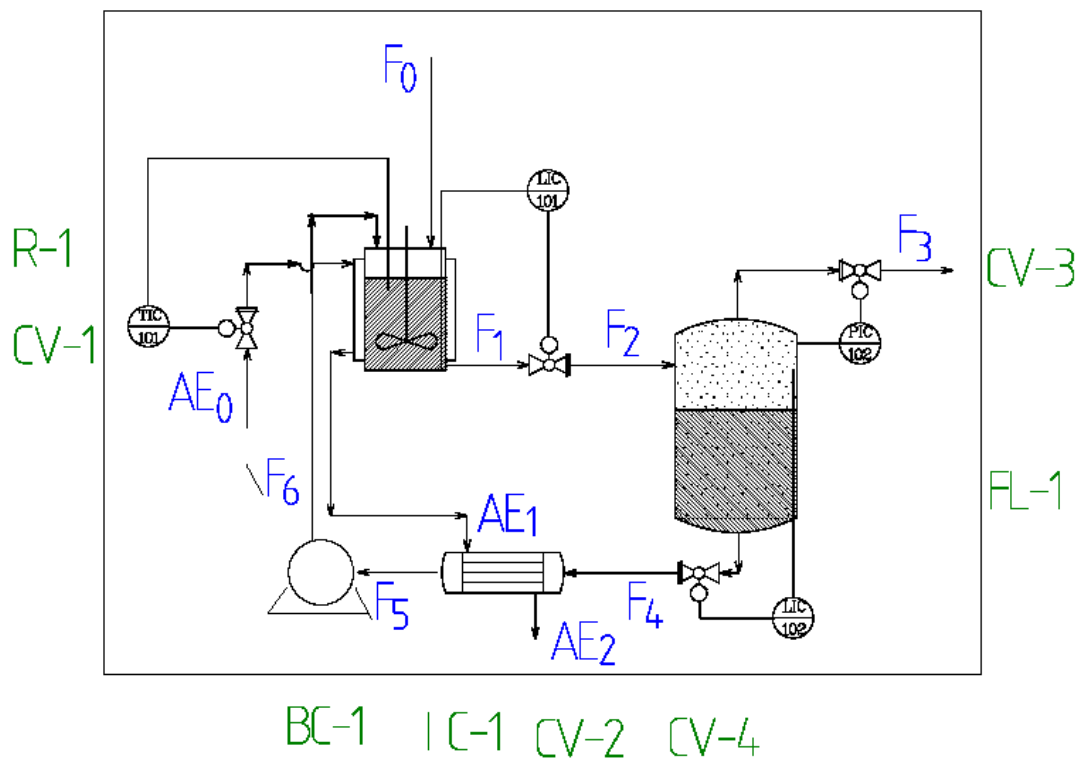


Unidad XVI: Ejemplo de Modelado de Equipos de una Planta en Estado Dinámico

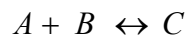
Sea el diagrama de flujo de la figura. Luego de nombrar las variables restantes, se desea plantear un modelo en estado dinámico que lo represente, y proponer una estrategia de resolución.



Hipótesis:

A) Reactor

- Reacción reversible exotérmica cuando se desplaza hacia el producto C.



- La cinética con A como base:

$$-r_A = K_D * C_A * C_B - K_I * C_C$$

- Reactor Mezcla completa. La camisa de refrigeración también se considera mezcla completa.
- Los coeficientes cinéticos son función de la temperatura (funcional tipo Arrhenius).
- Presión en el cuerpo de vapor del reactor es conocida (P_{R1}^0)
- Coeficiente de transferencia $(UA)_2$ conocido (camisa)
- Tanque cilíndrico de área AT.
- $C=[\text{moles/lit}]; \rho$: densidad molar
- Caída de presión a través de la camisa nula
- V_{R1} : volumen de líquido del reactor

B) Válvulas de control

Asúmase el caudal a través de las válvulas según:

$$Q = C_v \sqrt{\frac{(P_e - P_s)}{\rho_f}}$$

Nótese que pueden existir diversas funcionalidades, según tipo de válvula y condición de flujo y fluido. Generalmente el fabricante provee funcionalidades al respecto.

Siendo P_e la presión de entrada y P_s la de salida, ρ_f la densidad del fluido. La conductividad C_{vi} (con i de 1 a 4) depende de la ley de control:

$$C_{vi} = \alpha_i AC_i$$

(Nótese que pueden existir diversas funcionalidades según lo expresado arriba)

Siendo AC_i la acción total de control de la válvula i :

$$AC_i = AP_i + AI_i + AD_i + A_{0i}$$

Siendo AP_i la acción proporcional del controlador i , AI_i la acción integral y AD_i la derivativa. A_{0i} es una constante conocida.

Q es caudal volumétrico.

C) Flash

- No se producen reacciones químicas
- Adiabático
- Opera en equilibrio
- Hold up de vapor despreciable
- Las presiones de descargas son conocidas y constantes

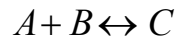
- Líquido con mezcla perfecta.

D) Intercambiador de calor

- $(UA)_{IC1}$ conocido y constante
- No se considera cambio de fase ni reacción química en ninguna de sus corrientes
- Modelar en estado pseudoestacionario (identifique los equipos que puede considerar bajo esta hipótesis)
- Caída de presión nula

Modelado

Reactor



$$(-r_A) = k_D \times C_A \times C_B - k_I \times C_C$$

Balance de Materia:

$$\frac{dM_{R1}}{dt} = F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times V_{R1}$$

$$\rho_{F1} \times \frac{dV_{R1}}{dt} = F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times V_{R1}$$

$$\frac{\rho_{F1} \times A_{R1} \times dh_{R1}}{dt} = F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times V_{R1}$$

$$\boxed{\frac{dh_{R1}}{dt} = \frac{F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1}}} \quad (I)$$

Balance de Materia por Componentes:

- Componente A (concentraciones y fracciones molares):
- F_i : flujos molares (con $i=A, B$ y C)

$$\frac{d(V_{R1} \times C_A^{F1})}{dt} = F_0 \times x_A^{F0} + F_6 \times x_A^{F6} - F_1 \times x_A^{F1} - (-r_A) \times V_{R1}$$

$$A_{R1} \times \frac{d(h_{R1} \times C_A^{F1})}{dt} = F_0 \times x_A^{F0} + F_6 \times x_A^{F6} - F_1 \times x_A^{F1} - (-r_A) \times V_{R1}$$

$$\frac{d(h_{R1} \times C_A^{F1})}{dt} = \frac{F_0 \times x_A^{F0} + F_6 \times x_A^{F6} - F_1 \times x_A^{F1} - (-r_A) \times V_{R1}}{A_{R1}}$$

$$C_A^{F1} \times \frac{dh_{R1}}{dt} + h_{R1} \times \frac{dC_A^{F1}}{dt} = \frac{F_0 \times x_A^{F0} + F_6 \times x_A^{F6} - F_1 \times x_A^{F1} - (-r_A) \times V_{R1}}{A_{R1}}$$

$$h_{R1} \times \frac{dC_A^{F1}}{dt} = \frac{F_0 \times x_A^{F0} + F_6 \times x_A^{F6} - F_1 \times x_A^{F1} - (-r_A) \times V_{R1}}{A_{R1}} - \frac{C_A^{F1} \times dh_{R1}}{dt}$$

$$\frac{dC_A^{F1}}{dt} = \left[\frac{F_0 \times x_A^{F0} + F_6 \times x_A^{F6} - F_1 \times x_A^{F1} - (-r_A) \times V_{R1}}{A_{R1}} - C_A^{F1} \times \left(\frac{F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times V_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1}} \right) \right] / h_{R1}$$

- Para los tres componentes:

$\frac{dC_A^{F1}}{dt} = \left[\frac{F_0 \times x_A^{F0} + F_6 \times x_A^{F6} - F_1 \times x_A^{F1} - (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{A_{R1}} - C_A^{F1} \times \left(\frac{F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1}} \right) \right] \frac{h_{R1}}{h_{R1}}$
$\frac{dC_B^{F1}}{dt} = \left[\frac{F_0 \times x_B^{F0} + F_6 \times x_B^{F6} - F_1 \times x_B^{F1} - (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{A_{R1}} - C_B^{F1} \times \left(\frac{F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1}} \right) \right] \frac{h_{R1}}{h_{R1}}$
$\frac{dC_C^{F1}}{dt} = \left[\frac{F_0 \times x_C^{F0} + F_6 \times x_C^{F6} - F_1 \times x_C^{F1} + (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{A_{R1}} - C_C^{F1} \times \left(\frac{F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1}} \right) \right] \frac{h_{R1}}{h_{R1}}$

(Ecs. II, III y IV)

Balance de energía (ρ_{F1} densidad molar, H_{F1} , entalpía específica):

$$\frac{d(M_{R1} \times H_{F1})}{dt} = F_0 \times H_{F0} + F_6 \times H_{F6} - F_1 \times H_{F1} + (-r_A) \times (-\Delta H_{R1}) \times V_{R1} - Q_{R1}$$

$$\rho_{F1} \times \frac{d(V_{R1} \times H_{F1})}{dt} = F_0 \times H_{F0} + F_6 \times H_{F6} - F_1 \times H_{F1} + (-r_A) \times (-\Delta H_{R1}) \times V_{R1} - Q_{R1}$$

$$\rho_{F1} \times A_{R1} \times \frac{d(h_{R1} \times H_{F1})}{dt} = F_0 \times H_{F0} + F_6 \times H_{F6} - F_1 \times H_{F1} + (-r_A) \times (-\Delta H_{R1}) \times V_{R1} - Q_{R1}$$

$$H_{R1} \times \frac{dh_{R1}}{dt} + h_{R1} \times \frac{dH_{F1}}{dt} = \frac{F_0 \times H_{F0} + F_6 \times H_{F6} - F_1 \times H_{F1} + (-r_A) \times (-\Delta H_{R1}) \times V_{R1} - Q_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1}}$$

$$h_{R1} \times \frac{dH_{F1}}{dt} = \frac{F_0 \times H_{F0} + F_6 \times H_{F6} - F_1 \times H_{F1} + (-r_A) \times (-\Delta H_{R1}) \times V_{R1} - Q_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1}} - H_{R1} \times \frac{dh_{R1}}{dt}$$

$\frac{dH_{F1}}{dt} = \frac{\left[\frac{F_0 \times H_{F0} + F_6 \times H_{F6} - F_1 \times H_{F1} + (-r_A) \times (-\Delta H_{R1}) \times A_{R1} \times h_{R1} - Q_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1}} - H_{R1} \times \left(\frac{F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1}} \right) \right]}{h_{R1}}$
--

(Ec. V)

(Se asume pF1 constante en el rango de operación (respecto a la temperatura)).

$$\rho_{F1} = \rho_{F1}(T_{F1}, x_A^{F1}, x_B^{F1}, x_C^{F1}) \quad (1)$$

$$C_i = x_i^{F1} \times \rho_{F1} \quad i = A, B \text{ y } C \quad (2-4)$$

$$(-r_A) = k_D \times C_A^{F1} \times C_B^{F1} - k_I \times C_C^{F1} \quad (5)$$

Flujo molar a través de la válvula de control CV₂:

$$F_1 = \rho_{F1} \times C_{v2} \times \sqrt{\frac{(P_{F1} - P_{F2})}{\rho_{F1}}} \quad (6)$$

$$P_{F1} = P_{R1}^0 + \rho_{F1} \times g \times h_{R1} \quad (7)$$

P_{R1}^0 : presión en el cuerpo de vapor en el reactor

$$P_{F2} = P_{FL1}^0 \quad (8)$$

P_{FL1}^0 : presión en el cuerpo de vapor en el flash (P_{eq})

$$C_{v2} = \alpha_2^{AC_2}$$

$$AC_2 = AP_2 + AI_2 + AD_2 + A_{02}$$

A_{02} : Acción del controlador (2) cuando son cero las acciones P, I, D (conocida y constante).

$$AP_2 = Kp_2 \times (h_{R1} - SP_{hR1})$$

$$\frac{dAI_2}{dt} = Ki_2 \times (h_{R1} - SP_{hR1}) \quad (XIII)$$

$$AD_2 = Kd_2 \times \frac{dh_{R1}}{dt}$$

$$H_{F0} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F0} \times H_i^{F0}(T_{F0}) \quad (9)$$

$$H_{F1} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F1} \times H_i^{F1}(T_{F1}) \quad (10)$$

$$H_{F6} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F6} \times H_i^{F6}(T_{F6}) \quad (11)$$

Camisa:

Considerando el hold up, densidad y Cp_a del agua de enfriamiento constantes:

$$\frac{d(M_a \times H_a)}{dt} = AE_0 \times Cp_a \times (T_{AE0} - T_{AE1}) + Q_{R1}$$

$$M_a \times \frac{d(Cp_a \times T_{AE1})}{dt} = AE_0 \times Cp_a \times (T_{AE0} - T_{AE1}) + Q_{R1}$$

$$M_a \times Cp_a \times \frac{dT_{AE1}}{dt} = AE_0 \times Cp_a \times (T_{AE0} - T_{AE1}) + Q_{R1}$$

$$\frac{dT_{AE1}}{dt} = \frac{AE_0 \times Cp_a \times (T_{AE0} - T_{AE1}) + Q_{R1}}{M_a \times Cp_a} \quad (VI)$$

$$Q_{R1} = (UA)_2 \times (T_{F1} - T_{AE1}) \quad (12)$$

$$AE_0 = \rho_{AE0} \times C_{v1} \times \sqrt{\frac{(P_{AE0} - P_{AE1})}{\rho_{AE0}}} \quad (13)$$

$$C_{v1} = \alpha_1^{AC_1}$$

$$AC_1 = AP_1 + AI_1 + AD_1 + A_{01}$$

$$AP_1 = Kp_1 \times (T_{F1} - SP_{TF1})$$

$$\frac{dAI_1}{dt} = Ki_1 \times (T_{F1} - SP_{TF1}) \quad (XII)$$

Nota:

SP= set point.

Convención de signos Calor de reacción

Reacciones exotérmicas: $\Delta H < 0 \quad \rightarrow \quad (-\Delta H) > 0$

Reacciones endotérmicas: $\Delta H > 0 \quad \rightarrow \quad (-\Delta H) < 0$

Flash

Balance de Materia:

$$\frac{dM_{FL1}}{dt} = F_1 - F_3 - F_4$$

$$\frac{d(\rho_{F4} \times V_{FL1})}{dt} = F_1 - F_3 - F_4$$

$$\rho_{F4} \times \frac{d(h_{FL1} \times A_{FL1})}{dt} = F_1 - F_3 - F_4$$

$$\rho_{F4} \times A_{FL1} \times \frac{dh_{FL1}}{dt} = F_1 - F_3 - F_4$$

$$\boxed{\frac{dh_{FL1}}{dt} = \frac{F_1 - F_3 - F_4}{\rho_{F4} \times A_{FL1}}} \quad (\text{VII})$$

Con M_{FL1} : Hold up de líquido en el flash, V_{FL1} : Volúmen de líquido en el flash, h_{FL1} : altura de líquido en el flash

Balance de Materia por Componentes:

- Componente A

$$\frac{d(M_{FL1} \times x_A^{F4})}{dt} = F_1 \times x_A^{F1} - F_4 \times x_A^{F4} - F_3 \times y_A^{F3}$$

$$\rho_{F4} \times \frac{d(V_{FL1} \times x_A^{F4})}{dt} = F_1 \times x_A^{F1} - F_4 \times x_A^{F4} - F_3 \times x_A^{F4} \times K_A^{F4}$$

$$\rho_{F4} \times A_{FL1} \times \frac{d(h_{FL1} \times x_A^{F4})}{dt} = F_1 \times x_A^{F1} - x_A^{F4} \times (F_4 + F_3 \times K_A^{F4})$$

$$x_A^{F4} \times \frac{dh_{FL1}}{dt} + h_{FL1} \times \frac{dx_A^{F4}}{dt} = \frac{F_1 \times x_A^{F1} - x_A^{F4} \times (F_4 + F_3 \times K_A^{F4})}{\rho_{F4} \times A_{FL1}}$$

$$h_{FL1} \times \frac{dx_A^{F4}}{dt} = \frac{F_1 \times x_A^{F1} - x_A^{F4} \times (F_4 + F_3 \times k_A^{F4})}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} - x_A^{F4} \times \frac{dh_{FL1}}{dt}$$

$$\frac{dx_A^{F4}}{dt} = \left[\frac{F_1 \times x_A^{F1} - x_A^{F4} \times (F_4 + F_3 \times K_A^{F4})}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} - x_A^{F4} \times \frac{dh_{FL1}}{dt} \right] / h_{FL1}$$

$$\frac{dx_A^{F4}}{dt} = \left[\frac{F_1 \times x_A^{F1} - x_A^{F4} \times (F_4 + F_3 \times K_A^{F4})}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} - x_A^{F4} \times \left(\frac{F_1 - F_3 - F_4}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} \right) \right] / h_{FL1}$$

Todos los componentes:

$\frac{dx_A^{F4}}{dt} = \left[\frac{F_1 \times x_A^{F1} - x_A^{F4} \times (F_3 + F_4 \times K_A^{F4})}{\rho_{FL4} \times A_{FL1}} - x_A^{F4} \times \left(\frac{F_1 - F_3 - F_4}{\rho_{F3} \times A_{FL1}} \right) \right] / h_{FL1}$
$\frac{dx_B^{F4}}{dt} = \left[\frac{F_1 \times x_B^{F1} - x_B^{F4} \times (F_3 + F_4 \times K_B^{F4})}{\rho_{FL4} \times A_{FL1}} - x_B^{F4} \times \left(\frac{F_1 - F_3 - F_4}{\rho_{F3} \times A_{FL1}} \right) \right] / h_{FL1}$
$\frac{dx_C^{F4}}{dt} = \left[\frac{F_1 \times x_C^{F1} - x_C^{F4} \times (F_3 - F_4 \times K_C^{F4})}{\rho_{FL4} \times A_{FL1}} - x_C^{F4} \times \left(\frac{F_1 - F_3 - F_4}{\rho_{F3} \times A_{FL1}} \right) \right] / h_{FL1}$

Ecs. (VIII, IX y X)

Con K_i^{F4} constante de equilibrio, a las condiciones swl flash (i= A, B y C).

Balance de energía:

$$\frac{d(H_{F4} \times M_{FL1})}{dt} = F_1 \times H_{F1} - F_3 \times H_{F3} - F_4 \times F_{F4}$$

$$\rho_{F4} \times \frac{d(H_{F4} \times V_{FL1})}{dt} = F_1 \times H_{F1} - F_3 \times H_{F3} - F_4 \times F_{F4}$$

$$\rho_{F4} \times A_{FL1} \times \frac{d(H_{F4} \times h_{FL1})}{dt} = F_1 \times H_{F1} - F_3 \times H_{F3} - F_4 \times F_{F4}$$

$$h_{FL1} \times \frac{dH_{F4}}{dt} + H_{F4} \times \frac{dh_{FL1}}{dt} = \frac{F_1 \times H_{F1} - F_3 \times H_{F3} - F_4 \times F_{F4}}{\rho_{F4} \times A_{FL1}}$$

$$h_{FL1} \times \frac{dH_{F4}}{dt} = \frac{F_1 \times H_{F1} - F_3 \times H_{F3} - F_4 \times F_{F4}}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} - \frac{H_{F4} \times dh_{FL1}}{dt}$$

$$\frac{dH_{F4}}{dt} = \left[\frac{F_1 \times H_{F1} - F_3 \times H_{F3} - F_4 \times F_{F4}}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} - \frac{H_{F4} \times dh_{FL1}}{dt} \right] / h_{FL1}$$

$$\frac{dH_{F4}}{dt} = \frac{\left[\frac{F_1 \times H_{F1} - F_3 \times H_{F3} - F_4 \times F_{F4} - H_{F4} \times \left(\frac{F_1 - F_3 - F_4}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} \right)}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} \right]}{h_{FL1}} \quad (XI)$$

$$F_4 = \rho_{F4} \times C_{v4} \times \sqrt{\frac{(P_{FL1} - P_{F4})}{\rho_{F4}}} \quad (14)$$

$$P_{FL1} = P_{FL1}^0 + \rho_{F4} \times g \times h_{FL1} \quad (15)$$

P_{FL1} : Presión en el fondo del flash (donde se supone la salida de la corriente F_4)

$$P_{FL1}^0 = \sum_{i=1}^{NC} x_i^{F4} \times P_{v_i}(T_{F4}) \quad (16)$$

$$C_{v4} = \alpha_4^{AC_4}$$

$$AC_4 = AP_4 + AI_4 + AD_4 + A_{04}$$

$$AP_4 = Kp_4 \times (h_{FL1} - SP_{hFL1})$$

$$\frac{dAI_4}{dt} = Ki_4 \times (h_{FL1} - SP_{hFL1}) \quad (XV)$$

$$AD_4 = Kd_4 \times \frac{dh_{FL1}}{dt}$$

El caudal F_3 es manipulado por el controlador de presión del flash

$$F_3 = \rho_{F3} \times C_{v3} \times \sqrt{\frac{(P_{FL1}^0 - P_{F3}^S)}{\rho_{F3}}} \quad (17)$$

$$AC_3 = AP_3 + AI_3 + AD_3 + A_{03}$$

$$AP_3 = Kp_3 \times (P_{FL1}^0 - SP_{PFL1})$$

$$\frac{dAI_3}{dt} = Ki_3 \times (P_{FL1}^0 - SP_{PFL1}) \quad (XIV)$$

$$AD_3 = Kd_3 \times \frac{dP_{FL1}^0}{dt}$$

En ambos casos, las entalpías se calculan según la funcionalidad:

$$H_{F3} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F3} \times H_i^{F3}(T_{F3}) \quad (18)$$

$$H_{F4} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F4} \times H_i^{F4}(T_{F4}) \quad (19)$$

Intercambiador de calor

Se asume la variación instantánea de las variables involucradas respecto a las variaciones de las variables diferenciales (equipos de mayor holdup, por ejemplo) . Esta hipótesis se la conoce como estado pseudoestacionario.

Además, no se considera cambio de fases ni reacción química en ninguna de sus corrientes.

Balance de Materia:

$$\begin{aligned} F_5 &= F_4 \\ AE_2 &= AE_1 \end{aligned} \quad (20)$$

- Por Componentes:

$$x_i^{F5} \times F_5 = x_i^{F4} \times F_4 \quad \text{con } i=1 \text{ a } 3$$

$$x_i^{F5} = x_i^{F4} \quad (21)$$

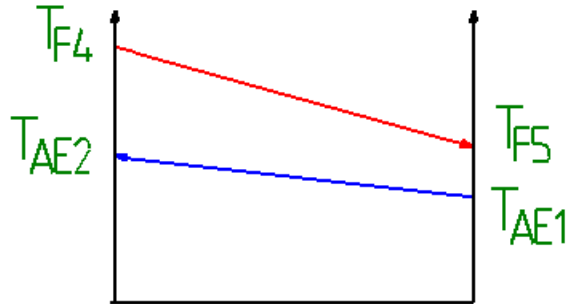
Balance de energía:

$$Q_{IC1} = F_4 \times H_{F4} - F_5 \times H_{F5} = F_4 \times (H_{F4} - H_{F5}) \quad (22)$$

$$H_{F5} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F5} \times H_i^{F5}(T_{F5}) \quad (23)$$

$$Q_{IC1} = AE_1 \times Cp_{AE1} \times (T_{AE2} - T_{AE1})$$

$$T_{AE2} = \frac{Q_{IC1} + AE_1 \times Cp_{AE1} \times T_{AE1}}{AE_1 \times Cp_{AE1}} \quad (24)$$



$$Q_{IC1} = (UA)_{IC1} \frac{(T_{F4} - T_{AE2}) - (T_{F5} - T_{AE1})}{\text{Ln} \frac{(T_{F4} - T_{AE2})}{(T_{F5} - T_{AE1})}} \quad (34)$$

Bomba Centrífuga (estado pseudoestacionario)

Solo incrementa la presión para permitir la recirculación. Como la contrapresión es dato y constante (P_{R1}^0) y asumiendo como dato y constante el incremento de presión de la bomba (ΔP_{BC1}):

$$F_6 = F_5 \quad (25)$$

$$T_{F6} = T_{F5} \quad (26)$$

$$P_{F5} = P_{F4} \quad (27)$$

$$P_{F6} = P_{R1}^0 \quad (28)$$

$$x_i^{F6} = x_i^{F5} \quad \text{para } i=1 \text{ a } 3 \quad (29-31)$$

$$H_{F6} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F5} \times H_i^{F5}(T_{F5}) \quad (32)$$

Desarrollado el módulo, vemos que en definitiva, nos queda un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas a un sistema de ecuaciones algebraicas, no lineales.

En resumen, esquemáticamente el sistema de ecuaciones diferenciales que a su vez aparecen en el miembro derecho acoplado al sistema de ecuaciones algebraicas contiene

funcionalidades que involucran derivadas del miembro izquierdo simultáneamente con las mismas en alguna ecuación del miembro izquierdo y en particular en la misma como es el caso de (I), (VII)

$$\frac{dh_{R1}}{dt} = f_1\left(\frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dh_{R1}}{dt}\right) \quad (I)$$

$$\frac{dC_A^{F1}}{dt} = f_2\left(\frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dh_{R1}}{dt}\right) \quad (II)$$

$$\frac{dC_B^{F1}}{dt} = f_3\left(\frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dh_{R1}}{dt}\right) \quad (III)$$

$$\frac{dC_C^{F1}}{dt} = f_4\left(\frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dh_{R1}}{dt}\right) \quad (IV)$$

$$\frac{dH_{F1}}{dt} = f_5\left(\frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dh_{R1}}{dt}\right) \quad (V)$$

$$\frac{dT_{AE1}}{dt} = f_6\left(\frac{dT_{F1}}{dt}\right) \quad (VI)$$

$$\frac{dh_{FL1}}{dt} = f_7\left(\frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dh_{R1}}{dt}, \frac{dP_{FL}^0}{dt}\right) \quad (VII)$$

$$\frac{dx_A^{F4}}{dt} = f_8\left(\frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dh_{R1}}{dt}, \frac{dP_{FL}^0}{dt}\right) \quad (VIII)$$

$$\frac{dx_B^{F4}}{dt} = f_9\left(\frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dh_{R1}}{dt}, \frac{dP_{FL}^0}{dt}\right) \quad (IX)$$

$$\frac{dx_C^{F4}}{dt} = f_{10}\left(\frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dh_{R1}}{dt}, \frac{dP_{FL}^0}{dt}\right) \quad (X)$$

$$\frac{dH_{F4}}{dt} = f_{11}\left(\frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dh_{R1}}{dt}, \frac{dP_{FL}^0}{dt}\right) \quad (XI)$$

$$\frac{dAI_1}{dt} = f_{12}(\) \quad (XII)$$

$$\frac{dAI_2}{dt} = f_{13}(\) \quad (XIII)$$

$$\frac{dAI_3}{dt} = f_{14}(\) \quad (\text{XIV})$$

$$\frac{dAI_4}{dt} = f_{15}(\) \quad (\text{XV})$$

Estrategia de Resolución del Modelo Dinámico completo

Para resolver el problema se necesitan los valores de las condiciones iniciales de las variables diferenciales (o sea al tiempo inicial).

Además, necesitamos un método de resolución de sistemas de ecuaciones diferenciales. En este caso, debido a que las derivadas de las variables diferenciales se encuentran también en el miembro derecho de las ecuaciones que conforman el sistema, se necesita un método implícito, es decir, iterativo, en particular en las variables acopladas mencionadas.

Siendo $i=1$ a 3

Entradas (Datos o parámetros del problema):

$$\begin{array}{cccc} F_0 & T_{F0} & P_{F0} & x_i^{F0} \\ T_{AE0} & P_{AE0} & P_{R1}^0 & \Delta P_{BC1} \\ A_{R1} & (UA)_{R1} & A_{FL1} & (UA)_{IC1} \end{array}$$

Condiciones iniciales (a tiempo $t=t_0$):

- $AI_{1i}^0, AI_{2i}^0, AI_{3i}^0, AI_{4i}^0,$
- H_{F1}, h_{R1}, h_{FL1}
- $C_i^{F1}, T_{AE1}, x_i^{F4}$ y H_{F4} (para $i=A, B$ y C)

Valores semilla: Son inicializaciones para el procedimiento iterativo, al utilizar un método implícito de resolución.

$$\left(\frac{dh_{R1}}{dt}\right)^*, \left(\frac{dH_{F1}}{dt}\right)^*, \left(\frac{dh_{FL1}}{dt}\right)^*, \left(\frac{dP_{FL1}^0}{dt}\right)^*$$

Secuencia de Resolución:

En primer lugar debe demostrarse que pueden resolverse todos los términos del miembro derecho de todas las ecuaciones diferenciales, para asegurar que el método de resolución seleccionado pueda calcular los valores de las variables diferenciales en el tiempo posterior.

Para ello tenemos los datos/parámetros conocidos y el valor de las variables diferenciales conocidas a partir de conocer los valores iniciales (a tiempo t_0 , en cada instante de tiempo).

Como vimos en los modelos dinámicos para cada equipo, se presentan todas las ecuaciones algebraicas necesarias relacionadas a los miembros derechos de las ecuaciones diferenciales. En consecuencia, se reescriben a continuación en el orden requerido para su resolución.

Comenzamos calculando:

$$x_j^{F1} = \frac{C_j^{F1}}{\sum_{i=1}^3 C_i^{F1}} \quad \text{Para } j=1 \text{ a } 3$$

$$T_{F1} = f(H_{F1}, P_{F1}, x_i^{F1})$$

$$T_{F4} = f(H_{F4}, P_{F4}, x_i^{F4})$$

Las anteriores deben resolverse por algún método iterativo (ejemplo Newton-Raphson).

$$k_D = A_D \times e^{\left(\frac{-E_D}{R \times T_{F1}}\right)} \quad k_I = A_I \times e^{\left(\frac{-E_I}{R \times T_{F1}}\right)}$$

luego se resuelven las ecuaciones (1) a (5):

$$\rho_{F1} = \sum_{j=1}^3 \rho_j^{puro}(T_{F1}) \times x_j^{F1}$$

$$(-r_A) = k_D \times C_A^{F1} \times C_B^{F1} - k_I \times C_C^{F1}$$

$$P_{F1} = P_{R1}^0 + \rho_{F1} \times g \times h_{R1} \quad (7)$$

$$P_{FL1}^0 = \sum_{i=1}^{NC} x_i^{F4} \times Pv_i(T_{F4}) \quad (8)$$

Antes de resolver la (6), se necesita conocer la acción de control de la válvula de control 2: CV-2:

$$AP_2 = Kp_2 \times (h_{R1} - SP_{hR1})$$

$$AD_2 = Kd_2 \times \left(\frac{dh_{R1}}{dt} \right)^*$$

$$AC_2 = AP_2 + AI_2 + AD_2 + A_{02}$$

$$C_{v2} = \alpha_2^{AC_2}$$

$$P_{F2} = P_{FL1}^0$$

La caída de presión se produce en la válvula, luego (según ecuación 6):

$$F_1 = \rho_{F1} \times C_{v2} \times \sqrt{\frac{(P_{F1} - P_{F2})}{\rho_{F1}}}$$

Luego se resuelven la (9), (10) y (12):

$$H_{F0} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F0} \times H_i^{F0}(T_{F0})$$

$$H_{F1} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F1} \times H_i^{F1}(T_{F1})$$

$$Q_{R1} = (UA)_{R1} \times (T_{F1} - T_{AE1})$$

Calculando la acción de control de la válvula 1, se obtiene A_{E0} (de la ec. (13)):

$$AP_1 = Kp_1 \times (T_{F1} - SP_{TF1})$$

$$AD_1 = Kd_1 \times \left(\frac{dT_{F1}}{dt} \right)^*$$

$$AC_1 = AP_1 + AI_1 + AD_1 + A_{01}$$

$$C_{v1} = \alpha_1^{AC_1}$$

$$AE_0 = \rho_{AE0} \times C_{v1} \times \sqrt{\frac{(P_{AE0} - P_{AE1})}{\rho_{AE0}}} \quad (13)$$

$$AP_4 = Kp_4 \times (h_{FL1} - SP_{h_{FL1}})$$

$$AD_4 = Kd_4 \times \left(\frac{dh_{FL1}}{dt} \right)^*$$

$$AC_4 = AP_4 + AI_4 + AD_4 + A_{04}$$

$$C_{v4} = \alpha_4^{AC_4}$$

$$\rho_{F4} = \sum_{j=1}^3 \rho_j^{puro}(T_{F4}) \times x_j^{F4}$$

$$P_{FL1} = P_{FL1}^0 + \rho_{F4} \times g \times h_{FL1}$$

De la ecuación (14) se obtiene F_4

$$F_4 = \rho_{F4} \times C_{v4} \times \sqrt{\frac{(P_{FL1} - P_{F4}^s)}{\rho_{F4}}}$$

Para resolver F_3 se necesita calcular, además de la acción de control de la válvula 3, las constantes de equilibrio y la densidad de F_3 (se asume ideal)

$$K_j^{F4} = \frac{Pv_j(T_{F4})}{P_{FL1}^0}$$

$$AP_3 = Kp_3 \times (P_{FL1}^0 - SP_{h_{FL1}})$$

$$AD_3 = Kd_3 \times \left(\frac{dP_{FL1}^0}{dt} \right)^*$$

$$AC_3 = AP_3 + AI_3 + AD_3 + A_{03}$$

$$C_{v3} = \alpha_3^{AC_3}$$

$$\rho_{F3} = \frac{P_{FL1}^0}{R \times T_{F4}}$$

$$F_3 = \rho_{F3} \times C_{v3} \times \sqrt{\frac{(P_{FL1}^0 - P_{F3}^s)}{\rho_{F3}}} \quad (17)$$

$$y_j^{F3} = K_j^{F4} \times x_j^{F4} \quad \text{Para } j=1 \text{ a } 3$$

$$T_{F3} = T_{F4}$$

$$H_{F3} = \sum_{i=1}^3 y_i^{F3} \times H_i^{F3}(T_{F3}) \quad (18)$$

$$H_{F4} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F4} \times H_i^{F4}(T_{F4}) \quad (19)$$

$$F_5 = F_4$$

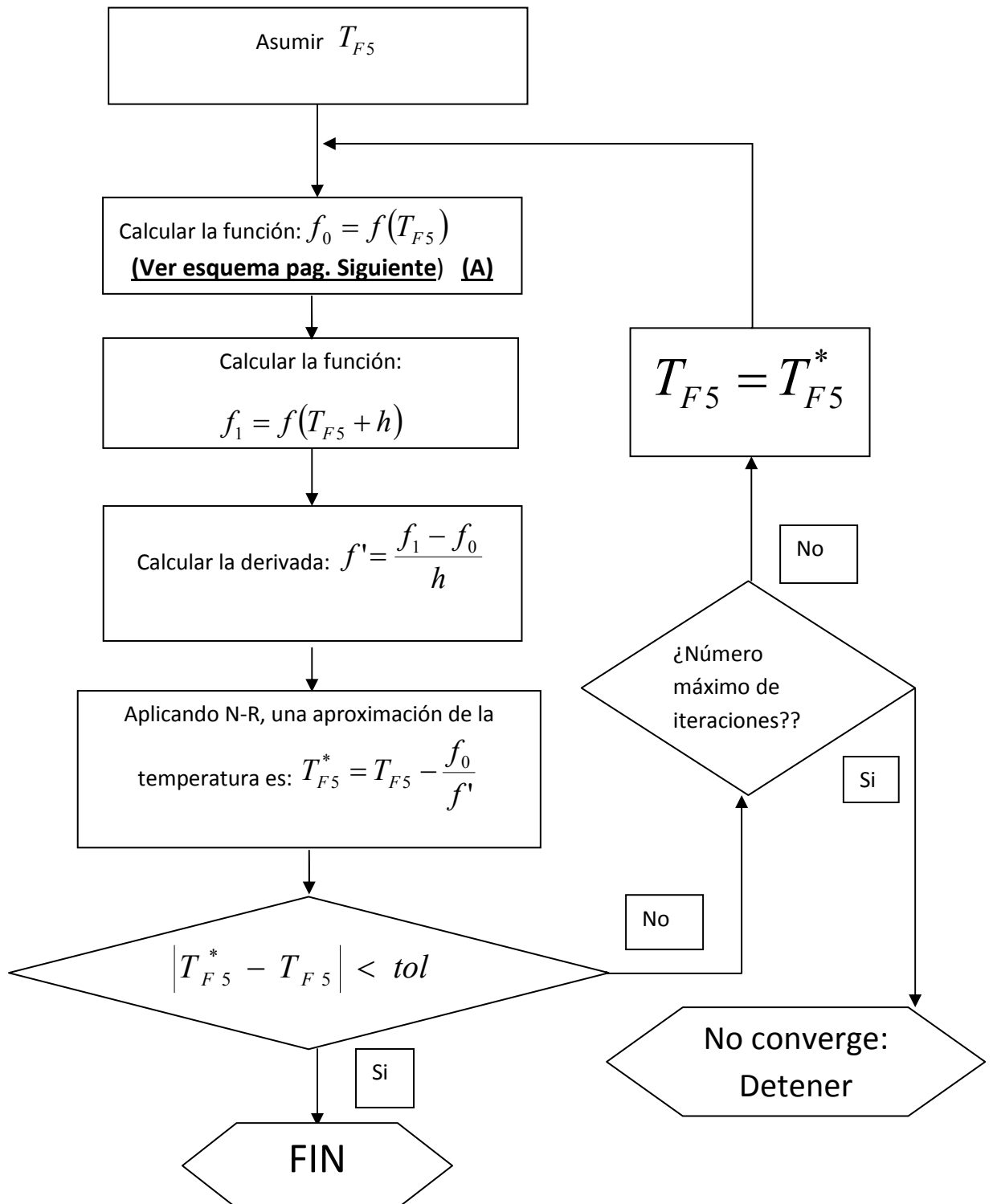
$$AE_2 = AE_1 \quad (20-21)$$

$$x_i^{F5} = x_i^{F4} \quad i=A, B, C$$

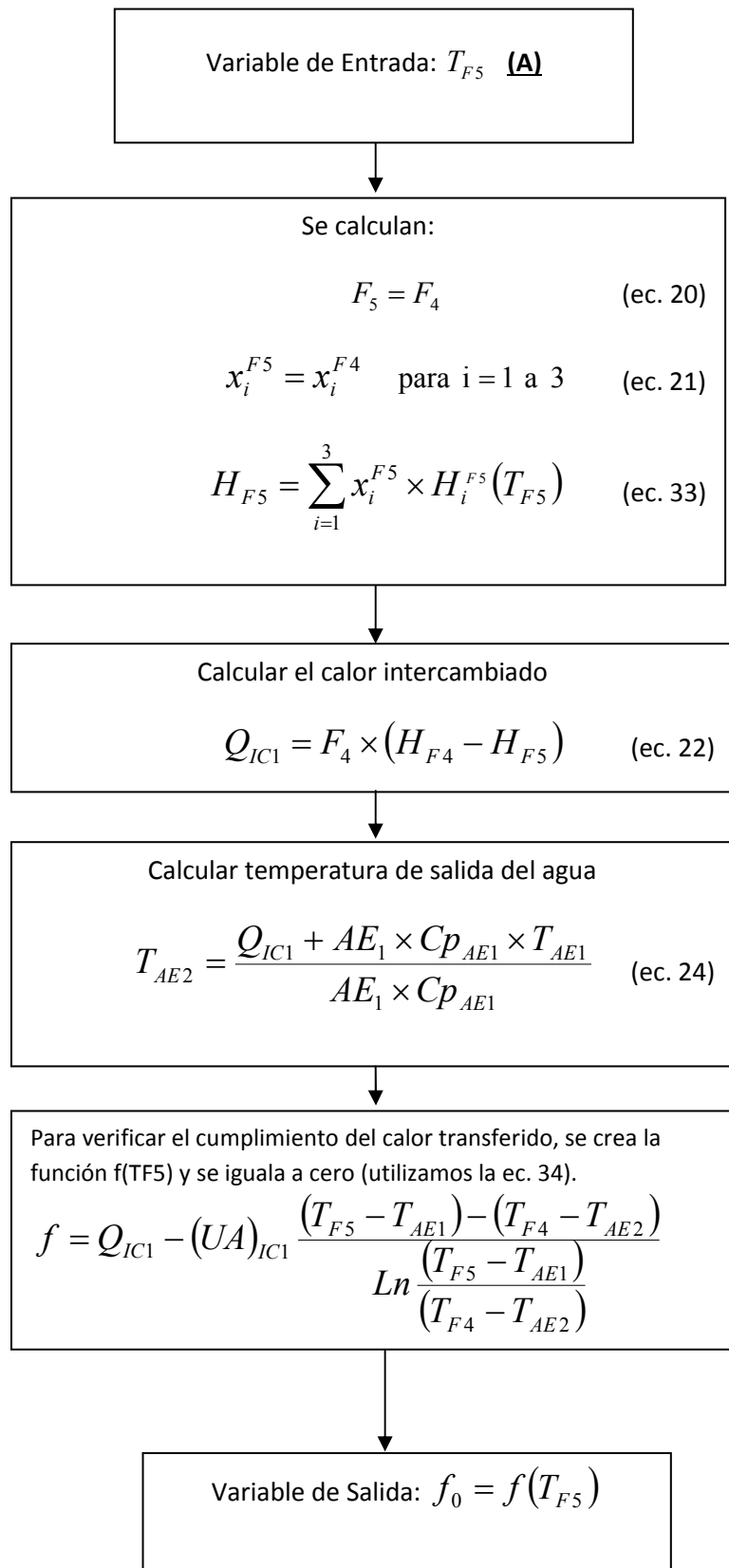
Para resolver el sistema de ecuaciones algebraicas no lineales que involucra al intercambiador de calor, se debe emplear algún método apropiado de aproximaciones sucesivas, ya sea por sustitución o Newton-Raphson.

Un algoritmo que combina las tres ecuaciones del balance de energía (Q_{iC1} , H_{F5} y T_{AE2}) y las convierte en una única ecuación con una incógnita es:

El procedimiento N-R para resolver el sistema de ecuaciones del intercambiador como caja negra sería:



Dónde $f_0 = f(T_{F5})$ queda representado por el siguiente diagrama:



se obtiene Q_{IC1} :

$$Q_{IC1} = AE_1 \times Cp_{AE1} \times (T_{AE2} - T_{AE1})$$

Finalmente, se calculan las ecuaciones algebraicas relacionadas con la bomba centrífuga (Ecs. 25 a 32):

$$F_6 = F_5$$

$$T_{F6} = T_{F5}$$

$$P_{F5} = P_{F4}$$

$$x_i^{F6} = x_i^{F5}$$

$$H_{F6} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F5} \times H_i^{F5}(T_{F5})$$

$$P_{F6} = P_{R1}^0$$

A partir de los valores calculados, si se observan las ecuaciones diferenciales I a XV, junto a los datos y parámetros conocidos, más los valores de las variables diferenciales, cualquier algoritmo de resolución de ecuaciones diferenciales nos brinda el valor de las variables diferenciales en el tiempo $t+\Delta t$.

Por ejemplo recordar el caso más simple (Euler), en el cual la variable en el tiempo $(i+1)$ se calcula en función del valor en el tiempo (i) + el producto de la función f' por Δt . Siendo que las f' (miembros derecho) son calculables, lo son también los valores de las variables diferenciales en el tiempo siguiente.

Como los valores de las derivadas los hemos inicializados (con valores semillas) los miembros derechos quedan definidos. No obstante, todo el cálculo se ha realizado estimando el valor de las derivadas (asociadas a las variables controladas).

Debemos ahora verificar el valor de las mismas respecto de los valores supuestos; esto es, si están dentro del margen de error, podemos pasar al cálculo de las variables diferenciales en el tiempo siguiente. De lo contrario debe proponerse un nuevo valor para las mismas y seguir iterando hasta lograr la convergencia.

Para ello definimos:

$$G_1 = \left| \left(\frac{dh_{R1}}{dt} \right)^* - \left(\frac{dh_{R1}}{dt} \right)_{\text{calculado}} \right|$$

$$G_2 = \left| \left(\frac{dH_{F1}}{dt} \right)^* - \left(\frac{dH_{F1}}{dt} \right)_{\text{calculado}} \right|$$

$$G_3 = \left| \left(\frac{dh_{FL1}}{dt} \right)^* - \left(\frac{dh_{FL1}}{dt} \right)_{\text{calculado}} \right|$$

Debe notarse que no calculamos directamente (dP_{FL1}^0/dt) , por lo que utilizando la relación $Pv_i=f(T_{F4})$, por ejemplo por Antoine, podemos aproximarla. Otra manera es, conociendo la temperatura T_{F4} , comparar directamente el valor de P_{FL1}^0 a partir de la derivada, y el calculado a partir del valor obtenido T_{F4} , según:

$$G_4 = \left(\frac{dP_{FL1}^0}{dt} \right)^* \times \Delta t + P_{FL1}^0{}^{(i)} - \sum x_i^{F4} \times Pv_i(T_{F4}) = 0$$

Satisfechas las 4 ecuaciones de verificación ya se han obtenido todas las variables que representan al proceso en el tiempo $t=t_i+1$ ($i=i+1$).

Se imprimen y/o almacenan los datos en una base de datos. Si el t es igual al t_{FINAL} se da por terminado el cálculo, de lo contrario se comienza con el nuevo ciclo ($t+\Delta t$).

Si no se verifica que las 4 funciones tengan un valor absoluto menor que cierto valor de tolerancia (tol) debe emplearse un método iterativo (p. ej. Sustitución directa) hasta convergencia.

Conocidas la composición y entalpía específica de la corriente que sale del reactor se puede hallar su temperatura a partir de resolver la ecuación implícita:

$$H_{F1} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F1} \times H_i^{F1}(T_{F1}^{(i+1)})$$

Con lo que un valor mejorado para la próxima iteración de $\frac{dT_{F1}}{dt}$ será:

$$\left(\frac{dT_{F1}}{dt} \right)^* = \frac{T_{F1}^{(i+1)} - T_{F1}^{(i)}}{\Delta t}$$

En el caso de la altura de nivel de líquido en el flash, un valor mejorado para $\frac{dh_{FL1}}{dt}$ puede ser:

$$\left(\frac{dh_{FL1}}{dt} \right)^* = \frac{h_{FL1}^{(i+1)} - h_{FL1}^{(i)}}{\Delta t}$$

Mientras que para $\frac{dP_{F^0}}{dt}$ se propone:

$$\left(\frac{dP_{FL1}^0}{dt} \right)^* = \frac{\sum_{i=1}^{NC} x_i^{F4(i+1)} \times Pv_i(T_{F4}^{(i+1)}) - P_{FL1}^0(i)}{\Delta t}$$