

Modelado individual de equipos en estado dinámico (INTRO)

Profesor: Dr. Nicolás J. Scenna
Profesor: Dr. Néstor H. Rodríguez
JTP: Dr. Juan I. Manassaldi

Introducción

- La simulación dinámica es una herramienta para diseñar, optimizar y operar mejor un proceso.
- Las plantas químicas nunca se encuentran verdaderamente en estado estacionario.
- Las perturbaciones en la alimentación o en el entorno, el ensuciamiento y desgaste de equipos alteran continuamente las condiciones de un proceso.
- El comportamiento transitorio de un sistema se estudia mejor utilizando las herramientas de simulación dinámica.
- El diseño y la optimización de un proceso químico implican el estudio tanto del comportamiento en estado estacionario como del dinámico.
- Los modelos en estado estacionario permiten realizar balances de materia y energía y evaluar distintos escenarios de una planta.
- La simulación dinámica permite confirmar que la planta es capaz de producir el producto deseado de una manera segura y fácil de operar.

Introducción

- La mayoría de los sistemas de ingeniería química presentan gradientes térmicos o de concentración en las tres dimensiones (x , y , z) además de en el tiempo. Esto se conoce como un sistema distribuido.
- Si se caracterizara matemáticamente un sistema de este tipo, se obtendría un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales (EDP).
- Si se ignoran los gradientes en x , y y z , el sistema queda "concentrado" (lumped), y todas las propiedades físicas se consideran iguales en el espacio. **En ese análisis solo se consideran los gradientes en el tiempo.**
- Esta consideración permite describir el proceso mediante ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO), que son mucho menos rigurosas que las EDP y, por lo tanto, ahorran tiempo de cálculo.
- En la mayoría de los casos, el método concentrado da una solución que es una aproximación razonable de la solución del modelo distribuido.

Introducción

- En los ejemplos de clase adoptaremos el enfoque de parámetros concentrados para todas las operaciones unitarias, lo que conduce a sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) cuya única variable independiente es el tiempo.

Expresión implícita

$$F\left(t, y, \frac{dy}{dt}\right) = 0$$

Expresión explícita

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y)$$

Resolución (problema de valores iniciales):

$$y^{i+1} = y^i + \left(\frac{dy}{dt}\right)_i \Delta t$$

Euler (forward Euler)

$$y^{i+1} = y^i + \left(\frac{dy}{dt}\right)_{i+1} \Delta t$$

Euler implícito (backward Euler)



Balance de materia en sistemas dinámicos

- Balance materia global de un sistema dinámico:

$$\left[\begin{array}{l} \text{Flujo de masa que} \\ \text{ingresa al sistema} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{Flujo de masa que} \\ \text{abandona el sistema} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{velocidad de variación} \\ \text{de la masa dentro del sistema} \end{array} \right]$$

La unidad de esta ecuación es masa/tiempo



- La ecuación de diseño en estado estacionario que estamos acostumbrados a usar dice que "lo que entra, sale".
- La versión dinámica dice lo mismo con la adición de la palabra "eventualmente".
- El lado derecho será una derivada ordinaria de la masa dentro del sistema con respecto a la variable independiente tiempo (t).

Balance de materia en sistemas dinámicos

- Balance materia global de un sistema dinámico:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Flujo de masa que} \\ \text{ingresa al sistema} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Flujo de masa que} \\ \text{abandona el sistema} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{velocidad de variación} \\ \text{de la masa dentro del sistema} \end{array} \right]$$

La unidad de esta ecuación es masa/tiempo

- Balance materia por componentes de un sistema dinámico:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Flujo de moles} \\ \text{del componente i} \\ \text{que ingresan al sistema} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Flujo de moles} \\ \text{del componente i} \\ \text{que abandonan el sistema} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{velocidad de formación} \\ \text{de moles del componente i} \\ \text{por reacción química} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{velocidad de variación} \\ \text{de moles del componente i} \\ \text{dentro del sistema} \end{array} \right]$$

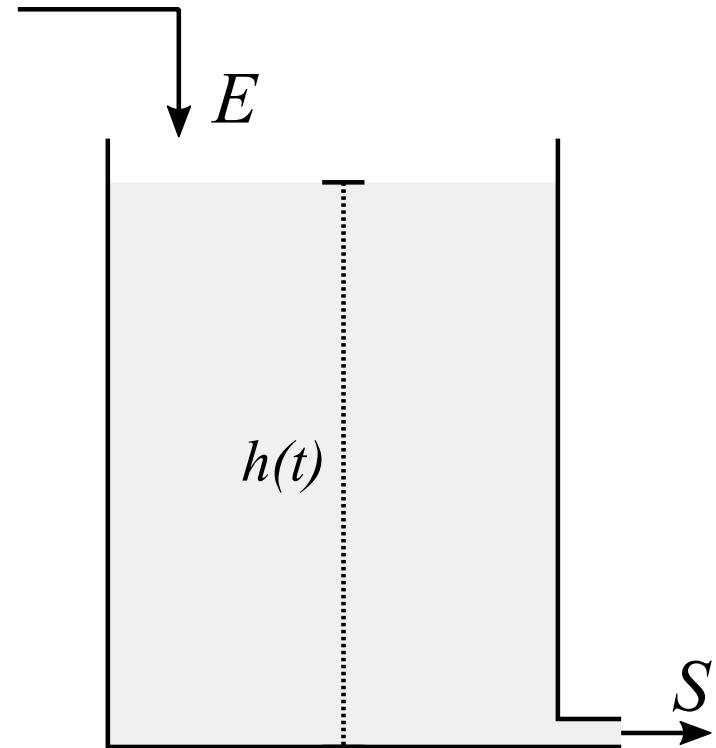
La unidad de esta ecuación es moles/tiempo

Ambas ecuaciones pueden expresarse en masa/tiempo o moles/tiempo mediante una apropiada conversión

Ejemplo: Tanque abierto con flujo de salida gravitatorio

Hipótesis:

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



Tanque abierto con flujo de salida gravitatorio

- Balance de materia en el tanque: **Acumulación = Entrada – Salida**

$$\frac{dM}{dt} = m_e - m_s$$

$M \rightarrow$ Masa de fluido dentro del tanque
 $m_e \rightarrow$ Flujo masico de entrada de fluido
 $m_s \rightarrow$ Flujo masico de salida de fluido

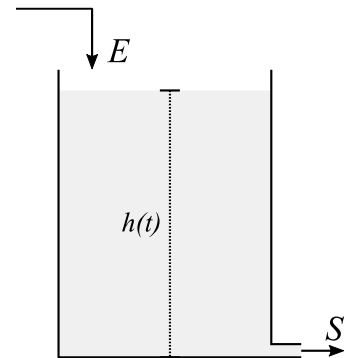
$$M = \rho V = \rho A_T h \rightarrow \frac{dM}{dt} = \frac{d \rho A_T h}{dt} = \rho A_T \frac{dh}{dt}$$

$$\rho A_T \frac{dh}{dt} = m_e - m_s$$

¡Fácilmente medible!

ρ cte

A_T cte



Tanque abierto con flujo de salida gravitatorio

$$m_e = \rho E \quad E \rightarrow \text{Caudal volumetrico de entrada}$$

$$m_s = \rho S \quad S \rightarrow \text{Caudal volumetrico de salida}$$

$$m_s = \rho A_s v_s \quad A_s \rightarrow \text{Area de salida del tanque}$$

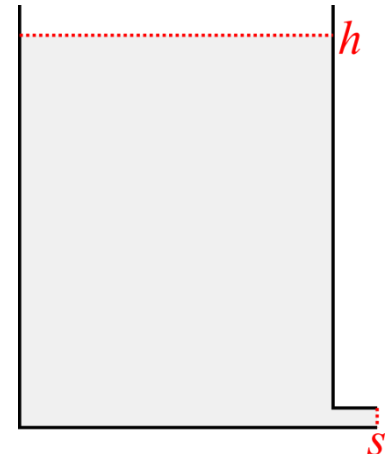
$$v_s \rightarrow \text{velocidad de salida del tanque}$$

Bernoulli en la superficie y salida:

$$\cancel{\frac{v_h^2 \rho}{2}} + \cancel{P_h} + \rho g h = \frac{v_s^2 \rho}{2} + \cancel{P_s} + \cancel{\rho g h_s}$$

$v_h = 0$ $P_h = P_s$ $h_s = 0$

$$\rho g h = \frac{v_s^2 \rho}{2} \rightarrow v_s = \sqrt{2gh}$$



Tanque abierto con flujo de salida gravitatorio

Luego: $\rho A_T \frac{dh}{dt} = m_e - m_s$

$$\cancel{\rho} A_T \frac{dh}{dt} = \rho E - \rho A_s v_s = \cancel{\rho} E - \cancel{\rho} A_s \sqrt{2gh}$$

Finalmente:

$$A_T \frac{dh}{dt} = E - A_s \sqrt{2gh}$$

$$\frac{dh}{dt} = \frac{E}{A_T} - \frac{A_s}{A_T} \sqrt{2gh}$$

EDO

$t \rightarrow$ Variable independiente (tiempo)

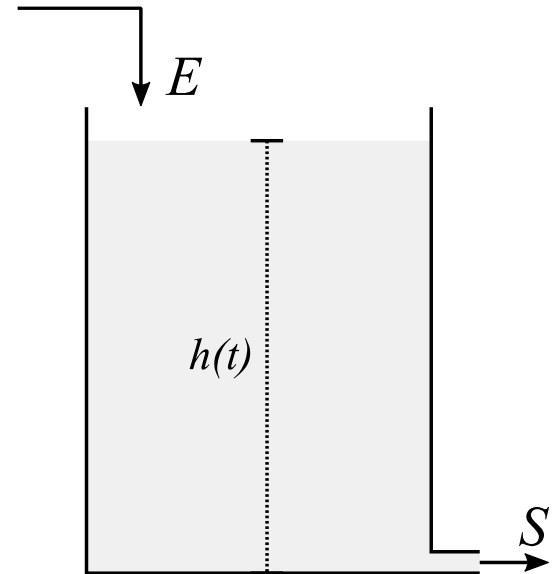
$h \rightarrow$ Variable dependiente (altura)

$t = 0 \rightarrow h = h_0$ (problema de valor inicial)

Tanque abierto con flujo de salida gravitatorio

Ejemplo práctico:

- Vaciado del tanque ($E=0$)
- Altura inicial del tanque: 4 m
- Diámetro del tanque: 1 m
- Diámetro de orificio de salida: 0.0508 m
- Tiempo final 320 segundos

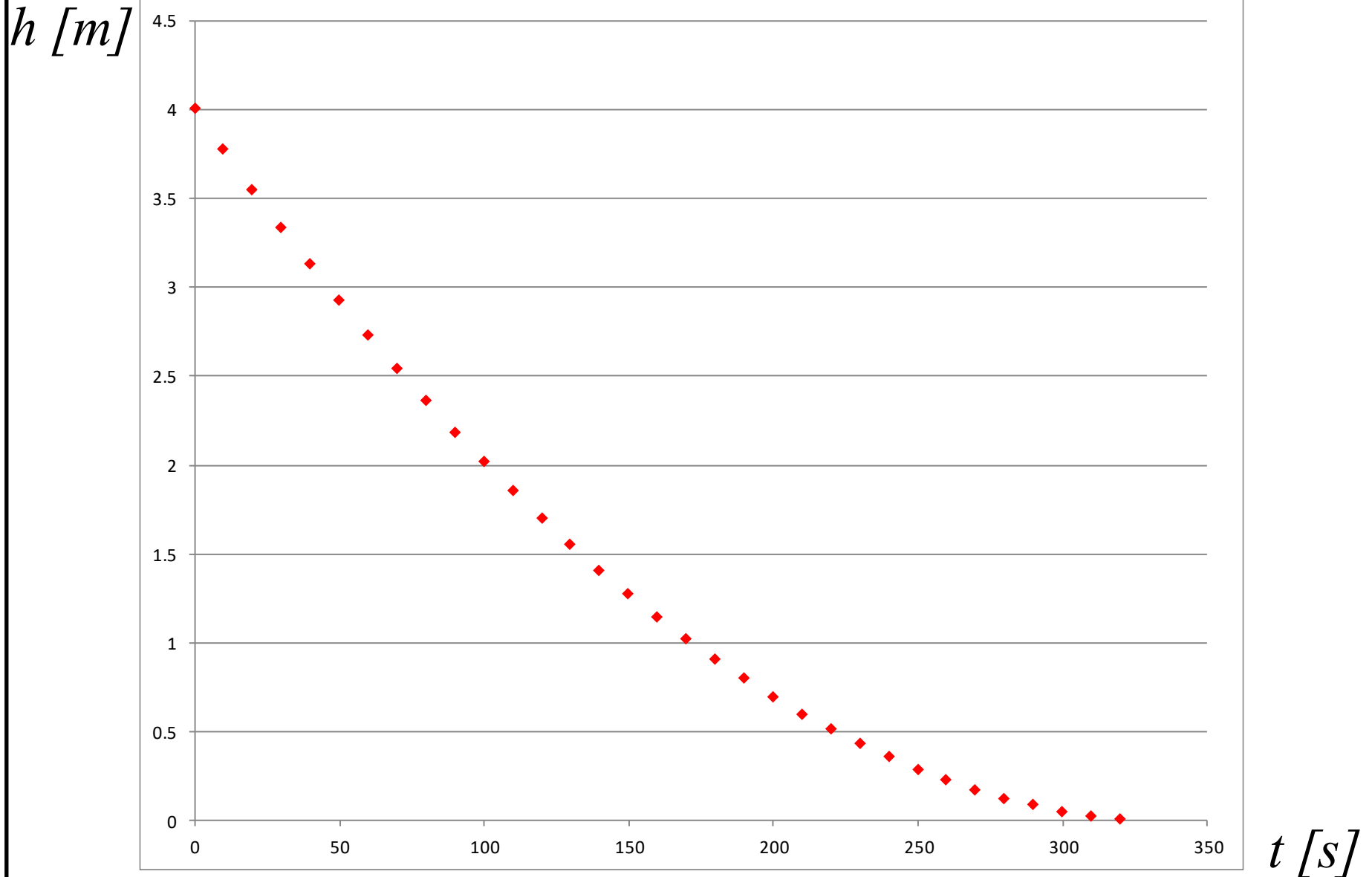


$$A_T = \frac{\pi D_T^2}{4} \quad A_s = \frac{\pi D_s^2}{4} \quad \rightarrow \quad A_T \frac{dh}{dt} = -A_s \sqrt{2gh} \quad \rightarrow \quad \frac{\pi D_T^2}{4} \frac{dh}{dt} = -\frac{\pi D_s^2}{4} \sqrt{2gh}$$

$$\frac{dh}{dt} = -\frac{D_s^2}{D_T^2} \sqrt{2gh}$$

$$\frac{dh}{dt} = -2.58064 \times 10^{-3} \sqrt{2gh}$$

Tanque abierto con flujo de salida gravitatorio



Modelos simples de válvulas

- Las válvulas de control son conceptualmente orificios de área variable.
- Se las puede considerar simplemente como una restricción que cambia su tamaño de acuerdo a un pedido por parte del controlador u operador.
- Al pasar un fluido por una restricción , la fórmula (para líquidos) que vincula el caudal con la diferencia de presión entre la entrada y la salida es:

$$Q = k \sqrt{\frac{\Delta P}{\rho}}$$

$Q \rightarrow$ Caudal volumetrico que atravieza la válvula

$\Delta P \rightarrow$ Diferencia de presión a traves de la válvula

$\rho \rightarrow$ Densidad del fluido

$k \rightarrow$ Constante del orificio

$$Q = k' \sqrt{\frac{\Delta P^*}{G}}$$

$G \rightarrow$ Gravedad específica del fluido

Modelos simples de válvulas

- El predominio histórico de los fabricantes de válvulas en Estados Unidos ha llevado a que las características de las válvulas se den a menudo en unidades estadounidenses.
- Para gases suele utilizarse la misma ecuación pero utilizando la gravedad específica referenciada al aire y el caudal expresado de forma estándar.

$$Q = C_v \sqrt{\frac{\Delta P}{G}}$$

$Q \rightarrow$ Caudal volumetrico que atravieza la válvula [*US gpm*]

$\Delta P \rightarrow$ Diferencia de presión a traves de la válvula [*psi*]

$G \rightarrow$ Gravedad específica del fluido $\rho / \rho_{60^\circ F}^{agua}$ [*adim*]

$C_v \rightarrow$ Coeficiente de la válvula para agua a 60 °F

$$Q = K_v \sqrt{\frac{\Delta P}{G}}$$

$Q \rightarrow$ Caudal volumetrico que atravieza la válvula [*m³/h*]

$\Delta P \rightarrow$ Diferencia de presión a traves de la válvula [*bar*]

$G \rightarrow$ Gravedad específica del fluido $\rho / \rho_{60^\circ F}^{agua}$ [*adim*]

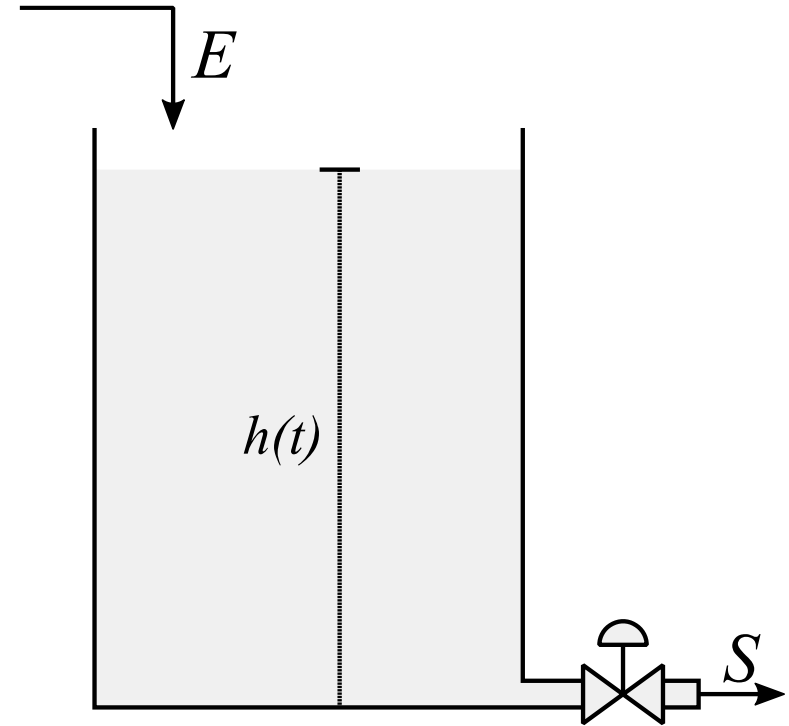
$K_v \rightarrow$ Coeficiente de la válvula para agua a 60 °F

$$C_v = 1.15 K_v$$

Tanque abierto con descarga regulada por una válvula

Hipótesis

- Sistema adiabático
- La densidad es constante
- Evaporación despreciable
- No hay reacción química
- Tanque cilíndrico



Tanque abierto con descarga regulada por una válvula

- Balance de materia en el tanque:

$$\frac{dM}{dt} = m_e - m_s \quad M = \rho V = \rho A_T h \rightarrow \frac{dM}{dt} = \rho A_T \frac{dh}{dt}$$

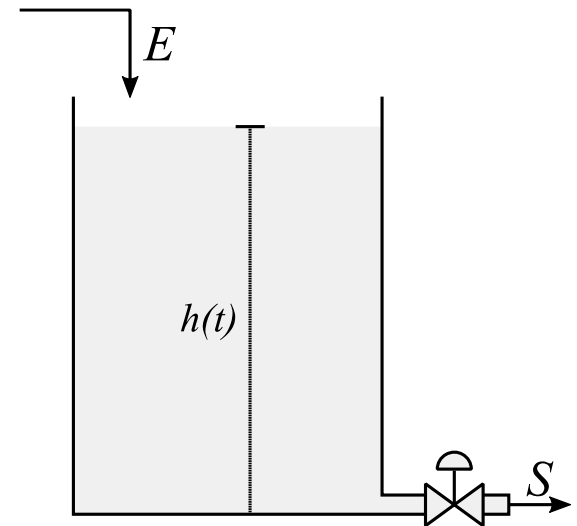
ρ cte

A_T cte

$$\rho A_T \frac{dh}{dt} = m_e - m_s$$

$$\rho A_T \frac{dh}{dt} = \rho E - \rho S$$

$$A_T \frac{dh}{dt} = E - S$$



Tanque abierto con descarga regulada por una válvula

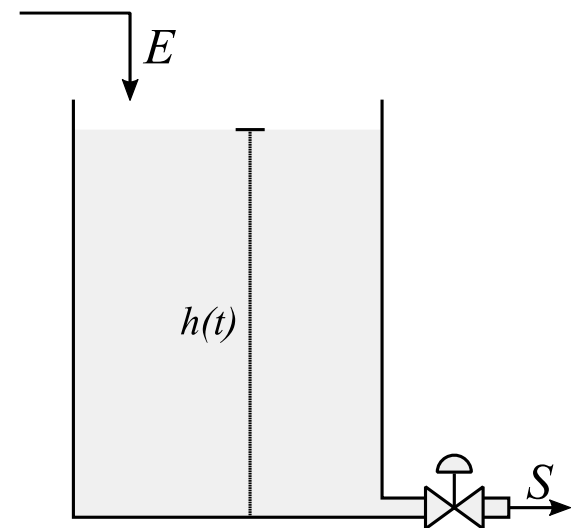
$$A_T \frac{dh}{dt} = E - S$$

$$S = C_v \sqrt{\Delta P_s / \rho} \rightarrow S = C_v \sqrt{(P_f - P)_s / \rho}$$

$$P_0 = P_s$$

$$S = C_v \sqrt{(\cancel{P_0} + \cancel{\rho gh} - \cancel{P_s})_s / \cancel{\rho}}$$

$$\frac{dh}{dt} = \frac{E}{A_T} - \frac{C_v}{A_T} \sqrt{gh}$$



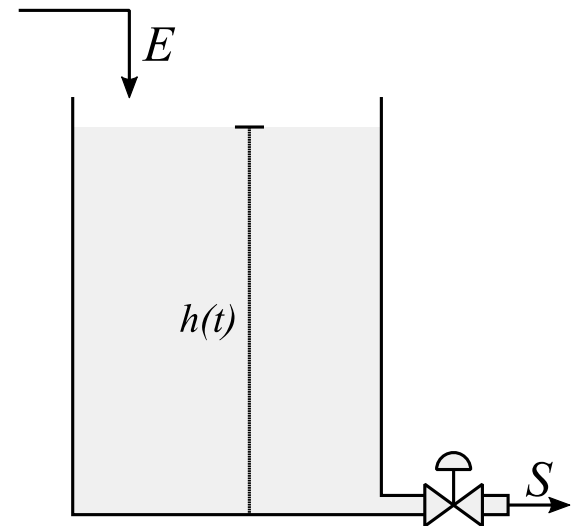
Tanque abierto con descarga regulada por una válvula

Ejemplo práctico:

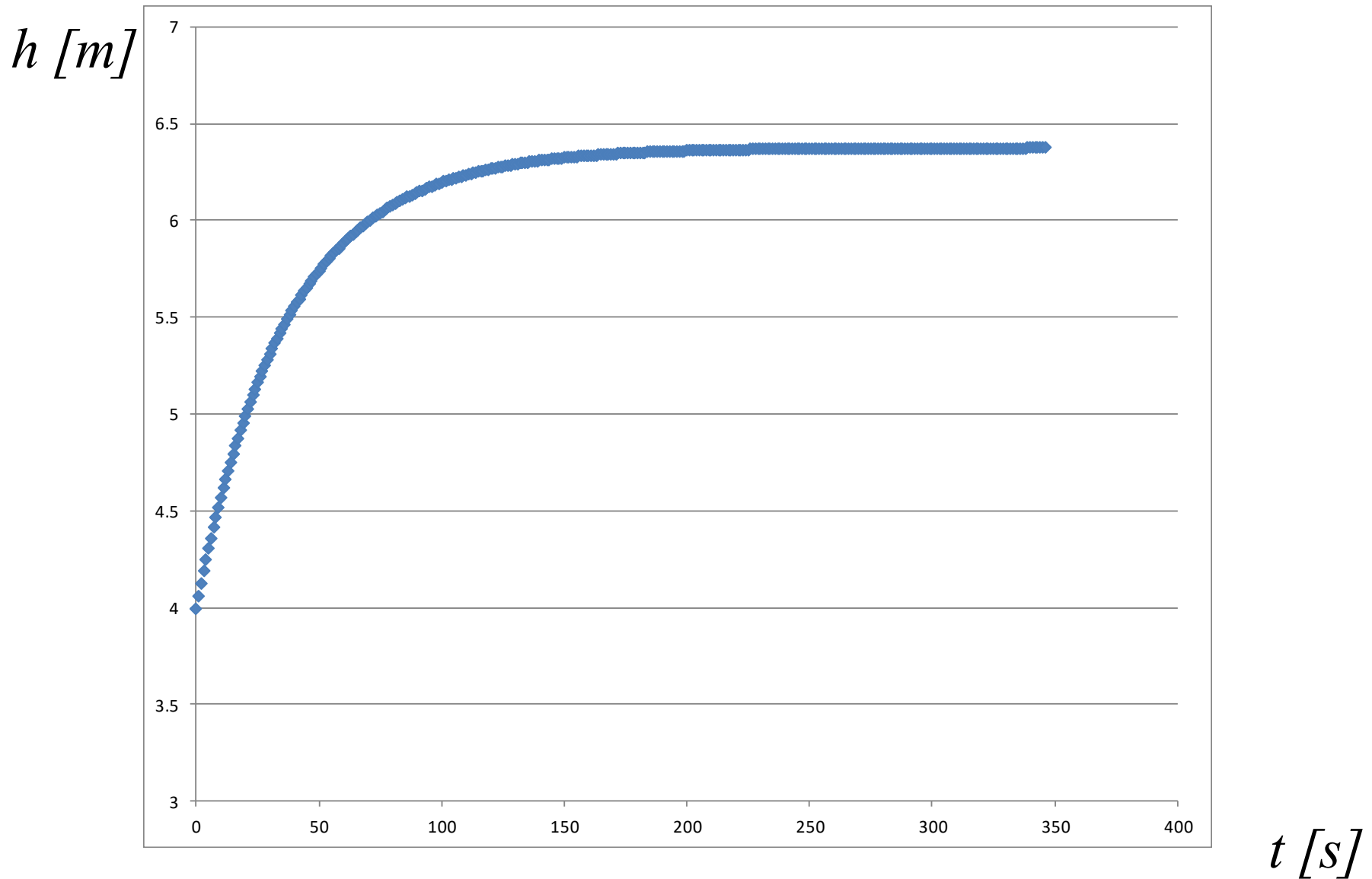
- Caudal de entrada ($E=0.25 \text{ m}^3/\text{seg}$)
- Altura inicial del tanque: 4 m
- Diámetro del tanque: 1 m
- C_v de la válvula de descarga: 0.0316 m^2

$$\frac{dh}{dt} = \frac{E}{A_T} - \frac{C_v}{A_T} \sqrt{gh}$$

$$t = 0 \rightarrow h = 4 \text{ m}$$



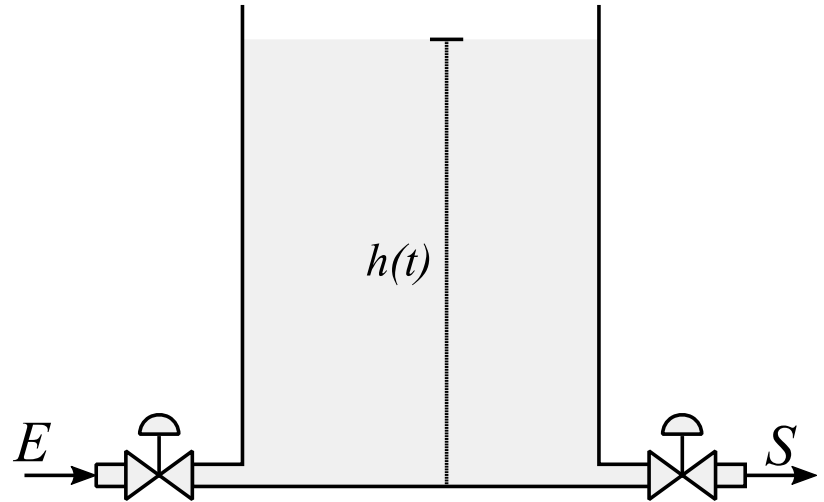
Tanque abierto con descarga regulada por una válvula



Tanque abierto con entrada y descarga regulada por válvula

Hipótesis

- Sistema adiabático
- La densidad es constante
- Evaporación despreciable
- No hay reacción química
- Tanque cilíndrico
- Presión de entrada y de salida conocidas

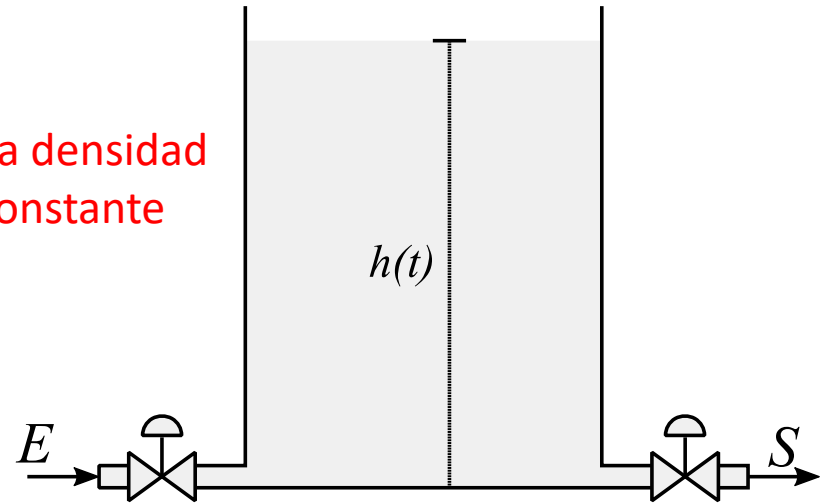


Tanque abierto con entrada y descarga regulada por válvula

- Balance de materia en el tanque:

$$A_T \frac{dh}{dt} = E - S$$

¡Cuidado!: Solo para densidad
y área transversal constante



$$E = C_{v1} \sqrt{(P_E - P_f) / \rho}$$

$$S = C_{v2} \sqrt{(P_f - P_s) / \rho}$$

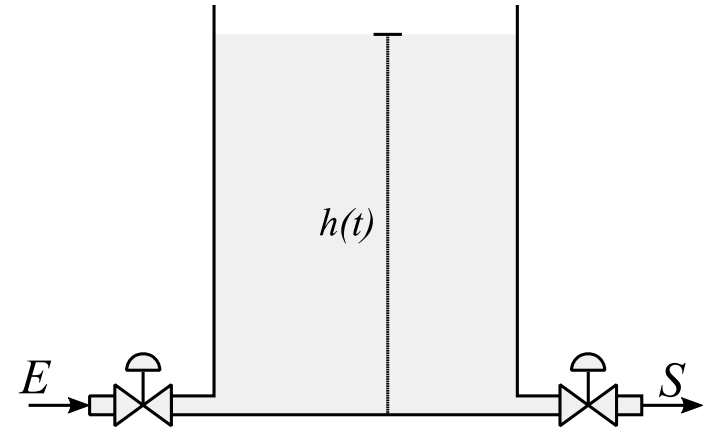
$$E = C_{v1} \sqrt{(P_E - P_0 - \rho gh) / \rho} \quad S = C_{v2} \sqrt{(P_0 + \rho gh - P_s) / \rho}$$

$$A_T \frac{dh}{dt} = C_{v1} \sqrt{(P_E - P_0 - \rho gh) / \rho} - C_{v2} \sqrt{(P_0 + \rho gh - P_s) / \rho}$$

Tanque abierto con entrada y descarga regulada por válvula

Ejemplo practico:

- Altura inicial del tanque: 4 m
- Diámetro del tanque: 1 m
- C_{v1} y C_{v2} de las válvulas: 0.0316 m²
- Densidad del fluido: 1000 kg/m³
- Presión en la superficie del liquido $P_0 = 101325 \text{ Pa}$
- Presión de descarga igual a la superior del tanque ($P_s = P_0$)
- Presión de entrada: $P_E = 202650 \text{ Pa}$

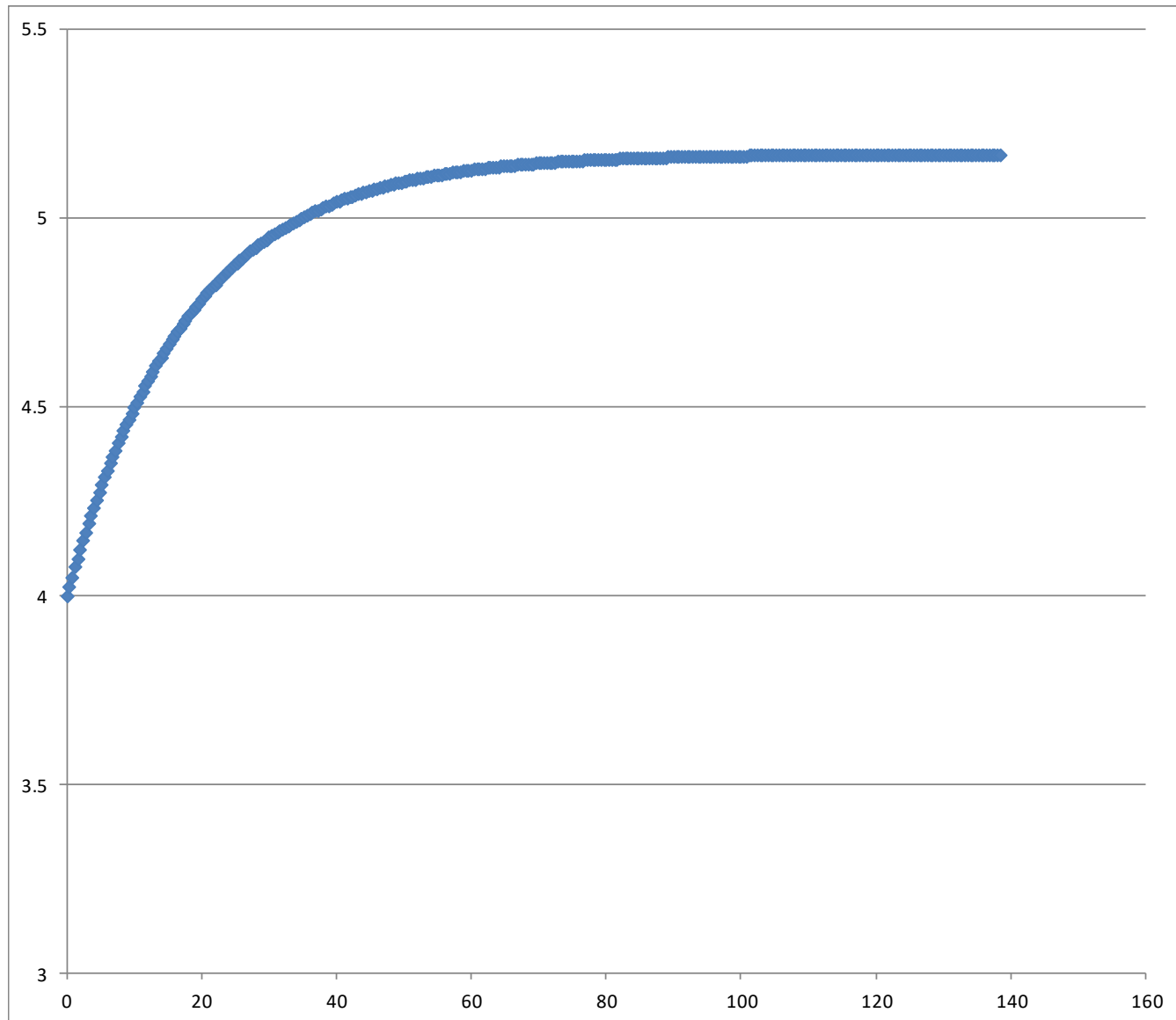


$$A_T \frac{dh}{dt} = C_{v1} \sqrt{(P_E - P_0 - \rho gh) / \rho} - C_{v2} \sqrt{(P_0 + \rho gh - P_s) / \rho}$$

$$t = 0 \rightarrow h = 4 \text{ m}$$

Tanque abierto con entrada y descarga regulada por válvula

$h [m]$

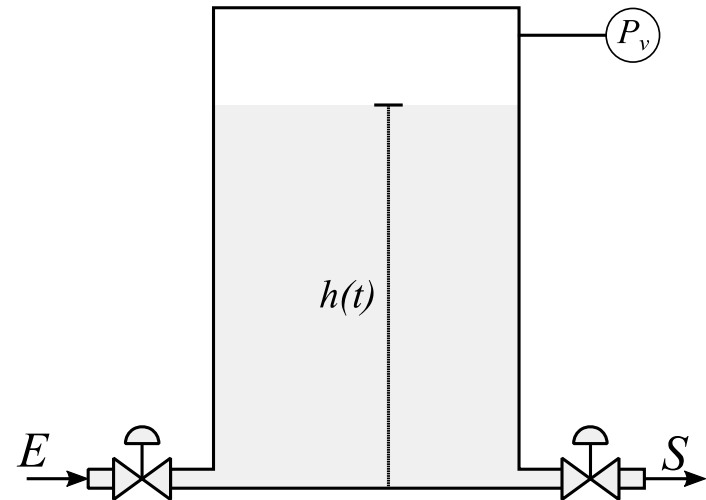


$t [s]$

Tanque cerrado con entrada y descarga regulada por válvula

Hipótesis

- Sistema adiabático
- La densidad es constante
- No hay reacción química
- Tanque cilíndrico
- Presión de entrada y de salida conocidas
- El vapor sobre el líquido se encuentra en equilibrio.
- Holdup de vapor despreciable

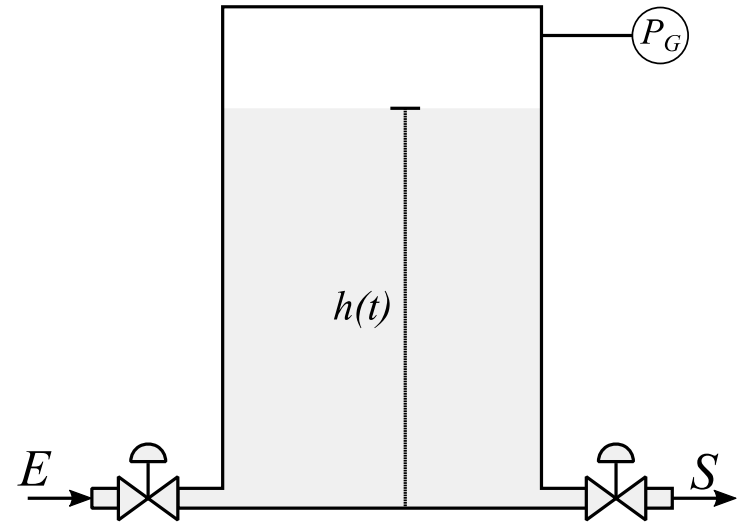


$$A_T \frac{dh}{dt} = C_{v1} \sqrt{(P_E - P_v - \rho g h) / \rho} - C_{v2} \sqrt{(P_v + \rho g h - P_s) / \rho}$$

Tanque cerrado con entrada y descarga regulada por válvula

Hipótesis

- Sistema adiabático
- La densidad es constante
- No hay reacción química
- Tanque cilíndrico
- Presión de entrada y de salida conocidas
- Holdup de vapor no despreciable y constante



Tanque cerrado con entrada y descarga regulada por válvula

$$A_T \frac{dh}{dt} = C_{v1} \sqrt{P_E - \boxed{P_G} - \rho gh / \rho} - C_{v2} \sqrt{\boxed{P_G} + \rho gh - P_s / \rho}$$

¡Varía con la altura!

$$M_G = \rho_G V_G \quad \text{Holdup del gas no despreciable y constante}$$

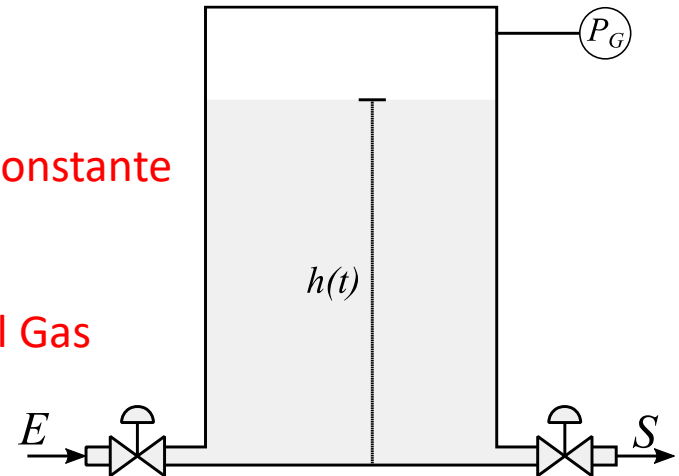
$$\rho_G = \frac{P_G}{R'T} \quad \text{Asumiendo comportamiento ideal del Gas}$$

$$\frac{P_G^0 V_G^0}{R'T_G^0} = \frac{P_G V_G}{R'T_G}$$

$$\frac{P_G^0 V_G^0}{T_G^0} = \frac{P_G V_G}{T_G} \quad \text{Se desprecia la variación de temperatura}$$

$$V_G = V_T - A_T h$$

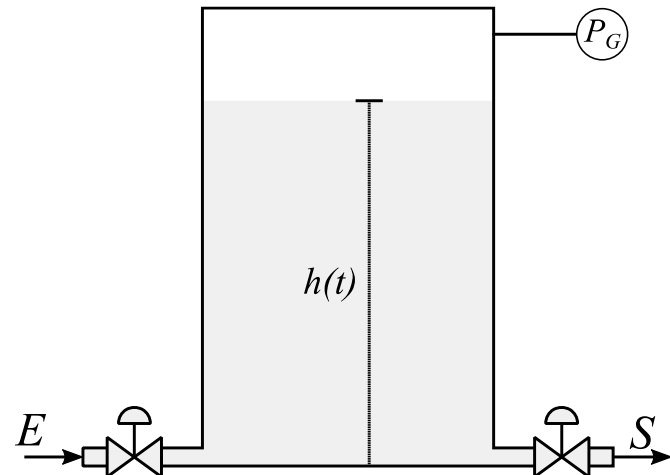
$$P_G = \frac{P_G^0 (V_T - A_T h^0)}{(V_T - A_T h)}$$



Tanque cerrado con entrada y descarga regulada por válvula

$$A_T \frac{dh}{dt} = C_{v1} \sqrt{(P_E - P_G - \rho gh) / \rho} - C_{v2} \sqrt{(P_G + \rho gh - P_s) / \rho}$$

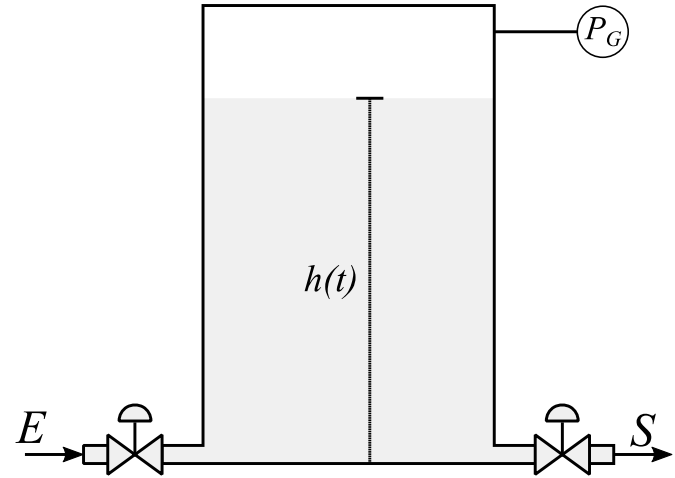
$$P_G = \frac{P_G^0 (V_T - A_T h^0)}{(V_T - A_T h)}$$



Tanque abierto con entrada y descarga regulada por válvula

Ejemplo practico:

- Altura inicial del tanque: 4 m
- Diámetro del tanque: 1 m
- Altura del tanque: 10 m
- C_{v1} y C_{v2} de las válvulas: 0.0316 m^2
- Densidad del fluido: 1000 kg/m^3
- Presión de descarga : $P_s = 101325 \text{ Pa}$
- Presión de entrada: $P_E = 202650 \text{ Pa}$
- Presión inicial del gas: $P_G^0 = 101325 \text{ Pa}$

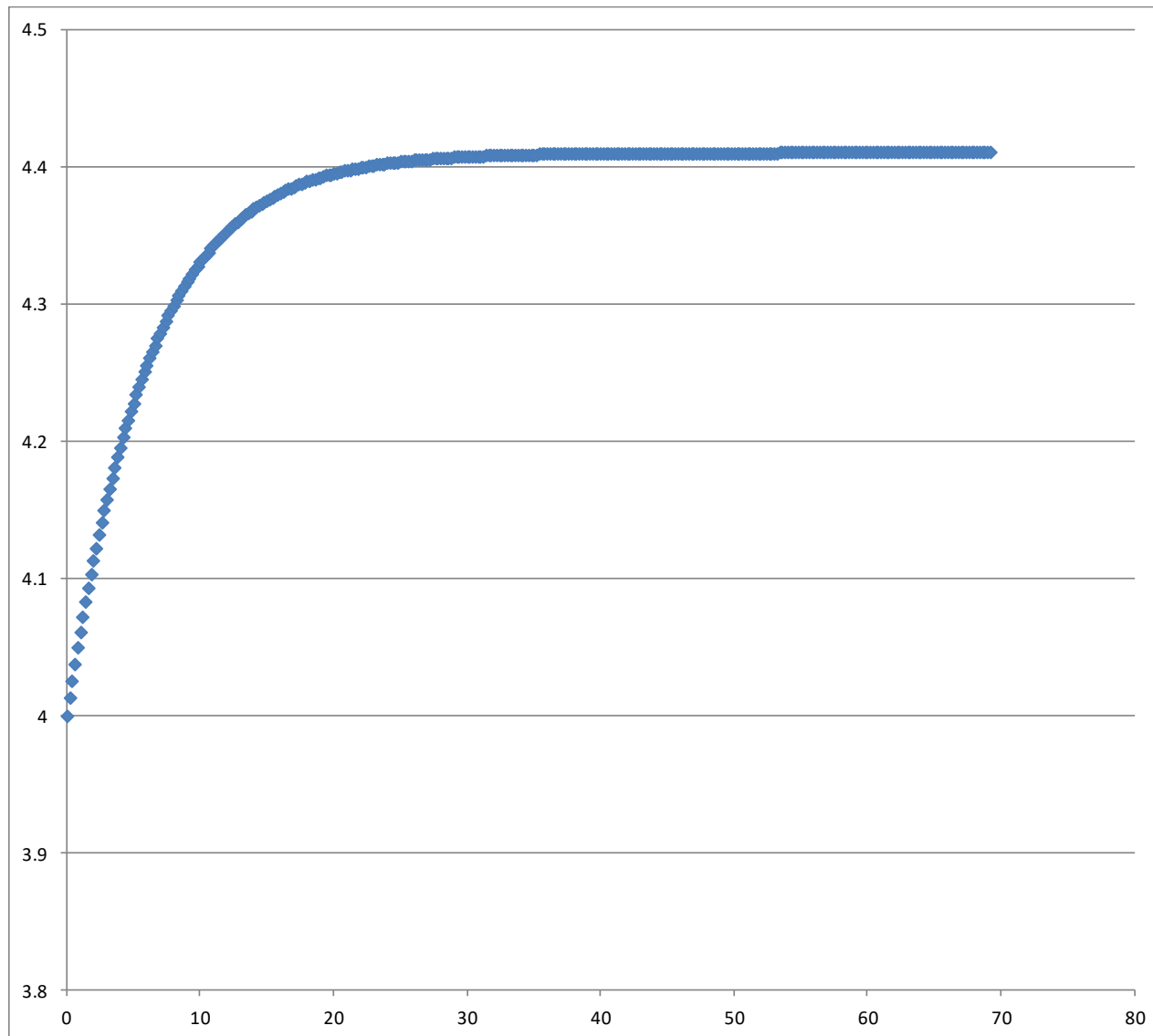


$$A_T \frac{dh}{dt} = C_{v1} \sqrt{(P_E - P_G - \rho gh) / \rho} - C_{v2} \sqrt{(P_G + \rho gh - P_s) / \rho}$$

$$P_G = P_G^0 \left(V_T - A_T h^0 \right) / \left(V_T - A_T h \right)$$

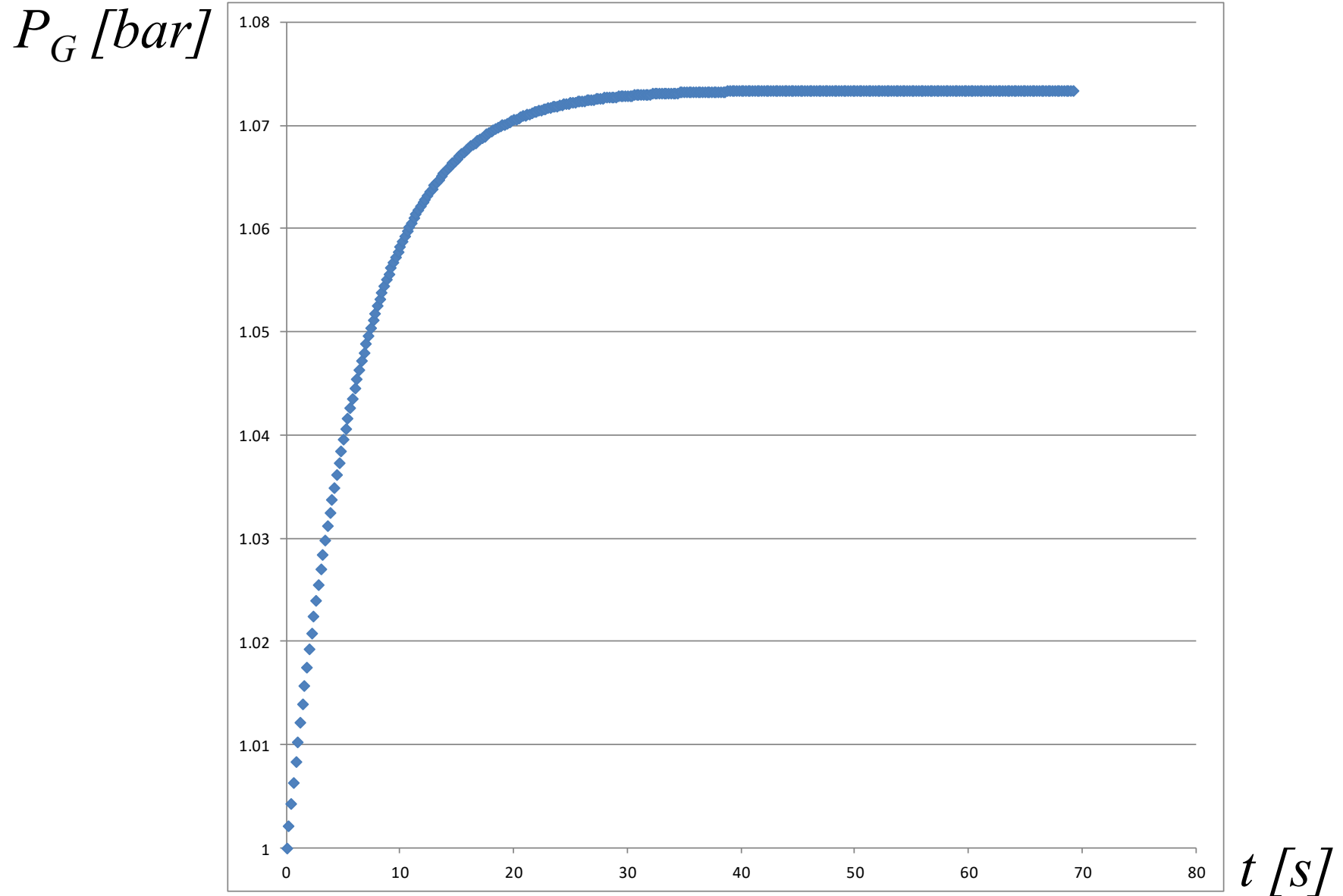
Tanque abierto con entrada y descarga regulada por válvula

$h [m]$

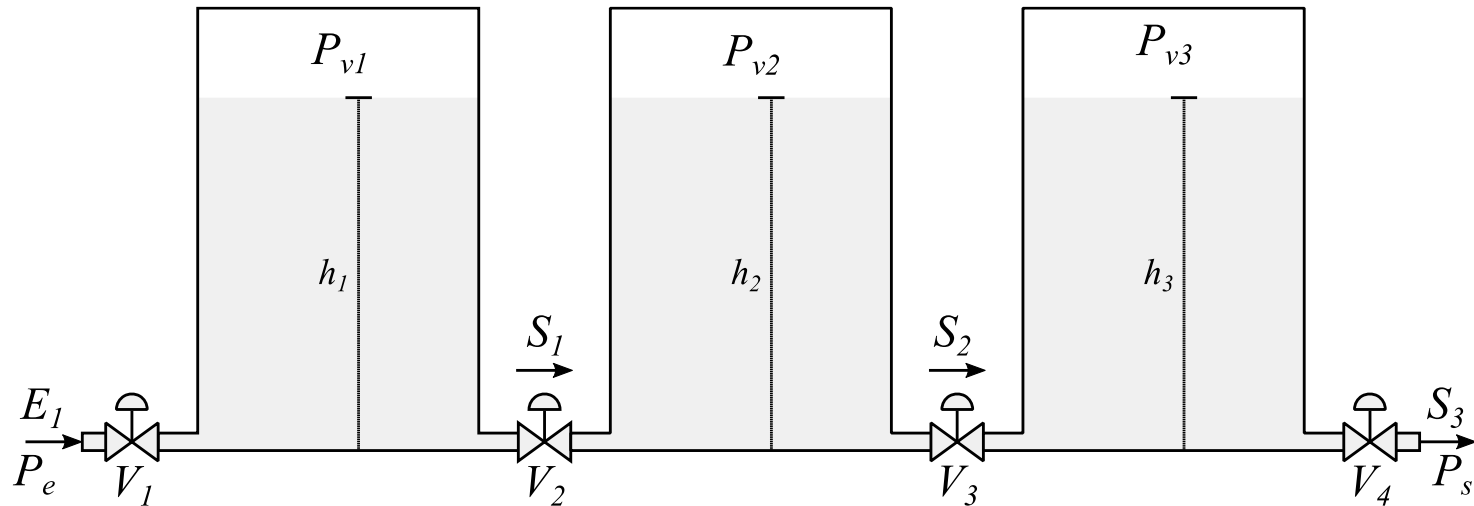


$t [s]$

Tanque abierto con entrada y descarga regulada por válvula



Tanques en serie



$$\frac{dM_1}{dt} = m_{e1} - m_{s1} \xrightarrow{\text{pcte}} A_{T_1} \frac{dh_1}{dt} = E_1 - S_1$$

$$\frac{dM_2}{dt} = m_{e2} - m_{s2} \xrightarrow{\text{pcte}} A_{T_2} \frac{dh_2}{dt} = S_1 - S_2$$

$$\frac{dM_3}{dt} = m_{e3} - m_{s3} \xrightarrow{\text{pcte}} A_{T_3} \frac{dh_3}{dt} = S_2 - S_3$$

$$A_{T_1} \frac{dh_1}{dt} = E_1 - S_1$$

$$A_{T_2} \frac{dh_2}{dt} = S_1 - S_2$$

$$A_{T_3} \frac{dh_3}{dt} = S_2 - S_3$$