

CAPÍTULO XIV

SIMULACIÓN DINÁMICA DE EQUIPOS DE PROCESO ELEMENTALES

Por
Nicolás J. Scenna

XIV.1 INTRODUCCIÓN

En los primeros capítulos mencionamos que en general, los problemas de simulación en los cuales se adopta la hipótesis de parámetros concentrados (no nos interesa la variación de las propiedades punto a punto en las direcciones espaciales), involucran la solución de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (la derivada de la acumulación *-holdup-* respecto del tiempo).

En este capítulo exploraremos metodologías para lograr modelos de simulación dinámica de equipos (módulos) característicos de un simulador dinámico de propósito genérico. En general, los módulos son los mismos analizados en el caso de simuladores estacionarios, ya discutidos en los capítulos anteriores. Proceduralmente, los pasos a seguir para plantear los modelos (sistemas de ecuaciones diferenciales) son exactamente los ya vistos en los Capítulos VI, IX y X, pero ahora teniendo en cuenta el término de acumulación en los respectivos balances. Los algoritmos para solucionar numéricamente los sistemas de ecuaciones diferenciales resultantes se han discutido en el Capítulo XIII.

También discutiremos sintéticamente los aspectos vinculados a la arquitectura de un simulador dinámico de propósitos generales. En los Capítulos V y VI vimos que los simuladores modulares secuenciales disponen de una lógica central que permite realizar los pasos necesarios a los efectos de articular los modelos parciales (módulos) para *encadenarlos* (secuencialmente) para resolver el problema total (particionado, rasgado y ordenamiento). Además, hemos visto que en los simuladores secuenciales los módulos son orientados. Esto es, conocidas sus entradas, calculan las salidas; o bien en algunos casos se introduce flexibilidad de forma de lograr combinaciones de sentidos de flujo de información (corrientes), con el objeto de minimizar el número de iteraciones globales para resolver el sistema de ecuaciones que representa la planta completa. Se logra así mayor flexibilidad.

En el caso del sistema de ecuaciones diferenciales asociado a la planta completa, y su relación con los subsistemas parciales, asociados a cada módulo, la vinculación es totalmente diferente. En primer lugar hemos observado que numéricamente, si por ejemplo usamos un método explícito para resolver un sistema de ecuaciones diferenciales, se nos pide conocer el miembro derecho instante a

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

instante, a partir de cuyo valor, pueden obtenerse las variables diferenciales (miembro izquierdo) en el instante posterior. En el miembro derecho están contenidas tanto las variables asociadas a las *corrientes de entrada* como las de *salida*, como veremos en los ejemplos de diversos módulos.

Dentro de este contexto, cada reciclo físico en la planta involucra, en el sistema de ecuaciones algebraicas asociado, potenciales variables de iteración. En simulación dinámica, el problema radica en poder calcular, para cada instante, el miembro derecho a partir de los valores calculados de las variables diferenciales (las que figuran en el miembro izquierdo). Por lo tanto, la necesidad de iterar o no para resolver el sistema de ecuaciones algebraicas simultáneas que conforma el miembro derecho depende de cada caso, y debe recurrirse a ello necesariamente si adoptamos un método de integración de la familia predictores-correctores o implícitos. Aquí vemos el primer requisito a cumplir por la lógica central: Una vez que se dispone del sistema de ecuaciones diferenciales, dadas las variables diferenciales, encontrar un procedimiento (no iterativo si es posible), para resolver el sistema de ecuaciones que resulta. Para el encadenado de los módulos, basta con utilizar la información que indica que las corrientes de salida de un módulo son las entradas del siguiente. Con ese dato, puede construirse, a partir de los módulos individuales, el sistema de ecuaciones diferenciales global.

Puede observarse que la mayoría de los simuladores dinámicos en el mercado responden a la filosofía global u orientada a ecuaciones. Esto es así debido a las características mencionadas más arriba, esto es, la arquitectura orientada a ecuaciones permite fácilmente el planteo de los métodos de resolución de ecuaciones diferenciales, mediante la aplicación de las técnicas vistas en el Capítulo IV.

A continuación analizaremos el problema de construir el modelo asociado a diversos módulos que existen por lo general en los simuladores comerciales. Como hemos resaltado anteriormente, éstos son los mismos que aquellos existentes en los simuladores estacionarios de propósito general. Este planteo facilita la comprensión y permite comparar los modelos y las formas de resolución para los módulos correspondientes al estado estacionario o dinámico. Debe recordarse aquí que si bien pueden escribirse las ecuaciones para cada módulo, basta con conocer las conexiones en el DFI para obtener, a partir de ellas, ligando las variables pertenecientes a las corrientes de entrada/salida de cada módulo, el sistema de ecuaciones global, esto es, el de la planta completa. Además, haciendo el término de acumulación igual a cero, se pasa del modelo dinámico al estacionario. Ello es lo que hace atractiva la arquitectura orientada a ecuaciones, ya que *ambos* simuladores pueden *coexistir* en forma sencilla y operativa, dentro de una *estructura global* que los contenga.

Para lograr un desarrollo coherente con lo que se ha estudiado, se plantearán en los siguientes capítulos modelos dinámicos pertenecientes a módulos para simulación en estado estacionario ya estudiados (equipos de separación múltiple etapa en contracorriente, evaporación flash, etc.), a los efectos de apreciar la diferencia entre ambos modelos. Sin embargo, también hemos remarcado a lo largo de todos los

capítulos anteriores que cualquiera sea el simulador comercial a disposición, siempre existirá la necesidad de recurrir a módulos particulares. Es por ello que los mismos permiten que el usuario incorpore diversos modelos propios, tanto módulos de equipos como métodos de estimación de propiedades fisicoquímicas. Esto nos lleva a destacar, al igual que lo hicieramos para el caso estacionario, la importancia de lograr habilidad para desarrollar modelos específicos, ahora dinámicos.

Para ejemplificar este último punto, en el Capítulo XVII analizaremos modelos de equipos específicos que en general no se disponen normalmente en simuladores comerciales. Para ello, entre otros ejemplos, continuaremos con el problema planteado en el Capítulo II (desalación de aguas de mar por el método de evaporación flash múltiple efecto), de tal forma de lograr simultáneamente la comparación entre modelos estacionarios y dinámicos y discutir además diversas aplicaciones prácticas de un simulador de este tipo. Por último, en el Capítulo XVIII analizaremos el caso de un biodigestor para el tratamiento de efluentes líquidos. Se discutirán los puntos a considerar durante el desarrollo de un módulo de simulación dinámica de un equipo como el planteado, que al contrario de los módulos de destilación, por ejemplo, no pueden generalizarse fácilmente para cualquier tipo de efluentes a tratar. Estos ejemplos tienen el claro objetivo de mostrar las limitaciones de un simulador de *propósito general* cuando en la tarea cotidiana nos enfrentamos con distintos tipos de problemas.

En lo que sigue analizaremos los sistemas de ecuaciones diferenciales que resultan al plantearse módulos de simulación dinámica para diversos equipos sencillos.

XIV.2 SIMULACIÓN DINÁMICA DE EQUIPOS SENCILLOS DE PROCESO

En esta sección analizaremos, en orden creciente de complejidad, y a través de ejemplos consecutivos, diversos modelos de simulación dinámica.

Ejemplo 1: *Tanque abierto con flujo de salida gravitatorio.*

Un esquema del sistema bajo análisis se muestra en la Figura (XIV.1).

Hipótesis asumidas:

- Sistema adiabático
- Densidad constante
- No hay reacción química
- Se desprecia la evaporación.

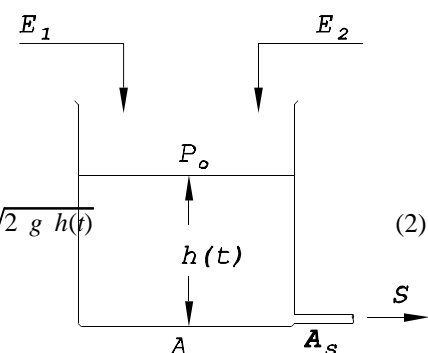
Balance de materia:

$$A_T \frac{d}{dt} h(t) = E_1 + E_2 - S \quad (1)$$

donde E_1 y E_2 representan los caudales volumétricos de entrada, S el caudal volumétrico de salida y A_T el área transversal del tanque, supuesto cilíndrico (área constante con la altura).

Dado que la densidad del líquido es constante, se han dividido ambos miembros por la misma a los efectos de plantear la acumulación volumétrica de fluido.

Suponemos que conocemos los caudales de entrada. Estos son constantes (es decir perfectamente controlados). El caudal de salida en cambio depende de la altura, a partir de la ecuación que se obtiene de la expresión de Bernoulli; en efecto, la velocidad de salida puede expresarse como:



$$v_s(t) = \sqrt{2 g h(t)} \quad (2)$$

donde g es la aceleración de la gravedad y $h(t)$ la altura de líquido por encima del orificio de salida. Por lo tanto, el caudal volumétrico a la salida, $S(t)$, se obtiene de la siguiente expresión:

$$S(t) = A_s v_s(t) \quad (3)$$

Figura XIV.1: Esquema de un tanque abierto, flujo de salida gravitatorio.

donde A_s es el área del orificio de salida.

Dadas las expresiones para el cálculo del miembro derecho en función de la variable diferencial $h(t)$, la solución de la Ecuación (1) es directa por cualquiera de los métodos discutidos en el Capítulo XIII, por ejemplo Euler, luego de especificar la condición inicial $h = h_0$ en $t = t_0$.

Ejemplo 2: Tanque abierto con descarga regulada por una válvula.

A continuación suponemos que el tanque genérico del Ejemplo (1) ahora descarga por gravedad, pero regulado por la acción de una válvula (según el esquema indicado en la Figura (XIV.2)). El caudal E se supone conocido y constante.

Hipótesis:

- Los efectos energéticos son despreciables
- La densidad es constante
- Evaporación despreciable
- No hay reacción química

Balance de materia:

$$A_T \frac{d}{dt} h(t) = E - S \tag{4}$$

donde E y S son el caudal volumétrico de entrada y salida, respectivamente y A_T el área de la base del tanque (supuesta constante con la altura del mismo).

Para resolver este sistema, al igual que el caso anterior, se debe asumir una condición inicial: $t = t_0, h = h(t_0)$. Si el estado inicial es estacionario, la altura $h(t_0)$ es tal que genera una corriente de salida $S(t_0)$ igual a la entrada E . De lo contrario, la altura y caudal de salida evolucionarán hasta el nuevo estado estacionario.

Si suponemos que E es constante y conocido, sólo resta calcular $S(t)$. Podemos suponer una relación genérica del flujo y la constante característica de la válvula, C_v , según la expresión generalizada:

$$S = C_v \sqrt{\Delta p} = C_v \sqrt{(P_f - P_s)} \tag{5}$$

Dado que el tanque se supone abierto, y descarga a la atmósfera, la caída de presión entre ambos puntos es simplemente la altura h de líquido, expresado en las unidades correspondientes. Por lo tanto:

$$S = C_v f \sqrt{h(t)} \tag{6}$$

donde f es un factor que considera el cambio de unidades respectivo para homogeneizar dimensionalmente la ecuación. Luego, dada la condición inicial, instante a instante, se puede determinar $S(t)$, y por lo tanto $h(t)$, para el intervalo de tiempo dado. En efecto, dado un valor $h(t_0)$ y aplicando el método de Euler por ejemplo, pueden calcularse la altura $h(t)$ y el caudal $S(t)$ para el intervalo de tiempo especificado, a partir de la Ecuación Diferencial (4).

Ejemplo 3: Tanque abierto, alimentación en la base.

Ahora suponemos un

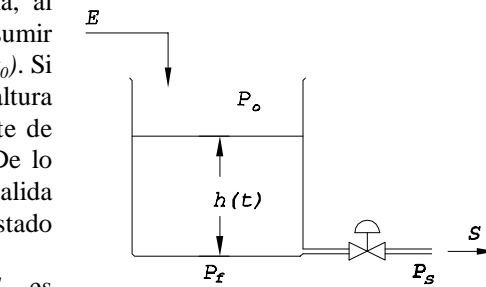


Figura XVI.2: Esquema de un tanque abierto, salida a través de una válvula manual.

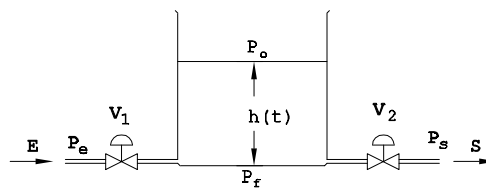


Figura XVI.3: Esquema de un tanque abierto, entrada y salida a través de válvulas manuales.

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

tanque al cual se lo alimenta desde la base, según el esquema, indicado en la Figura (XIV.3), donde se asumen conocidas la presión de entrada, P_e , y la presión de salida, P_s , supuestas constantes.

El conjunto de hipótesis es similar al caso anterior. Luego, por el *balance de materia* se tiene:

$$A_T \frac{d}{dt} h(t) = E - S \quad (7)$$

donde E y S pueden calcularse según:

$$E = C_{v_1} f \sqrt{(P_e - P_f)} \quad (8)$$

$$S = C_{v_2} f \sqrt{(P_f - P_s)} \quad (9)$$

$$P_f = P_o + \rho_l g h(t) \quad (10)$$

con P_o , P_e y P_s datos; ρ_l densidad del fluido y g aceleración gravitatoria.

Conocido $h(t)$ en cualquier instante podemos calcular P_f , y por lo tanto $S(t)$. Luego, a partir de la Ecuación Diferencial (7) puede calcularse $h(t + \Delta t)$ para todo valor del tiempo hasta llegar al especificado utilizando un valor Δt conveniente. Obviamente, asumimos que se utiliza un método explícito para resolver la ecuación diferencial que describe el comportamiento del sistema, que para casos sencillos como estos resulta lo más adecuado.

Ejemplo 4: Tanque cerrado.

Una ligera complicación se presenta cuando se tiene un recipiente cerrado, según lo indicado en la Figura (XIV.4). Aquí la presión de la fase vapor P_v no es constante (diferente de la atmosférica), sino que puede variar y debe calcularse instante a instante, ya que de haber una masa de gas retenida importante, varía con el volumen de la cámara disponible para el gas.

Generalmente se plantean dos opciones. En una se asume *holdup* de vapor despreciable y por lo tanto la presión de la fase vapor surge de plantear la relación de equilibrio (ya sea mezcla multicomponente o un sólo componente).

El otro camino supone que la masa retenida en el volumen para el gas no es despreciable (sea constante o no)

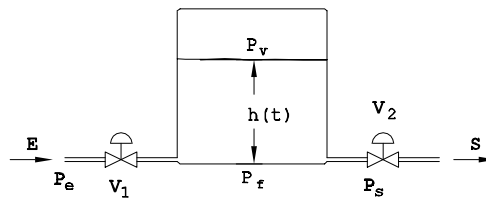


Figura XVI.4: Esquema de un tanque cerrado.

y por lo tanto, la presión surge de un cálculo de aplicar una ecuación de estado (ya sea la ley de los gases ideales o bien otra más realista). En este caso, necesitamos tanto el volumen disponible para el gas/vapor como la masa y la temperatura del mismo. Esta última puede adoptarse igual a la del líquido si consideramos despreciable el aumento o disminución de energía interna en el gas debido al trabajo de expansión/compresión.

Ejemplo 4a: Holdup de vapor despreciable.

Para el caso en que consideramos *holdup* de vapor despreciable sólo debe evaluarse la presión de vapor, $P_v = P_{vs}$. La temperatura del vapor, T_G , podemos asumirla en equilibrio térmico con la del líquido (temperatura de ambas fases iguales). Por lo tanto, dado la temperatura del líquido, la presión de vapor de equilibrio puede calcularse utilizando cualquiera de las correlaciones disponibles, por ejemplo, Antoine (ver Capítulo VII).

Una vez disponible la presión en la fase vapor, los cálculos a realizar son equivalentes al ejemplo anterior. En efecto, sólo nos resta evaluar, para cada instante, dada la presión de vapor, $P_{vs} = f(T_G)$, los caudales correspondientes. A partir de los mismos puede evaluarse $h(t + \Delta t)$ instante a instante, hasta alcanzar el valor de tiempo especificado.

Ejemplo 4b: Holdup de vapor no despreciable y constante.

Si en cambio consideramos importante la masa de vapor retenida (masa constante y conocida), entonces podemos evaluar por medio de una ecuación de estado (supongamos gas perfecto) la presión en la fase vapor:

$$P_v = n R T_G / V_G \quad (11)$$

El problema ahora es determinar V_G . Dado que asumimos para el vapor una expansión isotérmica (T_G constante), la masa evaporada despreciable (*holdup* de vapor (n) constante) y equilibrio térmico líquido-vapor, esto es, conocemos T_G , el volumen ocupado por el vapor, V_G , es la única variable y es igual al volumen total del tanque, V_T , menos el del líquido.

$$V_G = V_T - A_T h(t) \quad (12)$$

Recordar que asumimos que el área transversal del tanque, A_T , es constante.

Determinado P_v , todos los cálculos que deben realizarse son similares a los ya vistos en los ejemplos anteriores.

Si la expansión del gas no fuera isotérmica, la variación de la temperatura con el volumen deberá ser tenida en cuenta, ya que el trabajo de compresión del gas se convierte en variación de energía interna y existen casos en los cuales este factor no es despreciable.

Por otra parte, si existiera una caída de presión importante en la válvula de entrada, o bien se calienta el contenido líquido del tanque, entonces la evaporación del líquido podría no ser despreciable, y por lo tanto, debe plantearse la variación del *holdup*, tanto en la fase líquida como en la fase vapor.

Ejemplo 5: Evaporación en tanque cerrado.

Consideremos ahora un ejemplo en el cual se introduce calor a través de una camisa calefactora a un recipiente cerrado, del cual se extrae la corriente vapor producida a través de una cañería regulada por una válvula (el vapor se forma a partir de la ebullición del líquido), según el esquema indicado en la Figura (XIV.5).

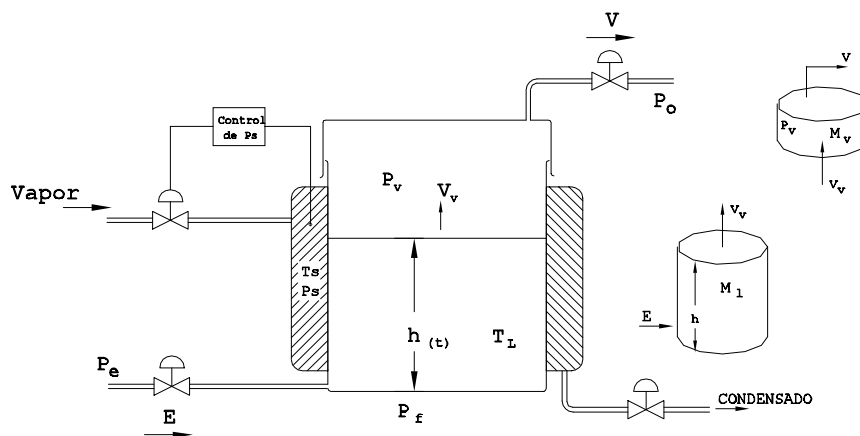


Figura XVI.5: Evaporación en un recipiente cerrado con calefacción.

Hipótesis:

- La caída de presión del líquido a través de la válvula no genera cambio de propiedades apreciables en el mismo.
- Líquido perfectamente mezclado.
- Se supone que la densidad de líquido es constante, pese a la variación de temperatura.
- Se desprecian las pérdidas calóricas a través de las paredes del recipiente y/o cañerías
- Se supone un *control perfecto* de la presión de vapor de calefacción, P_s , a la cual le corresponde la temperatura de saturación T_s .
- Se supone que no existe reacción química.

Asumimos equilibrio térmico entre el líquido y el vapor. A partir de estas hipótesis se plantean los balances de energía y materia:

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Balance de energía:

$$\frac{d}{dt}(M_l HL) = Q + \rho_l E HL - V_v HV \quad (13)$$

donde M_l es el *holdup* de líquido, E caudal volumétrico y V_v caudal másico.

Balance de materia, fase vapor:

$$\frac{dM_v}{dt} = V_v - V \quad (14)$$

donde V es el caudal másico de vapor a la salida del tanque, V_v el caudal másico de vapor que abandona la fase líquida y M_v el *holdup* de vapor.

Balance de materia de la fase líquida:

$$\rho_l A_T \frac{d}{dt} h(t) = \rho_l E - V_v \quad (15)$$

Si utilizamos un método explícito para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales, que por otra parte son apropiados para estos casos (y ventajosos ya que requieren menor tiempo de cómputo), dado el valor de las variables diferenciales, debemos calcular el miembro derecho. Para ello deben utilizarse las siguientes relaciones, que permiten determinar las variables que necesitamos:

$$Q = U A_h (T_s - T_L) \quad (16)$$

donde el área de calefacción, A_h , se supone constante, pese a que puede variar con la altura del líquido en el tiempo, T_s es la temperatura de condensación del vapor y T_L la temperatura del líquido.

La masa de líquido retenida en cada tiempo resulta:

$$M_l = A_T h(t) \rho_l \quad (17)$$

de donde, a partir del contenido entálpico total, $M_l HL$, se obtiene la entalpía específica (por división) y a partir de la misma, la temperatura de líquido, T_L . Conocida la temperatura del líquido, podemos calcular el calor transferido.

El caudal de entrada E puede calcularse como en los ejemplos anteriores; por ejemplo, conocida la presión en el fondo del tanque, P_f , tenemos:

$$E = C_v f \sqrt{(P_e - P_f)} \quad (18)$$

$$P_f = P_v + \rho_l g h(t) \quad (19)$$

El cálculo de la masa evaporada puede realizarse a partir de la relación que nos indica que el caudal de vapor es proporcional a la diferencia de presión entre la presión de vapor del líquido, P_{vs} , que es función de la temperatura T_L y la presión de la fase vapor en el tanque, P_v .

$$V_v = K (P_{vs} - P_v) \quad (20)$$

En general, la constante K (pseudo-coeficiente de transferencia de materia) se fija en un valor muy grande de tal forma de lograr que P_v tienda a P_{vs} . A medida que usamos un valor más pequeño, podemos visualizar el efecto del no equilibrio en la evaporación, ya que progresivamente la presión en el tanque se diferencia de la de equilibrio. Como ya mencionamos, P_v se calcula según:

$$P_v = n R T_G / V_G \quad (21)$$

donde V_G es el volumen de la cámara de gas, que puede obtenerse restando el volumen del líquido al volumen total del tanque y el número de moles surge directamente a partir del holdup de vapor, M_v .

Para la ecuación anterior, se considera que la fase vapor tiene la misma temperatura (T_G) que el líquido (T_L), que es conocida (equilibrio térmico).

El caudal másico de vapor que abandona el tanque (V) puede calcularse a través de la funcionalidad que vincula a éste con la caída de presión a través de la válvula según el tipo especificado, por ejemplo:

$$V = C_v \sqrt{\frac{(P_v - P_0)}{\rho_v}} \quad (22)$$

donde C_v es la constante característica de la válvula con las unidades dimensionales adecuadas y ρ_v es la densidad del vapor.

Ejemplo 6: Reactor tanque agitado con intercambio de calor.

En este ejemplo analizaremos un reactor tanque agitado mezcla perfecta, con una reacción de primer orden, exotérmica, por lo que se requiere enfriamiento que es provisto por una camisa por la cual circula un caudal volumétrico de agua de proceso, A_e .

El sistema se indica esquemáticamente en la Figura (XIV.6).

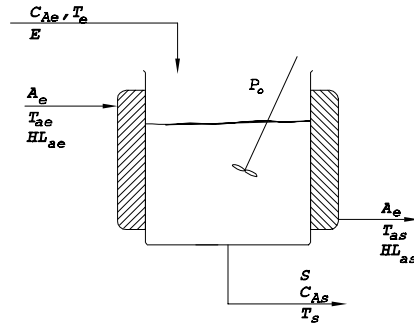


Figura XVI.6: Reactor tanque agitado con agua de enfriamiento.

Hipótesis:

- Reactor tanque ideal mezcla perfecta.
- Densidad del líquido constante (independiente de la temperatura y de la composición).
- No existen pérdidas calóricas a través de las paredes.
- Líquido de enfriamiento perfectamente mezclado en camisa.
- Área y coeficientes de transferencia de calor constantes.

Balance de materia:

$$\frac{dV_l}{dt} = E - S \quad (23)$$

donde V_l es el volumen de líquido retenido en el reactor.

Balance de materia para el reactante A:

$$\frac{d}{dt} (V_l C_{As}) = E C_{Ae} - S C_{As} - V_l k C_{As} \quad (24)$$

donde k es la constante cinética, función de la temperatura de líquido según:

$$k = k_0 \exp (-\Delta H_r / R T_L) \quad (25)$$

donde ΔH_r representa el calor de reacción.

Balance de energía:

$$\rho_l \frac{d}{dt} (V_l HL) = \rho_l E HL_e - \rho_l S HL_s + (V_l k C_{As}) \Delta H_r - UA_h \Delta T_m \quad (26)$$

donde ΔT_m es la diferencia media logarítmica para la transferencia de calor.

Se suponen conocidas las presiones de contorno, por lo cual son calculables los caudales E y S , a partir de los gradientes de presiones y los dispositivos que correspondan, según vimos en ejemplos anteriores. A_e se supone conocida.

Para el cálculo de la concentración Ca_s debemos conocer la temperatura del líquido (ya que k es función de la misma). Ésta surge de la ecuación diferencial del balance de energía. Aquí debemos considerar el calor de reacción ΔH_r , que por lo general también depende de la temperatura. Se supone la funcionalidad provista como dato. Por último se debe calcular la diferencia media efectiva para la transferencia de calor. La ecuación algebraica para el cálculo de la diferencia ΔT_m resulta:

$$\Delta T_m = \frac{(T_L - Ta_s) - (T_L - Ta_e)}{\ln (T_L - Ta_s) / (T_L - Ta_e)} \quad (27)$$

En esta expresión no conocemos Ta_s , por lo que deben agregarse nuevas relaciones o nuevas hipótesis. Planteando la dinámica de la entalpía retenida en la masa de agua de enfriamiento, se tiene:

$$\rho_a V_a \frac{d}{dt} (HL_{as}) = U A_h (T_L - Ta_s) + \rho_a A_e (HL_{ae} - HL_{as}) \quad (28)$$

donde HL_{ae} es la entalpía del agua de enfriamiento en la entrada, HL_{as} la entalpía en la salida, A_e es el flujo volumétrico (se supone *holdup* de agua de enfriamiento constante) y ρ_a la densidad del agua (supuesta constante). A partir de esta ecuación, al obtener la entalpía específica del agua de enfriamiento a la salida (igual a la de la camisa de enfriamiento por la hipótesis de mezcla perfecta), podemos calcular la temperatura, Ta_s . Con la misma, y las hipótesis asumidas, podemos calcular el calor transferido, para ser utilizado en la Ecuación (26). Además, si suponemos que el líquido en la camisa de enfriamiento se encuentra perfectamente mezclado y su masa es constante (se supone *holdup* de agua de enfriamiento constante), luego la ecuación (27) se simplifica, ya que el agua de enfriamiento tendrá una temperatura global única, la de salida, que resulta desconocida.

$$Q = U A_h (T_L - Ta_s) = U A_h \Delta T_m \quad (29)$$

Por último, resulta interesante aclarar que dado que existe una reacción química, la velocidad con que el componente A desaparece implica la aparición de otros componentes. En este caso, se supone que sólo estamos interesados en seguir la evolución del componente A en la corriente de salida y además, que las propiedades no se alteran demasiado por las variaciones en composición, asumiendo, por ejemplo, que reactante y productos se encuentran sumamente diluidos. Si se conoce la estequiometría de la reacción, puede fácilmente plantearse un balance de materia para

cada componente.

Ejemplo 7: Tanques en serie.

En este ejemplo nos interesa mostrar la forma en que se acoplan las ecuaciones diferenciales, formando un sistema de elevada dimensión, a medida que se incrementa el número de elementos interconectados. Sea, por ejemplo, el sistema indicado en la Figura (XIV.7), en la cual se esquematiza un arreglo de tres tanques en serie, tomados cada uno en forma similar al descrito en el Ejemplo (4), por lo que las hipótesis asumidas son las mismas que en el mencionado ejemplo.

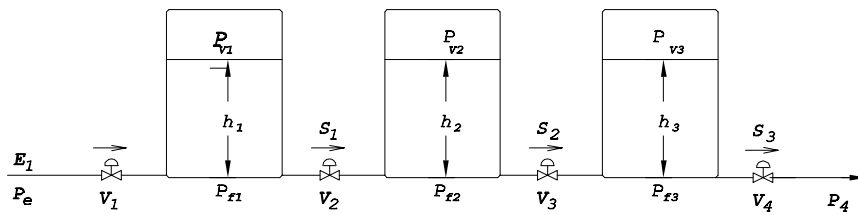


Figura XVI.7: Sistema con tres tanques en serie.

Aquí nuevamente, por condiciones de contorno suponemos que P_e y P_4 son conocidas y constantes.

Balance de materia para cada tanque:

$$A_{T_1} \frac{d}{dt} h_1(t) = E_1 - S_1 \quad (30)$$

$$A_{T_2} \frac{d}{dt} h_2(t) = S_1 - S_2 \quad (31)$$

$$A_{T_3} \frac{d}{dt} h_3(t) = S_2 - S_3 \quad (32)$$

Nuevamente, dados los valores de h_1 , h_2 y h_3 se deberán calcular todas las demás variables. Esto impone, en el caso general, para resolver el sistema de ecuaciones del miembro derecho, un procedimiento de particionado, rasgado y ordenamiento, tal cual como lo vimos en el Capítulo IV, de tal manera de lograr una secuencia de resolución acíclica. En efecto, sabemos que ahora existen ecuaciones acopladas del siguiente modo:

$$E_1 = C_{v_1} f \sqrt{(P_e - P_{f_1})} \quad (33)$$

$$P_{f_i} = P_{v_i} + \rho_l g h_i \quad ; \quad i = 1, 2, 3 \quad (34)$$

$$S_1 = C_{v_2} f \sqrt{(P_{f_1} - P_{f_2})} \quad (35)$$

$$S_2 = C_{v_3} f \sqrt{(P_{f_2} - P_{f_3})} \quad (36)$$

$$S_3 = C_{v_4} f \sqrt{(P_{f_3} - P_4)} \quad (37)$$

$$P_{v_i} = \frac{n_i R T_{G_i}}{V_{T_i} - A_{T_i} h_i} \quad ; \quad i = 1, 2, 3 \quad (38)$$

donde n_i (número de moles de gas) es constante y dato y T_G se asume igual a la temperatura del líquido.

Este ejemplo nos brinda varias conclusiones. En primer lugar, el número de ecuaciones se incrementa rápidamente, al aumentar el número de elementos del arreglo. Sin embargo, las ecuaciones pueden expresarse genéricamente utilizando índices, cuya sola función es ayudar a individualizar el tipo de variable (caudal, presión, etc) y la etapa o elemento de la cascada, como vimos en el Capítulo X para torres de destilación.

Queda claro que al complicar el sistema, por ejemplo si se necesitara plantear el balance de energía, o bien existieran múltiples reacciones químicas, aparecen nuevas ecuaciones acopladas, incrementando el número y complejidad de las mismas, que deben resolverse simultáneamente. Si además consideramos que existen casos en los cuales se introducen expresiones fuertemente no lineales (por ejemplo la diferencia de temperatura media logarítmica, la necesidad de utilizar ecuaciones de estado mucho más complicadas que la de los gases perfectos, el cálculo de la entalpía considerando los calores de mezcla, el equilibrio en mezclas multicomponentes, etc.), resulta evidente la posibilidad de la existencia de una secuencia de resolución cíclica, y por lo tanto la necesidad de plantear un método algorítmico para minimizar el número de variables iteradoras a emplear, según lo visto en el Capítulo IV. Dado que

para sistemas muy grandes el tiempo de cómputo empleado es importante, minimizar el esfuerzo de cálculo al resolver el miembro derecho resulta imperioso, ya que se debe calcularlo instante a instante, a lo largo de todo el intervalo de integración.

Resumiendo, el objetivo es lograr encontrar una secuencia acíclica, esto es, sin variables de iteración a los efectos de minimizar el tiempo de cálculo. Si bien en el ejemplo propuesto ello es posible, no siempre resulta de esa manera, especialmente si se incorporan expresiones fuertemente no lineales.

Por otra parte, hasta aquí se ha supuesto que el modelo ha sido adecuadamente planteado desde el punto de vista de los grados de libertad del sistema, esto es, que el número de ecuaciones es igual al de incógnitas. Como se ha visto en el Capítulo IX, este aspecto es lo primero que debe analizarse al plantearse un modelo.

La complicación en la solución del sistema de ecuaciones algebraicas puede observarse a partir de los próximos ejemplos. Suponga que parte de las corrientes que salen de los respectivos tanques se bifurcan, por alguna necesidad específica del proceso bajo análisis, según el arreglo indicado en la Figuras (XIV.8).

Ejemplo 8: Sistemas con reciclos o bifurcaciones.

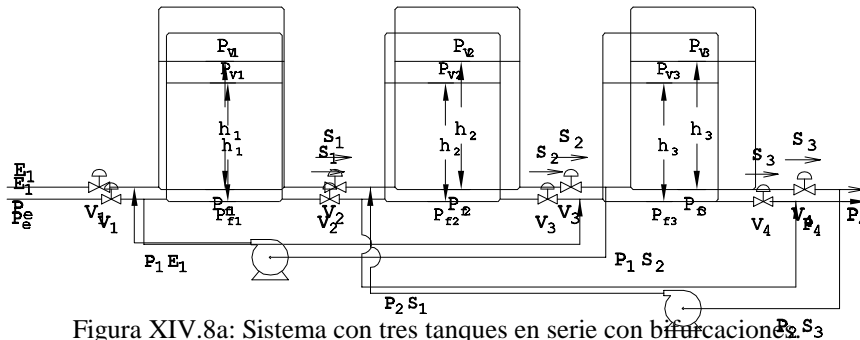


Figura XIV.8a: Sistema con tres tanques en serie con bifurcaciones.
 Figura XIV.8b: Sistema con tres tanques en serie con reciclos.

En la Figuras (XIV.8a) y (XIV.8b) P es un parámetro que indica el porcentaje de la corriente derivada. Por lo tanto, PE_i significa por ejemplo, si $P = 0.5$, que la mitad de la corriente E_i se bifurca según lo expresa el diagrama. También podrán plantearse esquemas con reciclos, aunque en este caso, debido al gradiente de presiones, recircular una corriente implicaría utilizar una bomba que facilite el flujo en el sentido contrario a la caída de presión (ver Figura (XIV.8b)). La consecuencia natural de este *reciclo de información*, es que todas las ecuaciones en sus miembros derechos, tendrán muchas variables también pertenecientes a las otras. En el sentido matricial, esto significa que en vez de concentrarse las variables en la diagonal o en una banda simétrica a ella (la etapa anterior, la actual y la que le sigue en la cascada), y el resto de la matriz con valores nulos, ahora existe una gran dispersión de variables.

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Ello implica, fijado un conjunto de variables diferenciales, una mayor probabilidad en la necesidad de utilizar métodos iterativos para resolver el sistema de ecuaciones algebraicas que corresponde al miembro derecho, una vez dados los valores de las variables diferenciales al tiempo t , para calcular el correspondiente valor de las variables en el instante posterior.

Además, como se comentó en el Capítulo XIII, no es ésta la única razón por la cual aparece la necesidad de utilizar métodos iterativos en la solución del sistema de ecuaciones que conforma el miembro derecho. Esto sólo es así, si se supone que se utilizan métodos explícitos para la resolución de las ecuaciones diferenciales, esto es, aquellos que calculan el valor de la variable diferencial en el tiempo $t+\Delta t$, sólo a partir de los valores conocidos de las variables diferenciales al instante t .

Todos estos métodos (los supuestos hasta este punto) son en general muy efectivos para los problemas aquí tratados, si se utilizan valores del incremento Δt muy pequeños, cuyo esfuerzo de cálculo para recorrer todo el intervalo de integración se compensa con creces al evitar la estrategia iterativa propia de los métodos implícitos. Sin embargo, en sistemas más complicados, por ejemplo con ecuaciones fuertemente no lineales, o bien con constantes de tiempo entre variables muy diferentes entre sí (sistemas *stiff* como veremos en el capítulo siguiente), resultará necesario utilizar métodos numéricos implícitos para la resolución de las ecuaciones diferenciales correspondientes. Esto de por sí introduce la necesidad de recurrir a métodos iterativos para resolver el sistema de ecuaciones algebraico que resulte, según lo discutido en el Capítulo XIII.

Para nuestro ejemplo de la Figura (XIV.8a) el sistema a resolver resulta:

$$A_{T_1} \frac{dh_1}{dt} = E_1 (1 - P_1) - S_1 \quad (39)$$

donde las expresiones Φ indican simbólicamente la función correspondiente.

Paralelamente, para el sistema de la Figura (XIV.8b), resulta:

$$A_{T_1} \frac{dh_1}{dt} = E_1 + P_1 S_2 - S_1 \quad (48)$$

$$A_{T_2} \frac{dh_2}{dt} = S_1 (1 - P_2) - S_2 \quad (49)$$

$$A_{T_3} \frac{dh_3}{dt} = S_2 + P_1 E_1 - S_3 \quad (41)$$

$$E_1 = \Phi(P_e, P_{f_1}) \quad (42)$$

$$S_1 = \Phi(P_{f_1}, P_{f_2}) \quad (43)$$

$$S_2 = \Phi(P_{f_2}, P_{f_3}) \quad (44)$$

$$S_3 = \Phi(P_{f_3}, P_4) \quad (45)$$

$$P_{f_i} = \Phi(h_i, P_{v_i}) \quad ; \quad i = 1, 2, 3 \quad (46)$$

$$P_{v_i} = \Phi(n_i, T_{G_i}, V_{G_i}) \quad ; \quad i = 1, 2, 3 \quad (47)$$

$$A_{T_3} \frac{dh_3}{dt} = S_2 (1 - P_1) - S_3 \quad (50)$$

$$E_1 = \Phi(P_e, P_{f_1}) \quad (51)$$

$$S_1 = \Phi(P_{f_1}, P_{f_2}) \quad (52)$$

$$S_2 = \Phi(P_{f_2}, P_{f_3}) \quad (53)$$

$$S_3 = \Phi(P_{f_3}, P_4) \quad (54)$$

$$P_{f_i} = \Phi(h_i, P_{v_i}) \quad ; \quad i = 1, 2, 3 \quad (55)$$

$$P_{v_i} = \Phi(M_i, T_{G_i}, V_{G_i}) \quad ; \quad i = 1, 2, 3 \quad (56)$$

Ejemplo:

Si damos valores a las constantes correspondientes al proceso indicado en la Figura (XIV.7), obtenemos un sistema de ecuaciones diferenciales (que surgen de las Ecuaciones (30) a (38)), que como comentamos, puede ser resuelto por medio de métodos explícitos como los de Euler o Runge-Kutta de 4to. orden, entre otros. Sea por ejemplo el siguiente conjunto de parámetros para los tanques 1, 2 y 3, respectivamente: $A_T = 5 \text{ m}^2$, $V_T = 10 \text{ m}^3$ (tanques iguales), $Pe = 8 \cdot 10^4 \text{ kg/cm}^2$, $C_{v1}f = C_{v2}f = C_{v3}f = C_{v4}f = 10^{-3} \text{ m}^4/\text{min kg}^{1/2}$, $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$, $n_1 = n_2 = 120 \text{ mol}$, $n_3 = 300 \text{ mol}$, $P_4 = 10^4 \text{ kg/cm}^2$. Si adoptamos como valores iniciales para las variables diferenciales, por ejemplo los siguientes, $h_{1,0} = 1.6 \text{ m}$, $h_{2,0} = 1.6 \text{ m}$, $h_{3,0} = 1 \text{ m}$, podemos calcular la evolución de todas las variables según se indica en las siguientes figuras.

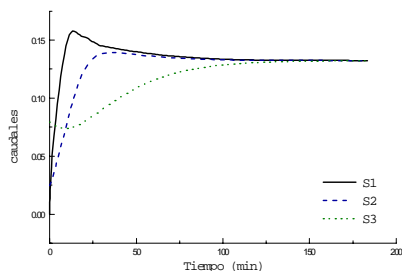


Figura XIV.9: Evolución temporal de los caudales a partir de una inicialización cualquiera.

La Figura (XIV.9) muestra la evolución de los caudales en los respectivos tanques en función del tiempo. Según hemos procedido, la inicialización ha sido sólo con sentido matemático en cada uno de ellos, ya que no se parte de un estado estacionario real, sino de uno ficticio. Esta situación es similar a la discutida en el Capítulo X al mencionar los simuladores por el método de relajación, que si bien se basan en resolver las ecuaciones diferenciales del modelo, el objetivo final consiste en

la obtención de los estados estacionarios finales, ya que el simulador es utilizado con ese fin. Aquí vemos que en el estado estacionario obtenido (el tiempo tiende a infinito, las variables adoptan un valor constante) todos los caudales son iguales, lo cual es necesario como sabemos para que no exista acumulación.

La evolución de las presiones, sin embargo, muestra que las mismas se estabilizan a diferentes valores (ver Figura (XIV.10)), lo cual es comprensible, ya que en estado estacionario deben proveer la fuerza impulsora (gradientes de presiones) para la circulación del fluido. Si ahora estudiamos distintas perturbaciones desde el estado estacionario hallado,

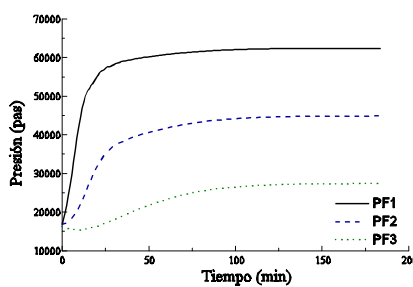


Figura XIV.10: Evolución de las presiones hasta el estado estacionario.

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

podremos obtener conclusiones acerca de la evolución de las variables de interés.

En este ejemplo se estudiarán dos perturbaciones. Las mismas serán producidas a los 200 minutos y 400 minutos, contando el tiempo a partir de la condición inicial. La primera perturbación consiste en provocar un escalón en la presión de entrada P_e , desde su estado inicial ($P_e = 8 \cdot 10^4 \text{ kg/cm}^2$) a un valor menor ($P_e = 5 \text{ kg/cm}^2$). La segunda perturbación a introducir ($t = 400 \text{ min}$) consiste en provocar un salto escalón en el valor de la constante de la válvula C_{v3} , desde su valor inicial (10^{-3}) al valor cero, esto es, simular un bloqueo en la misma. El estado de partida es el estacionario obtenido a partir de la perturbación anterior, ya que los tiempos son elegidos de tal manera que cuando se realiza la 2da. Perturbación, se alcanzó el estacionario correspondiente a la primera.

En las gráficas siguientes se mostrarán las evoluciones correspondientes, una a continuación de la otra, según los valores de tiempo especificados para las perturbaciones. Notar que al tiempo que se produce la segunda perturbación, el sistema ya alcanzó el estado estacionario correspondiente a la primera.

Se hace notar que hasta aquí, al plantear los modelos, hemos supuesto que el flujo de líquido entre tanques se da desde izquierda a derecha, ya que suponemos que la presión del lazo izquierdo en todo instante es mayor que la del derecho. Esto no siempre será así, ya que el gradiente puede revertirse en función de alguna perturbación, y el modelo debe tenerlo en cuenta, como veremos seguidamente.

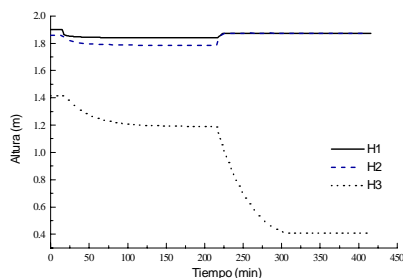


Figura XIV.11: Evolución de las alturas luego del escalón en la presión P_e .

A partir del instante de la perturbación, resolviendo el sistema de ecuaciones anterior, pero ahora con el nuevo valor para la constante modificada, se obtiene la evolución temporal de todas las variables del sistema. Por ejemplo, en la Figura (XIV.11) se muestra la evolución de las alturas de los respectivos recipientes. El primer tramo en la figura muestra el efecto de la reducción de la presión en la entrada, hasta llegar al nuevo valor estacionario. A partir de esta situación, y como consecuencia de suspenderse la

alimentación del último tanque, en la segunda parte de la evolución se muestra cómo la altura del mismo tiende a reducirse a un mínimo valor (existe caudal de salida mientras que la presión del fondo del tanque sea mayor que P_d). Las alturas de los tanques anteriores (1 y 2), tienden a aumentar, ya que mientras el caudal sea positivo (la presión P_e sea superior a P_{f1}) ingresa líquido al sistema. No obstante, la presión del gas en el cuerpo de vapor se hará cada vez mayor, ya que mientras la altura sube, el volumen disponible se hace cada vez menor. Dado que hemos despreciado toda solubilidad del gas en el líquido, a cualquier presión no existirán cambios en los moles

de gas existentes en la parte superior. Esto hace que en algún punto se igualen las presiones de entrada al tanque y la del fondo del mismo, anulando los caudales y, eventualmente, produciendo una reversión de flujo.

En la Figura (XIV.12) se observa (para la perturbación en C_{v3} , segundo tramo) una respuesta sinusoidal en el caudal S_1 . Esto se debe a que la presión del gas en la parte superior del tanque actúa como amortiguador, provocando un flujo en uno y otro sentido, según el valor de las diferencias de presiones existente. La primera parte de la evolución en la Figura (XIV.12) muestra la respuesta de los caudales a la perturbación de la presión de entrada; los cuales llegan luego de un tiempo al nuevo valor estacionario (a partir del cual se introduce la segunda perturbación recientemente analizada).

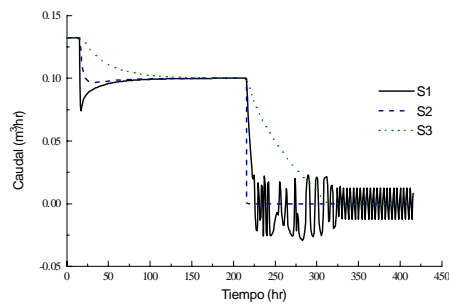


Figura XIV.12: Evolución de los caudales luego de la perturbación en la presión P_e .

Si bien no se muestra en la gráfica, la evolución de las presiones en el fondo de los tanques acompaña la trayectoria de la alturas de líquidos, ya que obviamente, éstas determinan la caída de presión que se tenga en cada instante de tiempo. Por ejemplo, la presión P_2 oscila (al igual que h_2) acompañando la evolución del caudal correspondiente en la Figura (XIV.12).

Como ya mencionamos, hasta ahora no hemos discutido el sentido de flujo, ya que siempre se supuso, al plantear las ecuaciones, que la presión de entrada era mayor que la del interior, lo que implicaba un flujo hacia el tanque. Pero esto no necesariamente será así en todos los casos durante la evolución del sistema, como en este ejemplo. Esto impone asegurarse en la expresión de la raíz en la Ecuaciones (35) a (37) que no sea negativa, para poder realizar el cálculo (lo cual se logra utilizando valor absoluto), pero por otro lado debemos *decidir* cual es el sentido del flujo, que dependerá del signo de la caída de presión.

Por otra parte, debemos tener mucho cuidado con el alcance que se dará a las simulaciones de un modelo propuesto, dado que las hipótesis abarcan un conjunto de hechos y conocimientos implícitos acerca del sistema, que son válidos en las condiciones planteadas, pero pueden cambiar si se perturba el sistema lo suficiente. Esto se da en la práctica cuando se tratan de simular fallas extremas (por ejemplo, situaciones donde un flujo se anula, etc.). Aquí las relaciones propuestas pueden no ser válidas, por ejemplo, debido a relaciones causales implícitamente asumidas en el modelo (sentido del flujo) que pueden revertirse o anularse bajo otras condiciones. Un ejemplo de relaciones causales es el siguiente: Al plantear la cantidad de calor que se disipa en un circuito eléctrico podemos escribir la conocida expresión $Q = I^2 R$. Si

bien en el modelo matemático la igualdad impone el doble sentido, esto es, el calor se iguala al producto de la derecha y viceversa, sabemos que en la realidad la circulación de corriente provoca la transformación cuantitativa en calor indicada (pérdidas) pero no se cumple la inversa debido a las limitaciones que impone el segundo principio de la termodinámica. *Esto determina un sentido de causalidad (orientación definida) a la interpretación de la ecuación dada, no disponible ni contenida implícitamente en el planteo de la ecuación escrita.* Es por ello que deberá tenerse cuidado en el contexto en el cual la utilizamos y la interpretación que hacemos de los resultados de un modelo que la contenga, si perturbamos diferentes variables que se encuentran vinculadas a partir de la misma.

XIV.3 MODELO PARA LA SIMULACIÓN DINÁMICA DE UN SEPARADOR FLASH

Este ejemplo ha sido ya discutido en el Capítulo IX, en el cual vimos que existen diferentes alternativas funcionales. A continuación plantearemos el caso correspondiente a la operación adiabática, manteniendo las hipótesis básicas realizadas en aquella oportunidad.

Hipótesis:

- El vapor y el líquido tienen el tiempo suficiente para lograr equilibrio de fases. Equilibrio instantáneo frente a la evolución temporal de las otras variables.
- Existe solo una fase líquida y otra vapor.
- No existen reacciones químicas.
- Sistema adiabático.
- Masa de vapor despreciable frente al líquido retenido en el equipo.

En general, al igual que en el caso de simulación en estado estacionario, para modelar este equipo recurrimos a los balances de materia y energía, pero ahora considerando el término de acumulación (ver Figura (IX.1)).

Balance de materia por componente ($i = 1, \dots, NC$):

$$\frac{dM_i}{dt} = F z_i - V y_i - L x_i \quad (57)$$

Balance de energía:

$$\frac{d(HE)}{dt} = F HF - V HV - L HL \quad (58)$$

donde los M_i representan el *holdup* de materia por componente en la fase líquida y HE

la acumulación de contenido energético total, respectivamente. La simbología es la misma para la utilizada en el Capítulo IX.

Como en todo problema de simulación dinámica, se asume conocido el estado de las variables para el tiempo inicial. Este estado puede ser *real*, o *representativo de un estado estacionario*, con lo cual las trayectorias a calcular tienen sentido físico, o bien pueden ser *virtuales*. En efecto, como se ha explicado al analizar distintos tipos de simuladores estacionarios, en los basados en el método de relajación, el punto inicial puede que tenga (si no se parte de un estado estacionario) sólo sentido matemático (inicialización que no coincide con un estado estacionario real) y las trayectorias que se calculan no tienen significación física, ya que sólo el estado estacionario que se obtenga tendrá significado y es precisamente el resultado buscado, ya que estamos utilizando nuestro modelo como un simulador estacionario bajo una filosofía numérica que involucra la solución de ecuaciones diferenciales (método de relajación).

Para la simulación estacionaria de un equipo flash, esta filosofía no tiene ventajas respecto a la vista en el Capítulo IX, ya que no existen en general problemas serios de convergencia al resolver el sistema de ecuaciones algebraicas correspondientes. Por lo tanto, resolver el sistema de ecuaciones diferenciales involucra más tiempo de cómputo sin ventajas adicionales. Sin embargo, no se presenta la misma situación en la simulación de equipos para separación de mezclas multicomponente en arreglos múltiple etapa (Capítulo X). Allí vimos que en algunos casos es difícil obtener convergencia, aún con diferentes tipos de inicializaciones propuestas, en especial para mezclas fuertemente no ideales. En este caso, existen propuestas alternativas, según lo expuesto en la Sección (X.7), que reiteramos, se basan en resolver un sistema de ecuaciones diferenciales con el objeto de obtener el sistema estacionario deseado, a partir de una inicialización particularmente establecida o condición inicial a tiempo cero.

Volviendo a nuestro sistema de ecuaciones, vemos que tenemos $NC+1$ ecuaciones diferenciales. Conocido el estado al tiempo inicial, t_0 , podemos evaluar el miembro derecho a partir de cuyo valor podrá nuevamente calcularse el nuevo estado (para $t = t_0 + \Delta t$) de las variables diferenciales. Si todos los valores de las expresiones del miembro derecho son idénticamente nulos, es que estamos en un estado estacionario y para todo tiempo las variables diferenciales serán iguales.

En caso contrario, una vez obtenido el nuevo estado de las variables (M_i y HE), debemos calcular nuevamente el miembro derecho y así sucesivamente hasta llegar a valor fijado para el tiempo final de simulación especificado. Habitualmente se adoptan métodos de resolución explícitos para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales (57), (58), dadas las características del sistema de ecuaciones a resolver.

Para resolver el miembro derecho debemos calcular los contenidos entálpicos (que son función de la temperatura, de la presión y de la composición de vapor y líquido). Además debemos conocer los valores de los caudales de líquido y vapor, suponiendo que conocemos el caudal de entrada, F , que *se supone constante*,

al igual que el vector de composiciones, z , la temperatura y la presión de la alimentación.

Por definición, dados los valores M_i , sabemos que las fracciones molares se calculan según la siguiente expresión:

$$x_i = \frac{M_i}{\sum_{i=1}^{NC} M_i} \quad (59)$$

Además, dado que suponemos un estado de equilibrio, se debe cumplir:

$$y_i = K_i(x, y, T, P) x_i \quad (60)$$

Sin embargo, para realizar el cálculo, debemos conocer T , ya que P y las x_i son ahora conocidas.

Dado que es variable diferencial, conocemos en todo instante el contenido entálpico del líquido. Dado que suponemos despreciable el contenido entálpico y másico retenido de vapor (*holdup* de vapor despreciable), la única variable conocida corresponde a la fase líquida, cuya composición también lo es. Por lo tanto, a partir de la ecuación (HL se obtiene de dividir HE por el holdup másico):

$$HL = HL(x, P, T) \quad (61)$$

podemos calcular T , que es la única incógnita. Generalmente deberá recurrirse a un método iterativo.

Dado el valor de la temperatura, a partir de la Ecuación (60) podemos calcular ahora la composición de vapor. No obstante, para calcular el miembro derecho (Ecuaciones (57) y (58)), todavía debemos conocer los valores de los caudales molares del vapor y líquido (V y L , respectivamente).

Con las ecuaciones que hemos planteado, no podemos determinar dichos valores en función de las variables hasta ahora calculadas. Debemos encontrar nuevas relaciones, lo cual nos lleva a suponer un estado de operación particular, según hemos discutido profundamente en los ejemplos anteriores.

En general, las relaciones que necesitamos en este caso surgen de relacionar la caída de presión con el caudal. Para ello suponemos que las presiones a las cuales descarga nuestro sistema, o condición de contorno, esto es, en el límite de la cañería que transporta el caudal (L y V en este caso) son conocidas y constantes (asumimos control perfecto de las mismas). Obviamente, si consideramos un proceso completo, dado que para cada subsistema que compone el mismo se puede asumir la misma hipótesis, suponiendo que al final se descargan las corrientes producidas a la atmósfera o reservorios específicos (que en general pueden considerarse como

pulmones a condiciones constantes), esta hipótesis no es limitante, pero debe tenerse cuidado en la interpretación de los resultados al realizar una simulación, caso por caso. Por lo tanto, el caudal que nos preocupa puede ser calculado como el producto de un factor por la caída de presión. El factor será dependiente del tipo de arreglo utilizado (una simple cañería, flujo por gravedad, la curva característica de la bomba, una válvula de control, válvula manual, etc.). La caída de presión, como vimos, tiene una componente variable (la presión del equipo) y una constante conocida (la de descarga). Si el caudal de salida de la fase líquida fuera consecuencia de una restricción fija, es fácil obtenerlo mediante una simple relación en función de la altura líquida en el tanque de separación flash. La altura se puede calcular conociendo el área de la base del tanque (supuesta constante), dadas la masa líquida retenida y la densidad de la mezcla que se asume conocida y constante. Sin embargo, una instalación de este tipo no es muy atractiva tecnológicamente.

La regulación del caudal por medio de un controlador resultará en general más adecuada. Ello nos obliga a plantear cómo se relaciona el caudal de salida, L , en función del nivel y los parámetros del controlador de nivel. En efecto, un controlador que manipule el caudal de salida en función del error, ε , entre el nivel actual $h(t)$ y el deseado o *set point*, h_{set} , nos brindará la relación buscada.

Un dato necesario en este punto es el tipo de controlador que utilizaremos. Dentro de los controladores típicos podemos mencionar al proporcional, el integral y el derivativo, como cualquiera de sus combinaciones; por ejemplo, el controlador PID (proporcional-integral-derivativo), según se analizará con mayor profundidad en el Capítulo XVI.

El más sencillo de los mismos, el proporcional, se basa en el simple principio de actuar mediante una señal enviada a la válvula de control (de tal manera que la misma actúe operando sobre el caudal) en una magnitud proporcional al error (diferencia entre el valor deseado *set point* y el actual o real). Esto es, la acción de control proporcional, A_{cp} , resulta:

$$A_{cp} = K_p \varepsilon \quad (62)$$

donde $\varepsilon = (h(t) - h_{set})$ y K_p es la constante de acción proporcional del controlador (dato). A partir del valor de A_{cp} y dado el tipo de válvula de control (lineal, igual porcentaje, etc.), se dispondrá de la ecuación que en función de A_{cp} y la caída de presión entre el sistema y la descarga, nos brinde el caudal líquido de salida, L .

Si en cambio utilizamos un controlador derivativo, la acción de control resulta de la siguiente expresión:

$$A_{cd} = K_d \frac{d\varepsilon(t)}{dt} \quad (63)$$

Esto es, la acción del controlador es proporcional a la derivada del error en

el instante t . En este caso, la derivada respecto del tiempo del error es equivalente a la derivada del nivel, que es dato. Sólo resulta necesario introducir la relación del caudal en función de la acción de control y de la válvula, con lo cual a partir de un reordenamiento algebraico es posible el cálculo del mismo sin inconvenientes.

Por último, si se utiliza un controlador integral o una combinación que contenga una parte integral, aparece la necesidad de incorporar una nueva ecuación diferencial. En efecto, la ecuación que liga la acción de control con el error en este caso responde a la forma:

$$Ac_I = K_I \int_0^t \varepsilon(t) dt \quad (64)$$

Si derivamos ambos miembros respecto del tiempo se obtiene:

$$\frac{dAc_I}{dt} = \varepsilon(t) \quad (65)$$

De esta forma, a partir del error instantáneo, puede calcularse la acción integral del controlador en cada instante de tiempo posterior, con la cual a su vez se puede evaluar el caudal correspondiente a través de las relaciones apropiadas. Obviamente, cualquier combinación (por ejemplo un controlador proporcional integral derivativo PID) puede modelarse combinando las ecuaciones anteriores. Sin embargo, debe adicionarse una nueva ecuación diferencial al sistema representativo del evaporador flash.

Lo importante, entonces, es haber logrado relacionar mediante un sistema de ecuaciones, las variables diferenciales con las corrientes de salida que necesitamos calcular, ya que de lo contrario no podríamos plantear la dinámica del sistema. En este punto resulta importante remarcar, que al agregar un lazo de control, las respuestas obtenidas al resolver el modelo son a lazo cerrado, mientras que si modelamos el equipo sin incluir lazos de control, las respuestas obtenidas son a lazo abierto. No necesariamente, en todos los casos, necesitamos recurrir al expediente de introducir controladores para relacionar las variables de interés; dependiendo esto de la situación real que se quiera modelar.

Resumiendo, independientemente del número de ecuaciones diferenciales que deban agregarse por la especificación de ciertos controladores, es posible disponer de expresiones que brindan las corrientes de salida del equipo. En efecto, sea por ejemplo el sistema indicado en la Figura (XIV.13), donde P_v es la presión de vapor en el cuerpo de vapor, h es la altura, P_{set} y h_{set} los valores deseados o *set points*, P_1 y P_2 las presiones de descarga (conocidas y constantes). Aquí se agregan, a las ecuaciones ya planteadas, aquellas que permitan vincular el caudal de vapor y líquido con las variables diferenciales. Las mismas tienen el siguiente formato general:

$$V = f(P_v - P_{set}), P_1, \text{ tipo de válvula, algoritmo de control) } \quad (66)$$

$$L = f(h - h_{set}), P_2, \text{ tipo de válvula, algoritmo de control) } \quad (67)$$

Hasta aquí no hemos especificado nada acerca de la corriente de salida vapor. Dado que asumimos *holdup* de vapor constante, no tenemos ninguna ecuación diferencial que nos brinde la evolución de la masa retenida de vapor.

Podemos proceder, como ya vimos en el capítulo anterior, según dos opciones. En una se puede asumir que la masa de vapor es despreciable frente a la de líquido, por lo tanto P_v puede calcularse como la presión de equilibrio (presión de vapor de la mezcla P_{vs}). En efecto, dado que tenemos una mezcla multicomponente y por lo tanto cada componente ejerce una presión parcial en la fase vapor, debemos determinar ahora la presión de vapor de la mezcla. Si en cambio suponemos que la masa de vapor varía con el tiempo, deben plantearse las ecuaciones diferenciales correspondientes. Para ello asumimos una función de transferencia para calcular la masa evaporada. Además, o bien debemos calcular la variación de la temperatura para el gas o asumimos equilibrio térmico, según se ha indicado en los ejemplos anteriores.

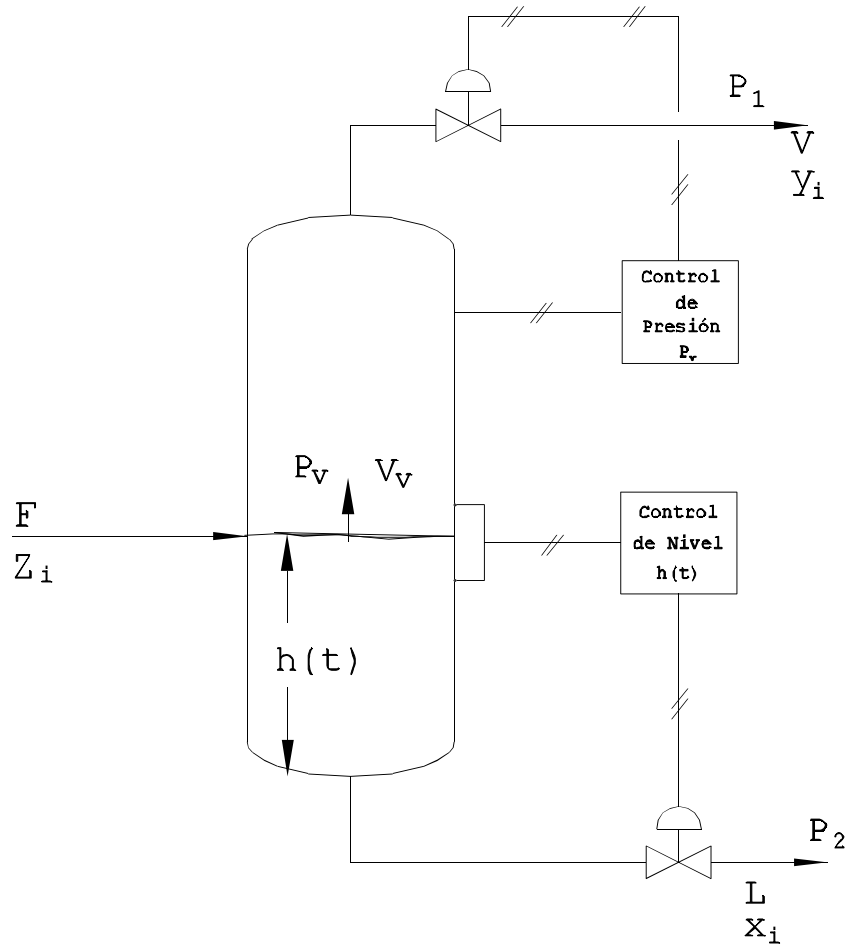


Figura XIV.13: Equipo de evaporación flash. Mezcla multicomponente. Caudal de líquido de salida y presión controladas.

En este caso, la ecuación que nos brinda la masa evaporada puede ahora plantearse:

$$V_v = K (P_{vs} - P_v) \quad (68)$$

donde P_{vs} es la presión de vapor de la mezcla, K es una pseudo-constante de transferencia de materia en la interfase líquido-vapor y P_v es la presión de vapor en el volumen disponible para el mismo.

Como ya mencionamos, mientras más elevado sea el valor asignado a K , más próximo al equilibrio ($P_v \rightarrow P_{vs}$) se comportará el sistema. Se puede observar qué sucede cuando se emplean distintos valores de K , con lo cual se supone un grado de no-equilibrio en la transferencia de materia entre ambas fases. Para plantear el modelo, en este caso, se debe agregar al sistema de ecuaciones las correspondientes a la fase vapor. Esto es:

$$\frac{dM_i}{dt} = F z_i - L x_i - V y_i$$

$$\frac{d}{dt} (HE) = F HF - V HV - L HL$$

$$\frac{dM_G}{dt} = V_v - V \quad (69)$$

La ecuación que nos brinda la masa evaporada es la (68).

Por otra parte, al igual que los ejemplos anteriores, puede calcularse P_v según:

$$P_v = \frac{n R T_G}{V_G} \quad (70)$$

donde V_G es el volumen disponible para el vapor (volumen del tanque menos el ocupado por el líquido), T_G es la temperatura del gas, igual a la del líquido si se asume equilibrio térmico, y n se obtiene a partir del *holdup* de vapor, M_G , y el peso molecular promedio de la mezcla. Por último, debemos utilizar en la Ecuación (66) el valor de la presión calculado según la Ecuación (70) y no la de saturación o equilibrio.

Finalmente, para este equipo, pueden plantearse diversas alternativas, similares a las analizadas en el Capítulo IX para el caso estacionario. Por ejemplo, la operación en estado isotérmico (suponiendo control perfecto de temperatura y calculando en el tiempo la evolución del calor intercambio al igual que las otras variables de interés), proponiendo además diversos arreglos de controladores, etc. Algunas de estas alternativas son planteadas como ejercicios en la sección de problemas propuestos.

PROBLEMAS PROPUESTOS

P1) Confeccione un diagrama de flujo para implementar un programa que calcule la variación de la altura de un tanque según el modelo planteado en el Ejemplo (1). Nota:

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Suponga que dispone de subrutinas de cálculo para resolver ecuaciones diferenciales, tales como las desarrolladas en los problemas propuestos en el Capítulo XIII.

P2) Plantee un simulador dinámico para el reactor ejemplificado en la Figura (P2), en el cual se produce la siguiente reacción química $A + 2B \rightarrow 3C + 2D$, donde A y B son componentes que ingresan según lo planteado en el esquema. Suponga que el calor de reacción es despreciable. Asuma un conjunto de hipótesis similar a los ejemplos desarrollados en el capítulo.

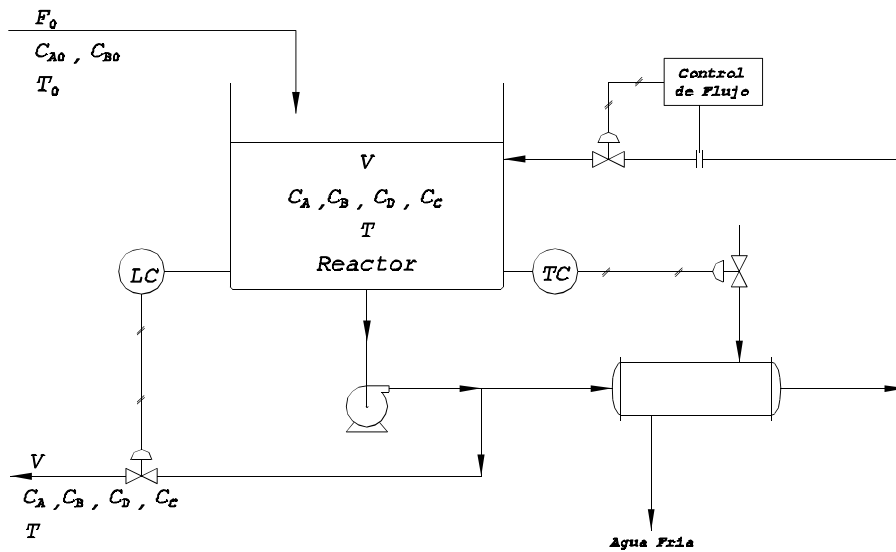


Figura XIV.P2

P3) Confeccione un programa para el cálculo de la variación de altura de cada recipiente indicado en la Figura (XIV.8b). Asuma que dispone de las subrutinas matemáticas correspondientes.

P4) Plantee un modelo para un evaporador flash isotérmico. Suponga que dispone de controladores de nivel cuya variable manipulada es el caudal de líquido de salida y un controlador de presión que manipula el caudal de vapor.

P5) Suponga que el área del tanque del Ejemplo (1) varía según una cierta ley $f(h)$, esto es, una función explícita de la altura. Plantee las ecuaciones diferenciales para resolver este nuevo caso, según las hipótesis restantes del mismo ejemplo.

P6) Suponga que el tanque del Ejemplo (2) ahora se *pincha* debido a corrosión, por lo que se produce un agujero de área A_g y a una distancia H_s de la base. ¿Cambia el modelo del equipo?

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

P7) Para un el caudal de un flujo que rebosa puede aplicarse la siguiente fórmula $Q = k H_r^{2/3}$, siendo k una constante y H_r la altura de líquido sobre el rebosadero (que no puede asumirla constante e igual al valor de diseño para el rebosadero hr). Suponga que la descarga del tanque (ver Figura (P8)) es bajo esta forma. Escriba el conjunto de ecuaciones diferenciales que gobierna el sistema. Proponga un procedimiento numérico para hallar el tiempo en el que se alcanza el estado estacionario dado un punto inicial.

P8) Sea un tanque similar al analizado en el Problema (P7) en el cual se produce una reacción química según se describe en la Figura (P8). Suponer calor de reacción despreciable y densidad constante. Reacción $2A + 3B \rightarrow C$. Obtener el modelo dinámico correspondiente y determinar la variación de la composición de A , B , y C con el tiempo. Se conocen todos los valores indicados en la entrada del tanque y las características del mismo. Despreciar para el cálculo de la conversión de reactivos en productos el volumen de líquido por encima de la altura H .

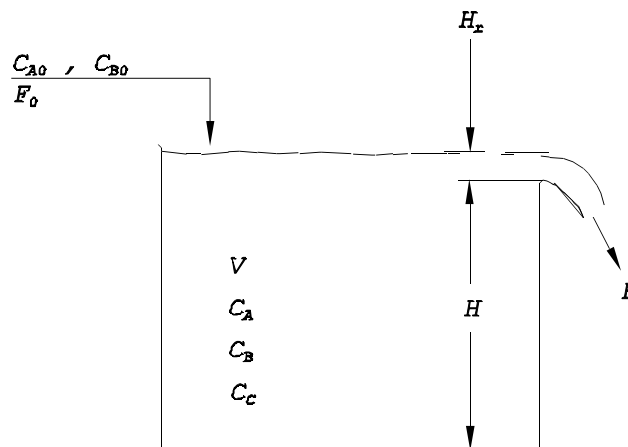


Figura XIV.P8

P9) ¿Cómo se modifica el planteo del modelo de un equipo flash si existe en la fase líquida una reacción química?. Qué datos necesita en esta nueva situación?. Cuáles hipótesis deben revisarse con respecto a las asumidas en nuestros ejemplos?.

P10) Modifique el diagrama de flujo de cálculo propuesto para los Ejemplos (6) y (7) si se utilizara un método explícito predictor-corrector para la integración numérica del sistema de ecuaciones correspondientes. ¿Cambia en algo este hecho el procedimiento o estrategia de resolución?.

BIBLIOGRAFÍA CITADA O RECOMENDADA

- ▶ Franks, R. G. E., *Mathematical Modeling in Chemical Engineering*, John Wiley and Sons Inc. NY (1965).
- ▶ Franks, R. G. E., *Modeling and Simulation in Chemical Engineering*, John Wiley and Sons Inc. NY (1972).
- ▶ Luyben, W. L., *Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineering*, 2nd. edition, McGraw-Hill Chemical Engineering Series (1990).
- ▶ Holland, C. D., *Fundamentals of Multi-Component Distillation*, Mc Graw-Hill, N.Y. (1981).
- ▶ Holland, C. D. y A. I. Liapis, *Computer Methods for Solving Dynamic Separation Problems*, pág.. 188, McGraw-Hill, N.Y. (1983).