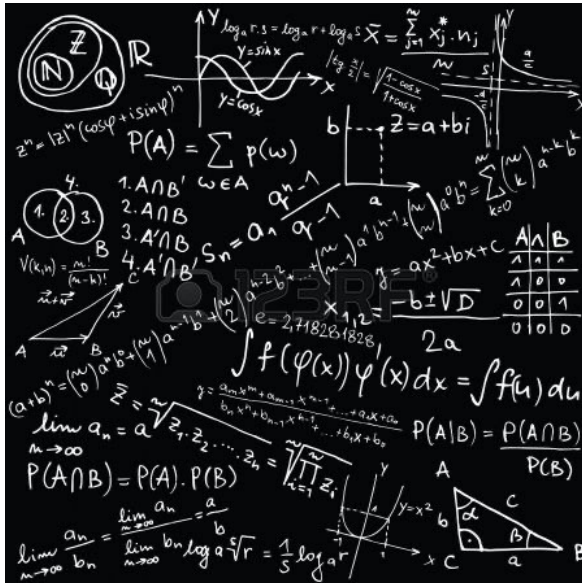


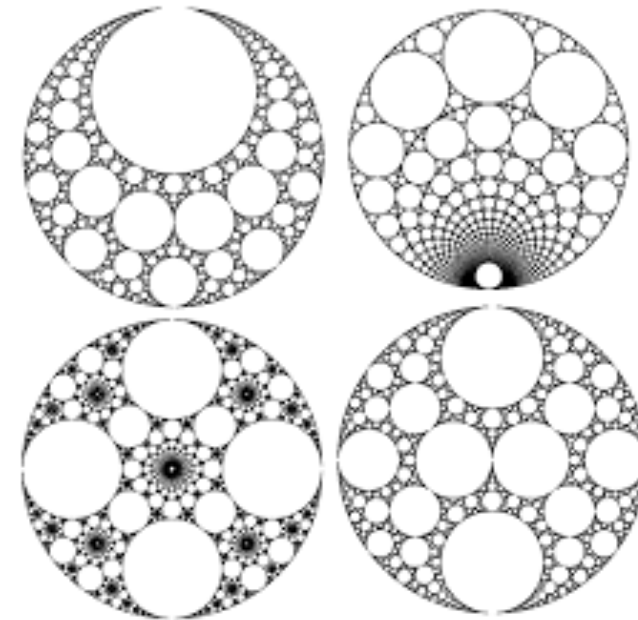
MODELADO MATEMÁTICO Y SIMULACIÓN I

1-90746

Unidad I: Introducción al modelado y simulación de procesos



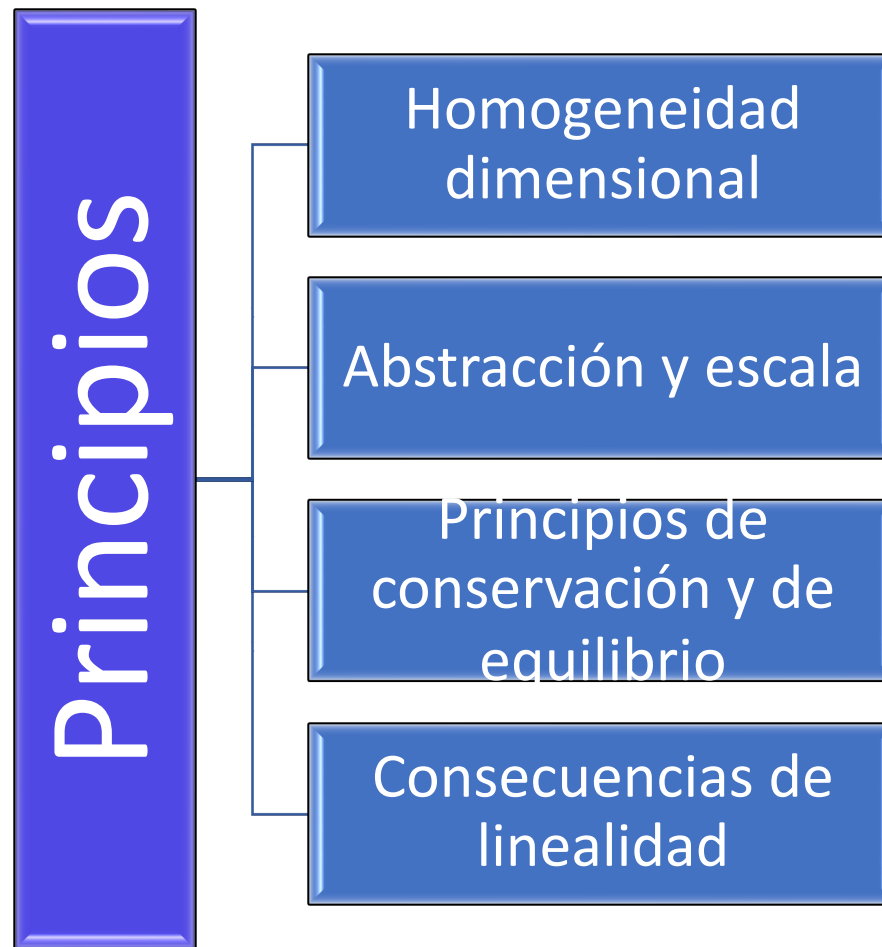
$$v_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \frac{\delta J[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} + \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} + v(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} + v(\mathbf{r}).$$



Portoviejo, Octubre 2023

1.2.- Principios de conservación y leyes constitutivas

Principios del modelado matemático



1.2.- Principios de conservación y leyes constitutivas

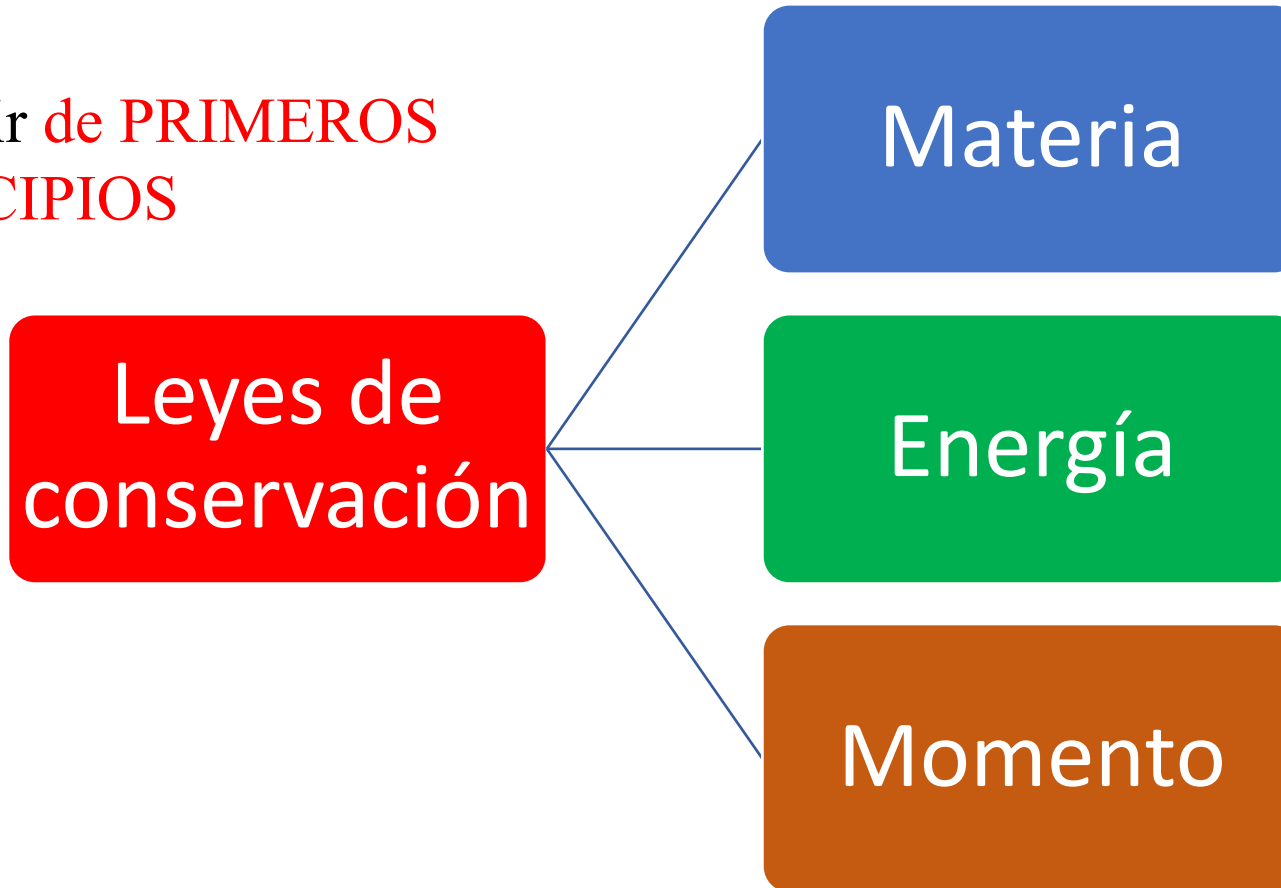
Lo que debe asegurar cada principio

- 1.- Que todas las ecuaciones sean **dimensionalmente homogéneas**.
- 2.- Que el **nivel de detalle** del problema y los **aspectos representados** sean **suficientes** para lo que se quiere estudiar.
- 3.- Que la **escala** que se utiliza sea la **adecuada**.
- 4.- Que las **propiedades** fundamentales del sistema y su **equilibrio** se **conserven**.
- 5.- Que la **linealidad** se aplique siempre que sea posible.

1.2.- Principios de conservación y leyes constitutivas

**Desarrollo de modelos CUANTITATIVOS (conceptuales)
DETERMINISTAS.**

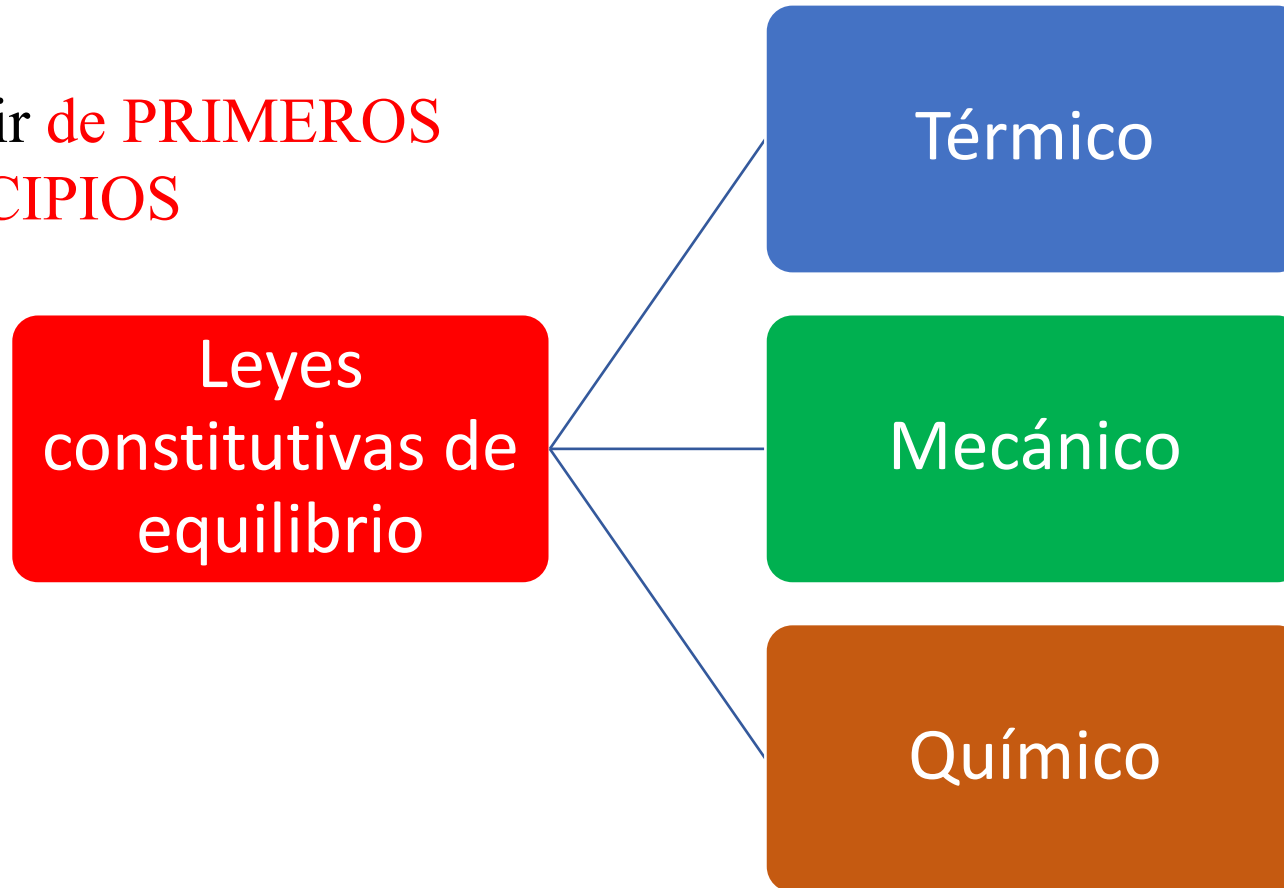
Modelado a partir de **PRIMEROS
PRINCIPIOS**



1.2.- Principios de conservación y leyes constitutivas

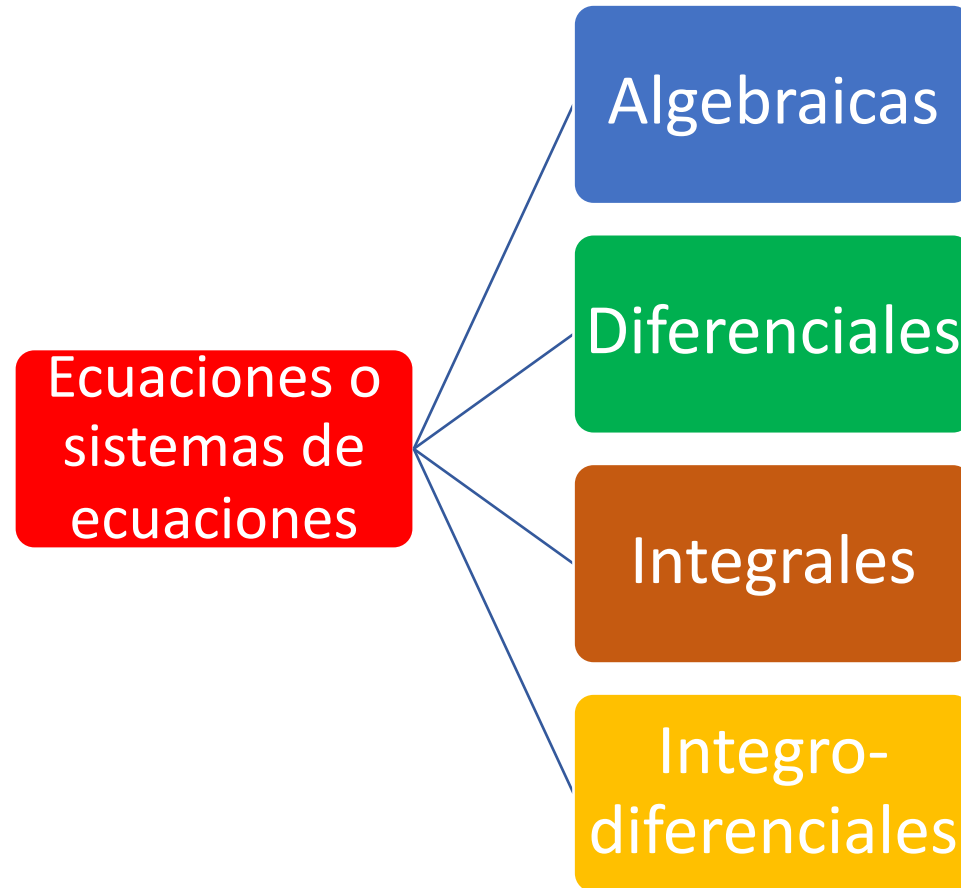
**Desarrollo de modelos CUANTITATIVOS (conceptuales)
DETERMINISTAS.**

Modelado a partir de **PRIMEROS
PRINCIPIOS**



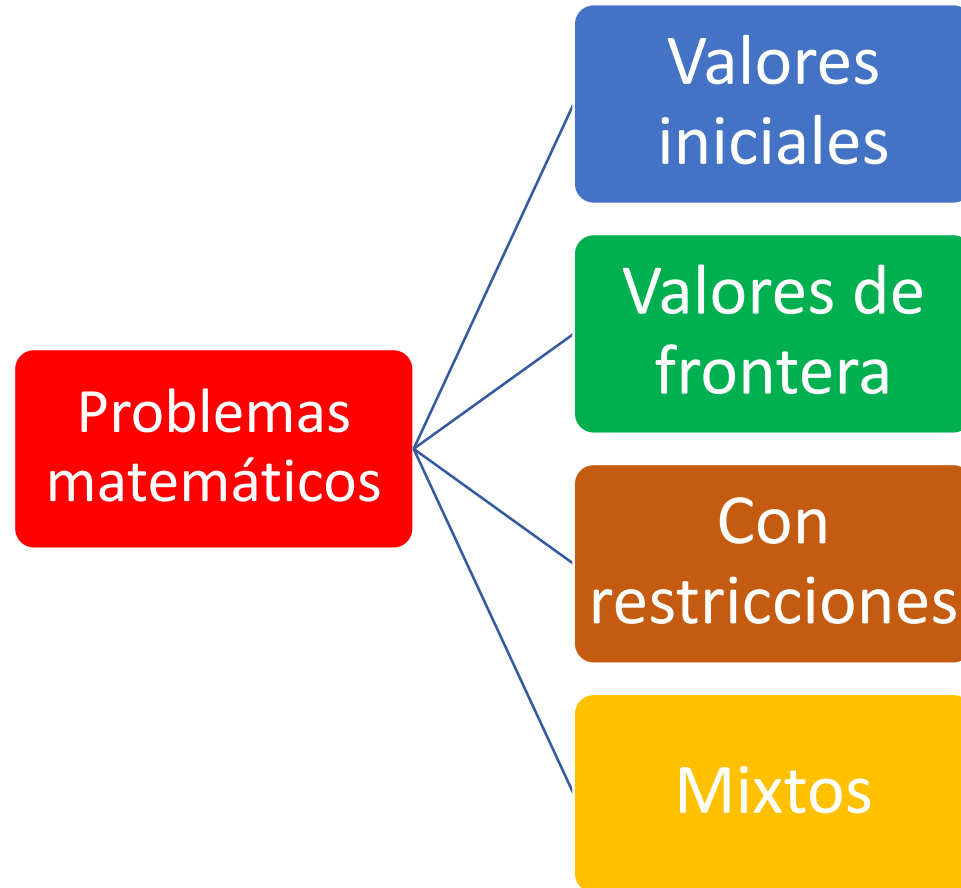
1.2.- Principios de conservación y leyes constitutivas

**Desarrollo de modelos CUANTITATIVOS (conceptuales)
DETERMINISTAS.**



1.2.- Principios de conservación y leyes constitutivas

**Desarrollo de modelos CUANTITATIVOS (conceptuales)
DETERMINISTAS.**



1.2.- Principios de conservación y leyes constitutivas

Modelado a partir de PRIMEROS PRINCIPIOS

Hangos, K., and Cameron, I. (2001). *Process Modelling and Model Analysis*. Academic Press.

Dado:

- Un sistema.
- Un objetivo para el modelado.
- Un criterio de validación.

Encontrar:

- Un modelo matemático para el sistema.

De acuerdo a:

- Un método objetivo y racional.

1.2.- Principios de conservación y leyes constitutivas

Modelado a partir de PRIMEROS PRINCIPIOS

Sistematización del método:

- 1.- Definición del sistema.
- 2.- Definición de las constantes, variables y parámetros característicos del sistema.
- 3.- Establecimiento de suposiciones para simplificar algunas características del sistema poco relevantes.
- 4.- Establecimiento de las ecuaciones de balance.
- 5.- Introducción de las leyes o ecuaciones constitutivas.
- 6.- Verificación de los grados de libertad del modelo.

1.2.- Principios de conservación y leyes constitutivas

Modelado a partir de PRIMEROS PRINCIPIOS

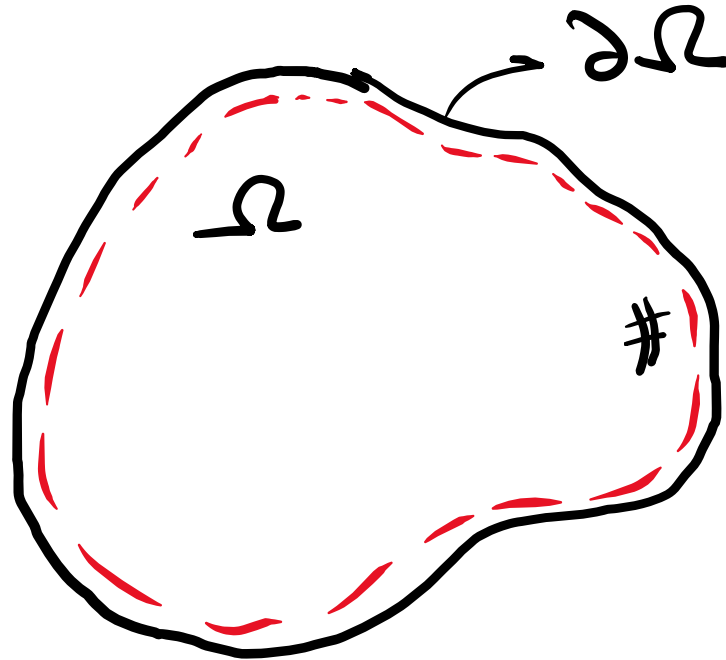
Sistematización del método:

- 1.- Definición del sistema.
- 2.- Definición de las constantes, variables y parámetros característicos del sistema.
- 3.- Establecimiento de suposiciones para simplificar algunas características del sistema poco relevantes.
- 4.- Establecimiento de las ecuaciones de balance.
- 5.- Introducción de las leyes o ecuaciones constitutivas.
- 6.- Verificación de los grados de libertad del modelo.

1.2.- Principios de conservación y leyes constitutivas

Principios de Conservación

- 1.- Se basan en los PRINCIPIOS FISICOS.
- 2.- Se establecen sobre el sistema de interés visto como un conjunto del espacio-ambiente.

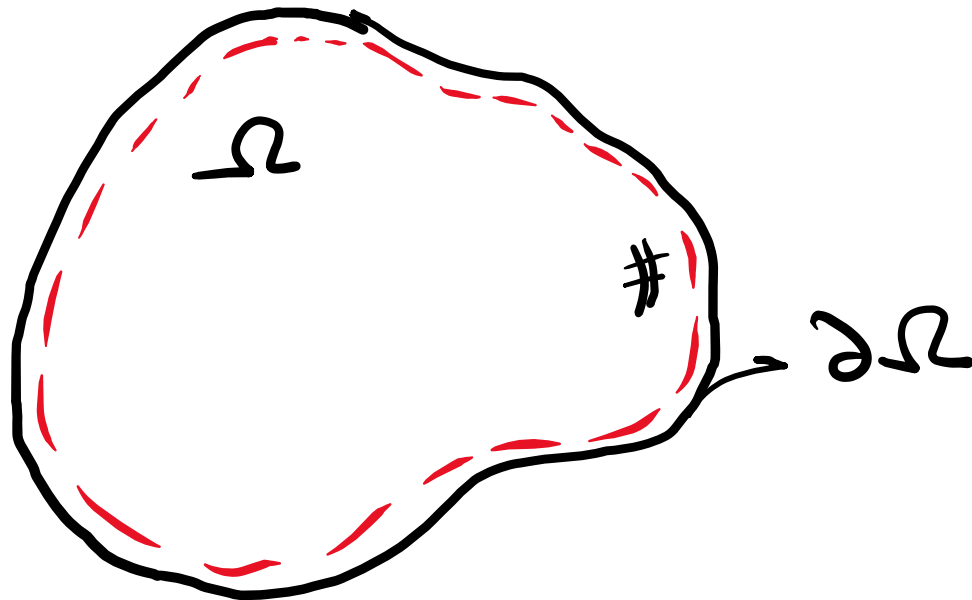


1.2.- Principios de conservación y leyes constitutivas

Principios de Conservación

3.- Se establecen mediante el BALANCE DINÁMICO.

$$\left(\begin{array}{l} \text{CAMBIO NETO en el tiempo} \\ \text{de la CANTIDAD } \textcolor{red}{DENTRO} \text{ de } \Omega \end{array} \right) = \left(\begin{array}{l} \text{Lo que } \textcolor{red}{ENTRA} \\ \text{de la CANTIDAD por } \partial\Omega \end{array} \right) - \left(\begin{array}{l} \text{Lo que } \textcolor{red}{SALE} \\ \text{de la CANTIDAD por } \partial\Omega \end{array} \right)$$



$$+ \left(\begin{array}{l} \text{GENERACIÓN NETA} \\ \text{de la CANTIDAD } \textcolor{red}{DENTRO} \text{ de } \Omega \end{array} \right)$$

1.2.- Principios de conservación y leyes constitutivas

Principios de Conservación

3.- Se establecen mediante el BALANCE DINÁMICO.

$$\left(\begin{array}{c} \textbf{Tasa de ACUMULACIÓN} \\ \text{de la CANTIDAD } \textbf{DENTRO} \text{ de } \Omega \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \textbf{FLUJO NETO} \\ \text{de la CANTIDAD por } \partial\Omega \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \textbf{GENERACIÓN NETA} \\ \text{de la CANTIDAD } \textbf{DENTRO} \text{ de } \Omega \end{array} \right)$$

$$\left(\begin{array}{c} \textbf{FLUJO NETO} \\ \text{de la CANTIDAD por } \partial\Omega \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{Lo que } \textbf{ENTRA} \\ \text{de la CANTIDAD por } \partial\Omega \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{Lo que } \textbf{SALE} \\ \text{de la CANTIDAD por } \partial\Omega \end{array} \right)$$

$$\left(\begin{array}{c} \textbf{GENERACIÓN NETA} \\ \text{de la CANTIDAD } \textbf{DENTRO} \text{ de } \Omega \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{Lo que se } \textbf{PRODUCE} \\ \text{de la CANTIDAD en } \Omega \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{Lo que } \textbf{CONSUME} \\ \text{de la CANTIDAD en } \Omega \end{array} \right)$$

1.2.- Principios de conservación y leyes constitutivas

Principios de Conservación

4.- Ley de conservación de la MASA.

$$\left(\begin{array}{c} \text{Tasa de } \textbf{ACUMULACIÓN} \text{ de} \\ \text{la } \textbf{MASA} \text{ en el sistema} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \textbf{FLUJO NETO} \\ \text{de } \textbf{MASA} \text{ por la} \\ \text{frontera del sistema} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \textbf{GENERACIÓN NETA} \\ \text{de } \textbf{MASA DENTRO} \text{ del sistema} \end{array} \right)$$

$$\left(\begin{array}{c} \textbf{FLUJO NETO} \\ \text{de } \textbf{MASA} \text{ por la} \\ \text{frontera del sistema} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{Lo que } \textbf{ENTRA} \\ \text{de } \textbf{MASA} \text{ por la} \\ \text{frontera del sistema} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{Lo que } \textbf{SALE} \\ \text{de la } \textbf{MASA} \text{ por la} \\ \text{frontera del sistema} \end{array} \right)$$

$$\left(\begin{array}{c} \textbf{GENERACIÓN NETA} \\ \text{de } \textbf{MASA DENTRO} \text{ del sistema} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{Lo que se } \textbf{PRODUCE} \\ \text{de } \textbf{MASA} \text{ dentro} \\ \text{del sistema} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{Lo que } \textbf{CONSUME} \\ \text{de MASA dentro} \\ \text{del sistema} \end{array} \right)$$

1.2.- Principios de conservación y leyes constitutivas

Principios de Conservación

5.- Ley de conservación de la MASA por componentes en una mezcla.

$$\left(\begin{array}{l} \text{Tasa de } \textbf{ACUMULACIÓN} \text{ del} \\ \textbf{COMPONENTE} \text{ en el sistema} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{l} \textbf{FLUJO NETO} \\ \text{del } \textbf{COMPONENTE} \text{ por la} \\ \text{frontera del sistema} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{l} \textbf{GENERACIÓN NETA} \\ \text{deL } \textbf{COMPONENTE} \\ \textbf{DENTRO} \text{ del sistema} \end{array} \right)$$

$$\left(\begin{array}{l} \textbf{FLUJO NETO} \\ \text{del } \textbf{COMPONENTE} \text{ por la} \\ \text{frontera del sistema} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{l} \text{Lo que } \textbf{ENTRA} \\ \text{del } \textbf{COMPONENTE} \text{ por la} \\ \text{frontera del sistema} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{l} \text{Lo que } \textbf{SALE} \\ \text{del } \textbf{COMPONENTE} \text{ por la} \\ \text{frontera del sistema} \end{array} \right)$$

$$\left(\begin{array}{l} \textbf{GENERACIÓN NETA} \\ \text{del } \textbf{COMPONENTE} \\ \textbf{DENTRO} \text{ del sistema} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{l} \text{Lo que se } \textbf{PRODUCE} \\ \text{del } \textbf{COMPONENTE} \\ \text{dentro} \\ \text{del sistema} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{l} \text{Lo que } \textbf{CONSUME} \\ \text{del } \textbf{COMPONENTE} \\ \text{dentro} \\ \text{del sistema} \end{array} \right)$$

1.2.- Principios de conservación y leyes constitutivas

Principios de Conservación

Matematización del BALANCE DE MASA GLOBAL

$$\left(\begin{array}{c} \text{Tasa de } \textcolor{red}{ACUMULACIÓN} \text{ de} \\ \text{la } \textcolor{red}{MASA} \text{ en el sistema} \end{array} \right) = \frac{dM}{dt}$$

$M(t)$: Masa total de sistema (kg)

$$\left(\begin{array}{c} \text{Lo que } \textcolor{red}{ENTRA} \\ \text{de } \textcolor{red}{MASA} \text{ por la} \\ \text{frontera del sistema} \end{array} \right) = \dot{m}_{en}$$

$\dot{m}_{en}(t)$: Flujo de masa que entra al sistema (kg/s)

$$\left(\begin{array}{c} \text{Lo que } \textcolor{red}{SALE} \\ \text{de la } \textcolor{red}{MASA} \text{ por la} \\ \text{frontera del sistema} \end{array} \right) = \dot{m}_{sa}$$

$\dot{m}_{sa}(t)$: Flujo de masa que sale del sistema s (kg/s)

1.2.- Principios de conservación y leyes constitutivas

Principios de Conservación

Matematización del BALANCE DE MASA GLOBAL

Por otro lado:

$$M(t) = V(t)\rho(t)$$

donde:

$V(t)$: Volumen del sistema (m^3)

$\rho(t)$: Densidad de la masa en el sistema (kg/m^3)

entonces:

$$\left(\begin{array}{c} \text{Tasa de } \textcolor{red}{ACUMULACIÓN} \text{ de} \\ \text{la } \textcolor{red}{MASA} \text{ en el sistema} \end{array} \right) = \frac{dM}{dt} = \frac{d(V\rho)}{dt} = \rho \frac{dV}{dt} + V \frac{d\rho}{dt}$$

1.2.- Principios de conservación y leyes constitutivas

Principios de Conservación

Matematización del BALANCE DE MASA GLOBAL

$$\rho \frac{dV}{dt} + V \frac{d\rho}{dt} = F_{en}\rho_{en} - F_{sa}\rho_{sa}$$

1.2.- Principios de conservación y leyes constitutivas

Principios de Conservación

Matematización del BALANCE DE MASA POR COMPONENTES de una mezcla

$$C_i \frac{dV}{dt} + V \frac{dC_i}{dt} = F_{en} C_{i,en} - F_{sa} C_{i,sa} + g_i$$

donde:

$C_i(t)$: Concentración del i -ésimo componente dentro del sistema (mol/m³)

$C_{i,en}(t)$: Concentración del i -ésimo componente en la corriente de entrada al sistema (mol/m³)

$C_{i,sa}(t)$: Concentración del i -ésimo componente en la corriente de salida del sistema (mol/m³)

$g_i(t)$: Producción del i -ésimo componente dentro del sistema (mol/s)