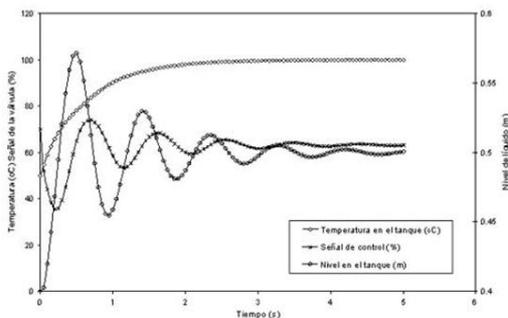
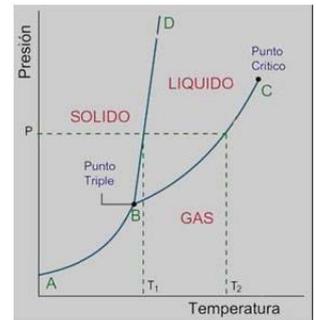
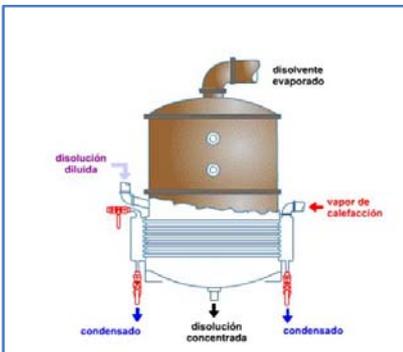
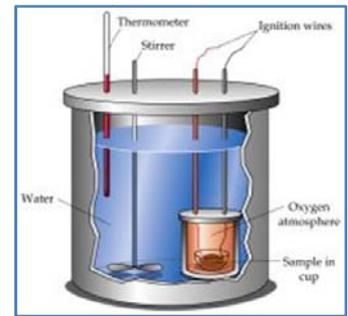
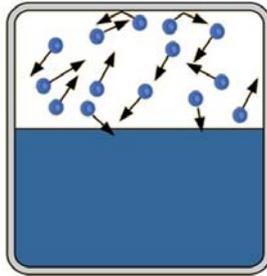


UTN

UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA NACIONAL
FACULTAD REGIONAL ROSARIO

CÁTEDRA DE “Balances de Materia y Energía”



MMXXV

Balances de Materia y Energía

Objetivos:

- ✓ Adquirir habilidad y conocimientos en la resolución de problemas de creciente complejidad y dificultad, así como la capacidad de adquisición de datos confiables y el uso de herramientas robustas y eficientes de cálculo.
- ✓ Lograr balancear las corrientes materiales y de energía que ingresan y egresan de una planta ya que de ello depende si un proceso determinado es de interés ingenieril o no (rentabilidad).
- ✓ Inferir el gasto y calcular el costo preciso de la energía consumida en un proceso, considerando la posibilidad de aplicar integración energética que, como se sabe, es un procedimiento mediante el cual corrientes calientes y frías se aprovechan para ahorrar servicios auxiliares de calefacción y refrigeración respectivamente.
- ✓ Discriminar las necesidades de acondicionamiento térmico de una corriente para llevarla a las condiciones deseadas de proceso (por ejemplo en tareas de secado o enfriadores evaporativos), como resultado del calor de mezclado que se pone en juego en ciertos y determinados sistemas, o producto de reacciones químicas exotérmica o endotérmicas, ya sea en sistemas ideales o reales.
- ✓ Aplicar balances de materia y energía en estado no estacionario en procesos dinámicos.
- ✓ Adquirir destrezas en el uso de métodos numéricos y simuladores que permitan llevar a cabo la resolución de sistemas que involucren modelos complejos de ecuaciones diferenciales (sistemas dinámicos) y sistemas de ecuaciones algebraicas implícitos en estado estacionario.

Contenidos:

Tema 1: Balances de materia y energía sin reacción Química. Conceptos de entalpía. Balances de energía para sistemas cerrados y abiertos. Diferentes formas de energía: calor y trabajo. Ciclos y procesos termodinámicos.

Aplicación: equipos de intercambio térmico. Conceptos de transferencia global de calor y temperatura media logarítmica en intercambiadores de calor.

Tema 2: Presión de vapor y psicrometría. Determinación de presiones de vapor de sustancias puras. Revisión de métodos gráficos (COX, Dühring) y mediante el uso de tablas. Ecuación de Antoine. Empleo de modernas correlaciones y métodos numéricos para el cálculo de propiedades fisicoquímicas y de equilibrio de fases. Conceptos asociados a los Balances de aire húmedo. Temperatura de bulbo seco y bulbo húmedo. Temperatura de rocío. Humedad absoluta y relativa. Grado de saturación. Saturación adiabática. Diferentes tipos de higrómetros. Diagramas psicrométricos. Balances de energía en sistemas de aire húmedo. Transformaciones: Calentamiento a humedad constante, Enfriamiento a humedad constante, Enfriamiento a entalpía constante. Determinación de la Humedad Relativa utilizando la temperatura de bulbo húmedo y la de bulbo seco.

Aplicación: Equipos de humidificación/ des-humidificación, torres de enfriamiento, secadores.

Tema 3: Balances de materia y energía con reacción Química. Termoquímica. Estados normales. Entalpías normales de reacción. Reacciones exotérmicas y endotérmicas. Entalpía normal de formación. Entalpía de enlace. Determinación de las entalpías normales de formación y de reacción. Calorimetría. La entalpía normal de combustión. La ley de Lavoisier y Laplace. La ley de Hess. Cálculo de calores de transformación: Por sumas y restas de ecuaciones termoquímicas, Mediante los calores de formación, Mediante los calores de combustión, Mediante la entalpía de enlace. Efecto de la temperatura en los calores de reacción. Ley de Kirchhoff. Entropía normal de reacción. Energía libre normal de reacción. Estimación de las propiedades termodinámicas: Calor de neutralización, Temperatura adiabática de llama. Balance de calor a partir de la expresión de diferencias de entalpías.

Aplicación: hornos y reactores que puedan ser resueltos en este nivel, por ejemplo a través de reacciones de conversión.

Tema 4: Aplicaciones a sistemas no ideales: Ecuaciones de estado de gases reales. Coeficiente de compresibilidad en gases reales utilizando ecuaciones de Estado. Comparación con diagramas basados en estados correspondientes. Mezcla de gases ideales y reales.

Equilibrio de fases para mezclas ideales y no ideales. Coeficientes de actividad. Mezclas azeotrópicas.

Aplicación: Obtención de curvas de equilibrio mediante software específico y general.

Tema 5: Balances de materia y energía en estado no estacionario. Mezcla de corrientes puras a diferentes temperaturas: evolución dinámica de la temperatura y nivel. Mezcla de soluciones a diferentes temperaturas y composición: evolución dinámica de la temperatura, composición y nivel. Conceptos de métodos numéricos para la resolución de sistemas dinámicos. Sistemas de ecuaciones diferenciales.

Aplicación: concepto de simulación dinámica de equipos y procesos sencillos que serán profundizado en "Modelado, simulación, optimización y seguridad de procesos" (4º Nivel) y Control Automático (5º Nivel).

Tema 6: Balances de materia y energía a través de diagramas entalpía/composición. Aplicación a Sistemas binarios: con dos componentes volátiles, con uno sólo volátil. Procesos asociados: Suma y separación de dos corrientes con y sin intercambio de calor. Ejemplos de utilización de los diagramas de entalpía – composición.

Aplicación: balances en evaporadores/concentradores y mezcladores. Cálculo de servicios auxiliares asociados a los mismos: refrigeración y calefacción.

Tema 7: Herramientas informáticas. Aplicaciones de softwares específicos y generales incluyendo simuladores de procesos. Introducción al concepto de modelado y simulación de equipos y procesos.

Aplicación: introducción básica y resolución de problemas sencillos mediante simulador, que será profundizado en “Modelado, simulación, optimización y seguridad de procesos”, con posibilidades de aplicación a otras cátedras.

Descripción de actividades teóricas y prácticas

Las actividades se dividirán en:

Clases teóricas: del contenido expuesto en los temas 1, 2, 3, 4, 5, 6 y 7

Clases prácticas: de los problemas fijos presentados en las guías correspondientes.

Resolución de Trabajos Prácticos en clases (aula o laboratorio de informática): Estos problemas varían y son independiente de aquellos que figuran en la guía.

Resolución de los parciales obligatorios: estos problemas, de mayor complejidad, también son diferentes y exigen al alumno un mayor manejo y comprensión de los temas requeridos en los Trabajos Prácticos. No obstante, dichos TP's resultan útiles como preparatorios para los Parciales de cuyo resultado dependerá aprobación directa o por examen final de la materia.

Listado de ejercitación en Clases Prácticas:

Tema 1: Problemas entalpía y cambio de unidades.

Tema 2: Problemas presión de vapor mediante variados métodos.

Tema 3: Problemas psicrometría y aire húmedo.

Tema 4: Problemas termoquímica.

Tema 5: Problemas Entalpía-Composición.

Trabajos Prácticos:

Trabajo Práctico nº 1: Cálculos de entalpías, cambio de unidades, cálculo de equipos de intercambio térmico.

Trabajo Práctico nº 2: Problemas de gases y vapores, cálculo de presiones de vapor y problemas de psicrometría (humidificación/des-humidificación, secado, torres de enfriamiento)

Trabajo Práctico nº 3: Problemas de balance y energía con reacción química, cálculos de calores de reacción en función de la temperatura, temperaturas adiabáticas, cálculo de consumos de servicios auxiliares de calentamiento / enfriamiento en equipos con reacción química.

Trabajo Práctico nº 4: Problemas de entalpía composición para el cálculo de equipos de mezclado, evaporadores, etc., en los que haya calores de mezclado. Cálculo de consumos de servicios auxiliares de calentamiento / enfriamiento en los equipos relacionados.

Trabajo Práctico nº 5: Resolución de los problemas resueltos en los prácticos anteriores pero mediante el uso de simuladores y su comparación en términos de exactitud, y esfuerzo requerido. Este simulador es el mismo que será utilizado en “Modelado, simulación, optimización y seguridad de procesos” y factible de aplicar Operaciones Unitarias I y II, Energía Térmica e Ingeniería de las Reacciones.

Las herramientas y medios por las que se llevarán a cabo dichas tareas se presentan en el siguiente ítem con mayor profundidad y precisión.

Metodología de evaluación:

Como condición de regularidad se debe satisfacer con un mínimo de asistencias a clases teóricas y especialmente a las clases prácticas. De esta segunda categoría se presentan dos casos, las clases en la cuales el ayudante los guía en la resolución de problemas de balances de materia y energía y en el segundo caso, son los alumnos los que en la propia clase deben resolver problemas de la temática que se está desarrollando. Los Trabajos Prácticos son de presentación individual, pudiendo ser desarrollados algunos en grupos reducidos a los fines de fomentar el trabajo en equipo.

Como requisito de aprobación directa se deberán, además, aprobar 2 parciales entre los que se divide todo el contenido de la materia. Los mismos son de resolución individual.

Ubicación de la cátedra dentro de la carrera Ingeniería Química

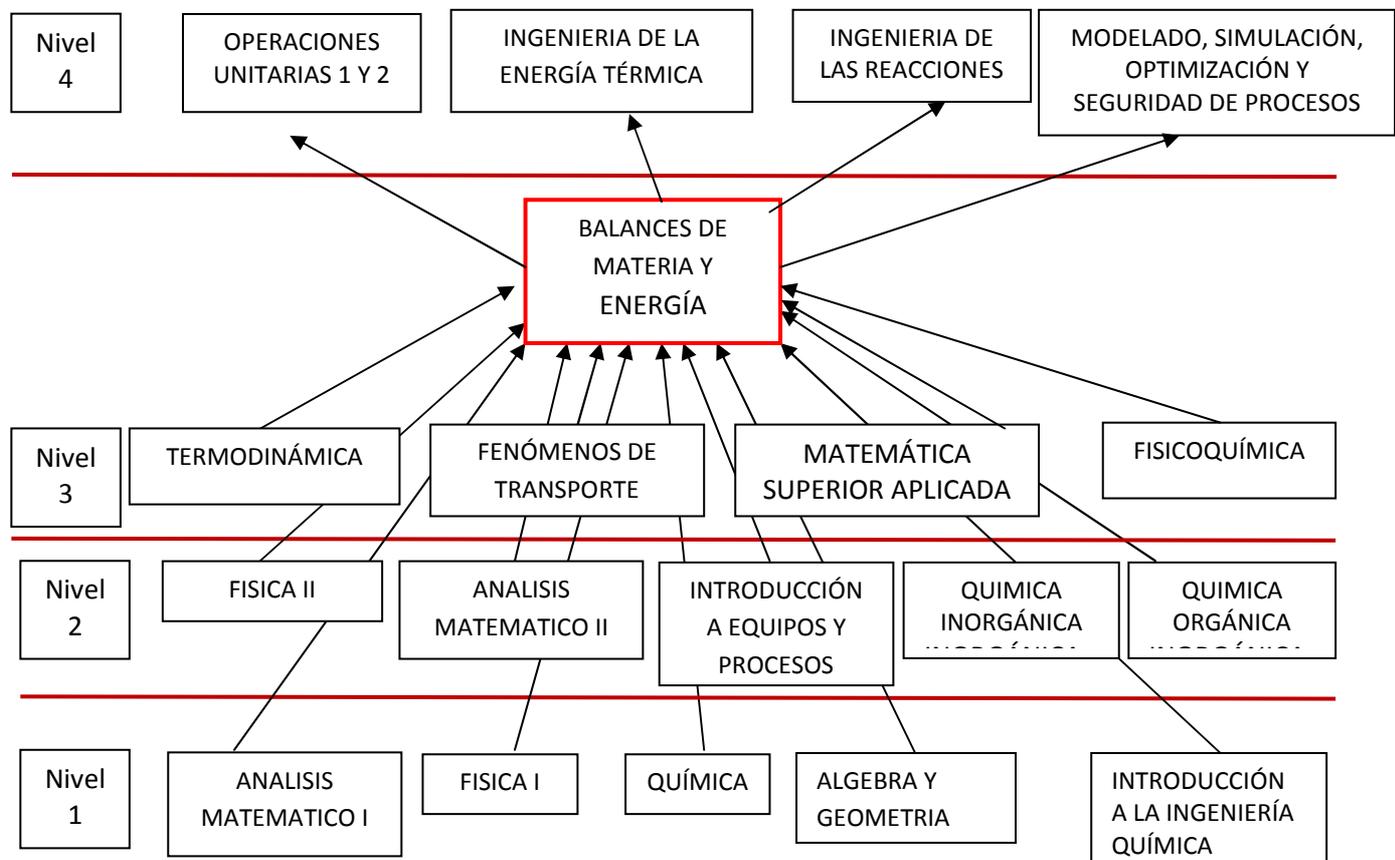


Figura 1

Bibliografía:

- Calculo de balances de materia y energia; Henley, Ernest J. ; Rosen, Edward M.; ; Reverte; 1973
- Principios de los procesos quimicos : balances de materia y energia; Hougen, Olaf Andreas, 1893- ; Watson, Kenneth Merle ; Ragatz, Roland; ; Reverte; 1980
- Analisis ingenieril de los procesos quimicos; Peña Manrique, Ramon de la,; ; Limusa; 1979
- Analisis y simulacion de procesos de refinacion del petroleo; Torres Robles, Rafael ; Castro Arellano, J. Javier; ; Alfaomega ; Ipen.; 2003
- Analisis y simulacion de procesos; Himmelblau, David Mautner, 1923- ; Bischoff, Kenneth B.; ; Reverte; 1976
- Curso de ingenieria quimica: procesos, operaciones unitarias y fenomenos de tran; Costas Lopez, J ... [et al.].; ; Reverte; 2008
- Diseño de procesos en ingenieria quimica; Jimenez Gutierrez, Arturo ; ; Reverte; 2003
- Introduccion a los procesos quimicos: principios, analisis y sintesis; Murphy, Regina M.; ; McGraw-hill; 2007
- Modelado, simulacion y optimizacion de procesos quimicos; Scenna, Nicolas Jose; ; U.T.N.; 1999
- Principios de los procesos quimicos : termodinamica.; Hougen, Olaf Andreas, 1893- ; Wat-son, Kenneth M. ; Ragatz, Roland A; ; Reverte; 1980
- Procesos de transferencia de calor.; Kern, Donald Quentin, 1914-1971; ; Cecsa; 2003
- Simulacion y control de procesos por ordenador; Creus Sole, Antonio, 1935-2011; ; Mar-combo; 2011
- Transferencia de calor en ingenieria de procesos; Cao, Eduardo; ; Nueva libreria; 2011
- Introduccion a la termodinamica en ingenieria quimica.; Smith, Joseph Mauk, 1916- ; Van Ness, Hendrick C. ; Abbott, Michae; ; McGraw-Hill; 2007
- Introduccion al analisis en ingenieria quimica; Russell, T. W. F., 1934- ; Denn, Morton M; ; Limusa; 1976
- Principios basicos y calculos en ingenieria quimica.; Himmelblau, David Mautner; ; Prentice-Hall; 1997
- Principios y calculos basicos de la ingenieria quimica; Himmelblau, David Mautner; ; Conti-ental; 1978
- Manual del ingeniero Quimico; Perry, John Howard; ; McGraw-Hill; 1986.
- Horizontal con Termodinámica, Físicoquímica, Fenómenos de Transporte
- Robert Nelson Smith - Solving general chemistry problems-W. H. Freeman (1980)
- Operaciones unitarias en Ingeniería Química- McCabe, Smith, Harriot. Edit: McGraw Hill. 2007.
- FUNDAMENTOS Y APLICACIONES DE TRANSFERENCIA DE MASA- ALFREDO ARIAS JARA- Universidad Nacional de San Cristóbal de Huamanga- Facultad de Ingeniería Química y Metalurgia. 2011.
- Simulación y Evaluación de Procesos Químicos. Carlos Andrés Henao. 2005



Página web:

<https://www.modeloingenieria.edu.ar/index.php/catedras/3-ano/integracion-iii>



Punto de encuentro virtual:

<https://www.facebook.com/groups/622908831193937/?ref=bookmarks>



Mails:

BYE.frro@gmail.com nestorhugo_r@yahoo.com

Equipo docente:

Profesor adjunto:
Auxiliar:

Dr. Néstor Hugo Rodríguez
Ing. Mabel Dupuy

Balances de materia y energía.

Sistemas

A la hora de encarar problemas que involucren transformaciones es necesario, en primer lugar, limitar las condiciones de estudio para su correcta formulación y resolución.

Un sistema es una porción limitada del universo que se someterá a estudio. El mismo puede ser abierto o cerrado en cuyo caso una pared lo separa del resto que denominaremos entorno o medio ambiente. Esa frontera a su vez puede ser virtual o real, en el 2º caso se deberá consignar si resulta permeable o impermeable a la materia y/o a la energía.

En Ingeniería Química este sistema puede ser un proceso o parte de él, algún o equipo o una de las partes que lo constituyen pudiendo aplicarse en forma sistemática y genérica a lo que se suele llamar operaciones unitarias.

Balances de Materia:

Este tema fue planteado en la cátedra “Introducción a equipos y procesos”. Parte de la premisa de que la materia no se genera ni se pierde, sólo se transforma. Esta hipótesis es válida en las condiciones normalmente usuales en Ingeniería Química. Por un lado se sabe que la masa y la energía de un objeto no son independientes. Así para un objeto en reposo:

$$E = m \times c^2$$

Donde E es energía, m es la masa y c la velocidad de la luz en el vacío. En realidad, dicha ecuación, postulada por primera vez por Albert Einstein se enfocaba el hecho de que un cuerpo que emite energía pierde un equivalente de energía dada por la misma. Este valor que suele tener mucho impacto a nivel de partículas elementales es totalmente despreciable al nivel macroscópico. Esto permite, en principio, segregar los balances de materia y energía y resolverlos en forma independiente. No obstante hay situaciones (ejemplo con reacciones químicas de conversión desconocida) en que ambos deben resolverse juntos.

Como sea, a los efectos prácticos, los balances de materia deben responder al principio de conservación de la materia. Los mismos permiten el dimensionamiento de equipos, el cálculo de la producción, requerimiento de materias primas e insumos etc.

Balances de Energía:

Conforma la “segunda pata” de los problemas a resolver en “Balances de Materia y Energía”. Para ello debe saberse el balance de materia o su planteo. La resolución de los balances de energía están motivados en el cálculo de la temperatura de un reactor, la de una llama, la necesaria en un evaporador, etc. Además dichos acondicionamiento térmicos se logran con el aporte o retiro de energía, así pues, el conocimiento de dichos valores permite calcular los servicios auxiliares correspondientes (refrigeración o calefacción) los cuales pueden cotejarse con aquellos disponibles en planta o sugerir y estimar aquellos que sean necesarios y el costo asociado al mismo parámetro de importancia para la valoración económica de un proceso o proyecto determinado. Este apunte no pretende sustituir los referentes a materias como Termodinámica, en los cuales se exponen en forma más general y

detallada, limitándonos nomás a su repaso y aplicación a los problemas de “Balances de materia y energía”.

Como norma general veremos dos importantes categorías: los sistemas sin reacción química (tales como intercambiadores de temperatura, condensadores/evaporadores, hornos y calderas del lado de tubos, camisas o serpentinas, etc.) y los sistemas con reacción química (reactores, hornos y calderas en la parte de combustión, etc). Lo expresado vale cuando nos referimos a energía térmica. Un balance de energía puede incluir términos mecánicos que los hace aplicables a válvulas, bombas, compresores, expansores, etc. Estos temas se estudian con mayor detalle en Operaciones Unitarias 1 en donde se consideran todos los efectos asociados a los mismos.

Formando parte los balances de materia de la cátedra “Balances de Materia y Energía”, en este caso, nos limitaremos solo a los balances de energía. Para ello daremos una introducción conceptual de los términos que a continuación se aplicarán:

Energía- Trabajo:	W
Calor:	Q
Energía cinética:	EC
Energía Potencial:	EP
Energía interna:	U
Entalpía:	H

CALOR Y TRABAJO:

Actualmente se considera, desde un punto de vista cinético, que el calor viene ligado, por una parte a la vibración mecánica de la materia, y por otra a un transporte de partículas dotadas de energía (moléculas, electrones, etc.). Se transmite en sólidos por conducción, en líquidos por conducción y convección, en gases por conducción, convección y radiación y en el vacío por radiación en forma de ondas electromagnéticas.

Se sabe por la experiencia, que cuando un cuerpo caliente se pone en contacto con uno frío, el primero se enfría y el segundo se calienta, hasta que ambos igualen sus temperaturas. Se ha producido, pues, una transferencia de energía del cuerpo caliente al frío; esta energía así transferida se llama calor; el cuerpo caliente ha disminuido su energía interna, y el cuerpo frío la ha aumentado. En esta definición viene implícito el hecho de que un cuerpo no contiene calor, sino que denominamos con este término la energía, en tanto cruza los límites, es decir, el calor es un fenómeno transitorio y, por lo tanto, el calor no es una función de estado. Si tenemos un cuerpo caliente como sistema A y un cuerpo frío como sistema B, ni A ni B contienen calor, pero al ponerlos en contacto térmico el calor se transfiere desde A hasta B, (régimen transitorio), hasta lograr el equilibrio de temperaturas, (régimen estacionario); al final del proceso ninguno de los sistemas contiene calor.

Se define el calor sensible como aquel que va asociado a cambios de temperatura, mientras que el calor latente se considera asociado a efectos caloríficos propios de reacciones químicas, cambios de fase, etc, en los que la temperatura permanece constante.

CAPACIDAD CALORÍFICA.- Vamos a considerar un sistema cuyo estado viene especificado por su temperatura T y por un conjunto de parámetros macroscópicos x, como la presión p y el volumen v. Si el sistema está inicialmente a la temperatura T y absorbe una cantidad infinitesimal de calor DQ en tanto permanece constante el parámetro x, la temperatura del sistema variará en una magnitud infinitesimal DT que dependerá de la naturaleza del sistema, y también, en general, de los parámetros T y x que definen el estado macroscópico inicial del mismo.

Se define la capacidad calorífica como la cantidad de calor necesaria para modificar la temperatura del sistema desde T1 a T2, es decir,

$$C_{T_1}^{T_2} = \frac{\Delta Q}{\Delta T} = \frac{\Delta Q}{T_2 - T_1}$$

Y en el límite:

$$C = \lim_{\Delta T \rightarrow 0} \left(\frac{\Delta Q}{\Delta T} \right) = \frac{dQ}{dT}$$

CALOR ESPECÍFICO.- La cantidad de calor dQ que debe aplicarse a un sistema homogéneo para producir una variación determinada de temperatura dT debe ser lógicamente proporcional a la masa total del sistema. Por tanto es conveniente definir lo que se conoce como calor específico, que es una magnitud que depende sólo de la naturaleza de la sustancia considerada, pero no de la cantidad presente. Para ello basta dividir la capacidad calorífica Cx de la sustancia, por el correspondiente número de gramos o moles.

La capacidad específica por unidad de masa ó calor específico viene dado por,

$$\bar{C} = \frac{\Delta C}{m} = \frac{dQ}{dT}$$

La raya superior se utilizará en todas las propiedades específicas pudiendo ser ésta másica o molar. En el segundo caso nos quedaría:

$$\bar{C} = \frac{\Delta C}{n} = \frac{dQ}{dT}$$

Dada la falta de consenso al respecto usaremos uno u otro en función de la disponibilidad de los datos debiendo aclarar explícitamente si estamos empleando moles o masa. De otro modo habría que distinguir los C en ambas ecuaciones. Ejemplo Cm (masico) y C (molar, que es más empleada).

La cantidad de calor absorbida por el sistema al aumentar su temperatura de T1 a T2 es, tomando la base en moles:

$$Q = n \times \int_{T_1}^{T_2} \bar{C} \times dT$$

Como normalmente se trabaja en determinados intervalos térmicos se puede definir el calor específico medio en el intervalo de temperaturas T1 y T2 en la forma,

$$\hat{C} = \frac{\int_{T_1}^{T_2} C \times dT}{\int_{T_1}^{T_2} dT} = \frac{1}{T_2 - T_1} \int_{T_1}^{T_2} C \times dT$$

La capacidad calorífica Cx es función de la temperatura y se puede poner como,

$$C = a + b \times T + cT^2 + \dots$$

por lo que el valor de Q será,

$$Q = \int_{T_1}^{T_2} \bar{C} \times dT = \int_{T_1}^{T_2} (a + b \times T + c \times T^2 + \dots) dT$$

$$Q = \left[a \times T + \frac{b}{2} \times T^2 + \frac{c}{3} \times T^3 + \dots \right]_{T_1}^{T_2} = a \times (T_2 - T_1) + \frac{b}{2} \times (T_2^2 - T_1^2) + \frac{c}{3} \times (T_2^3 - T_1^3) + \dots$$

CALORES ESPECÍFICOS DE LOS GASES

Experimentalmente se puede comprobar que el calor específico correspondiente a las diversas transformaciones que puede experimentar un sistema varía desde el valor 0 que corresponde a una transformación adiabática, hasta el valor γ que corresponde a una transformación isoterma. Los calores específicos a presión y volumen constante, son,

$$\text{A presión constante } C_p = \left(\frac{\Delta Q}{\Delta T} \right)_P$$

$$\text{A volumen constante } C_v = \left(\frac{\Delta Q}{\Delta T} \right)_V$$

Las propiedades Cp y Cv se conocen como calores específicos ya que bajo ciertas condiciones especiales relacionan el cambio de temperatura en un sistema con la cantidad de energía añadida por transferencia de calor. La diferencia entre los valores de Cp y Cv para un mismo gas, en el supuesto de que se desee incrementar su temperatura en dT, estriba en que para cp, una parte del calor puesto en juego se transforma en trabajo de dilatación, mientras que para cv se aprovecha íntegramente en aumentar su temperatura. En general, cv es una función de v y T, mientras que cp depende de p y T.

La determinación de los calores específicos del gas ideal es una de las áreas importantes en las que la aproximación microscópica contribuye de manera significativa a las aplicaciones termodinámicas. Por la Teoría Cinética de Gases, el calor específico a volumen constante para un mol de un gas perfecto, viene dado por la expresión:

$$C_v = \frac{\nu}{2} R$$

y el calor específico a presión constante por,

$$C_p = \frac{\nu}{2} R + R = C_v + R$$

La ecuación,

$$C_p - C_v = R$$

es la ecuación de Mayer, que dice que la diferencia entre los calores molares a presión y a volumen constante, para un gas ideal, vale aproximadamente 2 calorías.

Los valores de ν , número de grados de libertad molecular, son,

- a) En gases monoatómicos, $\nu = 3$
- b) En gases biatómicos, $\nu = 5$
- c) En gases poliatómicos, $\nu = 6$

En la práctica, el valor de c_v es difícil de calcular, por lo que se recurre a determinar c_p y la relación siguiente, que se conoce como coeficiente adiabático γ ,

$$\gamma = \frac{C_p}{C_v}$$

que vale, respectivamente,

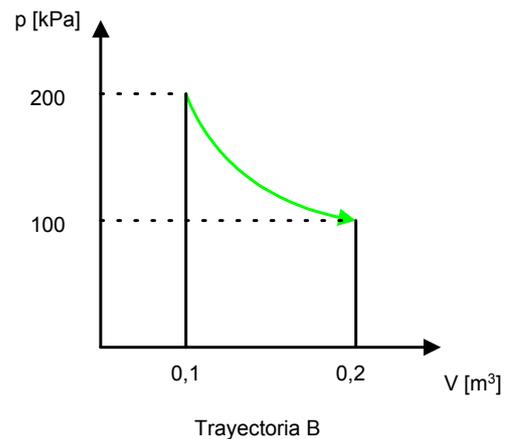
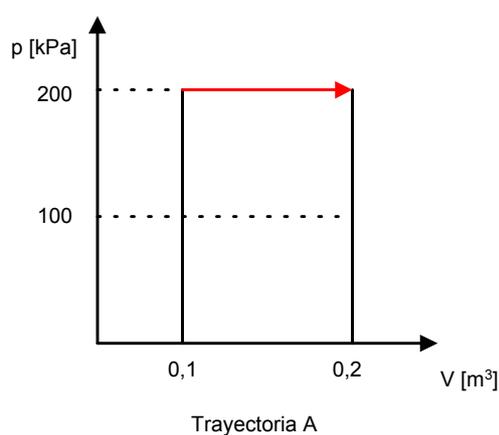
- a) Gas monoatómico, $\gamma = 1,66$
- b) Gas biatómico, $\gamma = 1,40$
- c) Gas poliatómico, $\gamma = 1,33$

Transformaciones.

- 1) El trabajo implica transferencia de energía entre el sistema y el entorno de una cierta fuerza mecánica. Para que un cierto trabajo pueda realizarse la frontera debe desplazarse respecto del entorno:

$$W = \int_{Est-1}^{Est-2} F \times dS$$

Ejemplo: Suponga que un gas ideal a 300 °K y 200 kPa está confinado en un cilindro mediante un pistón sin fricción, y que el gas empuja lentamente el pistón de modo que el volumen del gas se expande desde 0,1 hasta 0,2 m³. Calcular el trabajo realizado por el gas sobre el pistón (la única parte de la frontera que se mueve) si se siguen dos caminos distintos para ir del estado inicial al estado final.



- 2) El calor consiste en la transferencia de energía a través de la frontera del sistema debido a la existencia de una cierta diferencia de temperatura ΔT :

$$Q = U \times A \times \Delta T$$

- 3) La energía cinética es debido a la velocidad relativa del sistema con respecto al entorno:

$$EC = \frac{1}{2} m \times v^2$$

La energía cinética específica:

$$\overline{EC} = \frac{1}{2} v^2$$

Ejemplo:

Se bombea agua de un tanque de almacenamiento a través de un tubo de 3 cm de diámetro interior a una razón de 0,001 m³/s. ¿Cuál es la energía cinética?



Solución:

Base de cálculo 0,001 m³/s de agua

Asumiendo que la densidad del agua fuera de 1000 [kg/m³]

$$r = \frac{1}{2} D = \frac{3,00}{2} = 1,50 [\text{cm}]$$

$$v = \frac{q}{A} = \frac{0,001 \left[\frac{\text{m}^3}{\text{s}} \right]}{\pi \times 0,015^2 [\text{m}^2]} = 1,415 \left[\frac{\text{m}}{\text{s}} \right]$$

$$\overline{EC} = \frac{1}{2}v^2 = \frac{1}{2}1,415^2 = 1,00 \left[\frac{\text{m}^2}{\text{s}^2} \right] \times \left[\frac{\text{kg}}{\text{kg}} \right] = 1,00 \left[\frac{\text{J}}{\text{kg}} \right]$$

- 4) La energía potencial es debido a fuerzas gravitatorias, electromagnéticas o elásticas que se ejerce sobre el sistema respecto de un punto o superficie de referencia. Para el gaso de la energía potencia gravitatoria:

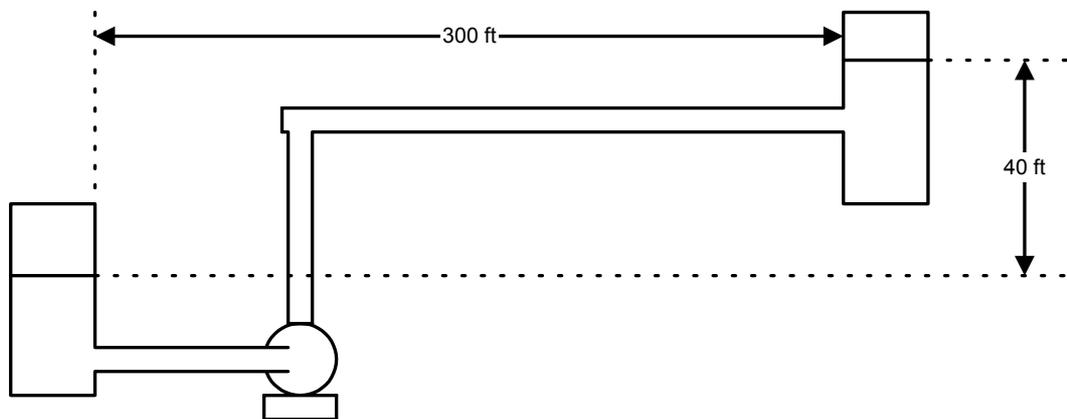
$$EP = m \times g \times h$$

La energía potencial específica:

$$\overline{EP} = g \times h$$

Ejemplo:

Se bombea agua de un tanque a otro que está a 300 ft. El nivel de agua del segundo tanque está 40 pies por encima del nivel del agua del primero. ¿Qué tanto aumentó la energía potencial específica del agua en BTU/lb?



Solución:

Se tomará como referencia el nivel de agua el primer tanque, Entonces $h = 40$ [ft]:

$$\overline{EP} = g \times h = 32,2 \left[\frac{\text{ft}}{\text{s}^2} \right] \times 40 [\text{ft}] \times \frac{1}{32,2 \left[\frac{\text{lbm} \times \text{ft}}{\text{lbf} \times \text{s}^2} \right]} \times \frac{1}{778,2 \left[\frac{\text{ft} \times \text{lbf}}{\text{BTU}} \right]} = 0,0514 \left[\frac{\text{BTU}}{\text{lbm}} \right]$$

- 5) La energía interna es la medida macroscópica de las energías moleculares, atómicas y subatómicas las cuales obedecen reglas de conservación microscópicas definidas para sistemas dinámicos.

Esta magnitud no puede medirse directamente, se calcula a través de su Volumen, Presión, Temperatura y Composición. En general:

$$\overline{U} = \overline{U}(T, V)$$

$$d\overline{U} = \left(\frac{\partial \overline{U}}{\partial T} \right)_V dT + \left(\frac{\partial \overline{U}}{\partial V} \right)_T dV$$

En ocasiones el 2º término puede despreciarse con lo cual la energía interna puede calcularse:

$$\bar{U}_2 - \bar{U}_1 = \int_{T_1}^{T_2} C_v \times dT$$

Al no existir un nivel absoluto de energía interna sólo puede medirse respecto de un cierto nivel de referencia arbitrario. A partir de ahora nos referiremos a la energía interna como ΔU .

- 6) La entalpía es la suma de calor y trabajo del sistema. Al igual que la energía interna no tiene un valor absoluto. $\bar{H} = \bar{U} + p \times V$

$$\bar{H} = \bar{H}(T, P)$$

$$d\bar{H} = \left(\frac{\partial \bar{H}}{\partial T} \right)_P dT + \left(\frac{\partial \bar{H}}{\partial P} \right)_T dP$$

En muchos casos el 2º término puede despreciarse lo que queda:

$$\bar{H}_2 - \bar{H}_1 = \int_{T_1}^{T_2} C_p \times dT$$

A partir de ahora nos referiremos a la entalpía como ΔH .

Formulaciones para los balances de Energía.

Como forma general podemos escribir para un régimen cualquiera:

$$\{Acumulación\} = \{Entrada\} - \{Salida\} + \{Generación\} - \{Consumo\}$$

Sistemas cerrados:

$$Q_{1,2} = (U_2 - U_1) + W_{Total}$$

Sistemas abiertos permanentes:

$$Q_{1,2} + \Delta H_1 + EC_1 + EP_1 = W_{1,2} + \Delta H_2 + EC_2 + EP_2$$

Sistemas abiertos no permanentes:

$$Q_{1,2} + m_e \times (\bar{\Delta H}_e + \bar{EC}_e + \bar{EP}_e) = W_{1,2} + m_s \times (\bar{\Delta H}_s + \bar{EC}_s + \bar{EP}_s) + \Delta E$$

Intercambiadores de calor: Conceptos

Son equipos acondicionadores de temperatura, esto es, que ajustan o cambian corrientes de procesos para llevarlas a las temperaturas requeridas en la planta. Esto puede lograrse mediante corrientes auxiliares de refrigeración (agua de enfriamiento, fluidos criogénicos, etc) o calefacción (vapor de agua saturada o recalentada, gases de hornos, etc) o bien entre las propias corrientes de procesos (corrientes calientes y frías) si sus diferencias de temperatura lo permiten. Cabe acotar que una corriente caliente no es aquella que simplemente tiene una temperatura elevada sino aquella que se requiere enfriar (entrega calor). Por otro lado las corrientes frías son aquellas que deban ser aumentadas en sus temperaturas (requieren calor).

Existen numerosos tipos de equipos de intercambio pero en todos los casos podemos decir que se tratan de dispositivos que suministran una superficie de contacto térmico sin que, en realidad, se mezclen físicamente. El más sencillo de doble tubo se identifica rápidamente en un laboratorio químico (y en películas de terror) como el refrigerante donde el fluido caliente pasa por el tubo central mientras que el agua de enfriamiento por el ánulo. En la industria no será necesaria la transparencia del equipo siendo más importante su eficiencia por lo que (salvo excepciones) será metálico.

Una extensión del equipo anterior es el de tubos y coraza en donde la cantidad de conductos puede ser de cientos o quizás de miles pero al no entrar en detalles de diseño con lo expuesto será suficiente.

Lo que si es dable señalar que existen además dos configuraciones de acuerdo a si las corrientes ingresan en un mismo sentido (cocorriente) o invertidos (contracorriente).

Contracorriente:

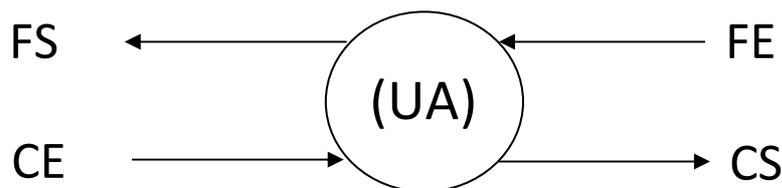


Figura 2

La figura 2 esquematiza el equipo en formato grafo. Se trata de un equipo en contracorriente. Las temperaturas de ingreso y egreso establecen dos perfiles de temperaturas como se aprecia en la figura 3.

Cabe aclarar en este caso como en el siguiente que las temperaturas de piel de tubo (interior) no son rectas como se ilustran ahí sino curvas ya que la tendencia al intercambio de calor será mayor en los puntos en donde la diferencia local de temperatura será mayor.

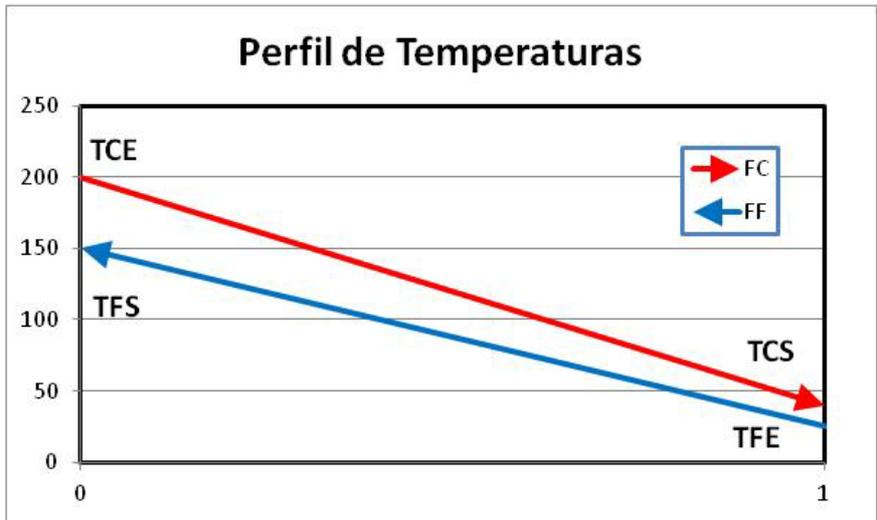


Figura 3

El otro esquema, es decir en cocrriente se ilustra en la figura 4 y su perfil en la 5. Vale la tarea de comparar ambos casos: así vemos que la transferencia en los equipos del 1º tipo es más uniforme a lo largo del mismo. Vemos que en cocrriente a medida que las corrientes se desplazan sus temperaturas se acercan no pudiendo igualarse nunca o ya no habría transferencia de calor. En la práctica siempre debe haber una diferencia de temperatura mínima a satisfacer. Por otro lado en contracorriente se da la posibilidad de que la corriente fría salga más caliente que la caliente (siempre y cuando sea más fría que la entrada) como se aprecia en la figura 3.

Co-corriente

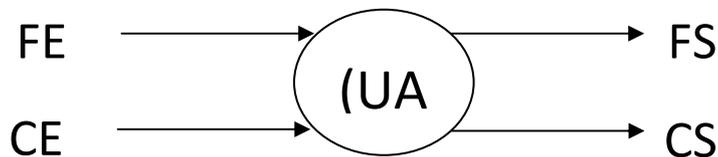


Figura 4

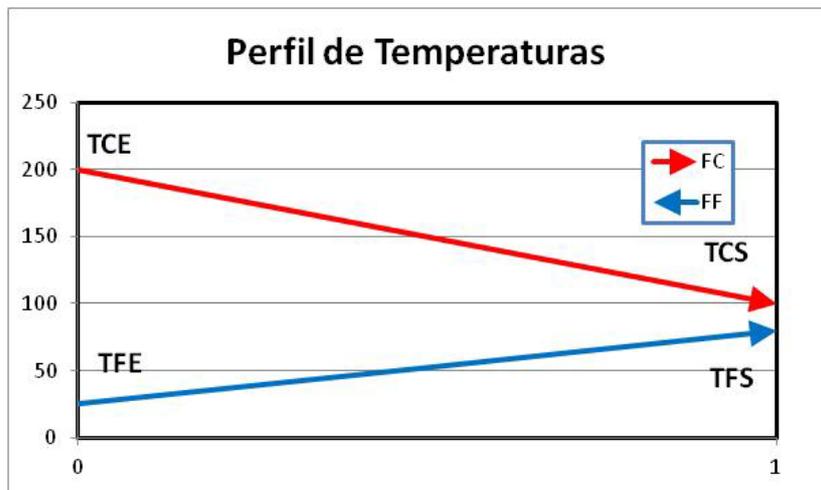


Figura 5

Para finalizar esta pequeña introducción mencionemos que el calor debe pasar desde el fluido caliente a través de una serie de resistencias en serie que son:

- 1) El coeficiente pelicular del fluido, esto es la capa del mismo que parece “pegarse” a la pared disminuyendo su velocidad y capacidad de transporte de calor (“capa límite”).
- 2) Luego debe atravesar el ensuciamiento (“Fouling”) que es suciedad proveniente del mismo fluido que se adhiere a la pared y se engrosa con el tiempo disminuyendo su rendimiento. Esto exige una tarea constante de mantenimiento (limpieza) cuya frecuencia dependerá de lo sucio del fluido.
- 3) Esta es quizás la menos importante en general porque las paredes en general son metales y su conductividad de calor alta.
- 4) Es la contraparte del fluido frío del ensuciamiento.
- 5) La capa límite del fluido frío.

Así la capacidad de la pared, una vez seleccionada es constante (si despreciamos la variación de su conductividad térmica de la temperatura).

Las resistencias debida a las capas límites dependen de las propiedades térmicas de los fluidos y de su velocidad. A más velocidad mejor conduce el calor pero aumenta la pérdida de carga requiriendo de más potencia de bombeo para su operación. En general esta velocidad suele acotarse por requisitos de diseño.

Lo que realmente modifica el rendimiento del equipo en forma constante es el ensuciamiento de ambos fluidos lo que exige su limpieza periódica. Cabe aclarar que se acuerdo al diseño de equipo se suele destinar la zona más accesible al fluido más sucio.

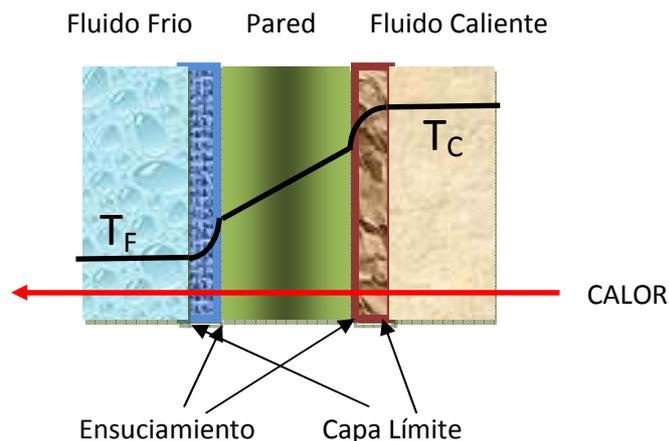


Figura: 6

Dejando de lado los balance de materia globales y por componentes de ambas corrientes daba la obviedad de que lo que sale en cantidad y composición es igual a lo que entra y suponiendo que no hay cambio de fases en ninguna de las dos corrientes el modelo

puede formularse a través del sistema de 4 ecuaciones y 4 incógnitas como se indica a continuación:

Fluido caliente:
$$Q = F_C \times \overline{\Delta H}_C$$

Fluido frío:
$$Q = F_F \times \overline{\Delta H}_F$$

Intercambiado:
$$Q = (UA) \times DTLN$$

Contracorriente:
$$DTLN = \frac{(T_{CE} - T_{FS}) - (T_{CS} - T_{FE})}{\ln \frac{(T_{CE} - T_{FS})}{(T_{CS} - T_{FE})}}$$

Co-corriente:
$$DTLN = \frac{(T_{CE} - T_{FE}) - (T_{CS} - T_{FS})}{\ln \frac{(T_{CE} - T_{FE})}{(T_{CS} - T_{FS})}}$$

Entalpías:

$$\overline{\Delta H}_C = \int_{T_{CS}}^{T_{CE}} \overline{Cp}_C \times dT$$

$$\overline{\Delta H}_F = \int_{T_{FE}}^{T_{FS}} \overline{Cp}_F \times dT$$

Capacidades caloríficas:

$$\overline{Cp}_C = \sum_{i=1}^{NC} x_i^C \times \overline{CP}_i$$

$$\overline{Cp}_F = \sum_{i=1}^{NC} x_i^F \times \overline{CP}_i$$

Intercambiadores de calor: Modelado

Aplicación del cambio de entalpía en corrientes.

Esquema:

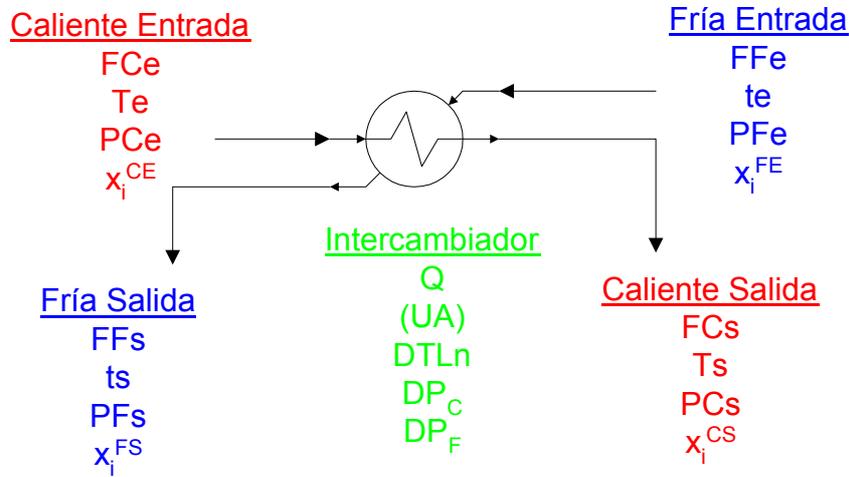


Figura: 7

Hipótesis:

- Sin reacción química
- Sin cambio de fases
- Adiabático
- Estado estacionario
- Mezclas de NC componentes

Modelo:

Balances de masa global:

$$FCs = FCe$$

$$FFs = FFe$$

Balances de masa por componente:

$$x_i^{CS} = x_i^{CE} \quad i = 1 \text{ a } NC$$

$$x_i^{FS} = x_i^{FE}$$

Presiones:

$$PCs = PCE - \Delta P_C$$

$$PFs = PFe - \Delta P_F$$

Balances de Energía:

$$Q = FCe \times [HC_E(Te) - HC_S(Ts)]$$

$$Q = FFe \times [HF_S(ts) - HF_e(te)]$$

$$Q = (UA) \times \Delta T \ln$$

Propiedades fisicoquímicas:

$$HC_E = \sum_{i=1}^{NC} x_i^{CE} \times H_i(Te)$$

$$HC_S = \sum_{i=1}^{NC} x_i^{CS} \times H_i(Ts)$$

$$HF_E = \sum_{i=1}^{NC} x_i^{FE} \times H_i(te)$$

$$HF_S = \sum_{i=1}^{NC} x_i^{FS} \times H_i(Ts)$$

TR: temperatura de referencia:

$$H_i(Te) = \int_{TR}^{Te} Cp_i \times dT$$

$$H_i(Ts) = \int_{TR}^{Ts} Cp_i \times dT$$

$$H_i(te) = \int_{TR}^{te} Cp_i \times dT$$

$$H_i(Te) = \int_{TR}^{Ts} Cp_i \times dT$$

$$\Delta T \ln = \frac{\Delta T1 - \Delta T2}{\ln \frac{\Delta T1}{\Delta T2}}$$

Otras Relaciones:

$$\text{Cocorriente: } \Delta T1 = Te - te \quad \Delta T2 = Ts - ts$$

$$\text{Contracorriente: } \Delta T1 = Te - ts \quad \Delta T2 = Ts - te$$

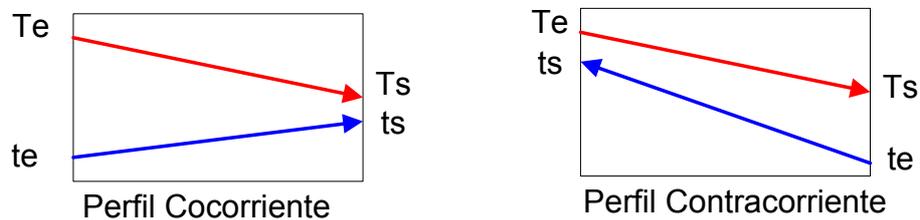


Figura: 8

Métodos numéricos. Aplicación de herramientas informáticas.

Caso de aplicación 1: Intercambiador de calor.

Sean dos corrientes que intercambian solamente calor a través de un intercambiador de calor a contracorriente. Los balances de materia global y por componentes resultan ser triviales dado que no hay mezcla ni divisiones de corrientes. Tampoco hay cambio de estado ni reacciones químicas. La figura siguiente representa al mencionado equipo:

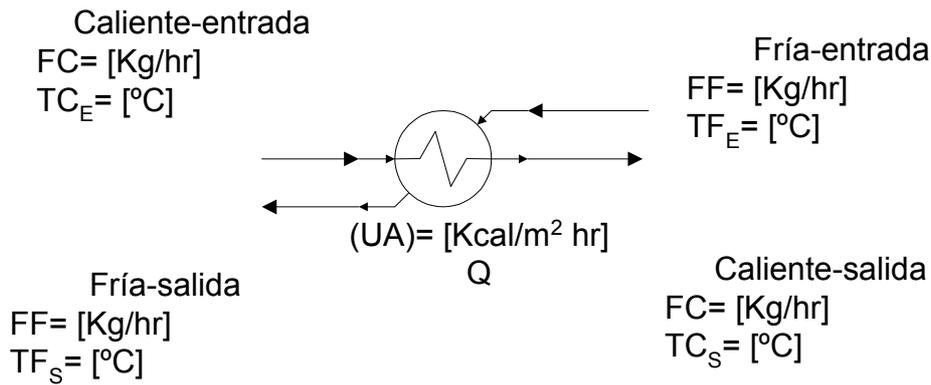


Figura: 9

Como resultado el sistema conformado se puede formular a través de las siguientes ecuaciones.

Fluido Caliente	$Q = FC \times \overline{\Delta H}_C$
Fluido Frio	$Q = FF \times \overline{\Delta H}_F$
Balance Global	$Q = (UA) \times \Delta T_{\ln}$
Dif de temp media log	$\Delta T_{\ln} = \frac{(TC_E - TF_S) - (TC_S - TF_E)}{\ln \frac{(TC_E - TF_S)}{(TC_S - TF_E)}}$

Siendo además las propiedades fisicoquímicas:

$$\overline{\Delta H}_C = \overline{\Delta H}_C(TC_E) - \overline{\Delta H}_C(TC_S)$$

$$\overline{\Delta H}_F = \overline{\Delta H}_F(TF_S) - \overline{\Delta H}_F(TF_E)$$

Una forma de calcular las entalpías es través de las capacidades caloríficas a presión constante (Cp's). Si asumimos Cp constante:

$$Ec-1 \quad Q - FC \times \overline{Cp}_C \times (TC_E - TC_S) = 0$$

$$Ec-2 \quad Q - FF \times \overline{Cp}_F \times (TF_S - TF_E) = 0$$

$$Ec-3 \quad Q - (UA) \times \Delta T_{\ln} = 0$$

$$Ec-4 \quad \Delta T_{\ln} - \frac{(TC_E - TF_S) - (TC_S - TF_E)}{\ln \frac{(TC_E - TF_S)}{(TC_S - TF_E)}} = 0$$

Se define como grados de libertad de un sistema a:

$$GL = NV - NE = 11 - 4 = 7$$

Donde: NV es el número de variables y NE el número de ecuaciones independientes. Para que el sistema tenga una solución única, los grados de libertad deben ser cero por lo que deben fijarse un número GL de variables (ahora llamados parámetros). No obstante, el orden de resolución del sistema resultante depende de cuáles de las variables se asumen como parámetros y cuáles como incógnitas. En ocasiones es factible hacer dicha selección a fin de reducir la complejidad del mismo mientras que otras veces viene impuesto por el mismo problema. A modo ilustrativo definiremos dos casos posibles.

Siendo la funcionalidad de las ecuaciones:

$$\begin{aligned} Ec-1 &= f_1(Q, FC, CP_C, TC_E, TC_S) \\ Ec-2 &= f_2(Q, FF, CP_F, TF_E, TF_S) \\ Ec-3 &= f_2(Q, \Delta T_{ln}, (UA)) \\ Ec-4 &= f_4(\Delta T_{ln}, TC_E, TC_S, TF_E, TF_S) \end{aligned}$$

O, en forma gráfica:

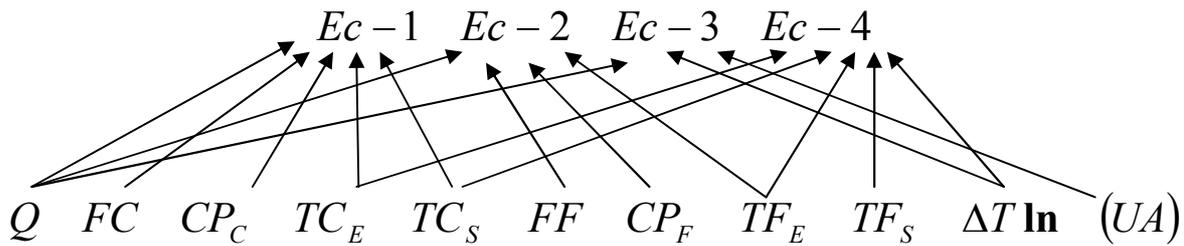


Figura: 10

Caso a) entradas totalmente definidas y temperatura de la corriente caliente a la salida, dato.

Serán conocidas pues: FC, CP_C, TC_E, FF, CP_F, TF_E (entradas) y TC_S (salida caliente)= 7 variables/parámetros. Quedando como incógnitas Q, TF_S, ΔT_{ln} y (UA) = 4 variables=GL.

$$GL = NV - NE = 4 - 4 = 0$$

$$\begin{aligned} Ec-1 &= f_1(Q) \\ Ec-2 &= f_2(Q, TF_S) \\ Ec-3 &= f_2(Q, \Delta T_{ln}, (UA)) \\ Ec-4 &= f_4(\Delta T_{ln}, TF_S) \end{aligned}$$

El árbol de variables (eliminando los parámetros) quedan:

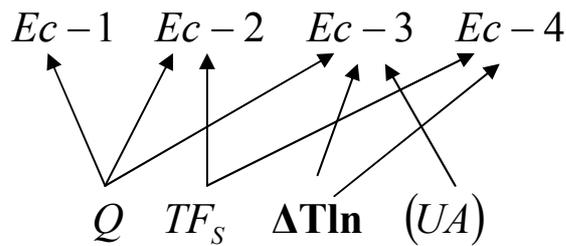


Figura: 11

Como se aprecia, la ecuación 1 sólo depende de una variable (Q) la cual se puede explicitar de allí. Conocida Q y eliminada $Ec-1$ queda:

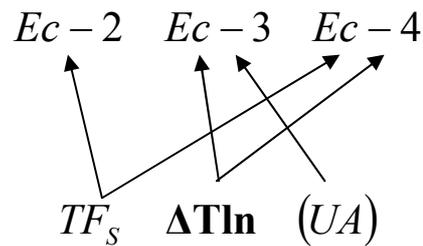


Figura: 12

De la ecuación 2 se puede explicitar TF_s . Se elimina $Ec-2$:

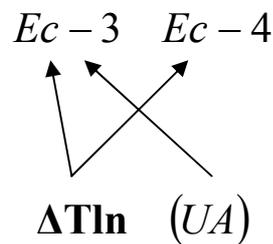


Figura: 13

La ecuación 4 depende sólo de ΔT_{ln} de la cual se despeja. Calculada ΔT_{ln} se elimina $Ec-4$. Queda:



Figura: 14

Finalmente, la última incógnita (UA) se calcula de la ecuación 3 con lo que el sistema queda totalmente resuelto.

Este tipo de problemas se denomina acíclico ya que su resolución es lineal. Existen casos en que se genera una estructura cíclica en la que no es posible operar en forma directa por lo que debe recurrirse a métodos iterativos para su resolución.

Caso b) entradas totalmente definidas y valor (UA) dato.

Al igual que antes tenemos un sistema de 4 ecuaciones (las mismas) y 4 incógnitas. Estas son Q, TCS, TFS y ΔTln.

$$\begin{aligned}
 Ec-1 &= f_1(Q, TC_s) \\
 Ec-2 &= f_2(Q, TF_s) \\
 Ec-3 &= f_3(Q, \Delta Tln) \\
 Ec-4 &= f_4(\Delta Tln, TC_s, TF_s)
 \end{aligned}$$

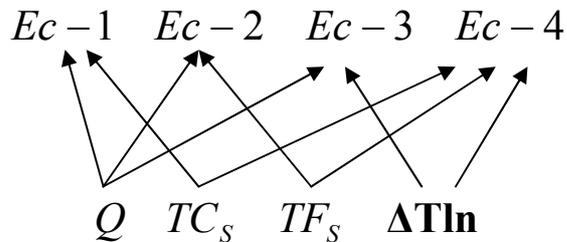


Figura: 15

Se aprecia aquí que ninguna ecuación depende de una sola variable por lo que conforman un sistema cíclico. Un método de resolución es estimando una variable que pasaría a ser, momentáneamente, un parámetro. Sea por ejemplo darle un valor supuesto a la variable TC_s. Ahora veremos que el sistema queda:

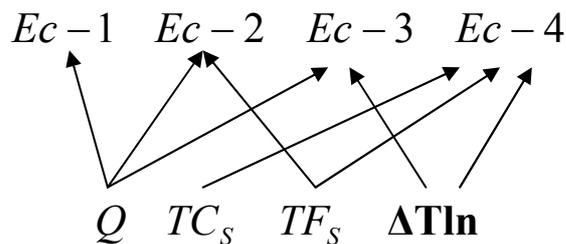


Figura: 16

De la ecuación 1 se puede calcular Q. se eliminan variable y ecuación quedando:

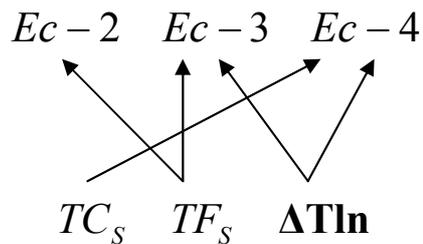


Figura: 17

La ecuación 2 depende sólo de TFS la cual puede calcularse. Nos queda:

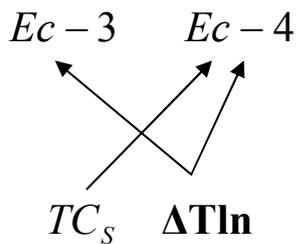


Figura: 18

De la ecuación 3 podemos despejar ΔTln y eliminar la ecuación 3. Finalmente queda:



Figura: 19

De la ecuación 4 se puede calcular TC_s . Este valor puede ser luego comparado con el valor estimado inicialmente. Si el error está dentro de lo tolerable se obtuvo la solución, de lo contrario se adopta el último valor de TC_s como valor estimado y se repite el ciclo.

No obstante lo expuesto anteriormente debe notarse que la variable TC_s no puede explicitarse de la Ec-4 por lo que también debe calcularse por métodos iterativos. A modo de ejemplo resolveremos el siguiente ejemplo numérico:

Ejemplo 1:

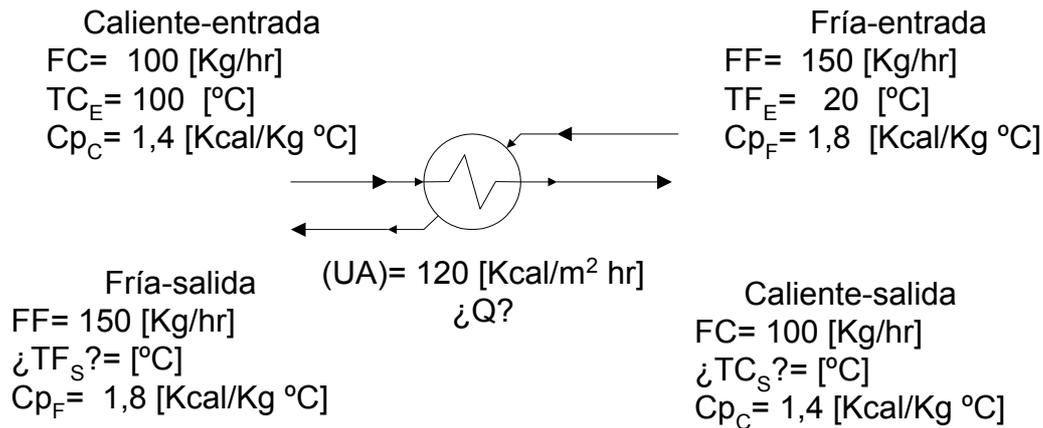


Figura: 20

Siguiendo el esquema anterior plantearemos el sistema en el orden de resolución obtenido. El esquema será encuadrado en un modelo denominado caja negra a la cual ingresará un valor de incógnita y saldrá un valor de un función cuya raíz debe resolverse.

Partimos de un valor estimado de TC_S que denominaremos TC_S^* .

$$\begin{aligned}
 Q &= FC \times \overline{Cp}_C \times (TC_E - TC_S^*) \\
 TF_S &= \frac{Q + FF \times \overline{Cp}_F \times TF_E}{FF \times \overline{Cp}_F} \\
 \Delta T \ln &= \frac{Q}{(UA)} \\
 f &= \Delta T \ln - \frac{(TC_E - TF_S) - (TC_S^* - TF_E)}{\ln \left(\frac{TC_E - TF_S}{TC_S^* - TF_E} \right)}
 \end{aligned}
 \rightarrow f(TC_S^*)$$

Vamos a resolver el mismo problema con diversas herramientas informáticas. En primer lugar con EMSO (Environment for Modeling, Simulation, and Optimization).

EMSO Simulator es un simulador de procesos orientado a ecuaciones con una interfaz gráfica para modelar complejos procesos dinámicos o de estado estacionario. Es compatible con el estándar CAPE-OPEN. EMSO significa entorno para modelado, simulación y optimización. El mismo dispone de una librería propia de módulos, métodos de resolución y paquetes fisicoquímicos. No obstante es interesante en la implementación de modelos creados por el usuario basado en sus propias hipótesis y limitaciones. Los módulos incorporados son abiertos pudiéndose copiar y modificar a voluntad.

Sin entrar en mayores detalles que pueden consultarse en la propia documentación del software un archivo de simulación **EMSO** (extensión mso) contiene varias secciones:

“using” permite vincular ciertas y determinadas librería para que estén disponibles para el caso particular. La librería “types” es de carácter general y obligatoria.

FlowSheet: nombre_del_caso, acá va el nombre del caso

PARAMETERS: aquí se listan los parámetros, es decir los nombres de las constantes a emplear

VARIABLES: aquí se indican las variables (valores a calcular)

EQUATIONS aquí se arma el modelo a través de las ecuaciones que lo representan. A fin de que el problema tenga una solución es que debe haber el mismo número de ecuaciones (independientes) que variables definidas en la sección anterior.

SET: aquí se dan valores a todos los parámetros ya indicados en la sección correspondiente.

INITIAL: esta sección se reserva para los valores iniciales de las variables diferenciales cuando el modelo es dinámico.

GUESS: permite asignar valores estimados a las incógnitas. En ocasiones esto facilita la resolución. Se aplica cuando el modelo no es dinámico.

OPTIONS: para opciones generales como elegir el método de resolución, número de iteraciones, precisión y, cuando es dinámico, valores de inicio, final, paso de integración y unidad temporal elegida.

Una ventaja de este simulador es que las ecuaciones no necesitan estar explicitadas dando flexibilidad al modelo. Por ejemplo, en ocasiones es conveniente que una variable que se encuentra en el denominador (que durante la resolución puede adquirir valor nulo), se pase al otro miembro multiplicando. Algunas veces los logaritmos y raíces pueden sustituirse por sus recíprocas evitando evaluar valores negativos (valores que son temporales durante la resolución). En particular, para el caso del intercambiador, y a fin de eliminar el término logaritmo se creó una variable llamada factor. El modelo resultó:

Modelo EMSO:

#* Balances de Materia y Energía*

using "types";

FlowSheet Int_de_calor

PARAMETERS

Cpc as Real;

Fc as Real;

Tce as Real;

Cpf as Real;

Ff as Real;

Tfe as Real;

UA as positive;

VARIABLES

Q as Real;

Tcs as Real;

Tfs as Real;

dtIn as Real;

factor as Real;

EQUATIONS

Q=Cpc*Fc*(Tce-Tcs);

```
Q=Cpf*Ff*(Tfs-Tfe);  
dtln=((Tce-Tfs)-(Tcs-Tfe))/factor;  
Q=UA*dtln;  
exp(factor)*(Tcs-Tfe)=(Tce-Tfs);
```

SET

```
Cpc= 1.4;  
Fc=100;  
Tce=100;  
Cpf=1.8;  
Ff=150;  
Tfe=20;  
UA=120;
```

INITIAL

GUESS

```
Tcs=60;  
Tfs=40;  
dtln=10;  
Q=1000;
```

OPTIONS

```
TimeStart=10;  
TimeEnd=100;  
TimeStep=1;  
TimeUnit='h';  
DAESolver(File="dassl");  
Dynamic=false;
```

end

Una vez escrito el código y almacenado en la Pc se lo ejecuta. Los resultados son:

```
Q      = 5765,95  
Tcs    = 58,8146  
Tfs    = 41,3554  
Dtln   = 48,0496  
Factor = 0.4126980
```

Modelo Excel

Las planillas Excel son ideales para este tipo de problemas. Para ello armamos una planilla como la siguiente:

		B7	fx	120
	A	B	C	
1	Variable	Caliente	Frio	
2	F	100	150	
3	Te	100	20	
4	Cp	1,4	1,8	
5	Ts	75	$=(B8+C2*C3*C4)/(C2*C4)$	
6				
7	(UA)	120		
8	Q	$=B2*B4*(B3-B5)$		
9	ΔT_{ln}	$=B8/B7$		
10	f	$=ABS(B9-((B3-C5)-(B5-C3))$		
11				
12				

Figura: 21

En donde se aprecian que las ecuaciones son las presentadas en la solución algebraica del problema. Así, las flechas indican la secuencia de cálculo que comienza con un valor estimado de Tcs (celda B5=75) y finaliza en la F de la celda B10 cuyo cero se desea encontrar. La planilla resuelta queda:

		B7	fx	120
	A	B	C	D
1	Variable	Caliente	Frio	
2	F	100	150	
3	Te	100	20	
4	Cp	1,4	1,8	
5	Ts	75,0000	32,9630	
6				
7	(UA)	120		
8	Q	3500,00		
9	ΔT_{ln}	29,1667		
10	f	31,6534584		
11				
12				
13				

Figura: 22

Ya de antemano se ve que 75 °C no es la solución del problema ya que la $f=31,65 \neq 0$. Si bien es posible manipular a mano el valor de la celda B5 hasta hallar la solución, Excel nos ofrece 3 alternativas posibles. La primera es “Busqueda de Objetivos” mediante la cual la herramienta manipula una celda hasta hacer que otra (dependiente de aquella) alcance cierto valor. En nuestro modelo queda:

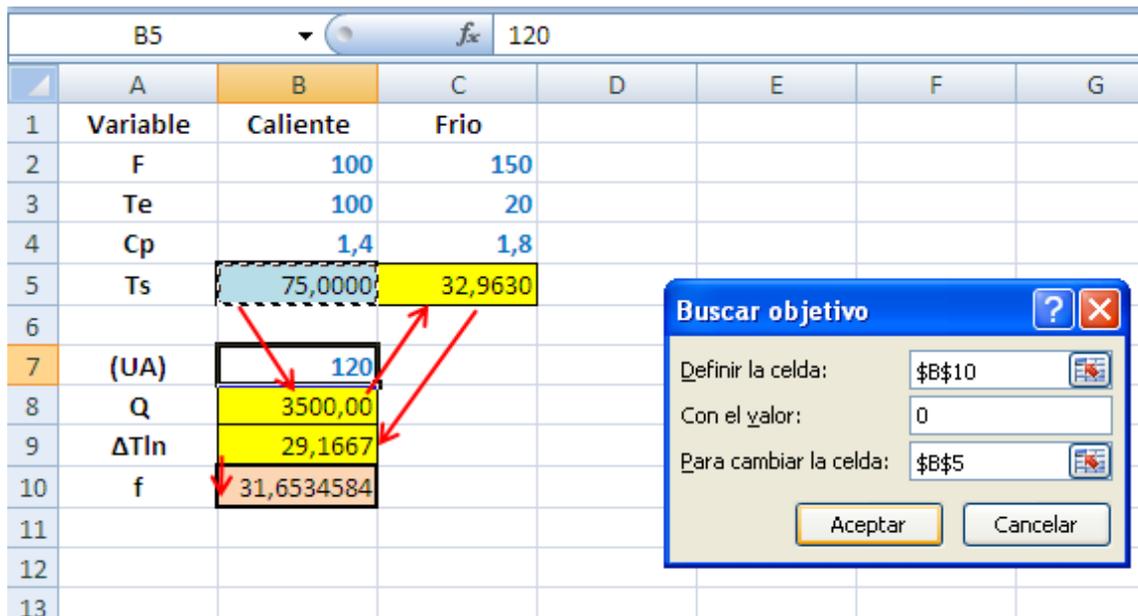


Figura: 23

El cual se resuelve haciendo clic en el botón “Aceptar”. Puede ocurrir que no se alcance la solución en un primer intento debido a que el valor actual está lejos de la solución con lo que el método diverge. En ese caso modificamos el valor de la celda B5 por otro valor, por ejemplo 60 °C. Resolviendo de nuevo nos queda:

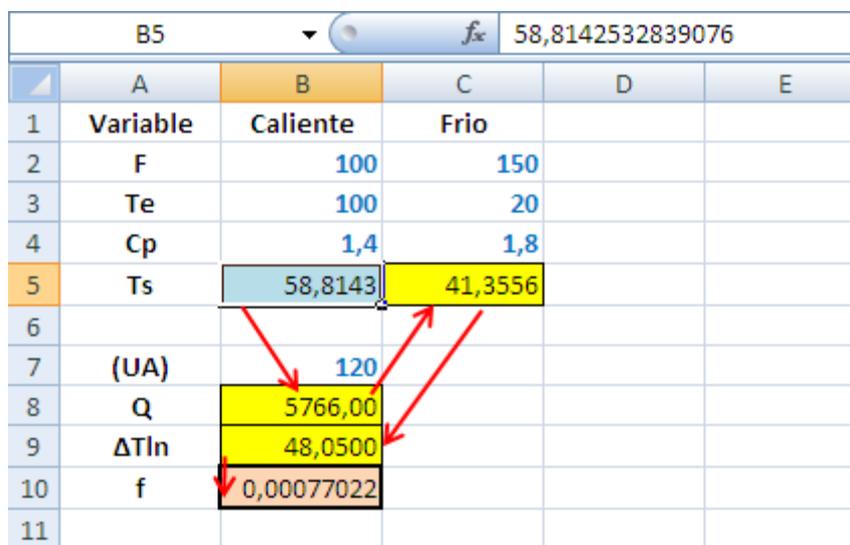


Figura: 24

El segundo método consiste en utilizar la herramienta Solver que se usa principalmente para la optimización, esto es, hallar una solución mínima o máxima de interés. Alternativamente se puede hallar un valor deseado. La ventaja del SOLVER es que se puede configurar en su precisión además de agregar restricciones.

+

Figura: 25

Y resuelto:

		B10 fx =ABS(B9-((B3-C5)-(B5-C3))/LN((B3-C5)/(B5-C3)))					
	A	B	C	D	E	F	G
1	Variable	Caliente	Frio				
2	F	100	150				
3	Te	100	20				
4	Cp	1,4	1,8				
5	Ts	58,8146	41,3554				
6							
7	(UA)	120					
8	Q	5765,95					
9	ΔTln	48,0496					
10	f	4,9166E-05					
11							

Figura: 26

Valores más exactos que los anteriores. Pero como se vio en el primer caso, el usuario no puede controlar lo que la herramienta hace por lo que puede implementar sus propios métodos. Así, aprovechamos el modelo hecho copiándolo a otra página del libro de Excel y le haremos algunos cambios. En primer lugar aplicaremos el **Método de sustitución directa** por lo que reemplazaremos la $f(x)$ por otra que llamaremos $F(x)$. La función $F(x)$ reemplaza a la función $f(x)$ cuya raíz se desea encontrar. Para ello se suma TC_s a ambos miembros por lo que la igualdad no se altera.

$$TC_s = f(TC_s) + TC_s = F(TC_s)$$

Como es obvio, para la raíz TC_s^* , $f(TC_s^*)=0$ por lo que la función anterior se aproxima a TC_s^* . Dicho esto veremos cómo queda conformada la planilla de acuerdo a la figura.

		G2 fx						
	A	B	C	D	E	F	G	H
1	Variable	Caliente	Frio					
2	F	100	150					
3	Te	100	20					
4	Cp	1,4	1,8					
5								
6								
7	(UA)	120						
8								
9								
10								
11								
12	Iteración	TCs	Q	ΔTln	TFS	f	F	
13	0	75,0000	3500,00	29,1667	32,9630	-31,6534584	43,3465	abs(B1-B0)-1e-3
14	1	43,3465	7931,48418	66,0957015	49,3758673	30,85240374	74,1989	31,6525

Figura: 27

En la celda B13 se inicializa la variable TC_s , en C13 se calcula Q, en D13 ΔT_{In} , en E13 la variable TF_s , en la F13 la $f(TC_s)$ y finalmente en la celda G13 la $F(TC_s)$. Adicionalmente en la H13 se compara el error absoluto con un valor tomado como tolerancia. En este caso 0,001. El valor de la celda B14 se obtiene por igualación en el de F13 y en el resto de las celdas se repiten las fórmulas. Por el algoritmo propuesto (**sustitución directa**) el valor de la columna G debería tender al de la columna B. Cabe aclarar que los parámetros en las ecuaciones deberán ser referenciados en forma absoluta. Copiando la fila 14 hacia abajo se llegará a la solución. En este caso se aprecia una oscilación de la solución convergiendo muy lentamente a la misma. En la figura se aprecia esto en forma gráfica.

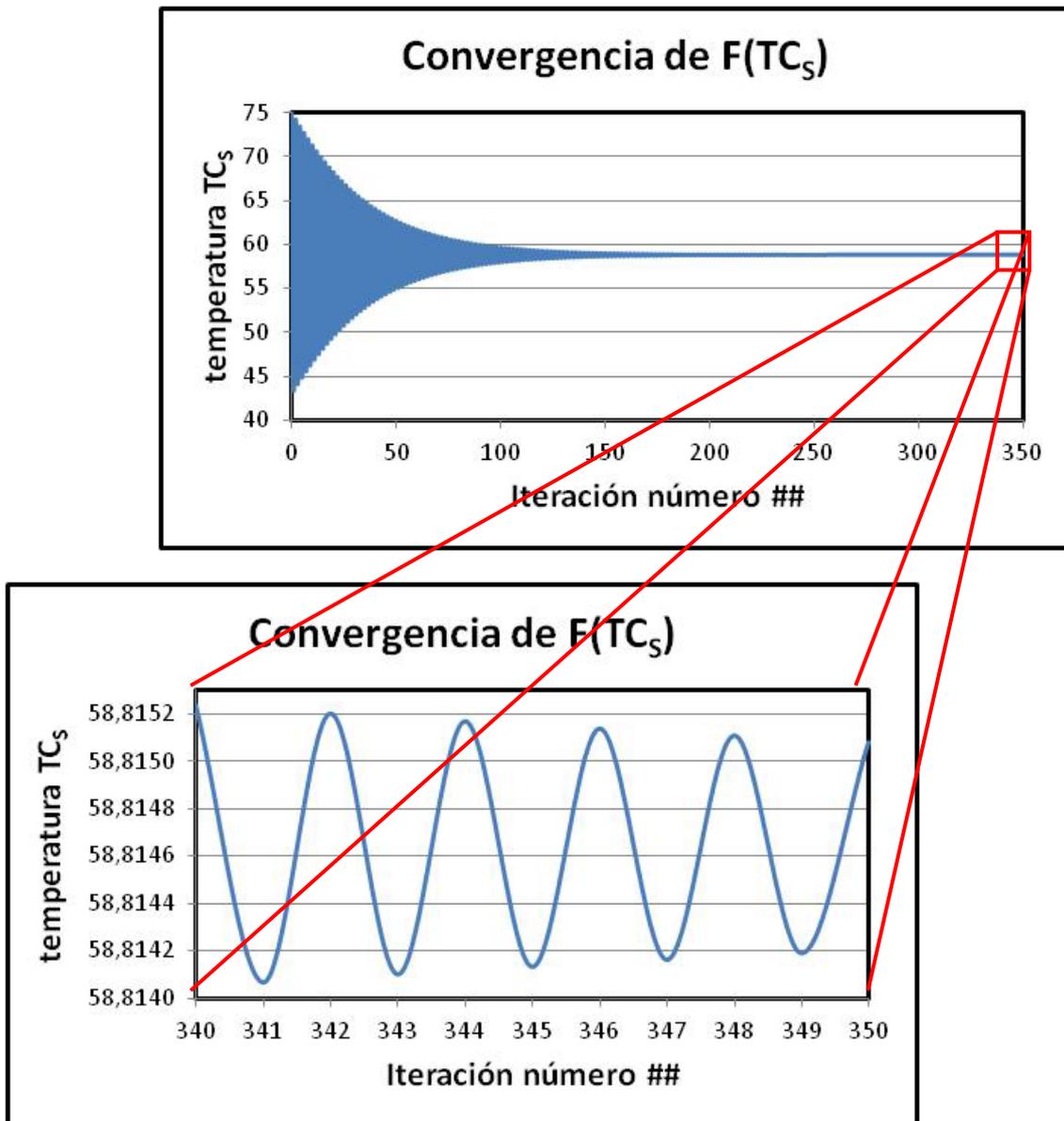


Figura: 28

La segunda figura muestra la convergencia de las últimas iteraciones siendo necesarias 347 de ellas para alcanzar la solución con la tolerancia escogida.

Las soluciones resultantes son:

Q = 5766,01
Tcs = 48,0501
Tfs = 41,3556
Dtln = 48,0501
It = 347

En otra hoja del mismo libro repetiremos el modelo pero utilizando el **Método de Newton-Rahpson**, para lo que haremos uso de la $f(TC_s)$ en lugar de la $F(TC_s)$ y tendremos que calcular la derivada.

En la figura siguiente se aprecia el modelo y se advierte que a pesar que cada iteración requiere duplicar los cálculos (para la función incrementada y la sin incrementar a fin de calcular la derivada numérica) la solución se alcanza con muy pocas iteraciones.

O7												
Variable	Caliente	Frio										
F	100	150										
Te	100	20										
Cp	1,4	1,8										
(UA)	120											
ΔT	1,00E-03											
Iter	TCs	Q	TFS	ΔT_{ln}	f	TCs + ΔT	Q	TFS	ΔT_{ln}	f	der	
0	75,0000	3500,00	32,9630	29,1667	-31,653458	7,50E+01	3499,86	32,9624	29,1655	-31,655403	-1,94E+00	
1	58,7200	5779,20	41,40	48,16	282,11	58,72	5779,06	41,40	48,16	0,18	-281921,93	
2	58,7210	5779,05	41,40	48,16	289,84	58,72	5778,91	41,40	48,16	0,18	-289657,65	
3	58,7220	5778,91	41,40	48,16	289,85	58,72	5778,77	41,40	48,16	0,18	-289669,52	
4	58,7230	5778,77	41,40	48,16	0,18	58,72	5778,63	41,40	48,16	0,18	-1,9703735	
5	58,8146	5765,95	41,36	48,05	290,77	58,82	5765,81	41,35	48,05	0,00	-290768,72	
6	58,8156	5765,81	41,35	48,05	290,78	58,82	5765,67	41,35	48,05	0,00	-290783,07	

Figura: 29

Las soluciones resultantes son:

Q = 5765,81
Tcs = 58,8156
Tfs = 41,3549
Dtln = 48,0484
It = 6

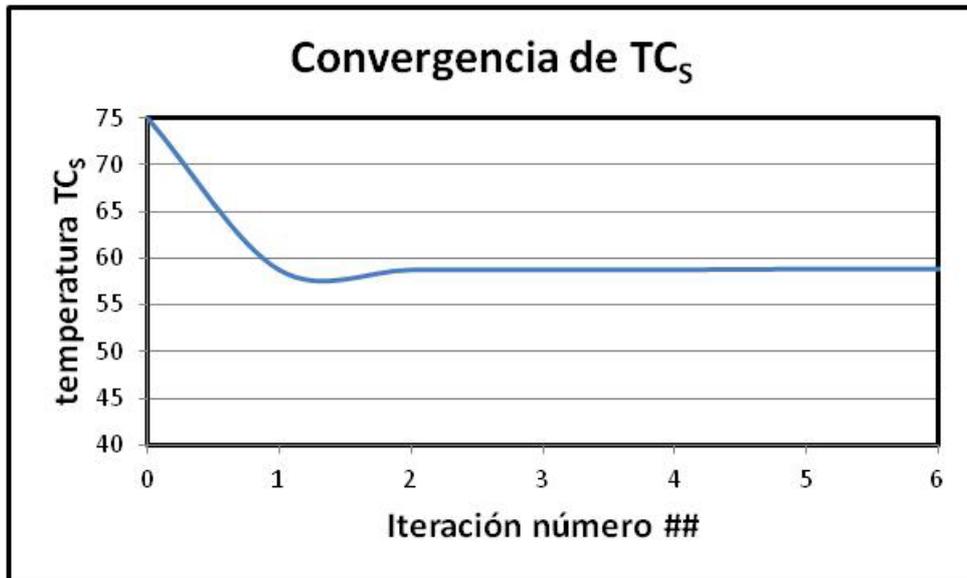


Figura: 30

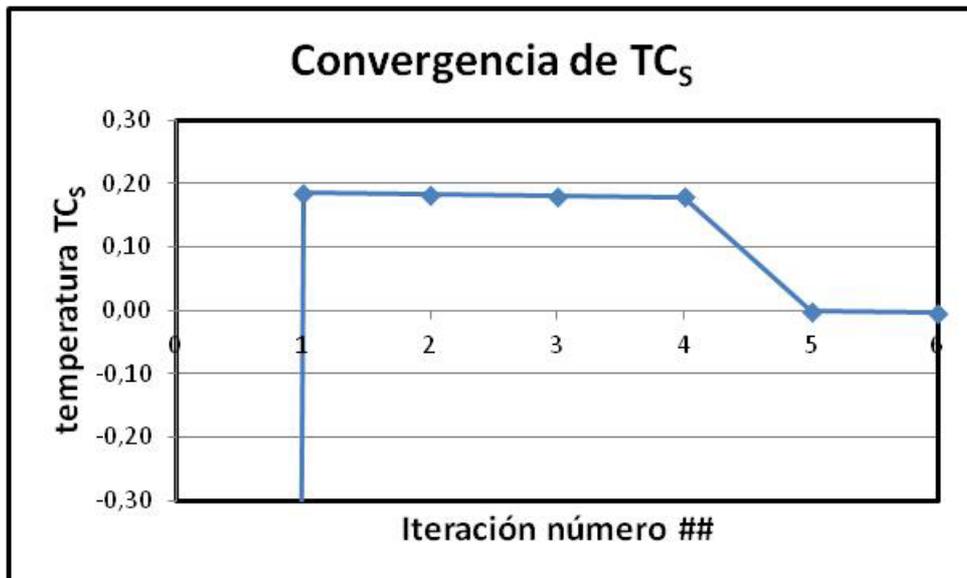


Figura: 31

Implementación con MATLAB.

A continuación un ejemplo de código MATLAB para la $F(TC_s)$ y el **método de sustitución directa** que hallará la solución (ResolSD).

```
function F=F(TCS);
FC=100;
CPC=1.4;
TCE=100;
FF=150;
CPF=1.8;
TFE=20;
UA=120;
Q=FC*CPC*(TCE-TCS)
TFS=(Q+FF*CPF*TFE)/(FF*CPF)
```

```
DTLN=Q/UA
F=DTLN-((TCE-TFS)-(TCS-TFE))/log((TCE-TFS)/(TCS-TFE))+TCS
end
```

```
function ResolSD=ResolSD()
TCS=75;
it=0;
yerro=1;
while yerro>1e-3;
    T1=F(TCS);
    yerro=abs(T1-TCS);
    TCS=T1;
    it=it+1
end
```

Las soluciones resultantes son:

Q = 5765,9
Tcs = 58,8142
Tfs = 41,3551
Dtln = 48,0490
It = 347

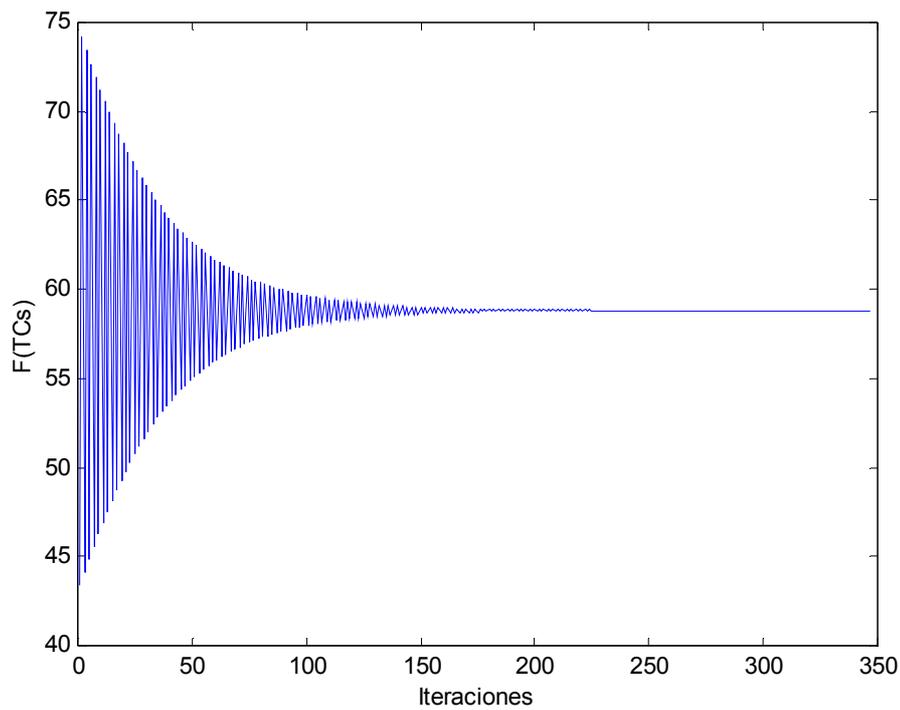


Figura: 32

Haciendo zoom en las últimas iteraciones:

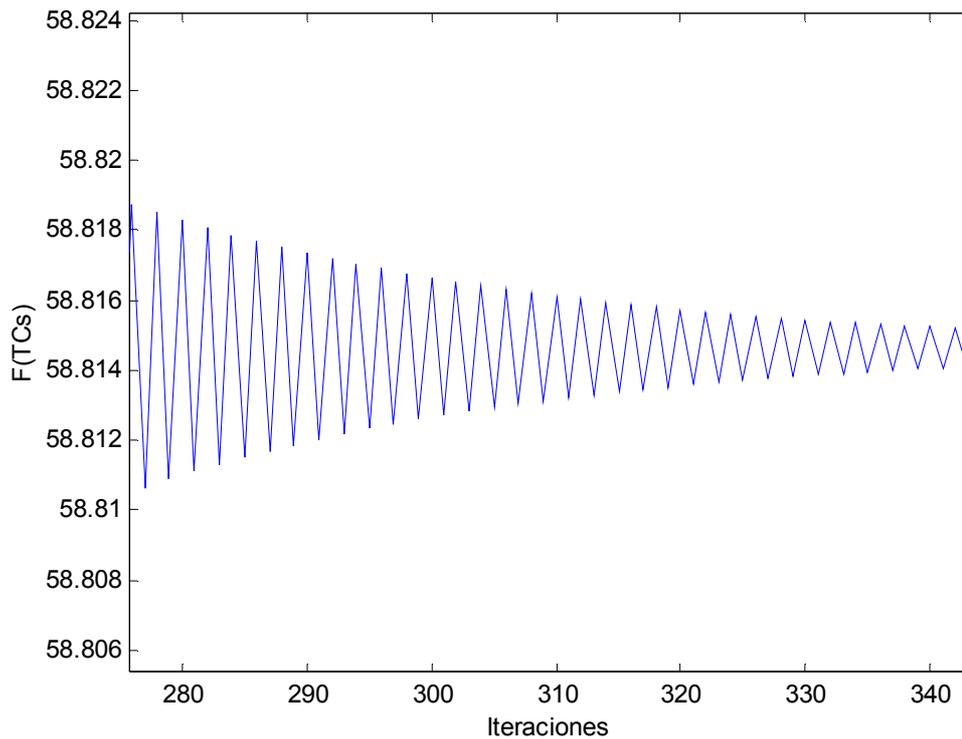


Figura: 33

Al resolverlo por el **Método de Newton-Raphson** se implementan los siguientes códigos:

```
function f0=f0(TCS);
FC=100;
CPC=1.4;
TCE=100;
FF=150;
CPF=1.8;
TFE=20;
UA=120;
Q=FC*CPC*(TCE-TCS)
TFS=(Q+FF*CPF*TFE)/(FF*CPF)
DTLN=Q/UA
f0=DTLN-((TCE-TFS)-(TCS-TFE))/log((TCE-TFS)/(TCS-TFE))
end
```

```
function ResolNR=ResolNR()
TCS=75;
it=0;
yerro=1;
while yerro>1e-3;
    der=(f0(TCS+1e-3)-f0(TCS))/1e-3
    T1=TCS-f0(TCS)/der;
    yerro=abs(T1-TCS);
    TCS=T1
    it=it+1
end
```

Las soluciones resultantes son:

Q = 5766,0
Tcs = 58,8146
Tfs = 41,3554
Dtln = 48,0496
It = 3

O a través del panel de comandos:

```
[TFS,Q,TCS,DTLN]=solve('Q=100*1.4*(100-TCS)', 'Q=150*1.8*(TFS-20)', 'Q=DTLN*120', 'DTLN=((100-TFS)-(TCS-20))/log((100-TFS)/(TCS-20))')
```

Lo que da:

TFS = 48.049581738522020015549713539263

Q = 5765.9498086226424018659656247116

TCS = 58.814644224123982843814531252060

DTLN = 41.355369661565342229133206017450

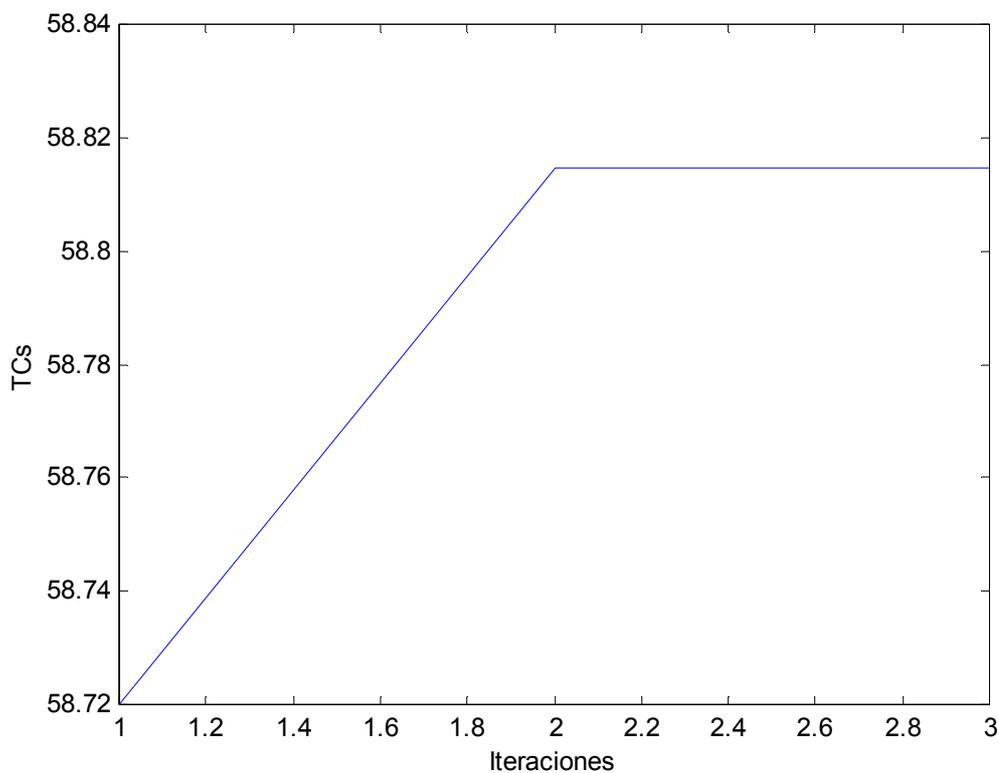


Figura: 34

Implementación con GAMS.

GAMS es un software para la optimización de modelos implementados por usuario. El mismo implica la búsqueda de máximo o mínimo de una determinada función a través de variables, parámetros y funciones que permite establecer la relación entre ellos (modelo) como así de condiciones limitantes de las variables (restricciones). En un modelo como el del intercambiador no existe en realidad una variable a optimizar pero aún así puede establecerse una variable muda con un valor constante. De este modo el resultado final es, ya no la optimización de la variable muda sino la resolución de las ecuaciones del sistema, esto es, el modelo a resolver. A continuación el código implementado en cuestión:

Cabe mencionar la necesidad que hubo de limitar el valor de la variable TCS a la cual se le asignó un límite inferior de 40 no siendo necesario hacerlo en las otras variables (como se muestra en la salida del simulador). A continuación del código se listan las ecuaciones y variables tal como las presenta GAMS. Dichos resultados son consistentes con los anteriores.

- * Balances de Materia y Energía
- * Intercambiador de calor

VARIABLES

Q,muda,TFS,dtln,TCS;

PARAMETERS

FC /100/

CPC /1.4/

TCE /100/

FF /150/

CPF /1.8/

TFE /20/

UA /120/

EQUATIONS

R0,R1,R2,R3,R4;

R0.. muda =E= 3;

R1.. Q =E= CPC*FC*(TCE-TCS);

R2.. Q =E= CPF*FF*(TFS-TFE);

R3.. dtln =E= ((TCE-TFS)-(TCS-TFE))/log((TCE-TFS)/(TCS-TFE));

R4.. Q =E= UA*dtln;

TCS.lo = 40;

MODEL BM /ALL/;

SOLVE BM USING NLP MINIMIZING muda;

Resultados:

	LOWER	LEVEL	UPPER	MARGINAL
---- EQU R0	3.000	3.000	3.000	1.000
---- EQU R1	14000.000	14000.000	14000.000	EPS
---- EQU R2	-5400.000	-5400.000	-5400.000	EPS
---- EQU R3	.	.	.	EPS
---- EQU R4	.	.	.	EPS

	LOWER	LEVEL	UPPER	MARGINAL
---- VAR Q	-INF	5765.950	+INF	.
---- VAR muda	-INF	3.000	+INF	.
---- VAR TFS	-INF	41.355	+INF	.
---- VAR dtIn	-INF	48.050	+INF	.
---- VAR TCS	40.000	58.815	+INF	.

Ejemplo numérico:

Una corriente de gas de 30 Kg/hr cuya composición es de 80 % de metano, 15 % de etano y 5 % de propano (base molar) y 1 atm de presión, se enfría con aire desde 100 °C hasta 40 °C en un intercambiador en contracorriente. Para ello se emplea una corriente de aire frío cuyo flujo es de 100 Kg/hr, 1 atm de presión y una temperatura de 20 °C.

- Calcular la temperatura de salida de la corriente de aire
- Calcular el valor de (UA) y el ΔT_{ln}

Datos:

Comp	$x_i \left[\frac{Kg}{Kmol} \right]$	$Cp_i \left[\frac{Kcal}{^\circ C Kmol} \right] [^\circ C]$
CH_4	16	$8,2 + 1,307 \times 10^{-2} \times t$
C_2H_6	30	$11,8 + 3,326 \times 10^{-2} \times t$
C_3H_8	44	$16,26 + 5,398 \times 10^{-2} \times t$
N_2	28	$6,919 + 0,136 \times 10^{-2} \times t$
O_2	32	$7,129 + 0,1407 \times 10^{-2} \times t$

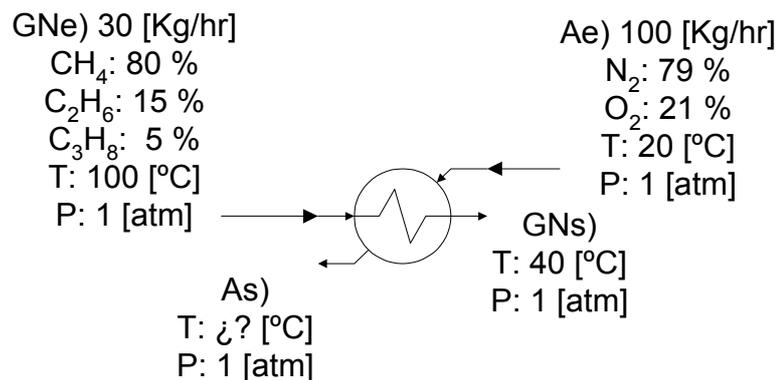


Figura: 35

Solución:

Corriente Caliente)

Comp	$x_i \left[\frac{Kmol}{Kmol} \right]$	$M_i \left[\frac{Kg}{kmol} \right]$	$x_i \times M_i$
CH_4	0,800	16	12,8
C_2H_6	0,150	30	4,5
C_3H_8	0,050	44	2,2
Total	1,000		19,5

Me= 19,5 [Kg/kmol]

$$F_{GN}^E = F_{GN}^S = \frac{30 \left[\frac{Kg}{hr} \right]}{19,5 \left[\frac{Kg}{Kmol} \right]} = 1,538 \left[\frac{Kmol}{hr} \right]$$

Comp	$x_i \left[\frac{Kg}{Kmol} \right]_i$	$Cp_i \left[\frac{Kcal}{^\circ C \text{ Kmole}} \right] [^\circ C]$
CH ₄	0,800	8,2 + 1,307 × 10 ⁻² × t
C ₂ H ₆	0,150	11,8 + 3,326 × 10 ⁻² × t
C ₃ H ₈	0,050	16,26 + 5,398 × 10 ⁻² × t
N ₂	0,000	6,919 + 0,136 × 10 ⁻² × t
O ₂	0,000	7,129 + 0,1407 × 10 ⁻² × t
Total	1,000	9,143 + 1,814 × 10 ⁻² × t

Corriente fría)

Comp	$x_i \left[\frac{Kmol}{Kmol} \right]$	$M_i \left[\frac{Kg}{Kmol} \right]$	$x_i \times M_i$
N ₂	0,790	28	22,12
O ₂	0,210	32	6,72
Total	1,000		28,84

Ma= 28,84 [Kg/Kmol]

$$F_{AIRE}^E = F_{AIRE}^S = \frac{100 \left[\frac{Kg}{hr} \right]}{28,84 \left[\frac{Kg}{Kmol} \right]} = 3,467 \left[\frac{Kmol}{hr} \right]$$

Comp	$x_i \left[\frac{Kg}{Kmol} \right]_i$	$Cp_i \left[\frac{Kcal}{^\circ C \text{ Kmole}} \right] [^\circ C]$
CH ₄	0,0000	8,2 + 1,307 × 10 ⁻² × t
C ₂ H ₆	0,000	11,8 + 3,326 × 10 ⁻² × t
C ₃ H ₈	0,000	16,26 + 5,398 × 10 ⁻² × t
N ₂	0,790	6,919 + 0,136 × 10 ⁻² × t
O ₂	0,210	7,129 + 0,1407 × 10 ⁻² × t
Total	1,000	6,963 + 1,369 × 10 ⁻³ × t

Balances de energía:

$$Q = F_{GN}^E \times (H_{GN}^E - H_{GN}^S)$$

$$Q = F_{AIRE}^E \times (H_{AIRE}^S - H_{AIRE}^E)$$

$$Q = (UA) \times \Delta T \ln$$

$$Q = F_{GN}^E \times \int_{40}^{100} CP_{GN} \times dt = 1,538 \left[\frac{Kmol}{hr} \right] \times \int_{40}^{100} (9,143 + 1,814 \times 10^{-2} \times t) dt = 960,0 \left[\frac{Kcal}{hr} \right]$$

$$Q = F_{AIRE}^E \times \int_{20}^t CP_{AIRE} \times dt = 3,467 \left[\frac{Kmol}{hr} \right] \times \int_{20}^t (6,963 + 1,369 \times 10^{-3} \times t) dt$$

$$Q = 3,467 \times \left[6,963 \times t + \frac{1,369 \times 10^{-3}}{2} \times t^2 \right]_{20}^t$$

$$Q = 3,467 \times \left[6,963 \times (t - 20) + \frac{1,369 \times 10^{-3}}{2} \times (t^2 - 20^2) \right]$$

$$Q = 3,467 \times [6,963 \times t - 6,963 \times 20 + 6,845 \times 10^{-4} \times t^2 - 6,845 \times 10^{-4} \times 20^2]$$

$$Q = 3,467 \times [6,963 \times t - 139,26 + 6,845 \times 10^{-4} \times t^2 - 0,2738]$$

$$Q = 3,467 \times [6,845 \times 10^{-4} \times t^2 + 6,963 \times t - 139,5]$$

$$Q = 2,373 \times 10^{-3} \times t^2 + 24,14 \times t - 483,6$$

$$960,9 = 2,373 \times 10^{-3} \times t^2 + 24,14 \times t - 483,6$$

$$0 = 2,373 \times 10^{-3} \times t^2 + 24,14 \times t - 1444$$

$$t = 59,47 \text{ [}^\circ\text{C]}$$

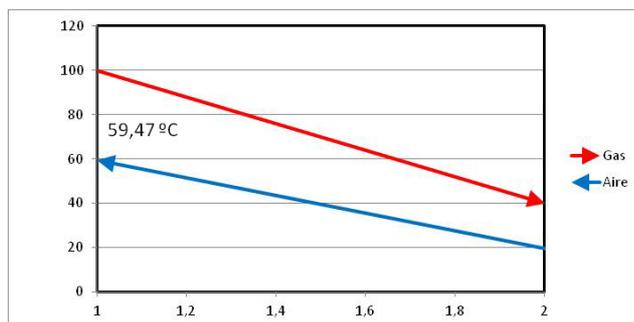


Figura: 36

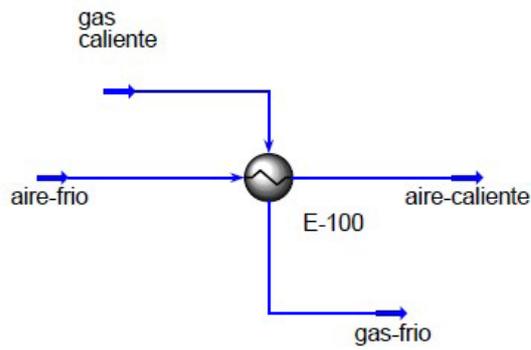
$$\Delta T_{\ln} = \frac{(100 - 59,47) - (40 - 20)}{\ln \frac{100 - 59,47}{40 - 20}} = 29,06 \text{ [}^\circ\text{C]}$$

$$Q = (UA) \times \Delta T_{\ln}$$

$$(UA) = \frac{Q}{\Delta T_{\ln}}$$

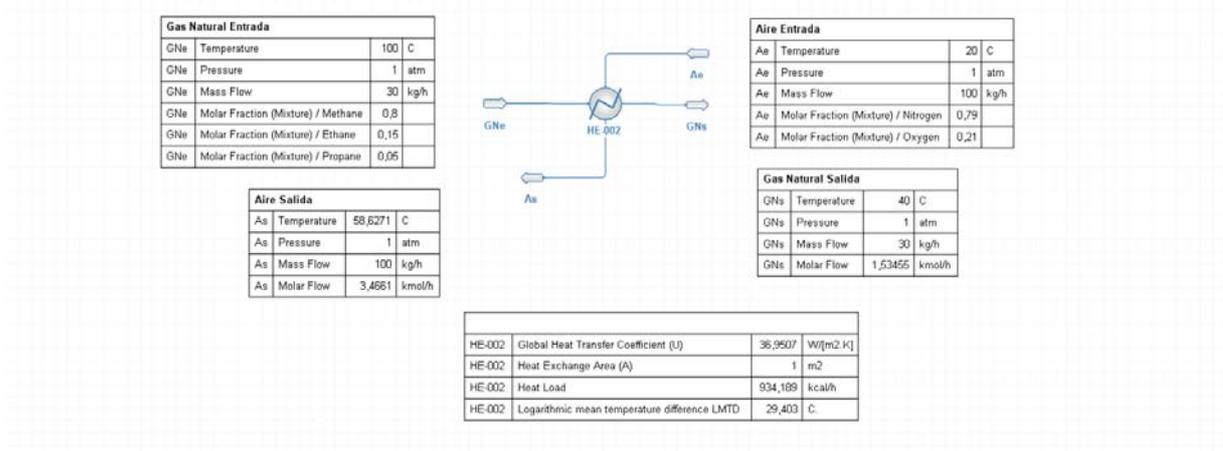
$$(UA) = \frac{960,9 \left[\frac{Kcal}{hr} \right]}{29,06 \text{ [}^\circ\text{C]}} = 33,06 \left[\frac{Kcal}{hr \text{ }^\circ\text{C}} \right]$$

Figura: 37 Resultados en Hysys



E-100		
Duty	952.4	kcal/h
Tube Inlet Temperature	20.00	C
Tube Outlet Temperature	60.04	C
Shell Inlet Temperature	100.0	C
Shell Outlet Temperature	40.00	C
UA	33.03	kcal/C-h
LMTD	28.84	C

Figura: 38 Resultados en dwsim:



Problema preliminar: Una corriente de aire de 4 [kmol/hr] a una presión de 1 atm se calienta desde 30 °C. Para ello se le incorpora 4000 [Kcal/hr]. Si no hay caída de presión, calcular la temperatura de salida.

Comp	x_i	$\left[\frac{\text{Kmol}}{\text{Kmol}} \right]$	M_i	$\left[\frac{\text{Kg}}{\text{Kmol}} \right]$	$x_i \times M_i$
N_2	0,790		28		22,12
O_2	0,210		32		6,72
<i>Total</i>	1,000				28,84

Temp de referencia: 25 °C

Comp	x_i	$Cp_i \left[\frac{\text{Kcal}}{^\circ\text{C Kmol}} \right] [^\circ\text{C}]$	$H_i \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{Kmol}} \right]$
N_2	0,790	$6,919 + 0,136 \times 10^{-2} \times t$	$-173,4 + 6,919 \times t + 6,800 \times 10^{-4} \times t^2$
O_2	0,210	$7,129 + 0,1407 \times 10^{-2} \times t$	$-178,7 + 7,129 \times t + 7,035 \times 10^{-4} \times t^2$
Total	1,000		$-174,5 + 6,963 + 6,849 \times 10^{-4} \times t^2$

$$Q = F_A \times [H_A^S(T_S) - H_A^E(T_E)]$$

$$4000 = 4 \times [(-174,5 + 6,963 \times T_S + 6,849 \times 10^{-4} \times T_S^2) - (-174,5 + 6,963 \times T_E + 6,849 \times 10^{-4} \times T_E^2)]$$

$$4000 = 4 \times [(-174,5 + 6,963 \times T_S + 6,849 \times 10^{-4} \times T_S^2) - (-174,5 + 6,963 \times 30 + 6,849 \times 10^{-4} \times 30^2)]$$

$$4000 = 4 \times [(-174,5 + 6,963 \times T_S + 6,849 \times 10^{-4} \times T_S^2) - (35,00)]$$

$$4000 = [(-698,0 + 27,85 \times T_S + 2,740 \times 10^{-3} \times T_S^2) - (140,0)]$$

$$4000 = -838 + 27,85 \times T_S + 2,740 \times 10^{-3} \times T_S^2$$

$$0 = -4838 + 27,85 \times T_S + 2,740 \times 10^{-3} \times T_S^2$$

$$T_S = 170,8 [^\circ\text{C}]$$

Figura: 39 Resultados en Hysys

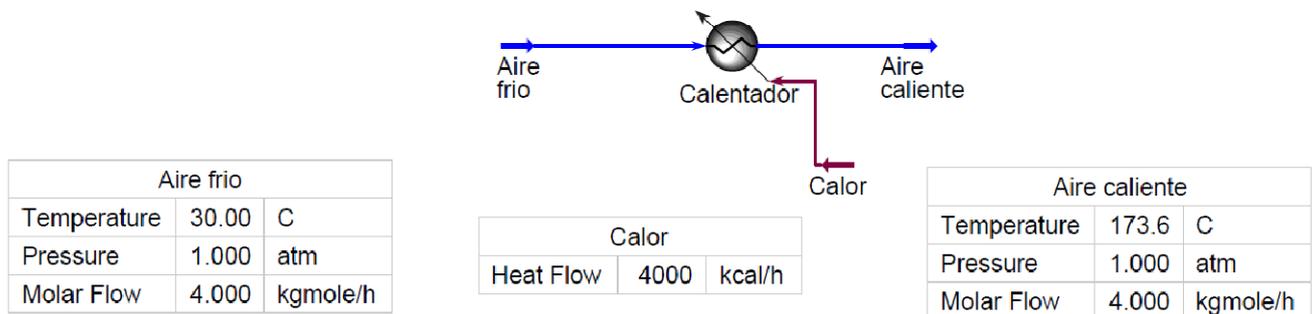


Figura: 40 Resultados en dwsim:



Enfoque generalizado:

Intercambiadores de calor

Aplicación del cambio de entalpía en corrientes.

A partir del Cp de la forma: $Cp = a + b \times t + c \times t^2$

Tomando Tr como temperatura de referencia, calculamos las entalpías:

$$\Delta H(t) = \int_{Tr}^t Cp \times dt = \int_{Tr}^t (a + b \times t + c \times t^2) dt$$

$$\Delta H(t) = \left[a \times t + \frac{b}{2} \times t^2 + \frac{c}{3} \times t^3 \right]_{Tr}^t = a \times (t - Tr) + \frac{b}{2} \times (t^2 - Tr^2) + \frac{c}{3} \times (t^3 - Tr^3)$$

$$\Delta H(t) = a \times t - a \times Tr + \frac{b}{2} \times t^2 - \frac{b}{2} \times Tr^2 + \frac{c}{3} \times t^3 - \frac{c}{3} \times Tr^3$$

$$\Delta H(t) = \left(-a \times Tr - \frac{b}{2} \times Tr^2 - \frac{c}{3} \times Tr^3 \right) + a \times t + \frac{b}{2} \times t^2 + \frac{c}{3} \times t^3$$

$$\Delta H(t) = A + B \times t + C \times t^2 + D \times t^3$$

$$A = - \left(\frac{a}{1} \times Tr + \frac{b}{2} \times Tr^2 + \frac{c}{3} \times Tr^3 \right)$$

$$B = \frac{a}{1}$$

$$C = \frac{b}{2}$$

$$D = \frac{c}{3}$$

Siendo:

De esta manera es fácil pasar de la tabla de Cp's a las de entalpías.

Volviendo al TP nº 1 y tomando 25 °C como temperatura de referencia:

Comp	x_i	$Cp_i \left[\frac{Kcal}{^\circ C \text{ Kmol}} \right] [^\circ C]$	$H_i(t) = \left[\frac{Kcal}{Kmol} \right]$
CH_4	x_1	$8,2 + 1,307 \times 10^{-2} \times t$	$-209,1 + 8,200 \times t + 6,535 \times 10^{-3} \times t^2$
C_2H_6	x_2	$11,8 + 3,326 \times 10^{-2} \times t$	$-305,4 + 11,80 \times t + 1,663 \times 10^{-2} \times t^2$
C_3H_8	x_3	$16,26 + 5,398 \times 10^{-2} \times t$	$-423,4 + 16,26 \times t + 2,699 \times 10^{-4} \times t^2$
N_2	x_4	$6,919 + 0,1360 \times 10^{-2} \times t$	$-173,4 + 6,919 \times t + 6,800 \times 10^{-4} \times t^2$
O_2	x_5	$7,129 + 0,1407 \times 10^{-2} \times t$	$-178,7 + 7,129 \times t + 7,035 \times 10^{-4} \times t^2$
Total	1,000		

Para el gas:

Comp	x_i	$H_i(t) = \left[\frac{Kcal}{Kmol} \right]$	$x_i \times H_i(t)$
CH_4	0,800	$-209,1 + 8,200 \times t + 6,535 \times 10^{-3} \times t^2$	$-167,3 + 6,560 \times t + 5,228 \times 10^{-3} \times t^2$
C_2H_6	0,150	$-305,4 + 11,80 \times t + 1,663 \times 10^{-2} \times t^2$	$-45,81 + 1,770 \times t + 2,495 \times 10^{-3} \times t^2$
C_3H_8	0,050	$-423,4 + 16,26 \times t + 2,699 \times 10^{-2} \times t^2$	$-21,17 + 0,8130 \times t + 1,350 \times 10^{-2} \times t^2$
N_2	0,000	$-173,4 + 6,919 \times t + 6,800 \times 10^{-4} \times t^2$	0
O_2	0,000	$-178,7 + 7,129 \times t + 7,035 \times 10^{-4} \times t^2$	0
Total	1,000		$-234,2 + 9,143 \times t + 9,072 \times 10^{-3} \times t^2$

Para el aire:

Comp	x_i	$H_i(t) = \left[\frac{Kcal}{Kmol} \right]$	$x_i \times H_i(t)$
CH_4	0,000	$-209,1 + 8,200 \times t + 6,535 \times 10^{-3} \times t^2$	0
C_2H_6	0,000	$-305,4 + 11,80 \times t + 1,663 \times 10^{-2} \times t^2$	0
C_3H_8	0,000	$-423,4 + 16,26 \times t + 2,699 \times 10^{-2} \times t^2$	0
N_2	0,790	$-173,4 + 6,919 \times t + 6,800 \times 10^{-4} \times t^2$	$-137,0 + 5,466 \times t + 5,372 \times 10^{-4} \times t^2$
O_2	0,210	$-178,7 + 7,129 \times t + 7,035 \times 10^{-4} \times t^2$	$-37,52 + 1,497 \times t + 1,477 \times 10^{-4} \times t^2$
Total	1,000		$-174,5 + 6,963 \times t + 6,849 \times 10^{-4} \times t^2$

Los flujos, composición y presión de salida son iguales a los de entrada y sólo la temperatura se modifica en ambos fluidos.

Tenemos un sistema de 4 ecuaciones independientes con 4 incógnitas (Q, t_s , $\Delta T \ln$ y (UA)).

$$Q = FC_e \times [HC_E(T_e) - HC_S(T_s)]$$

$$Q = FFe \times [HF_S(t_s) - HF_e(t_e)]$$

$$Q = (UA) \times \Delta T \ln$$

$$\Delta T \ln = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}}$$

Fluido caliente. Ingresa a 100 °C y egresa a 40 °C. Habiendo calculado su PM y su flujo molar correspondiente, el calor que cede es:

$$Q = FC_e \times [HC_E(T_e) - HC_S(T_s)]$$

$$Q = 1,538 \left[\frac{Kmol}{hr} \right] \times [(-234,2 + 9,143 \times 100 + 9,072 \times 10^{-3} \times 100^2) - (-234,2 + 9,143 \times 40 + 9,072 \times 10^{-3} \times 40^2)]$$

$$Q = 1,538 \left[\frac{Kmol}{hr} \right] \times [(770,8) - (146,0)] \left[\frac{Kcal}{Kmol} \right] = 960,9 \left[\frac{Kcal}{Kmol} \right]$$

Fluido frío. Ingresa a 20°C. Sabiendo su PM y su flujo molar, su balance de energía queda:

$$Q = 3,467 \left[\frac{Kmol}{hr} \right] \times [(-174,5 + 6,963 \times t_s + 6,849 \times 10^{-4} \times t_s^2) - (-174,5 + 6,963 \times 20 + 6,849 \times 10^{-4} \times 20^2)]$$

$$Q = 3,467 \times [(-174,5 + 6,963 \times t_s + 6,849 \times 10^{-4} \times t_s^2) - (-174,5 + 139,3 + 0,274)]$$

$$\begin{aligned}
 Q &= 3,467 \times [-139,6 + 6,963 \times ts + 6,849 \times 10^{-4} \times ts^2] \\
 960,9 &= 3,467 \times [-139,6 + 6,963 \times ts + 6,849 \times 10^{-4} \times ts^2] \\
 960,9 &= -483,9 + 24,14 \times ts + 2,375 \times 10^{-3} \times ts^2 \\
 2,375 \times 10^{-3} \times ts^2 + 24,14 \times ts - 1445 &= 0
 \end{aligned}$$

$$ts = 59,51 [^{\circ}C]$$

$$\Delta T \ln = \frac{(100 - 59,51) - (40 - 20)}{\ln \frac{100 - 59,51}{40 - 20}} = 29,05 [^{\circ}C]$$

$$(UA) = \frac{960,9 \left[\frac{Kcal}{hr} \right]}{29,05 [^{\circ}C]} = 33,08 \left[\frac{Kcal}{hr \ ^{\circ}C} \right]$$

Problema Preliminar

Código EMSO

```
#* Balance *#
```

```
using "types";
```

```
FlowSheet Calculo_entalpia
```

PARAMETERS

```
a(2) as Real;  
b(2) as Real;  
c(2) as Real;  
Fe as Real;  
x(2) as Real;  
M(2) as Real;
```

VARIABLES

```
A as Real;  
B as Real;  
C as Real;  
  
Te as Real;  
Hae as Real;  
Me as Real;
```

```
Ts as Real;  
Has as Real;
```

```
Q as Real;
```

EQUATIONS

```
Te=30;  
Me=x(1)*M(1)+x(2)*M(2);  
A=x(1)*a(1)+x(2)*a(2);  
B=x(1)*b(1)+x(2)*b(2);  
C=x(1)*c(1)+x(2)*c(2);  
Hae=A+B*Te+C*Te^2;  
Has=A+B*Ts+C*Ts^2;  
Q=Fe*(Has-Hae);  
Q=4000;
```

SET

```
a(1)=-173.4;  
b(1)=6.919;  
c(1)=6.8e-4;
```

```
a(2)=-178.7;  
b(2)=7.129;
```

c(2)=7.035e-4;

x(1)=0.79;

x(2)=0.21;

M(1)=28;

M(2)=32;

Fe= 4;

INITIAL

GUESS

OPTIONS

TimeStart=0;

TimeEnd=100;

TimeStep=1;

TimeUnit='h';

DAESolver(File="dassl");

Dynamic=false;

End

Resultados:

Variable	Valor
a(1)	-173,4000
a(2)	-178,7000
b(1)	6,9190
b(2)	7,1290
c(1)	0,0007
c(2)	0,0007
Fe	4,0000
x(1)	0,7900
x(2)	0,2100
M(1)	28,0000

Variable	Valor
M(2)	32,0000
A	-174,5130
B	6,9631
C	0,0007
Te	30,0000
Hae	34,9964
Me	28,8400
Ts	170,8320
Has	1035,0000
Q	4000,0000

Trabajo Práctico nº 1: Código EMSO

#* Balance *#

using "types";

FlowSheet Calculo_entalpia

PARAMETERS

a(5) as Real;
b(5) as Real;
c(5) as Real;
FmG as Real;
FmA as Real;
xG(5) as Real;
xA(5) as Real;
M(5) as Real;

VARIABLES

GAS

FG as Real;
AG as Real;
BG as Real;
CG as Real;

TGe as Real;
HGe as Real;
TGs as Real;
HGs as Real;

MG as Real;

AIRE

FA as Real;
AA as Real;
BA as Real;
CA as Real;

MA as Real;
TAe as Real;
HAe as Real;
TAs as Real;
HAs as Real;

Q as Real;
DTIn as positive;
UA as positive;

EQUATIONS

GAS

TGe=100;
TGs=40;
MG=xG(1)*M(1)+xG(2)*M(2)+xG(3)*M(3)+xG(4)*M(4)+xG(5)*M(5);

AG=xG(1)*a(1)+xG(2)*a(2)+xG(3)*a(3)+xG(4)*a(4)+xG(5)*a(5);
BG=xG(1)*b(1)+xG(2)*b(2)+xG(3)*b(3)+xG(4)*b(4)+xG(5)*b(5);
CG=xG(1)*c(1)+xG(2)*c(2)+xG(3)*c(3)+xG(4)*c(4)+xG(5)*c(5);

HGe=AG+BG*TGe+CG*TGe^2;
HGs=AG+BG*TGs+CG*TGs^2;
FG=FmG/MG;

AIRE

TAe= 20;
MA=xA(1)*M(1)+xA(2)*M(2)+xA(3)*M(3)+xA(4)*M(4)+xA(5)*M(5);

AA=xA(1)*a(1)+xA(2)*a(2)+xA(3)*a(3)+xA(4)*a(4)+xA(5)*a(5);
BA=xA(1)*b(1)+xA(2)*b(2)+xA(3)*b(3)+xA(4)*b(4)+xA(5)*b(5);
CA=xA(1)*c(1)+xA(2)*c(2)+xA(3)*c(3)+xA(4)*c(4)+xA(5)*c(5);

HAe=AA+BA*TAe+CA*TAe^2;
HAs=AA+BA*TAs+CA*TAs^2;
FA=FmA/MA;

Balances

Q=FG*(HGe-HGs);
Q=FA*(HAs-HAe);
DTln=((TGe-TAs)-(TGs-TAe))/ln((TGe-TAs)/(TGs-TAe));
Q=UA*DTln;

SET

a(1)=-209.1;
b(1)=8.2;
c(1)=6.535e-3;

a(2)=-305.4;
b(2)=11.80;
c(2)=1.663e-2;

a(3)=-423.4;
b(3)=16.26;
c(3)=2.699e-2;

a(4)=-173.4;
b(4)=6.919;
c(4)=6.8e-4;

a(5)=-177.7;
b(5)=7.129;
c(5)=7.035e-4;

```
xG(1)=0.80;  
xG(2)=0.15;  
xG(3)=0.05;  
xG(4)=0.00;  
xG(5)=0.00;  
xA(1)=0.00;  
xA(2)=0.00;  
xA(3)=0.00;  
xA(4)=0.79;  
xA(5)=0.21;
```

```
M(1)=16;  
M(2)=30;  
M(3)=44;  
M(4)=28;  
M(5)=32;
```

```
FmG=30;  
FmA=100;
```

INITIAL

GUESS

OPTIONS

```
TimeStart=0;  
TimeEnd=100;  
TimeStep=1;  
TimeUnit='h';  
DAESolver(File="dassl");  
Dynamic=false;
```

end

Resultados

Variable	Valor
a(1)	-209,1000
a(2)	-305,4000
a(3)	-423,4000
a(4)	-173,4000
a(5)	-177,7000
b(1)	8,2000
b(2)	11,8000
b(3)	16,2600
b(4)	6,9190
b(5)	7,1290
c(1)	0,0065
c(2)	0,0166
c(3)	0,0270
c(4)	0,0007
c(5)	0,0007
FmG	30,0000
FmA	100,0000
xG(1)	0,8000
xG(2)	0,1500
xG(3)	0,0500
xG(4)	0,0000
xG(5)	0,0000
xA(1)	0,0000
xA(2)	0,0000
xA(3)	0,0000
xA(4)	0,7900
xA(5)	0,2100

Variable	Valor
M(1)	16,0000
M(2)	30,0000
M(3)	44,0000
M(4)	28,0000
M(5)	32,0000
FG	1,5385
AG	-234,2600
BG	9,1430
CG	0,0091
TGe	100,0000
HGe	770,7600
TGs	40,0000
HGs	145,9750
MG	19,5000
FA	3,4674
AA	-174,3030
BA	6,9631
CA	0,0007
MA	28,8400
TAe	20,0000
HAe	-34,7670
TAs	59,5027
HAs	242,4450
Q	961,2070
DTIn	29,0535
UA	33,0841

ANEXO: Operaciones matemáticas de números con errores.

- 1) En la adición y sustracción de cantidades que contienen errores, se suman sus errores absolutos.

Ejemplo: se mezclan 10000 [kg] de un componente (A) con 300 [kg] de la misma sustancia (B). Dadas así las cantidades podemos asumir que en ambos casos el error es de $\pm 0,5$. Entonces:

	Cantidad	error abs
A	10000	0,5
B	300	0,5
Total	10300	1

Es decir 10.300 ± 1 . Si la cantidad b fuera de 300,0 [kg]:

	Cantidad	error abs
A	10000	0,5
B	300,0	0,05
Total	10300	0,55

Vemos que por más que aumentemos la precisión de una de las cantidades el error absoluto no puede ser menor que la menos precisa (A).

- 2) En la multiplicación y división de cantidades que contienen errores se suman sus errores porcentuales.

Ejemplo: una corriente de 10.000 [kg] tiene una entalpía específica de 300 [Kcal/kg]. El flujo de entalpía total será:

	Cantidad	error abs	error relativo
A	10000	0,5	0,005
B	300	0,5	0,16667
Total	3000000	5150	0,17167

Es decir que el resultado estará entre 3.005.150 y 2.994.850 [Kcal] ($3 \times 10^6 \pm 5150$). Si mejoramos el valor de B:

	Cantidad	error abs	error relativo
A	10000	0.5	0.005
B	300.0	0.05	0.01666667
Total	3000000	650	0.02166667

El resultado será ahora más preciso: entre 3.000.650 y 2.999.350 [Kcal] ($3 \times 10^6 \pm 650$). Si mejoramos B en un orden de magnitud más:

	Cantidad	error abs	error relativo
A	10000	0.5	0.005
B	300.00	0.005	0.00166667
Total	3000000	200	0.00666667

Ahora el resultado estará entre 3.000.200 y 2.999.800 ($3 \times 10^6 \pm 200$). Si bien mejora ya no es tan sustancial.

- 3) En la potenciación y radicación de cantidades que contienen errores, los errores porcentuales quedan multiplicados por los exponentes (enteros o fraccionarios). Ejemplo sea una función $Y=f(T) = T^2$. Si la temperatura es de 0 [°C] y optamos por un valor redondeado de 273 [°K] la función valdrá:

	Cantidad	error abs	error relativo
T	273	0,5	0,1832
Total	74.529	273	0,3663

Es decir, el resultado será de $7,4529 \times 10^4 \pm 273$ (entre 74.802 y 74.256). El error es significativo. Tomando un valor de 273,15 [°K] y asumiendo como incierta la parte faltante ($\pm 0,005$) dará ahora.

	Cantidad	error abs	error relativo
T	273.15	0.005	0.0018
Total	74611	3	0.0037

El resultado de $7,461 \times 10^4 \pm 3$ (entre 74.614 y 74.608) es mucho más preciso.

- 4) No obstante rara vez las operaciones son tan sencillas y suelen combinan a las operaciones básicas ya vistas. Así, sea la entalpía del metano:

$$\overline{\Delta H}_i \left[\frac{\text{kcal}}{\text{kmol}} \right] = 5,325 \times 10^{-3} \times T^2 + 6,230 \times T - 2,034 \times 10^4, \quad T \text{ [}^\circ\text{K]}$$

¿Cuál sería la entalpía específica y el error esperado para una temperatura de 313,15 [°K]?

Vemos que por la suma de tres términos deberíamos hallar los errores absolutos de cada uno y sumarlos siguiendo las normas vistas anteriormente, el error del factor T^2 se calcula con la 3ª regla, luego $a \times T^2$ por las 2ª regla:

	Valor	error abs	error relativo
a	5,33E-03	5,00E-07	9,39E-03
T	313,15	0,0050	1,60E-03
T ²	98.063	3,1315	3,19E-03
Total	522,19	0,0657	1,26E-02

Para el 2º término (bxT) se aplica la 2ª regla:

	Valor	error abs	error relativo
b	6,230	0,0005	8,03E-03
T	313,15	0,0050	1,60E-03
Total	1950,92	0,19	9,62E-03

Para el error total se aplica la 1ª regla (suma de errores absolutos):

	Valor	error abs	error relativo
c	-2,034E+04	5,0000	-2,46E-02
Total	-1,7867E+04	5,2534	-2,94E-02

El resultado es $-1,7867 \times 10^4 \pm 5,2534$ [Kcal] en lugar de $-1,78669 \times 10^4$ [Kcal] (entre $-1,7862 \times 10^4$ y $-1,7872 \times 10^4$) ya que sumar más cifras significativas no aportan información veraz.

- 5) Calcular el flujo molar de una corriente de agua de 100 [kg/hr]. El peso molecular del agua es 18,05 [kg/kmol]:

Normalmente sería tentador poner;

Variable	Valor	Unidad
F	100	[kg/hr]
M	18,05	[kg/kmol]
Fm	5,5401662	[kmol/hr]

Variable	Valor	Error abs	Error relativo
F	100	0,5	5,00E-01
M	18,05	0,005	2,77E-02
Fm=F/M	5,540	0,03	5,28E-01

Dando entre 5,57 y 5,51 ($5,54 \pm 0,03$). Así pues vemos que el error $\pm 0,03$ hace que el resto de las cifras deban ser desechadas.

Más erróneo es aun cuando por razones de “comodidad” se redondean pesos atómicos y moleculares pero después, y sin fundamento, se agrega una cantidad exagerada de cifras significativas mismas que se perdieron durante el primer truncamiento y debido al error intrínseco de los datos. Si tomamos 18 como peso molar del agua vemos:

Variable	Valor	Unidad
F	100	[kg/hr]
M	18	[kg/kmol]
Fm	5,5555556	[kmol/hr]

Variable	Valor	Error abs	Error relativo
F	100	0,5	5,00E-01
M	18	0,5	2,78E+00
Fm=F/M	5,56	0,18	3,28E+00

Dando un resultado entre 5,74 y 5,37 ($5,56 \pm 0,18$) bastante más alejado que en el caso anterior.