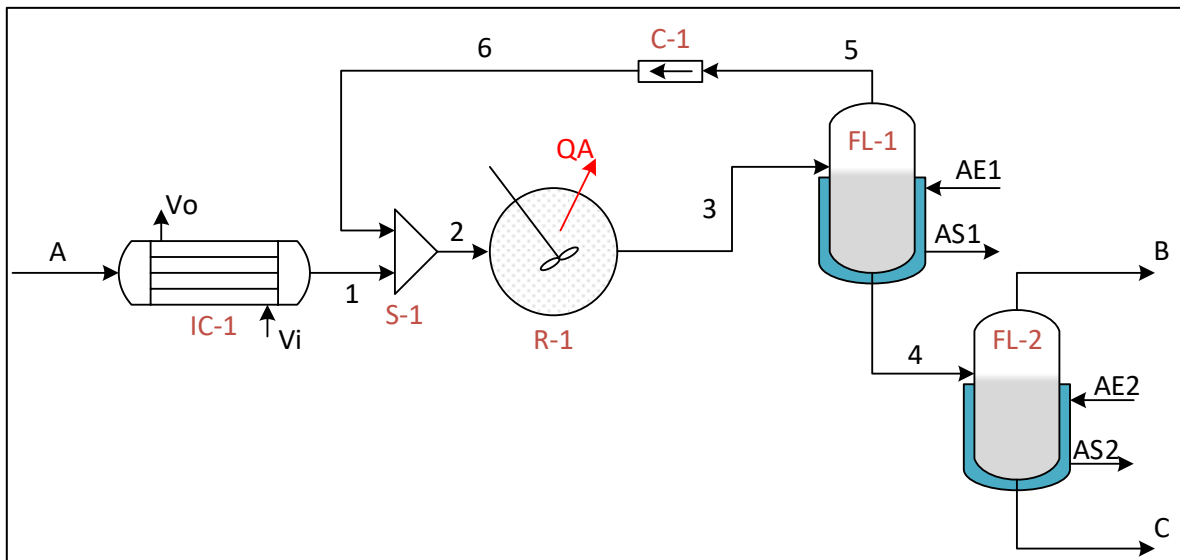


Integración IV - 2022

Ejemplo de Modelado de Equipos de una Planta según la Filosofía Modular Secuencial - III

Se propone:

- Elaborar bajo la filosofía modular secuencial los modelos matemáticos que representan el comportamiento en estado estacionario de los equipos incluidos en el proceso de la figura.
- A partir de las hipótesis planteadas, definir para cada uno de los equipos una secuencia de resolución en la que quede/n especificada/s su/s corriente/s de salida (fracción vaporizada, temperatura, presión, flujo y composición).
- Encontrar la secuencia de resolución del proceso completo y el número de corrientes de corte necesarias.



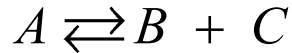
Flowsheet

Profesor Titular: *Dr. Ing. Qco. Nicolás J. Scenna*
Jefe de Trabajos Prácticos: *Dr. Ing. Qco. Néstor H. Rodríguez*
Ayudante de Primera: *Dr. Ing. Qco. Juan Ignacio Manassaldi*

Datos y Conjunto de Hipótesis:

A) Reactor R-1

- Con reacciones químicas en fase gaseosa cuya cinética es:



- La cinética de la reacción es conocida.

$$r_A = -k_D p_A + k_I p_B p_C$$

- Reactor Mezcla completa y presión de operación conocida (P_R)
- Los coeficientes cinéticos son conocidos ya que son función de la temperatura (funcional tipo Arrhenius).
- Pierde calor al ambiente con $(UA)_{R1}$ conocido.
- La temperatura ambiente es T_{Amb} y se mantiene constante.

B) Flashes: Fl-1 y Fl-2

- Refrigerados con de agua de enfriamiento.
- Sin reacción química. Equilibrio no ideal en la fase líquida. Presiones conocidas.
- $(UA)_{FL1}$ y $(UA)_{FL2}$ conocidos.

C) Evaporador: IC-1

- Sin reacción química.
- Vaporiza la alimentación hasta su punto de saturación.
- V_o : Considerar mezcla líquido-vapor.

D) Compresor: C-1

- Eleva la presión de la recirculación (ΔP_C conocido).
- No hay cambio en otras propiedades incluyendo cambio de estado (solo eleva la presión, despreciar su modelado riguroso).

E) Sumador: S-1

- Adiabático, sin reacción química ni cambio de fase.

F) Corrientes

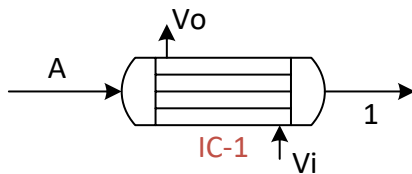
- A : Corriente de A de temperatura, presión y flujo conocidos.
- V_i : Corriente de vapor de agua saturado de temperatura, presión y flujo conocidos.
- Corrientes de agua de enfriamiento AE_1 y AE_2 de flujo, temperatura y presión conocidas.

Nota: Asuma toda otra hipótesis que considere necesaria para el modelado de los equipos y el proceso completo.

Modelos Matemáticos

Evaporador

Al adoptar la filosofía de simulación modular secuencial asumimos que las corrientes de entrada A y V_i están perfectamente definidas.



Balace de Materia global

$$m_{V_i} - m_{V_o} = 0$$

$$m_A - m_1 = 0$$

Balace de Materia por Componente

Omitimos los balances por componentes ya que ambas corrientes son compuestos puros.

Balace de Energía

Consideramos que todo el calor que pierde la corriente de vapor V_i es absorbido por la corriente que se evapora (A).

$$m_{V_i}H_{V_i} - m_{V_o}H_{V_o} - Q_C = 0$$

$$m_A H_A - m_1 H_1 + Q_C = 0$$

Propiedades termodinámicas

$$\text{Entalpía de 1: } f(H_1, T_1, P_1) = 0$$

$$\text{Entalpía de } V_o: f(H_{V_o}, T_{V_o}, P_{V_o}) = 0$$

Ambas corrientes se encuentran en equilibrio liquido vapor por lo que en la resolución se explicitara el flash correspondiente para cada caso.

Resolución:

Importante: *Todas las variables que aparecen en el miembro derecho deben ser conocidas.*

1- Resolvemos el balance de materia global para ambas corrientes.

$$m_1 = m_A$$

$$m_{V_o} = m_{V_i}$$

2- Según las hipótesis, la corriente A se calienta hasta su saturación por lo que la corriente 1 corresponde a un equilibrio liquido-vapor. Para poder conocer sus propiedades debemos resolver un flash a presión conocida (P_1) y fracción vaporizada conocida ($\theta_1=1$).

$$P_1 = P_A$$

$$\theta_1 = 1$$

$$T_1 = FLASH_{P\theta}(P_1, \theta_1)$$

$$H_1 = FLASH_{P\theta}(P_1, \theta_1)$$

(Ver resolución del flash más adelante)

3- Al quedar definida la corriente 1 ya podemos conocer el calor intercambiado.

$$Q_C = m_1 H_1 - m_A H_A$$

4- De manera similar podemos calcular la entalpía de salida del vapor de calentamiento.

$$H_{V_o} = (m_{V_i} H_{V_i} - Q_C) / m_{V_o}$$

5- La corriente V_o también corresponde a un equilibrio liquido-vapor. Por las hipótesis del modelo, esta corriente se trata de una mezcla liquido-vapor. Según la secuencia actual ya conocemos su entalpía y presión por lo que para poder conocer sus propiedades debemos resolver un flash a presión conocida (P_{V_o}) y entalpía conocida (H_{V_o}).

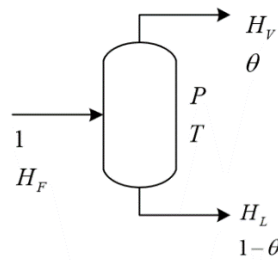
$$T_{V_o} = FLASH_{PH}(P_{V_o}, H_{V_o})$$

$$\theta_{V_o} = FLASH_{PH}(P_{V_o}, H_{V_o})$$

(Ver resolución del flash más adelante)

Flash teórico del punto 2 (compuesto puro)

Como sabemos, para calcular las propiedades de una corriente que se encuentra en equilibrio liq-vap se debe recurrir al flash teórico de la siguiente figura:



Para nuestro caso conocemos la composición de la alimentación (compuesto puro $z=x=y=1$), la presión de operación ($P=P_I$) y la fracción vaporizada ($\theta=1$).

1. A partir de la ecuación de Rachford & Rice ya podemos conocer la temperatura del flash para el valor de ($\theta=1$):

$$\frac{(K-1)}{\theta(K-1)+1} = 0 \rightarrow K = 1 \rightarrow K = \frac{Pv_A(T)}{P} = 1 \rightarrow T$$

2. Luego ya es posible calcular la entalpía de cada fase.

$$H_L = f_l(T, P)$$

$$H_V = f_v(T, P)$$

3. Del balance de energía ya se puede calcular la entalpía de la corriente:

$$H_F = (1-\theta)H_L + \theta H_V \rightarrow H_F = H_V$$

4. Finalmente, a partir de los cálculos del flash teórico ya quedan definidas la entalpía y temperatura de la corriente 1.

$$H_1 = H_F$$

$$T_1 = T$$

Flash teórico del punto 5 (compuesto puro)

Para este caso conocemos la composición de la alimentación (compuesto puro $z=x=y=1$), la presión de operación ($P=P_{Vo}$) y la entalpía ($H_F=H_{Vo}$).

1. Proponemos un valor para la temperatura $T=T^*$
2. A partir de la ecuación de Rachford & Rice calculamos la fracción vaporizada θ

$$K = \frac{Pv_{H_2O}(T^*)}{P} \rightarrow \frac{(K-1)}{\theta(K-1)+1} = 0 \rightarrow \theta$$

3. Luego ya es posible calcular la entalpía de cada fase.

$$H_L = f_l(T^*, P)$$

$$H_V = f_v(T^*, P)$$

4. Del balance de energía ya se puede calcular la entalpía de la corriente:

$$H_F^* = (1-\theta)H_L + \theta H_V$$

5. Ya podemos chequear la entalpía actual con la deseada:

$$i \| H_F^* - H_F \| \leq \text{tolerancia?}$$

Si: Continuamos.

No: proponemos una nueva T^ y regresamos al paso 2.*

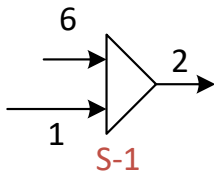
6. Finalmente, a partir de los cálculos del flash teórico ya quedan definidas la fracción vaporizada y temperatura de la corriente Vo.

$$\theta_{Vo} = \theta$$

$$T_{Vo} = T$$

Mezclador

Asumimos que las corrientes de entrada 6 y 1 están perfectamente definidas.



Balance de Materia global

$$m_1 + m_6 - m_2 = 0$$

Balance de Materia por Componente

$$m_1 x_{1,i} + m_6 x_{6,i} - m_2 x_{2,i} = 0 \quad \forall i$$

$$\sum_i x_{2,i} = 1$$

Balace de Energía

$$m_1 H_1 + m_6 H_6 - m_2 H_2 = 0$$

Propiedades termodinámicas

Entalpía de 2 (fase vapor): $H_2 = f_v(T_2, P_2, x_2)$

Resolución:

1- Resolvemos el balance de materia global.

$$m_2 = m_1 + m_6$$

2- Resolvemos el balance de materia por componentes.

$$x_{2,i} = (m_1 x_{1,i} + m_6 x_{6,i}) / m_2 \quad \forall i$$

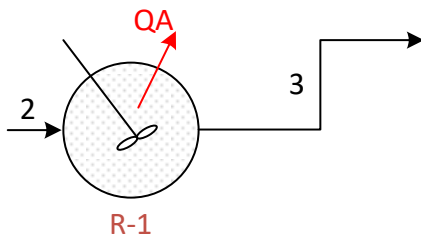
3- Del balance de energía conocemos la entalpía y finalmente su temperatura

$$H_2 = (m_1 H_1 + m_6 H_6) / m_2$$

$$H_2 = f_v(T_2, P_2, x_2) \rightarrow T_2$$

Reactor

Nuevamente asumimos que la alimentación (corriente 2) conocida.



Balace de Materia por Componente

$$m_2 x_{2,A} + r_A V_R - m_3 x_{3,A} = 0$$

$$m_2 x_{2,B} + r_B V_R - m_3 x_{3,B} = 0$$

$$m_2 x_{2,C} + r_C V_R - m_3 x_{3,C} = 0$$

$$x_{3,A} + x_{3,B} + x_{3,C} = 1$$

Velocidad de generación de cada componente

$$r_A = -k_D p_A + k_I p_B p_C$$

$$r_B = k_D p_A - k_I p_B p_C$$

$$r_C = k_D p_A - k_I p_B p_C$$

Balance global (combinación de las anteriores)

$$m_2 - r_A V_R - m_3 = 0$$

Presiones parciales

$$p_i = x_{3,i} P_R \quad \forall i$$

Constantes cinéticas

$$k_D = A_D \times e^{\left(\frac{E_D}{RT_3}\right)} \quad k_I = A_I \times e^{\left(\frac{E_I}{RT_3}\right)}$$

Balance de energía en el reactor

Omitimos el calor de reacción ya que en el cálculo de la entalpía tomamos como estado de referencia el calor de formación de cada compuesto. El reactor pierde calor con el medio, por lo que para obtener valores positivos de Q consideramos que el calor abandona el reactor (signo menos).

$$m_2 H_2 - m_3 H_3 - Q_A = 0$$

Perdida de calor con el medio

$$Q_A = (UA)_R (T_3 - T_{Amb})$$

Propiedades fisicoquímicas

Para completar el modelo matemático, nos restan definir las ecuaciones para el cálculo de las propiedades termodinámicas. En este caso, al tratarse de una fase conocida (vapor) podemos explicitar la ley funcional de éstas. Por otro lado, podríamos omitir la influencia de la presión, pero para mayor generalidad la incluimos y la asumimos conocida.

$$\text{Entalpía de 3: } H_3 = f_v(T_3, P_3, x_3)$$

Resolución:

- 1- El balance de materia está acoplado al balance de energía, un método de resolución apropiado comienza con una temperatura del reactor estimada (T_3^*). De esta manera se calculan las constantes cinéticas k_D y k_I :

$$k_D = A_D \times e^{\left(\frac{-E_D}{RT_3^*}\right)} \quad k_I = A_I \times e^{\left(\frac{-E_I}{RT_3^*}\right)}$$

- 2- Solo resta resolver el balance de materia para conocer el resto de las variables. Es decir, debemos resolver un reactor isotérmico a la temperatura propuesta (T_R^*). Como sabemos, el balance de materia responde a una estructura cíclica de resolución. Por lo tanto, tenemos dos caminos:

Resolución global o simultanea del balance de materia

Resolver un sistema de 7 ecuaciones y 7 incógnitas ($m_3, x_A, x_B, x_C, p_A, p_B, p_C$).

$$m_2 x_{2,A} + (-k_D p_A + k_I p_B p_C) V_R - m_3 x_{3,A} = 0$$

$$m_2 x_{2,B} + (k_D p_A - k_I p_B p_C) V_R - m_3 x_{3,B} = 0$$

$$m_2 x_{2,C} + (k_D p_A - k_I p_B p_C) V_R - m_3 x_{3,C} = 0$$

$$x_{3,A} + x_{3,B} + x_{3,C} = 1$$

$$p_A - x_{3,A} P_R = 0$$

$$p_B - x_{3,B} P_R = 0$$

$$p_C - x_{3,C} P_R = 0$$

Resolución secuencial del balance de materia

I- Proponemos un valor semilla de la composición: $x_{3,i}^* \quad i = A, B, C$

II- Calculamos las presiones parciales: $p_i = x_{3,i}^* P_R \quad i = A, B, C$

III- Combinando las 4 primeras ecuaciones podemos obtener el balance global en el reactor

$$m_2 + (k_D p_A - k_I p_B p_C) \times V_R - m_3 = 0$$

Luego, obtenemos el valor de la incógnita m_3 .

$$m_3 = m_2 + (k_D p_A - k_I p_B p_C) \times V_R$$

IV- Utilizando las tres primeras ecuaciones obtenemos las fracciones molares de los tres componentes:

$$x_{3,A} = (m_2 x_{2,A} + (-k_D p_A + k_I p_B p_C) V_R) / m_3$$

$$x_{3,B} = (m_2 x_{2,B} + (k_D p_A - k_I p_B p_C) V_R) / m_3$$

$$x_{3,C} = (m_2 x_{2,C} + (k_D p_A - k_I p_B p_C) V_R) / m_3$$

V- Por último, debemos comparar el valor de las fracciones molares obtenidas con el de las propuestas:

$$\zeta \|x^* - x\| \leq \text{tolerancia?}$$

Si: Continuamos.

No: $x^ = x$ y regresamos al paso II.*

3- Una vez que tenemos resuelto el balance de materia pasamos al de energía (recordar que se ha asumido la temperatura T_R^*). Calculamos la entalpía de la corriente de salida y el calor intercambiado:

$$H_3 = f_v(T_3^*, P_3, x_3)$$

$$Q_A = (UA)_R (T_3^* - T_{Amb})$$

4- Finalmente, chequeamos el balance de energía:

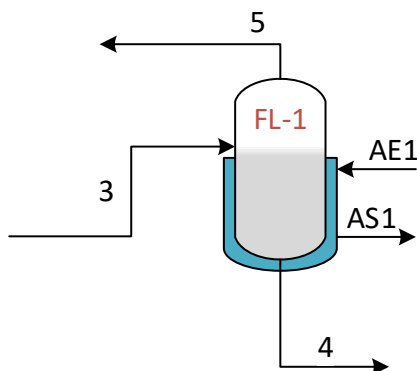
$$\zeta \|m_2 H_2 - m_3 H_3 - Q_A\| \leq \text{tolerancia?}$$

Si: Terminamos

No: Proponemos otra T_3^ y regresamos al paso I.*

Flash Refrigerado

Al adoptar la filosofía de simulación modular secuencial asumimos que las corrientes de entrada 3 y AE1 están perfectamente definidas.



Balance de Materia global

$$m_3 = m_4 + m_5$$

Balance de Materia por Componente (adecuamos la nomenclatura¹)

$$m_3 z_i - m_4 x_i - m_5 y_i = 0 \quad i = A, B, C$$

Balance de Energía

$$m_3 H_3 - m_4 H_4 - m_5 H_5 - Q_{FL} = 0$$

Fracción vaporizada

$$\theta = \frac{m_5}{m_3}$$

Suma de fracciones molares

$$x_A + x_B + x_C = 1$$

$$y_A + y_B + y_C = 1$$

Balance de materia en la camisa de enfriamiento

Al tratarse de un compuesto puro no es necesario realizar un balance por componentes

$$m_{AE1} - m_{AS1} = 0$$

Balance de energía en la camisa de enfriamiento

Anteriormente asumimos que el calor abandona el reactor. Por lo tanto, ahora consideramos que el calor ingresa a la camisa (signo más).

$$m_{AE1} H_{AE1} - m_{AS1} H_{AS1} + Q_{FL} = 0$$

Ecuación de diseño del intercambio de calor

Al ser el flash y la camisa mezcla completa asumimos que podemos utilizar una expresión simple en base a la diferencia de temperaturas.

$$Q_{FL} = (UA)_{FL} (T_{FL} - T_{AS1})$$

Propiedades termodinámicas

Las corrientes 4 y 5 corresponden a una mezcla de fase conocida (vapor y líquido respectivamente) por lo tanto podemos explicitar el cálculo de sus entalpías. Nuevamente, podríamos omitir la influencia de la presión, pero para mayor generalidad la incluimos. Omitimos el cálculo de las propiedades de la corriente 3 que asumimos conocida.

¹ z, x e y fracciones molares de 3, 4 y 5 respectivamente.

Entalpía de 4: $H_4 = f_l(T_4, P_{FL}, x)$

Entalpía de 5: $H_5 = f_v(T_5, P_{FL}, y)$

Entalpía de AS_1 : $H_{AS1} = f_l(T_{AS1}, P_{AS1})$

Condición de equilibrio: $y_i = K_i x_i \quad i = A, B, C$

Constantes de equilibrio (VLE no-ideal en fase líquida):

$$K_i = \gamma_i P v_i / P_{FL} \quad i = A, B, C \rightarrow K_i = f(T_{FL}, P_{FL}, x) \quad i = A, B, C$$

Resolución

Reformulamos el balance de materia a la ecuación de Rachford & Rice para tres componentes:

$$\sum_{i=1}^3 \frac{(K_i - 1) z_i}{\theta(K_i - 1) + 1} = 0$$

Estrategia de resolución propuesta

- 1- Proponemos una composición para la fase líquida x^* (debido a la no idealidad)
- 2- Se comienza con una temperatura del equipo flash estimada (T_{FL}^*).
- 3- Se calcula el Flash isotérmico a T_{FL}^* (completar su estrategia detallada de resolución).

$$K_i = f(T_{FL}^*, P_{FL}, x^*) \quad i = A, B, C$$

$$\sum_{i=1}^3 \frac{(K_i - 1) z_i}{\theta(K_i - 1) + 1} = 0 \rightarrow \theta$$

- 4- Una vez hallada la fracción vaporizada se calculan los flujos de salida (líquido y vapor), y sus composiciones.

$$m_5 = \theta m_3$$

$$m_4 = (1 - \theta) m_3$$

$$x_i = z_i / (\theta(K_i - 1) + 1)$$

$$y_i = K_i x_i$$

- 5- En este punto (o más adelante) ya podemos chequear la composición propuesta en el punto 1:

$$\zeta \|x^* - x\| \leq \text{tolerancia?}$$

Si: Continuamos.

No: $x^ = x$ y regresamos al paso 3.*

- 6- Luego ya es posible calcular sus entalpías y el calor intercambiado.

$$H_4 = f_l(T_{FL}^*, P_{FL}, x)$$

$$H_5 = f_v(T_{FL}^*, P_{FL}, y)$$

$$Q_{FL}^* = m_3 H_3 - m_4 H_4 - m_5 H_5$$

- 7- Resolvemos de manera directa el balance de materia en la camisa y a continuación del balance de energía obtenemos la entalpía de salida del agua y de ésta su temperatura:

$$m_{AS1} = m_{AE1}$$

$$H_{AS1} = (m_{AE1} H_{AE1} + Q_{FL}^*) / m_{AS1}$$

$$H_{AS1} = f_l(T_{AS1}, P_{AS1}) \rightarrow T_{AS1}$$

Finalmente, a partir de la ecuación de diseño calculamos chequeamos el calor intercambiado:

$$Q_{FL} = (UA)_{FL} (T_{FL}^* - T_{AS1})$$

$$\zeta \|Q_{FL} - Q_{FL}^*\| \leq \text{tolerancia?}$$

Si: Continuamos

No: Proponemos una nueva T_{FL}^ y regresamos al paso 2.*

- 8- Una vez calculada la temperatura, fracción vaporizada, composición etc., se obtienen (definen por completo) las corrientes de líquido y vapor. Redefinimos las variables originales para mantener la nomenclatura.

$$T_4 = T_5 = T_{FL}$$

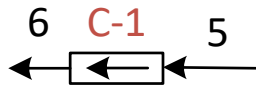
$$P_4 = P_5 = P_{FL}$$

$$x_{5,i} = y_i \quad i = A, B \text{ y } C$$

$$x_{4,i} = x_i \quad i = A, B \text{ y } C$$

Compresor: C-1

Su función solo es recirculación por lo que omitimos su modelado riguroso



Su función solo es recirculación por lo que omitimos su modelado riguroso. Asumimos la presión de 6 conocida.

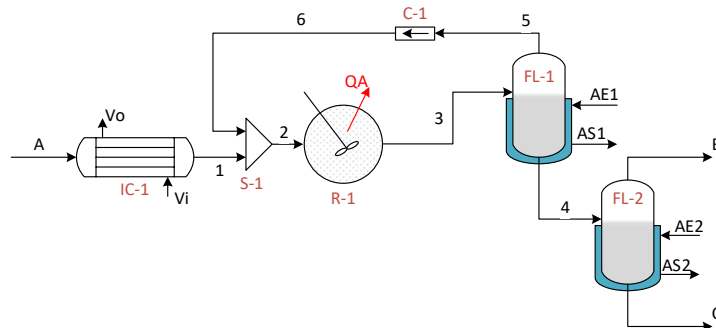
$$m_6 = m_5$$

$$x_{6,i} = x_{5,i}$$

$$T_6 = T_5$$

$$H_6 = f_v(T_6, P_6, x_6)$$

Resolución completa de la planta



En primer lugar, deben detectarse el número de ciclos existentes. En este caso las corrientes 2, 3, 5 y 6 conforman un ciclo que incluye al mezclador, reactor, flash y compresor. No habiendo otro ciclo que pudiera solaparse al mismo se concluye que el conjunto mínimo de corrientes de corte es unitario pudiendo ser, en principio, cualquiera de las corrientes mencionadas.

1. Así pues, se adopta a la corriente 6 como corriente de corte y se le asigna un flujo, temperatura, presión y composición (las restantes propiedades se calculan a partir de estas). Cabe aclarar que en estado estacionario, podemos considerar el perfil de

presiones de operación como conocido. Según el paquete termodinámico esto influirá en mayor o menor medida en los resultados finales.

2. Se aplica la secuencia propuesta para el evaporador IC-1 quedando completamente especificadas las corrientes 1 y Vo.
3. A partir de la secuencia propuesta se resuelve el sumador S-1 quedando definida la corriente 2.
4. Se aplica la secuencia propuesta para el reactor R-1 quedando completamente especificada la corriente 3.
5. Se aplica la secuencia propuesta para el flash FL-1 quedando completamente especificadas las corrientes AS1, 4 y 5.
6. Se aplica la secuencia propuesta para el compresor C-1 y se especifica la corriente 6.
7. Se comparan los valores obtenidos para la corriente 6 con los propuestos y se da por finalizado o no la iteración.
8. Finalmente, al converger el ciclo se resuelve el flash FL-2 y se especifican las corrientes faltantes del proceso (AS2, B y C).

Diagrama de flujo

