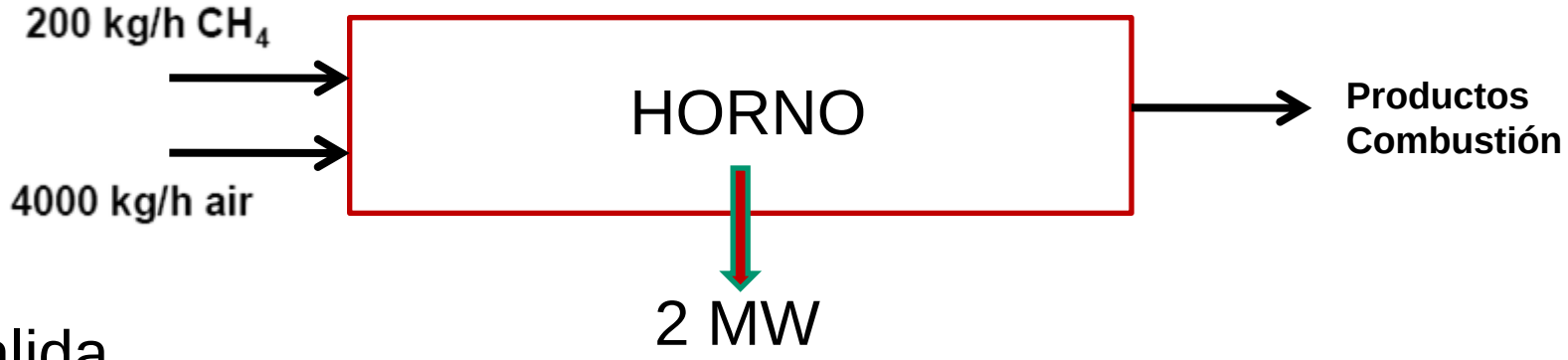
CH_4 $12.5\times(-74.85\times10^3+\int_{298.15}^{298.15}33.3dT)/3600=-259.9$ kJ/s

N_2 $109.57\times(\int_{298.15}^{298.15}29.1dT)/3600=0$ kJ/s

O_2 $29.13\times(\int_{298.15}^{298.15}29.1dT)/3600=0$ kJ/s

TOTAL **-259.9 kJ/s**

Balance de Energía de un Horno



Salida

CO_2

$12.5(-393.5x10^3+33.3x(T_{out}-298.15))/3600 = -1,366.32 + 0.11563\ (T_{out}-298.15)$

H_2O

$25(-241.81x10^3+33.3x(T_{out}-298.15))/3600 = -\ 1,679.24 + 0.23125(T_{out}-298.15)$

N_2

$109.57(\quad 29.1x(T_{out}-298.15))/3600 \quad = \quad 0.8856\ (T_{out}-298.15)$

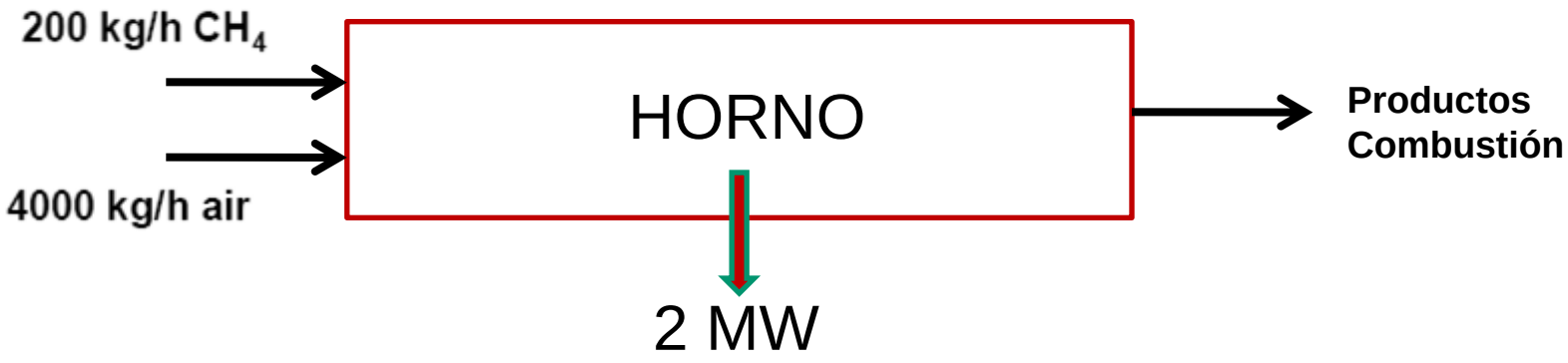
O_2

$4.13(\quad 29.1x(T_{out}-298.15))/3600 \quad = \quad 0.0334\ (T_{out}-298.15)$

Calor Extraído (Q) $= 2,000.00$

TOTAL $= -1,045.56 + 1.2659\ (T_{out}-298.15)$

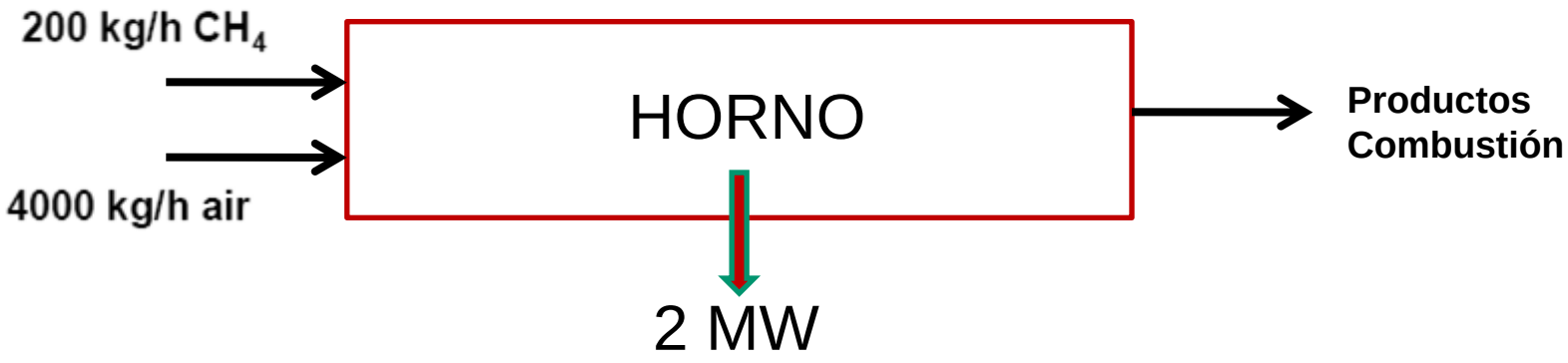
Balance de Energía de un Horno



$$-259.9 = -1{,}045.56 + 1.2659\ (T_{out} - 298.15)$$

$$T_{out} = 918.81\ K$$

Balance de Energía de un Horno



Entalpía Química:

-(-1,366.32-1,679.24-(259.9)) = 2,785.66 kJ/s

H_{out} = 2.786 – 2 = 0.786 MW

$$\eta = \frac{2}{2.786} = 0.72$$

Balance de Masa del Horno

Balance de Masa en Kgmol/hr o en Kg/hr

$$CH_4 + 2\ O_2 = CO_2 + 2\ H_2O$$

Otra Mirada:

		Entrada				%	Salida			
						100,00%				
PM		F1	X1j	Kg/hr	Kgmol/hr		Kgmol/hr	Kg/hr	F2	X2j
16	CH4	12,5	0,08	200	12,5		0	0	0	0,00
32	O2	25	0,17	800	25		0	0	0	0,00
32	O2	4,13	0,03	132,16	4,13		4,13	132,16	4,13	0,03
28	N2	109,57	0,72	3068	109,57		109,57	3068	109,57	0,72
44	CO2	0	0,00				12,5	550	12,5	0,08
18	H20	0	0,00				25	450	25	0,17

Balance de Masa del Horno

Otra Mirada:

		Entrada				%	Salida		
						100,00%			
PM		F1	X1j	Kg/hr	Kgmol/hr	Kgmol/hr	Kg/hr	F2	X2j
16	CH4	12,5	0,08	200	12,5	0	0	0	0,00
32	O2	25	0,17	800	25	0	0	0	0,00
32	O2	4,13	0,03	132,16	4,13	4,13	132,16	4,13	0,03
28	N2	109,57	0,72	3068	109,57	109,57	3068	109,57	0,72
44	CO2	0	0,00			12,5	550	12,5	0,08
18	H20	0	0,00			25	450	25	0,17

Balance de Masa del Horno

$$CH_4 + 2\ O_2 = CO_2 + 2\ H_2O$$

Otra Mirada:

C: $F_1X_{11} = F_2X_{21}$ $0,08 = 0,08$

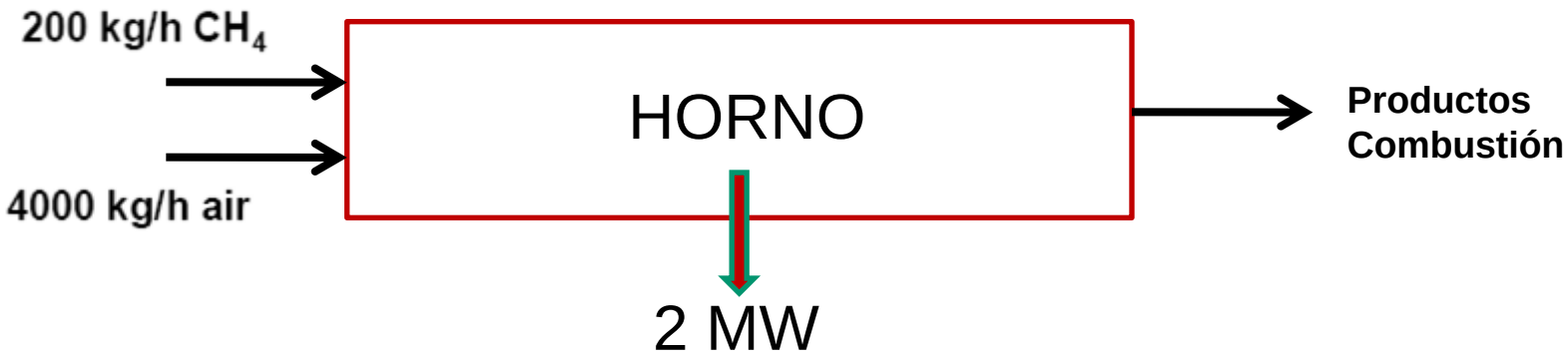
H: $2F_1X_{12} = F_2X_{22}$ $2*0,08 = 0,17$

0: $(3/2)F_1X_{13} = F_2X_{23}$ $(3/2)0,2 = 0,25$

		Entrada	Salida
1	CH4	0,08	0,00
2	O2	0,17	0,00
2	O2	0,03	0,03
3	N2	0,72	0,72
4	CO2	0,00	0,08
5	H20	0,00	0,17

C		H		O	
E	S	E	S	E	S
0,08		0,17			
				0,25	
	0,08				0,08
			0,17		0,17

Balance de Energía de un Horno



Reemplazar

Balance de Energía de un Horno

De acuerdo al profesor Hsin Chu
Los Cp(T) en Kg/KJ son:

Table 4.2 Polynomial coefficients for specific heats of gases

Carbon Dioxide	Polynomial Order 4
$a[0]$	0.818205
$a[1]$	$9.9739\ e^{-4}$
$a[2]$	$-7.61047\ e^{-7}$
$a[3]$	$2.79744\ e^{-10}$
$a[4]$	$-3.8726\ e^{-14}$

Carbon Monoxide	Polynomial Order 4
$a[0]$	1.030
$a[1]$	$0.1274\ e^{-3}$
$a[2]$	$0.2414\ e^{-6}$
$a[3]$	$-0.2174\ e^{-9}$
$a[4]$	$0.4956\ e^{-13}$

Water (vapour)	Polynomial Order 4
$a[0]$	1.86024
$a[1]$	$3.23229\ e^{-4}$
$a[2]$	$5.84858\ e^{-7}$
$a[3]$	$-3.5846\ e^{-10}$
$a[4]$	$5.93307\ e^{-14}$

Oxygen	Polynomial Order 5
$a[0]$	0.9057
$a[1]$	$0.2941\ e^{-3}$
$a[2]$	$0.9650\ e^{-7}$
$a[3]$	$-0.3364\ e^{-9}$
$a[4]$	$0.2021\ e^{-12}$
$a[5]$	$-0.3811\ e^{-16}$

Nitrogen	Polynomial Order 5
$a[0]$	1.30709
$a[1]$	$8.11879\ e^{-6}$
$a[2]$	$4.859\ e^{-7}$
$a[3]$	$-4.61612\ e^{-10}$
$a[4]$	$1.6814\ e^{-13}$
$a[5]$	$-2.18231\ e^{-17}$

Hydrogen	Polynomial Order 5
$a[0]$	14.350
$a[1]$	$0.9947\ e^{-3}$
$a[2]$	$-0.2480\ e^{-5}$
$a[3]$	$0.4978\ e^{-8}$
$a[4]$	$-0.2856\ e^{-11}$
$a[5]$	$0.5275\ e^{-15}$

Balance de Energía de un Horno

Esto es (CO_2):

$Cp(T) = 8{,}1821E\text{-}01 + 9{,}9739E\text{-}04*T - 7{,}6105E\text{-}07*T^2 + 2{,}7974E\text{-}10*T^3 - 3{,}8726E\text{-}14*T^4$ (KJ/Kg)

Multiplicando por 44 PM del CO_2.

$Cp(T) = 3{,}6001E+01 + 4{,}3885E\text{-}02*T - 3{,}3486E\text{-}05*T^2 + 1{,}2309E\text{-}08*T^3 - 1{,}7039E\text{-}12*T^4$ (KJ/Kmol)

Balance de Energía de un Horno

Esto es (H_2O):

Cp(T) = 1,0860E+00 + 3,2330E-04*T + 5,4886E-07*T^2
-3,4856E-10*T^3 + 5,9331E-14 *T^4 (KJ/Kg)

Multiplicando por 18 PM del H_2O.

Cp(T) = 1,9549E+01 + 1,4225E-02*T + 2,4150E-05*T^2
-1,5337E-08*T^3 + 2,6106E-12 *T^4 (KJ/Kmol)

Balance de Energía de un Horno

Esto es (N_2):

Cp(T) = 1,0307E+00 + 8,1188E-06*T + 4,8590E-07*T^2
- 4,6161E-10*T^3 + 1,6814E-13*T^4
-2,1823E-17*T^5 (KJ/Kg)

Multiplicando por 28 PM del N_2.

Cp(T) = 2,8860E+01 + 2,2733E-04*T + 1,3605E-05*T^2
- 1,2925E-08*T^3 + 4,7079E-12*T^4
-6,1105E-16 T^5(KJ/Kmol)

Balance de Energía de un Horno

Esto es (0_2):

Cp(T) = 9,0570E-01 + 2,9410E-04*T + 9,6500E-08 *T^2
- 3,3640E-10*T^3 + 2,0210E-13*T^4
-3,8110E-16*T^5 (KJ/Kg)

Multiplicando por 32 PM del $O_{2.}$

Cp(T) = 2,8982E+01 + 9,4112E-03*T + 3,0880E-06*T^2
-1,0765E-08*T^3 + 6,4672E-12*T^4
-1,2195E-14*T^5(KJ/Kmol)

Balance de Energía de un Horno

Esto es (CH_4):

$$Cp(T) = 0{,}03431 + 5{,}469E\text{-}05*T + 0{,}3661E\text{-}08*T^2 - 11{,}0E\text{-}12*T^3 \ (KJ/Kmol)$$

Balance de Energía de un Horno Cp(T)

Ingreso:

CH_4
$$12.5\times(-74.85\times10^{3}+\int_{298.15}^{298.15} Cp(T)\,dT)/3600=-259.9 \quad \text{kJ/s}$$

N_2
$$109.57\times(\int_{298.15}^{298.15} Cp(T)\,dT)/3600=0 \quad \text{kJ/s}$$

O_2
$$29.13\times(\int_{298.15}^{298.15} Cp(T)\,dT)/3600=0 \quad \text{kJ/s}$$

TOTAL **-259.9 kJ/s**

Balance de Energía de un Horno Cp(T)

Salida

CO_2

$$12.5(-393.5\times10^3+33.3\times(T_{out}-298.15))/3600 = -1{,}366.32 + 0.11563\,(T_{out}-298.15)$$

H_2O

$$25(-241.81\times10^3+33.3\times(T_{out}-298.15))/3600 = -\,1{,}679.24 + 0.23125(T_{out}-298.15)$$

N_2

$$109.57(\quad 29.1\times(T_{out}-298.15))/3600 \quad = \quad 0.8856\,(T_{out}-298.15)$$

O_2

$$4.13(\quad 29.1\times(T_{out}-298.15))/3600 \quad = \quad 0.0334\,(T_{out}-298.15)$$

Calor Extraído (Q) $= 2{,}000.00$

TOTAL $= -1{,}045.56 + 1.2659\,(T_{out}-298.15)$

Balance de Energía de un Horno Cp(T)

Salida

CO_2 12,5(-393,4*10E3+3,60E01(T-298,15)+4,39E-02(T^2-298,15^2)/2-3,35E-05(T^3-298,15^3)/3
1,23E-08*(T^4-298,15^4)/4-1,70E-12(T^5-298,15^5)/5))/3600

-1365,97+0,13*T-37,27+0,00015*T^2-2,27-3,88*10^-8*T^3+0,012+1,07*10^-11*T^4
-3,18*10^-5-1,18*10^-15*T^5+3,52*10^-8

-1365,85 + 0.13*T + 0,00015*T^2 -3,88*10^-8*T^3 + 1,07*10^-11*T^4 - 1,18*10^-15*T5

H_2O -1720,27 + 0,13*T + 9,86*10^-5*T^2 + 5,58*10^-8*T^3 - 2,83*10^-11*T^4 - 3,62*10^-16*T^5

N_2 -262,03+0,87*T+6,91*10^-6*T^2+1,34*10^-7*T^3-9,82*10^-11*T^4+2,87*10^-14*T^5-3,10*10^-18*T^6

O_2 -10,08+0,033*T+1,08*10^-5*T^2+1,18*10^-9*T^3-3,1*10^-12*T^4-1,49*10^-15*T^5-2,33*10^-18*T^6

Balance de Energía de un Horno Cp(T)

Agrupando Términos

1656,61 = 1,17*T + 2,69*10^-4*T^2 + 1,56*10^-7*T^3 - 1,19*10^-10*T^4 + 3,26*10^-14*T^5 - 5,43*10^-18*T^6

Se escoge T con Cp constante, es decir T = 918,81 ºK

a) Dif = 1656,61 – Polinomio (T)
b) Si (Dif < 0)
   T = T – algo
   caso contrario
   T = T + algo
   condición de parada Dif < error permitido

T = 1083,2 º K