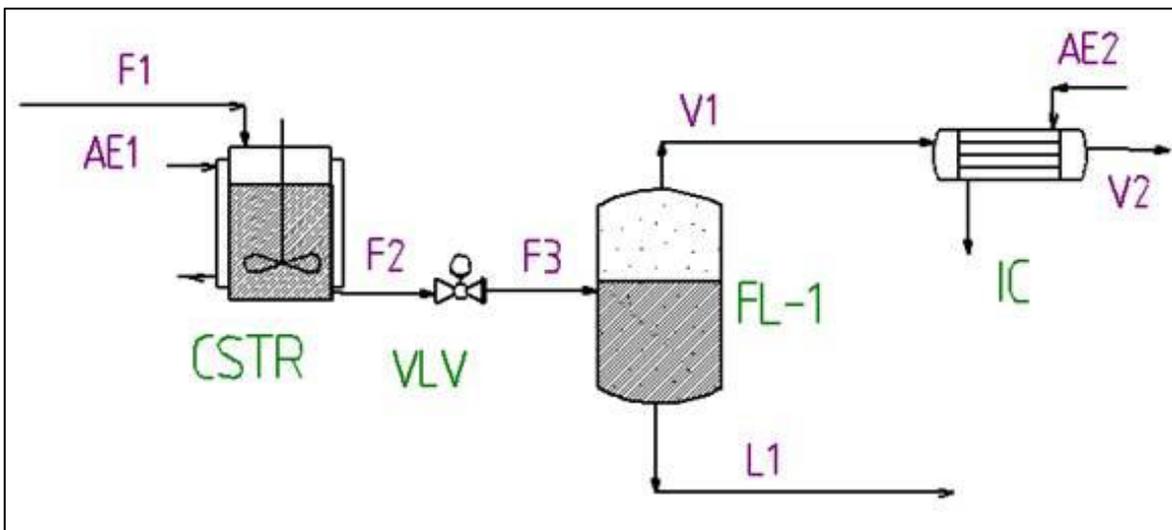


Integración IV - 2022

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

Se propone:

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



Flowsheet

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

Datos y Conjunto de Hipótesis:

A) Reactor CSTR

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



- La cinética de cada reacción es conocida.

$$r_D = Ae^{\left(\frac{-E}{RT}\right)} x_A$$

- Reactor Mezcla completa. La camisa de refrigeración también se considera mezcla completa.
- Los coeficientes cinéticos son conocidos ya que son función de la temperatura (funcional tipo Arrhenius).
- Hold up de vapor despreciable. Evaporación del líquido despreciable.
- Presión en el cuerpo de vapor del reactor es conocida (P_{R1}^0)
- $(UA)_{R1}$ es justo y necesario.
- Tanque cilíndrico de área AT y altura de líquido conocida.
- La temperatura de operación del reactor es conocida.
- Caída de presión a través de la camisa: nula

B) Flash FL-1

- La válvula forma parte del equipo.
- Mezcla No-ideal en fase líquida
- No se producen reacciones químicas
- Adiabático
- Opera en equilibrio L-V
- La presión de operación del equipo es conocida.

C) Condensador total (IC):

- Tipo tubo y coraza.
- Las corrientes operan a contracorriente.
- El (UA) tiene el valor justo para lograr la condensación total del vapor.
- El vapor ingresa saturado (temperatura de rocío) y sale como líquido saturado (punto de burbuja).
- No existen reacciones químicas.
- Se desprecian las caídas de presión.

D) Corrientes

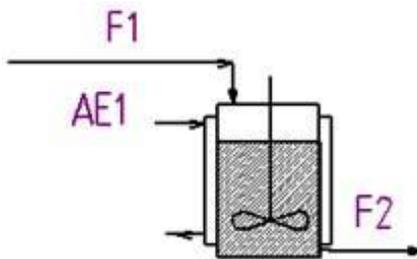
- Corrientes F_1 , AE_1 y AE_2 se conoce su flujo, composición, temperatura y presión.

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

Modelos Matemáticos

Reactor

Al adoptar la filosofía de simulación modular secuencial asumimos que las corrientes de entrada (F_1 y AE_1) están perfectamente definidas.



Balace de Materia por Componente

$$m_{F1}x_{F1,A} + r_A V_{Rx} - m_{F2}x_{F2,A} = 0$$

$$m_{F1}x_{F1,B} + r_B V_{Rx} - m_{F2}x_{F2,B} = 0$$

$$m_{F1}x_{F1,C} + r_C V_{Rx} - m_{F2}x_{F2,C} = 0$$

Velocidad de generación de cada componente

$$r_A = -k_D x_{F2,A}$$

$$r_B = k_D x_{F2,A}$$

$$r_C = k_D x_{F2,A}$$

Constantes cinéticas

$$k_D = A_D \times e^{\left(-\frac{E_D}{RT_{F2}}\right)}$$

Balance de energía en el reactor

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

$$m_{F1}H_{F1} - m_{F2}H_{F2} - Q_R = 0$$

Aclaración: Si se utiliza un calor de reacción distinto al que se obtiene mediante los calores de formación (calor normal de reacción) se deberá aplicar la ley de Kirchhoff hasta la temperatura en la que se conoce dicho calor de reacción (se deberán incluir estos términos en el balance de energía).

Suma de fracciones molares

$$x_{F2,A} + x_{F2,B} + x_{F2,C} = 1$$

Balance de materia en la camisa de enfriamiento

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

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

Balance de energía en la camisa de enfriamiento

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

$$m_{AE1}H_{AE1} - m_{AS1}H_{AS1} + Q_R = 0$$

Ecuación de diseño del intercambio de calor

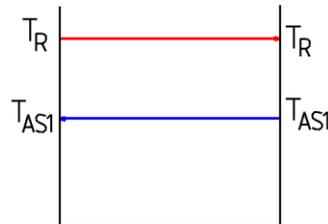
Al ser el reactor y la camisa mezcla completa asumimos que podemos utilizar una expresión simple en base a la diferencia de temperaturas.

$$Q_R = (UA)_R (T_{F2} - T_{AS1})$$

Propiedades fisicoquímicas

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

$$\text{Entalpía de } F_2: H_{F2} = f(T_{F2}, P_{F2}, x_{F2})$$



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

Resolución:

- 1- Se conocen las características de la corriente F_1 , por lo tanto, es conocido su flujo m_{F1} , temperatura T_{F1} , presión P_{F1} y composición x_{F1} y sus propiedades derivadas como entalpías molares H_{F1} .
- 2- Como el reactor opera a una temperatura conocida (T_{F2}) ya podemos conocer el valor de la constante cinética k_D :

$$k_D = A_D \times e^{\left(\frac{E_D}{RT_{F2}}\right)}$$

- 3- Al conocer la temperatura del reactor, solo resta resolver el balance de materia para conocer el resto de las variables. Es decir, debemos resolver un reactor isotérmico a la temperatura T_{F2} . Como sabemos, el balance de materia responde a una estructura cíclica de resolución por lo tanto, tenemos dos caminos:

Resolución global o simultanea del balance de materia

Resolver un sistema de cuatro ecuaciones y cuatro incógnitas (m_{F2} , x_A , x_B , x_C).

$$m_{F1}x_{F1,A} - k_D x_{F2,A} V_{Rx} - m_{F2}x_{F2,A} = 0$$

$$m_{F1}x_{F1,B} + k_D x_{F2,A} V_{Rx} - m_{F2}x_{F2,B} = 0$$

$$m_{F1}x_{F1,C} + k_D x_{F2,A} V_{Rx} - m_{F2}x_{F2,C} = 0$$

$$x_{F2,A} + x_{F2,B} + x_{F2,C} - 1 = 0$$

Aclaración: El volumen de reacción es conocido porque se conoce la altura del líquido.

$$V_{Rx} = A_T h_{liq}$$

Resolución secuencial del balance de materia

- I- Proponemos un valor semilla de la composición del reactor: $x_{F2,i}^*$ $i = A, B, C$
- II- Combinando las 4 ecuaciones podemos obtener el balance global en el reactor

$$m_{F1} + k_D x_{F2,A} V_{Rx} - m_{F2} = 0$$

Luego, obtenemos el valor de la incógnita m_{F2} .

$$m_{F2} = m_{F1} + k_D x_{F2,A}^* V_{Rx}$$

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

$$x_{F2,A} = (m_{F1} x_{F1,A} - k_D x_{F2,A} V_{Rx}) / m_{F2}$$

$$x_{F2,B} = (m_{F1} x_{F1,B} + k_D x_{F2,A} V_{Rx}) / m_{F2}$$

$$x_{F2,C} = (m_{F1} x_{F1,C} + k_D x_{F2,A} V_{Rx}) / m_{F2}$$

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

$$\dot{\iota} \left\| x_{F2}^* - x_{F2} \right\| \leq \text{tolerancia} ?$$

Si: *Continuamos.*

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

4- Una vez que tenemos resuelto el balance de materia pasamos al de energía. Calculamos la entalpía de la corriente de salida y el calor intercambiado:

$$H_{F2} = f(T_{F2}, P_{F2}, x_{F2})$$

$$Q_R = m_{F1} H_{F1} - m_{F2} H_{F2}$$

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

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

$$H_{AS1} = (m_{AE1} H_{AE1} + Q_R) / m_{AS1}$$

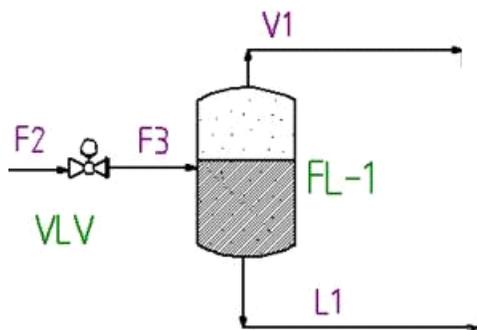
$$H_{AS1} = f(T_{AS1}, P_{AS1}) \rightarrow T_{AS1} \quad (\text{mediante un método iterativo})$$

6- Finalmente, a partir de la ecuación de diseño calculamos el $(UA)_R$ necesario.

$$(UA)_R = \frac{Q_R}{(T_{F2} - T_{AS1})}$$

Flash Adiabático

Al adoptar la filosofía de simulación modular secuencial asumimos que la corriente de entrada F2 está perfectamente definida.



Balance de Materia global

Incluimos el balance global porque vamos a utilizarlo durante la resolución. El balance global resulta de una combinación lineal del balance por componentes y las sumatorias de fracciones molares igual a uno por lo que no debe ser utilizado para un análisis de grados de libertad.

$$m_{F2} = m_{L1} + m_{V1}$$

Balance de Materia por Componente (adecuamos la nomenclatura¹)

$$m_{F2}z_i = m_{L1}x_i + m_{V1}y_i \quad i = A, B, C$$

Balance de Energía

$$m_{F2}H_{F2} - m_{L1}H_{L1} - m_{V1}H_{V1} = 0$$

Fracción vaporizada

$$\theta = \frac{m_{V1}}{m_{F2}}$$

Suma de fracciones molares

$$x_A + x_B + x_C = 1$$

$$y_A + y_B + y_C = 1$$

¹ z, x e y fracciones molares de F2, L1 y V1 respectivamente.

Propiedades termodinámicas

Las corrientes V1 y L2 corresponden a una mezcla de fase conocida (vapor y líquido respectivamente) por lo tanto podemos explicitar el cálculo de sus entalpías. Nuevamente, podríamos omitir la influencia de la presión, pero para mayor generalidad la incluimos. Omitimos el cálculo de las propiedades de la corriente F2 que asumimos conocida.

$$\text{Entalpía de L1: } H_{L1} = f(T_{FL}, P_{FL}, x)$$

$$\text{Entalpía de V1: } H_{V1} = f(T_{FL}, P_{FL}, y)$$

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

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

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

Resolución

Empleando el balance global, la definición de fracción vaporizada y la condición de equilibrio obtenemos:

$$m_{V1} = \theta m_{F2}$$

$$m_{F2} = m_{L1} + m_{V1} \rightarrow m_{L1} = m_{F2} - m_{V1} = m_{F2} - \theta m_{F2} = m_{F2} (1 - \theta)$$

$$m_{F2} z_i = m_{F2} (1 - \theta) x_i + m_{F2} \theta K_i x_i$$

Se divide todo por m_{F2} :

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

Despejando x_i y tomando θ como factor común:

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

Luego, de la condición de equilibrio liquido-vapor:

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

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

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

Reemplazando en la anterior y tomando z_i como factor común:

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

Estrategia de resolución propuesta

Como sabemos un flash tiene dos grados de libertad. En este caso se trata de un flash adiabático (no ideal en fase líquida) con la presión de operación conocida. Existen varias formas de resolverlo y a continuación se propone la siguiente secuencia.

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

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

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

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

$$m_{V1} = \theta m_{F2}$$

$$m_{L1} = (1 - \theta) m_{F2}$$

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

$$y_i = K_i x_i$$

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

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

Si: Continuamos.

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

- 6- Luego ya es posible calcular sus entalpías.

$$H_{L1} = f(T_{FL}^*, P_{FL}, x)$$

$$H_{V1} = f(T_{FL}^*, P_{FL}, y)$$

- 7- Para evitar grandes oscilaciones que podrían dificultar la convergencia, es conveniente normalizar el balance de energía (dividiendo ambos miembros por una magnitud del mismo orden). Para ello se utiliza el producto $m_{F2}H_{F2}$ (energía total de la corriente de entrada).

$$m_{F2}H_{F2} - (1-\theta)m_{F2}H_{L1} - \theta m_{F2}H_{V1} = 0$$

$$1 - (1-\theta)\frac{H_{L1}}{m_{F2}H_{F2}} - \theta\frac{H_{V1}}{m_{F2}H_{F2}} = 0$$

Además, una alternativa de resolución es sumar m.a.m la relación (T_{FL}/T_{F2}) a los efectos de aplicar el método de sustitución directa. La ecuación queda entonces:

$$\frac{T_{FL}}{T_{F2}} = \frac{T_{FL}}{T_{F2}} + 1 - (1-\theta)\frac{H_{L1}}{m_{F2}H_{F2}} - \theta\frac{H_{V1}}{m_{F2}H_{F2}}$$

Por lo que nuestra función de aproximación corresponde a:

$$T_{FL} = \left(\frac{T_{FL}}{T_{F2}} + 1 - (1-\theta)\frac{H_{L1}}{m_{F2}H_{F2}} - \theta\frac{H_{V1}}{m_{F2}H_{F2}} \right) T_{F2}$$

Continuando con nuestra resolución, generamos un nuevo valor para la variable de iteración (T_{FL}) evaluando el miembro derecho de la función de aproximación con los valores hasta ahora disponibles. Recordemos que los valores disponibles fueron calculados a partir de suponer el valor de la temperatura del flash (T_{FL}^*).

$$T_{FL} = \left(\frac{T_{FL}^*}{T_{F2}} + 1 - (1-\theta)\frac{H_{L1}}{m_{F2}H_{F2}} - \theta\frac{H_{V1}}{m_{F2}H_{F2}} \right) T_{F2}$$

- 8- Habiendo calculado una nueva temperatura (T_{FL}) se la compara con la estimada (T_{FL}^*).

$$\zeta \left\| T_{FL} - T_{FL}^* \right\| \leq \text{tolerancia?}$$

Si: Continuamos

No: $T_{FL}^ = T_{FL}$ y regresamos al paso 3.*

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

$$T_{V1} = T_{L1} = T_{FL}$$

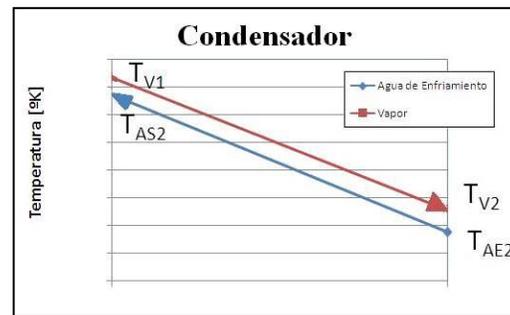
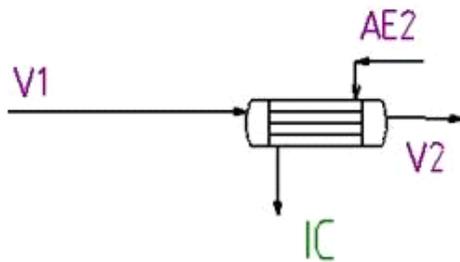
$$P_{V1} = P_{L1} = P_{FL}$$

$$x_{V1,i} = y_i \quad i = A, B \text{ y } C$$

$$x_{L1,i} = x_i \quad i = A, B \text{ y } C$$

Condensador Total

Nuevamente, al adoptar la filosofía de simulación modular secuencial asumimos que las corrientes de entrada V1 y AE2 están perfectamente definidas.



Balance de Materia global

$$m_{V1} - m_{V2} = 0$$

$$m_{AE2} - m_{AS2} = 0$$

Balance de Materia por Componente

Omitimos el balance por componentes de la corriente de agua de enfriamiento (es un compuesto puro).

$$m_{V1}x_{V1,i} - m_{V2}x_{V2,i} = 0 \quad i = A, B \text{ y } C$$

Balance de Energía

Consideramos que todo el calor que pierde la corriente de vapor V1 es absorbido por la corriente de agua de enfriamiento AE2.

$$m_{V1}H_{V1} - m_{V2}H_{V2} - Q_C = 0$$

$$m_{AE2}H_{AE2} - m_{AS2}H_{AS2} + Q_C = 0$$

Ecuación de diseño

Por la naturaleza del intercambiador de calor, consideramos la diferencia de temperatura media logarítmica (LMTD) como diferencia de temperatura característica.

$$Q_C = (UA)_C \times \frac{(T_{V1} - T_{AS2}) - (T_{V2} - T_{AE2})}{Ln \frac{(T_{V1} - T_{AS2})}{(T_{V2} - T_{AE2})}}$$

Propiedades termodinámicas

Entalpía de AS2: $H_{AS2} = f(T_{AS2}, P_{AS2})$ (se puede omitir la presión)

Entalpía de V2:

La corriente V2 corresponde a un equilibrio liquido-vapor por lo que el cálculo de sus propiedades termodinámicas se realiza mediante un flash teórico a las condiciones de la corriente. Por las hipótesis del modelo, esta corriente se trata de un líquido saturado a su presión de operación, es decir conocemos su presión y su fracción vaporizada. Por lo tanto, para poder conocer sus propiedades debemos resolver un flash a presión conocida (P_{V2}) y fracción vaporizada conocida ($\theta_{V2}=0$).

$$T_{V2} = FLASH_{P\theta}(P_{V2}, \theta_{V2}, x_{V2})$$

$$H_{V2} = FLASH_{P\theta}(P_{V2}, \theta_{V2}, x_{V2})$$

Las dos expresiones anteriores corresponden a una única resolución del flash **P θ** .

Resolución:

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

$$m_{V2} = m_{V1}$$

$$m_{AS2} = m_{AE2}$$

2- Resolvemos el balance de materia por componentes para la corriente V2. Para mayor generalidad, resulta útil aclarar que dado que en la corriente V2 ocurre un equilibrio liquido-vapor, la composición que obtenemos de este balance por componentes corresponde a la composición global de la corriente. Luego, según sea la fracción vaporizada cada fase tendrá su propia composición.

$$x_{V2,i} = x_{V1,i} \quad i = A, B \text{ y } C$$

3- Habiendo asumido la condensación total, la fracción vaporizada de la corriente de salida es cero y esta queda ya completamente definida.

$$T_{V2} = FLASH_{P\theta}(P_{V2}, 0, x_{V2})$$

$$H_{V2} = FLASH_{P\theta}(P_{V2}, 0, x_{V2})$$

Al tratarse de un líquido saturado la composición global de la mezcla (obtenida del balance por componentes) es igual a la de la fase. (*Ver resolución más adelante*)

- 4- Al quedar definida la corriente V2 ya podemos conocer el calor intercambiado.

$$Q_C = m_{V1}H_{V1} - m_{V2}H_{V2}$$

- 5- De manera similar podemos calcular la entalpía de salida del agua de enfriamiento y luego de su ley funcional la temperatura.

$$H_{AS2} = (m_{AE2}H_{AE2} + Q_C) / m_{AS2}$$

$$H_{AS2} = f(T_{AS2}, P_{AS2}) \rightarrow T_{AS2} \text{ (método iterativo)}$$

- 6- Ahora es posible calcular el $(UA)_C$ necesario para el intercambio de calor:

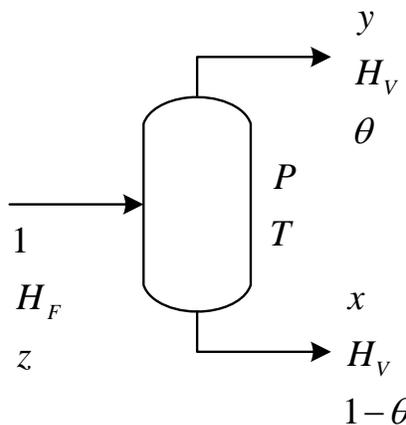
$$LMTD = \frac{(T_{V1} - T_{AS2}) - (T_{V2} - T_{AE2})}{\ln \frac{(T_{V1} - T_{AS2})}{(T_{V2} - T_{AE2})}}$$

$$UA_C = Q_C / LMTD$$

Es importante aclarar que esta secuencia de resolución es válida para cualquier valor de fracción vaporizada de la corriente de salida, por lo que también se puede aplicar a un condensador parcial ($0 < \theta < 1$).

Flash teórico del punto 3

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



Para nuestro caso conocemos la composición de la alimentación ($z=x_{V2}$), la presión de operación ($P=P_{V2}$) y la fracción vaporizada ($\theta=0$).

1. El equilibrio es no-ideal en la fase líquida, pero como la fracción vaporizada es cero la composición de la fase líquida x es igual a la de alimentación z (conocida). Por lo tanto, no debemos iterar con la composición del líquido.

2. A partir de la ecuación de Rachford & Rice ya podemos conocer la temperatura del flash para el valor de ($\theta=0$):

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

3. Una vez hallada la temperatura se calculan las composiciones de ambas fases.

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

$$y_i = K_i x_i$$

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

$$H_L = f(T, P, x)$$

$$H_V = f(T, P, y)$$

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

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

6. Finalmente, a partir de los cálculos del flash teórico ya quedan definidas la entalpía y temperatura de la corriente V2.

$$H_{V2} = H_F$$

$$T_{V2} = T$$

Resolución completa de la planta

En primer lugar, deben detectarse el número de ciclos existentes. En este caso no existen ciclos por lo que no es necesario seleccionar corrientes de corte. Por lo tanto, ya podemos comenzar con la resolución:

1. Se aplica la secuencia propuesta para el reactor CSTR quedando completamente especificada la corriente F2.
2. A partir de la secuencia propuesta se resuelve flash FL-1 quedando definidas las corrientes de salida V1 y L1.
3. Finalmente, se resuelve el condensador total IC y se especifican las corrientes faltantes del proceso (V2 y AS2).