

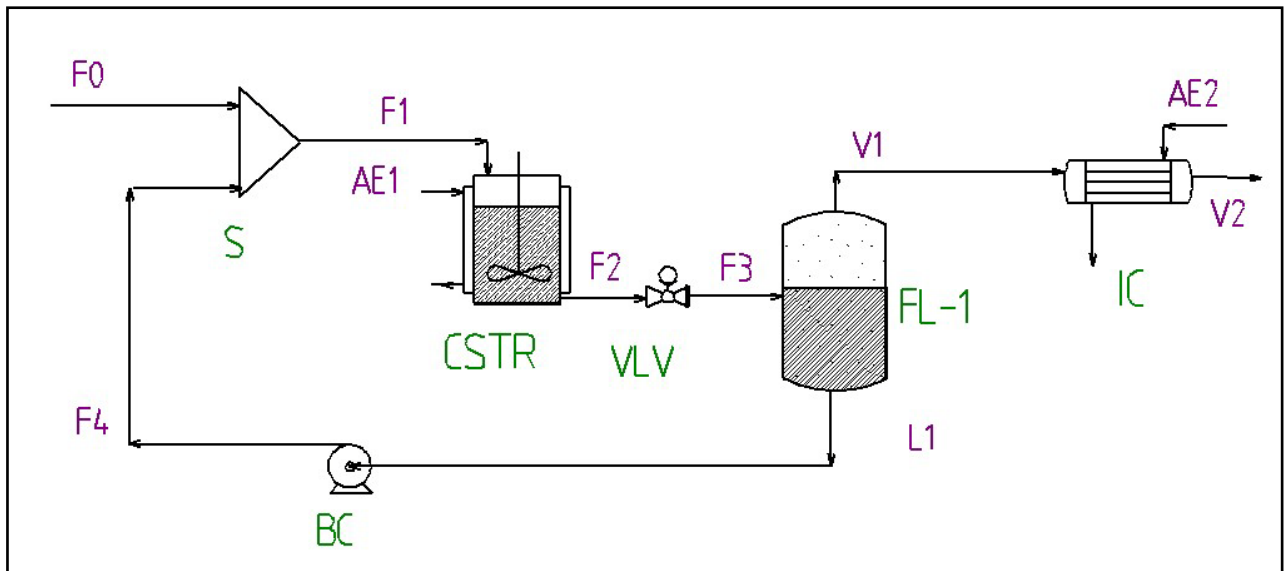
Integración IV - Año 2011

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

Se propone:

Elaborar los modelos matemáticos que representen el comportamiento de estado estacionario de los equipos presentes en el diagrama siguiente, de modo de poder obtener:

- Las corrientes intermedias de todos los equipos (Fracción vaporizada, Temperatura, Presión, Flujos y composición).
- La corriente de salida del reactor en flujo, temperatura y composición como así la temperatura de salida del agua.
- Las corrientes de salida del flash dando sus flujos, temperatura y composición.
- La corriente de salida de condensado en temperatura, composición y flujo.
- La temperatura de salida de agua de enfriamiento como así el valor UA correspondiente.

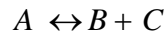


Flowsheet

Hipótesis:

A) Reactor

- Reacción reversible exotérmica ($\Delta H_R < 0$)



- La cinética con A como base:

$$-r_A = k_D * C_A - k_I * C_B * C_C$$

- Reactor Mezcla completa. La camisa de refrigeración también se considera mezcla completa.
- Los coeficientes cinéticos son conocidos ya que son función de la temperatura (funcional tipo Arrhenius).
- Hold up de vapor despreciable. Evaporación del líquido despreciable.
- Presión en el cuerpo de vapor del reactor es conocida (P_{RI}^0)
- UA es dato
- Tanque cilíndrico de área AT.
- C =[moles/lit]; ρ : densidad molar
- Caída de presión a través de la camisa nula

B) Flash Adiabático

- Mezcla ideal
- No se producen reacciones químicas
- Adiabático
- Opera en equilibrio L-V

C) Condensador total:

- Se asume condensación total
- No existe reacción química
- La presión de descarga del condensado es conocida y constante

D) Bomba Centrífuga

- No existe reacción química
- Adiabático
- No hay cambio de fases
- Se produce un aumento ΔP de presión en el líquido que sale de la bomba

E) Sumador

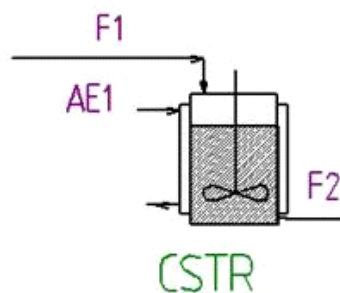
- No existe reacción química
- Adiabático
- No hay cambio de fase

F) Corrientes

- F_0 , AE_1 , AE_2 en base molar. Se conoce su flujo, composición, temperatura y presión.

Modelos Matemáticos

Reactor:



Balance de Materia global:

$$F_1 + (-r_A) * V_R = F_2$$

Balance de Materia por Componente:

$$F_1 * z_A - (-r_A) * V_R = F_2 * x_A$$

$$F_1 * z_B + (-r_A) * V_R = F_2 * x_B$$

$$F_1 * z_C + (-r_A) * V_R = F_2 * x_C$$

Donde:

$$k_i = A_i * e^{\left(\frac{E_i}{RT}\right)} ; i = D, I$$

Restricciones:

$$x_A + x_B + x_C = 1$$

$$x_i = C_i / \sum C_i ; i = A, B, C$$

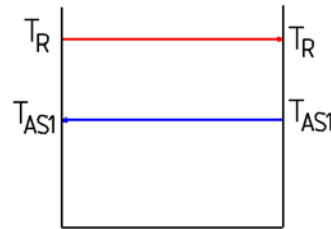
Balance de Energía molar:

$$F_1 * H_1 + (-r_A) * (-\Delta H_R) * V_R - Q_R = F_2 * H_2$$

Camisa:

$$Q_R = AE_1 * Cp_a * (T_{AS1} - T_{AE1})$$

$$Q_R = UA_R * (T_R - T_{AS1})$$



Propiedades fisicoquímicas:

Entalpía de F₁:

$$H_1 = \sum_{i=1}^{NC} z_i * H_i(T_{F1})$$

Entalpía de F₂:

$$H_2 = \sum_{i=1}^{NC} x_i * H_i(T_R)$$

Resolución:

1. Se conocen las características de la corriente F₁, por lo tanto, es conocido su flujo F₁, temperatura T₁, presión P₁ y composición Z₁ y sus propiedades derivadas como

entalpías molares H_i . Como el balance de materia quedo acoplado al balance de energía, a través de las constantes cinéticas en $(-r_A)$, el método de resolución comienza con una temperatura del reactor estimada (T_R^*). De esta manera se calculan las constantes cinéticas k_D y k_I :

$$k_i = A_i * e^{\left(\frac{-E_i}{RT}\right)} ; i = D, I$$

2 - Se resuelve el siguiente sistema de ecuaciones, esto es, hallar los valores de x_A , x_B , x_C ; C_A , C_B , C_C y F_2 que satisfacen las 7 ecuaciones:

$$\begin{aligned} F_1 * z_A - F_2 * x_A - (k_D * C_A - k_I * C_B * C_C) &= 0 \\ F_1 * z_B - F_2 * x_B + (k_D * C_A - k_I * C_B * C_C) &= 0 \\ F_1 * z_C - F_2 * x_C + (k_D * C_A - k_I * C_B * C_C) &= 0 \\ 1 - x_A - x_B - x_C &= 0 \\ x_A &= C_A / (C_A + C_B + C_C) \\ x_B &= C_B / (C_A + C_B + C_C) \\ x_C &= C_C / (C_A + C_B + C_C) \end{aligned}$$

3 - Una vez obtenidas las 7 variables se obtiene el calor intercambiado:

$$Q_R = F_1 * H_1 - F_2 * H_2 + (-r_A) * (-\Delta H_R) * V_R$$

4 - Luego del balance de energía de la camisa, se obtiene la temperatura de salida del agua:

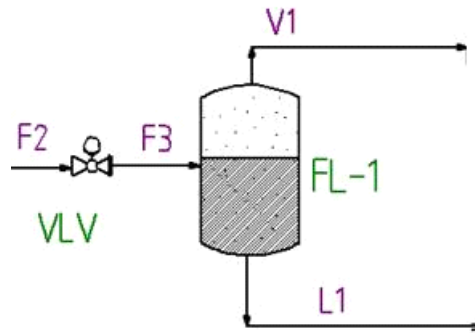
$$T_{AS1} = \frac{Q + m_a * CP_a * T_{AE1}}{m_a * CP_a}$$

5 - Finalmente se calcula de la siguiente ecuación un nuevo valor de la temperatura del reactor T_R^N .

$$T_R^N = \frac{Q}{(UA_R)} + T_{AS1}$$

Por último la nueva temperatura (T_R^N) calculada se la compara con la estimada (T_R^*). Si el error absoluto es mayor que cierto criterio adoptado se toma el nuevo valor para repetir el método. Una vez lograda la convergencia se termina.

Flash Adiabático:



Balance de Materia:

$$F_2 = L_1 + V_1$$

Balance de Materia por Componente:

$$F_2 * z_i = L_1 * x_i + V_1 * y_i$$
$$i = 1 \text{ a } 3 \text{ (A, B y C)}$$

Balance de Energía:

$$F_2 * H_{F2} = L_1 * H_{L1} + V_1 * H_{V1}$$

Propiedades termodinámicas:

Entalpía de F₂:

$$H_{F2} = \sum_{i=1}^{NC} z_i * HF_i(T_{F2})$$

Entalpía de L₁:

$$H_{L1} = \sum_{i=1}^{NC} x_i * HL_i(T_{FL})$$

Entalpía de V₁:

$$H_{V1} = \sum_{i=1}^{NC} x_i * HV_i(T_{FL}, P_{FL})$$

Constantes de equilibrio:

$$k_i = \frac{Pv_i(T_{FL})}{P_{FL}}$$

Fracción vaporizada:

$$\theta = \frac{V_1}{F_2}$$

Ecuaciones de restricción:

$$\sum_{i=1}^3 z_i = 1$$
$$\sum_{i=1}^3 x_i = 1$$
$$\sum_{i=1}^3 y_i = 1$$

Resolución:

Empleando el balance global, la definición de fracción vaporizada y la de constante de equilibrio se reemplaza en los balances por componentes:

$$V_1 = \theta * F_2$$

$$F_2 = L_1 + V_1 \rightarrow L_1 = F_2 - V_1 = F_2 - \theta * F_2 = F_2 * (1 - \theta)$$

$$F_2 * z_i = F_2 * (1 - \theta) * x_i + F_2 * \theta * k_i * x_i$$

Se divide todo por F_2 :

$$z_i = (1 - \theta) * x_i + \theta * k_i * x_i = x_i * [(\theta * k_i + 1) - \theta]$$

Despejando x_i y tomando θ como factor común:

$$x_i = \frac{z_i}{\theta * (k_i - 1) + 1}$$

Como $y_i = k_i * x_i$:

$$y_i = \frac{k_i * z_i}{\theta * (k_i - 1) + 1}$$

Y como debe cumplirse que las sumatorias de las fracciones de cada fase debe ser igual a 1:

$$\sum_{i=1}^3 y_i - \sum_{i=1}^3 x_i = 0$$

Reemplazando en la anterior y tomando z_i como factor común:

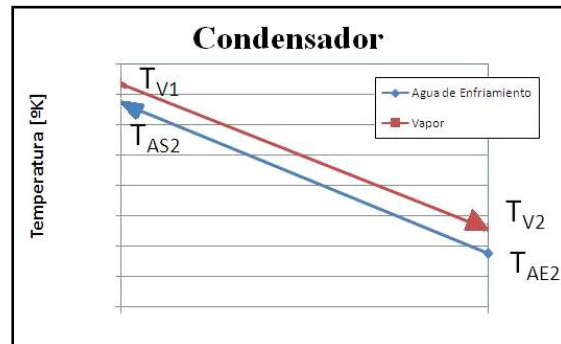
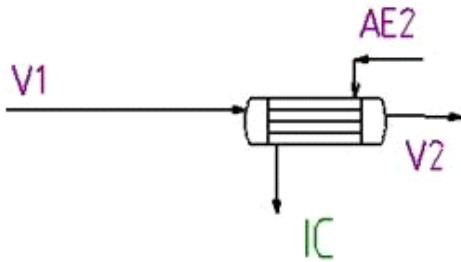
$$\sum \frac{(k_i - 1) * z_i}{\theta * (k_i - 1) + 1} = 0$$

- 1 - El método comienza con una temperatura de flash estimada. Se calcula el Flash isotérmico (o de temperatura determinada).
- 2 - Una vez hallada la fracción vaporizada se calculan los flujos de salida (líquido y vapor), y sus composiciones.
- 3 - Luego es posible de hallar sus entalpías.
- 4 - Planteando el balance de energía de la forma:

$$F_2 * H_{F2} - L_1 * H_{L1} - V_i * H_{V1} = 0$$

- 5 - Habiendo calculado una nueva temperatura (T_{FL}^N) se la compara con la estimada (T_{FL}). Si el error absoluto es mayor que cierto criterio adoptado se toma el nuevo valor para repetir el método. Una vez lograda la convergencia se termina.
- 6 - Una vez calculada la temperatura, fracción vaporizada, composición etc., se definen por completo las corrientes de líquido y vapor.

Condensador Total:



Balance de Materia:

$$V_1 = V_2$$

$$AE_2 = AS_2$$

Balance de Materia por Componente (no se incluye el agua):

$$V_1 * y_i = V_2 * x_i$$
$$i = 1 \text{ a } 3 \text{ (A, B y C)}$$

Balance de Energía:

$$V_1 * H_{V1}(T_{V1}) = V_1 * H_{V2}(T_{V2}) + Q_C$$

$$Q_C = V_1 * [H_{V1}(T_{V1}) - H_{V2}(T_{V2})]$$

$$Q_C = AE_2 * Cp_a * (T_{AS2} - T_{AE2})$$
$$Q_C = UA_C * \frac{(T_{V1} - T_{AS2}) - (T_{V2} - T_{AE2})}{Ln \frac{(T_{V1} - T_{AS2})}{(T_{V2} - T_{AE2})}}$$

Propiedades termodinámicas:

Entalpía Vapor:

$$H_{V1} = \sum_{i=1}^3 HV(T_{V1}) * y_i$$

Entalpía Líquido:

$$H_{V2} = \sum_{i=1}^3 HL(T_{V2}) * x_i$$

Punto de burbuja del líquido:

$$\sum_{i=1}^3 x_i * k_i(T_{V2}, P_{V2}) = 1$$

Resolución:

1 - Habiendo asumido la condensación total, la composición del condensado será igual a la del vapor que ingresa. Esto simplifica los cálculos.

Se comienza calculando la temperatura de salida del condensado, lo cual se hace a través del punto de burbuja del líquido.

2 - De esta manera es posible calcular el calor latente como la diferencia de entalpías entre fases.

$$Q_C = V_1 * [H_{V2}(T_{V1}) - H_{V1}(T_{V2})]$$

3 - La temperatura de salida del agua se la calcula a través del balance de calor del agua de enfriamiento:

$$T_{AS2} = \frac{Q + m_a * C_{p_a} T_{AE2}}{C_{p_a} T_{AE2}}$$

4 - Ahora es posible calcular el UA como:

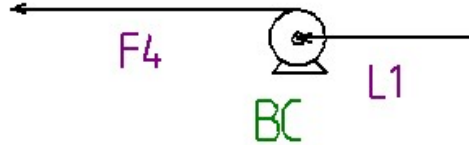
$$(UA) = \frac{Q}{DTLM}$$

Donde

$$DTLM = \frac{(T_{V1} - T_{AS2}) - (T_{V2} - T_{AE2})}{Ln \frac{(T_{V1} - T_{AS2})}{(T_{V2} - T_{AE2})}}$$

Observar que excepto el cálculo del punto de burbuja, el resto del mismo es directo no requiriéndose de ninguna iteración.

Bomba



Balance de Materia:

$$L_1 = F_4$$

Balance de Energía:

$$H_{L1} = H_{F4}$$

El aumento de presión se calcula como sigue:

$$P_{L1} + \Delta P = P_{F4}$$

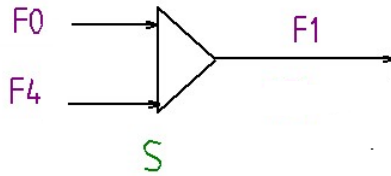
$$P_{F4} = P_{R^o_1}$$

Resolución:

1. Dado que no hay variación en el balance de materia y energía, los caudales, composiciones y temperaturas a la salida de la bomba son conocidos e iguales a los de la entrada de la bomba.

2. El aumento de presión se puede calcular, ya que $P_{R^{\circ}_1}$ es dato y la presión a la entrada de la bomba es conocida.

Sumador



Balance de Materia:

$$F_0 + F_4 = F_1$$

Balance de Materia por componente:

$$F_0 \cdot x_{iF0} + F_4 \cdot x_{iF4} = F_1 \cdot z_{iF1}$$

Balance de Energía:

$$F_0 \cdot H_0 + F_4 \cdot H_4 = F_1 \cdot H_1$$

Resolución global de la planta

