

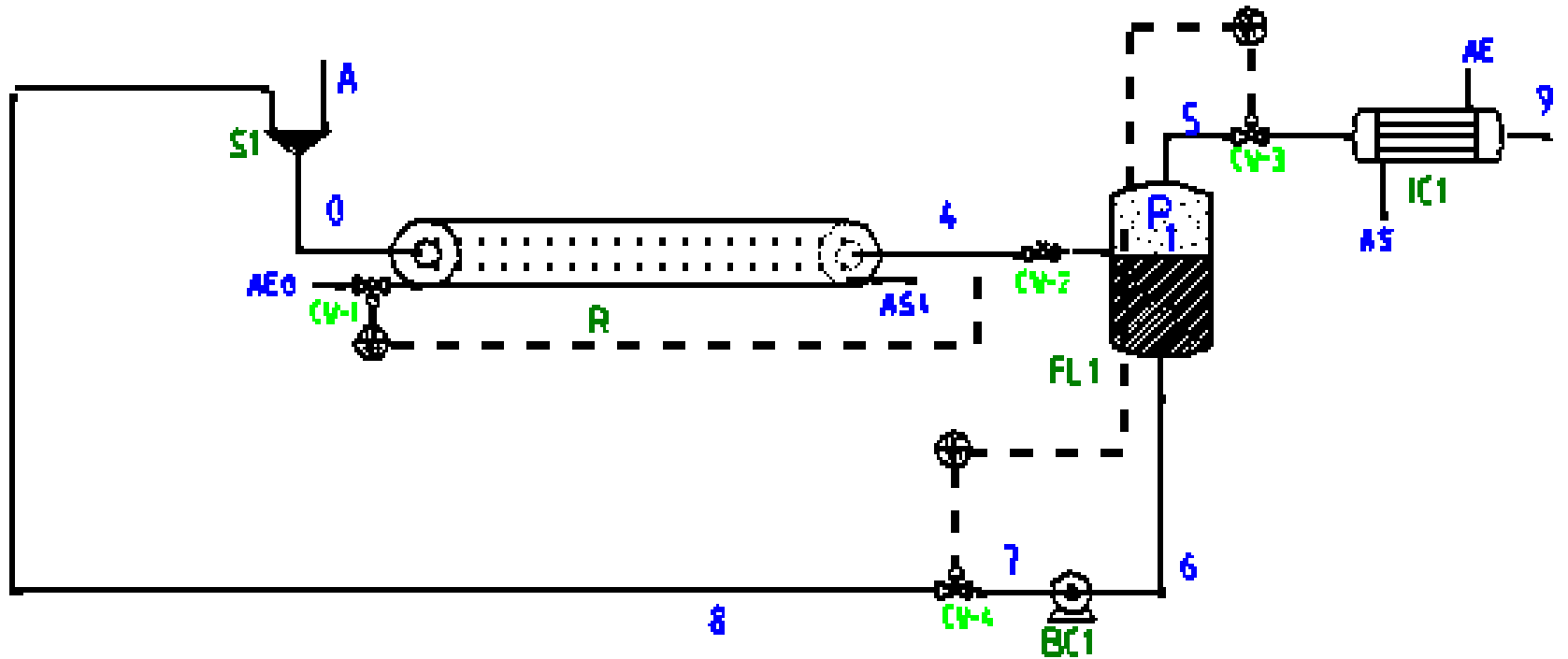
Integración IV

Ejemplo de Modelado de Equipos de una Planta en Estado Dinámico

2023

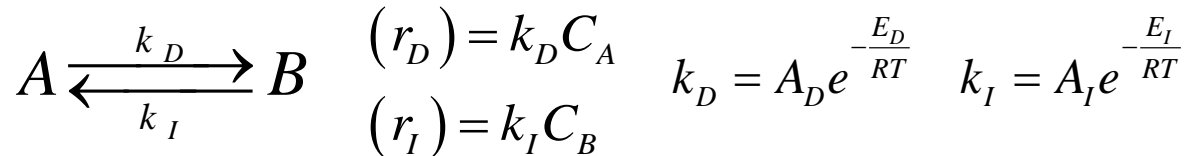
Profesor: Dr. Nicolás J. Scenna
Profesor: Dr. Néstor H. Rodríguez
3JTP: Dr. Juan I. Manassaldi

Flowsheet



Hipótesis – Reactor R

- Flujo pistón (tubular) con reacción por el centro,
- Dimensiones conocidas con un llenado del 100 %.
- Reacción química en fase líquida cuya cinética es:

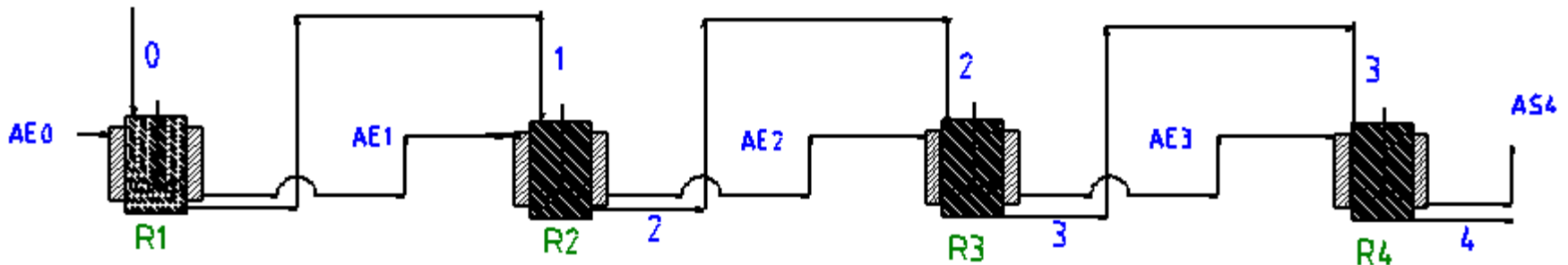


- Reacción exotérmica: ($\Delta H_R < 0$)
- Enfriado por agua de enfriamiento (agua líquida), circulando por el ánulo.
- Caudal de entrada igual al de salida.

Hipótesis – Reactor R

Hipótesis o estrategia de modelado

Para modelar el reactor se aproxima el flujo pistón por una serie de 4 reactores tanques agitados en serie totalmente llenos, de igual volumen y (UA) para cada uno.



Flash: FL1

- Dimensiones conocidas.
- Equilibrio LV ideal.
- Adiabático.
- La válvula de entrada forma parte del mismo equipo.
- Hold Up de vapor no despreciable.

Sumador: S1

- Adiabático y sin reacción química.
- Sin cambio de estado
- Caída de presión nula.
- Presiones de entrada todas iguales.

Bomba Centrífuga: BC1

- No hay cambio en otras propiedades incluyendo cambio de estado.
- Opera a presión de descarga conocida y constante.

Condensador: IC1

- Caídas de presión nula tanto en coraza como en tubos.
- El vapor condensa totalmente y solo entrega su calor latente.
- $(UA)_{IC}$ desconocido.

Hipótesis - Varias

Válvulas (CV1 a CV4)

- Válvulas de apertura lineal con todos sus parámetros conocidos.
- La válvula CV2 se encuentra en modo manual a una apertura conocida y se considera parte del flash.
- Todas las válvulas no alteran las propiedades del fluido.

Hipótesis - Varias

Controladores

- Controlador de temperatura del reactor: PI
- Controlador de nivel del flash: PID
- Controlador de presión del flash: P
- Todos los parámetros, incluidos los setpoints, son conocidos.

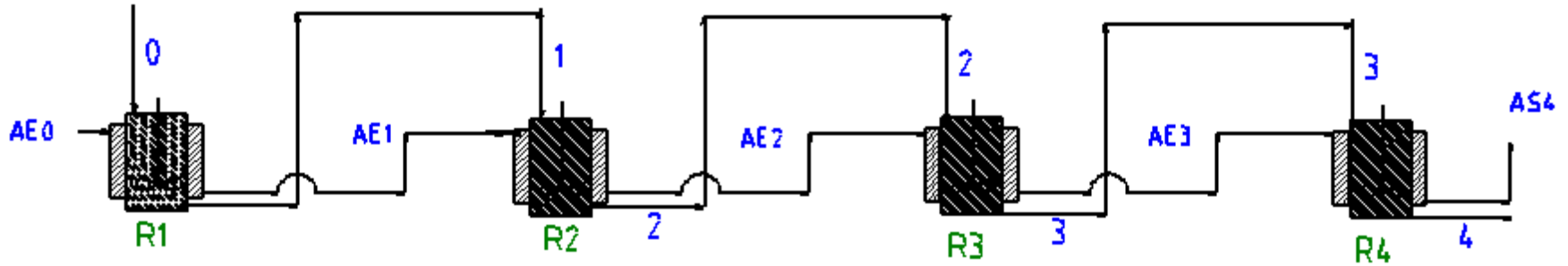
Corrientes

- Corriente A: Corriente de A puro de temperatura, caudal y presión conocidos.
- Corrientes AE0 y AE: Corrientes de refrigeración. Agua líquida, temperatura, caudal (solo AE) y presión conocidos.

Plantear:

1. El correspondiente sistema de ecuaciones diferenciales.
2. El sistema de ecuaciones algebraicas complementario de tal forma que todas las variables de las ecuaciones diferenciales queden definidas.
3. Explique la estrategia de resolución y demuestre esquemáticamente que el sistema de ecuaciones diferenciales y algebraicas resultante es calculable dadas las condiciones iniciales y los parámetros/datos de entrada del sistema. Detallar la secuencia en que se obtienen las variables del sistema de EDO.

Reactor R



- El holdup de materia es constante en cada reactor.
- Cada tanque es un CSTR en donde existe acumulación de energía y componentes (cambia la composición).

Modelado – Reactor R1

$$Q_0 = Q_1 \quad \circ \quad m_0 = m_1$$

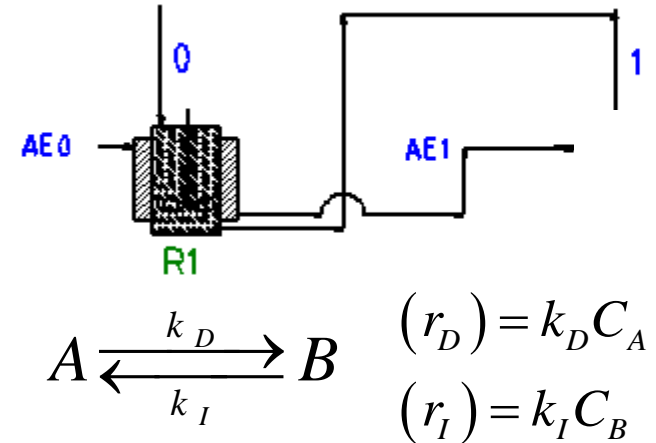
$$\frac{dM_A}{dt} = Q_0 c_{A,0} + r_{A,R1} V_{R1} - Q_1 c_{A,1}$$

$$M_A = c_{A,1} V_{R1}$$

$$V_{R1} \frac{dc_{A,1}}{dt} = Q_0 c_{A,0} + r_A V_{R1} - Q_1 c_{A,1}$$

$$V_{R1} \frac{dc_{A,1}}{dt} = Q_0 (c_{A,0} - c_{A,1}) + r_A V_{R1}$$

$$V_{R1} \frac{dc_{B,1}}{dt} = Q_0 (c_{B,0} - c_{B,1}) + r_B V_{R1}$$

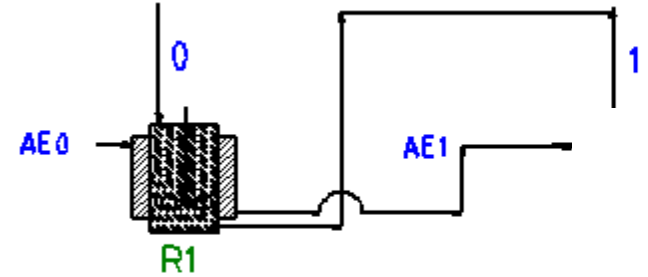


Modelado – Reactor R1

$$\frac{dMH_1}{dt} = m_0 H_0 - m_1 H_1 + (-r_A) V_{R1} (-\Delta H_{rD}) - Q_{R1}$$

$$M = \rho_1 V_{R1}$$

$$\rho_1 V_{R1} \frac{dH_1}{dt} = m_0 H_0 - m_1 H_1 + (-r_A) V_{R1} (-\Delta H_{rD}) - Q_{R1}$$



$$r_A = -k_D C_A + k_I C_B \quad r_B = k_D C_A - k_I C_B \quad k_D = f(T_1) \quad k_I = f(T_1)$$

$$x_{A,1} = \frac{c_{A,1}}{c_{A,1} + c_{B,1}} \quad x_{B,1} = \frac{c_{B,1}}{c_{A,1} + c_{B,1}}$$

$$H_1 = f(T_1, x_1)$$

$$\rho_1 = c_{A,1} + c_{B,1}$$

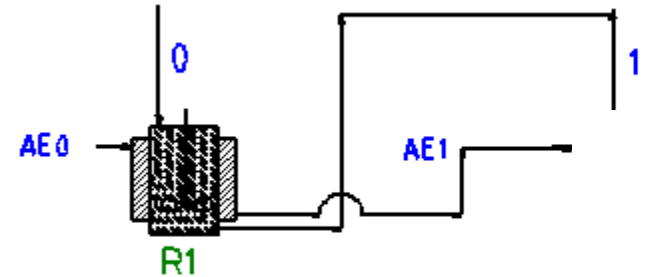
$$\Delta H_{rD} = f(T_1)$$

Modelado – Reactor R1 (camisa)

$$m_{AE0} = m_{AE1}$$

$$\frac{dMH_{AE1}}{dt} = m_{AE0}H_{AE0} - m_{AE1}H_{AE1} + Q_{R1}$$

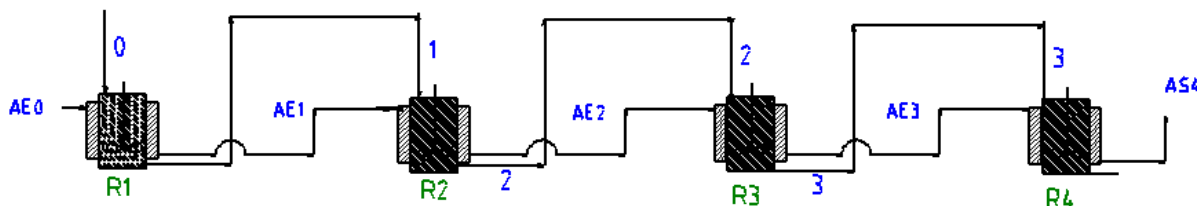
$$\rho_{AE}V_{C1} \frac{dH_{AE1}}{dt} = m_{AE0}(H_{AE0} - H_{AE1}) + Q_{R1}$$



$$Q_{R1} = UA_{R1}(T_1 - T_{AE1})$$

$$H_{AE1} = f(T_{AE1})$$

- El resto de los reactores se modela de manera similar incrementando los índices en una unidad.



Modelado – Reactor R1 (Control de temperatura)

$$\varepsilon = T_4 - T_{sp} \quad \text{Control directo}$$

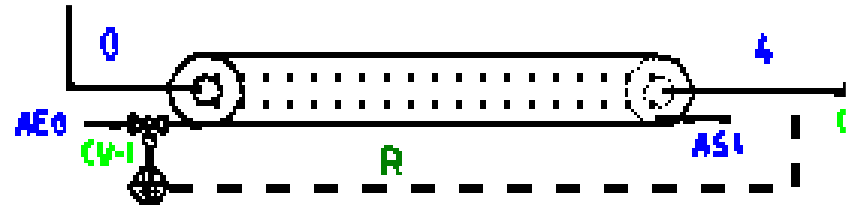
$$A_p = K_p \varepsilon$$

$$\frac{dA_I}{dt} = K_I \varepsilon$$

$$AC = A_p + A_I + A_0$$

$$x_{CV1} = \max(0, \min(1, AC))$$

$$Q_{AE0} = x_{CV1} K_{CV1} \sqrt{\frac{\Delta P_{CV1}}{G_{CV1}}}$$



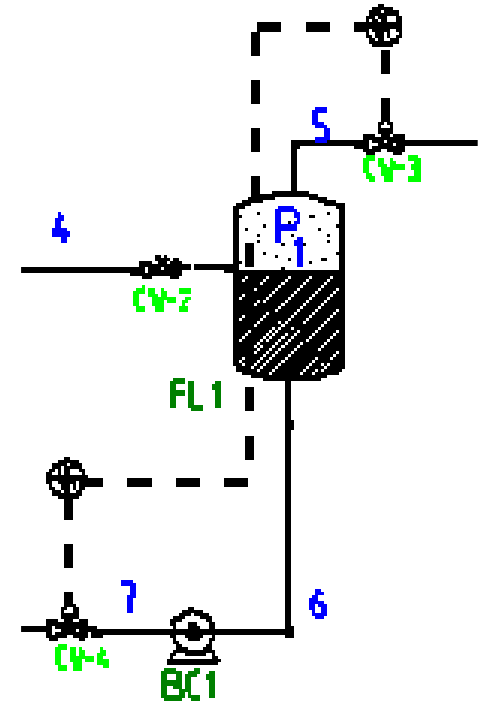
Modelado – Flash FL 1

- Balance molar en el líquido:

$$\frac{dM_{FL}}{dt} = m_4 - m_V - m_6$$

$$\frac{d\rho_6 A_{FL} h_{FL}}{dt} = m_4 - m_V - m_6$$

$$\rho_6 A_{FL} \frac{dh_{FL}}{dt} = m_4 - m_V - m_6$$



Modelado - Flash

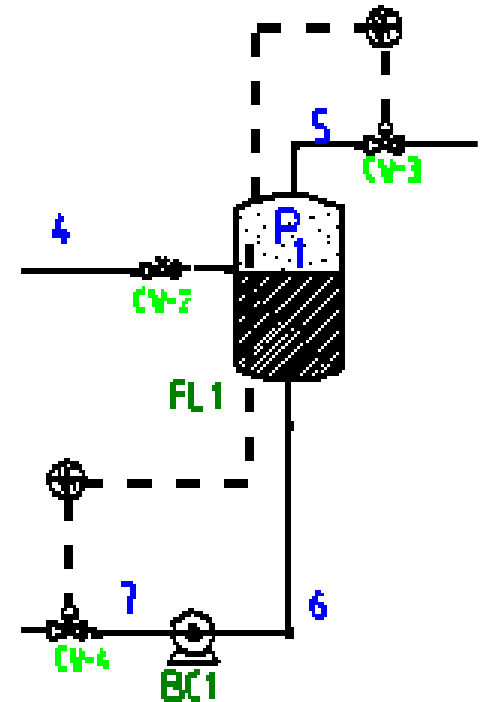
- Balance por componentes:

$$\frac{dM_{FL} x_{6,i}}{dt} = m_4 x_{4,i} - m_V y_{V,i} - m_6 x_{6,i} \quad \forall i$$

$$\frac{d\rho_6 A_{FL} h_{FL} x_{6,i}}{dt} = m_4 x_{4,i} - m_V y_{V,i} - m_6 x_{6,i} \quad \forall i$$

$$\rho_6 A_{FL} h_{FL} \frac{dx_{6,i}}{dt} + \rho_6 A_{FL} x_{6,i} \frac{dh_{FL}}{dt} = m_4 x_{4,i} - m_V y_{V,i} - m_6 x_{6,i} \quad \forall i$$

$$\rho_6 A_{FL} h_{FL} \frac{dx_{6,i}}{dt} + \rho_6 A_{FL} x_{6,i} \frac{dh_{FL}}{dt} = m_4 x_{4,i} - m_V K_i x_{6,i} - m_6 x_{6,i} \quad \forall i$$



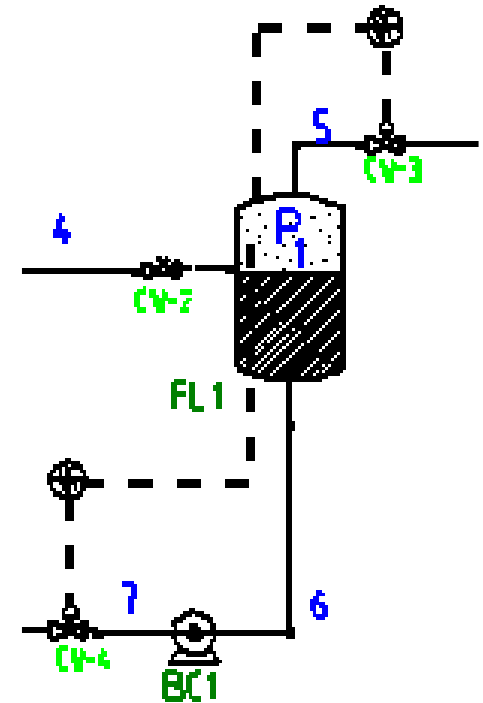
Modelado - Flash

$$\rho_6 A_{FL} h_{FL} \frac{dx_{6,A}}{dt} + \rho_6 A_{FL} x_{6,A} \frac{dh_{FL}}{dt} = m_4 x_{4,A} - m_V K_i x_{6,A} - m_6 x_{6,A}$$

$$\rho_6 A_{FL} h_{FL} \frac{dx_{6,B}}{dt} + \rho_6 A_{FL} x_{6,B} \frac{dh_{FL}}{dt} = m_4 x_{4,B} - m_V K_i x_{6,B} - m_6 x_{6,B}$$

$$K_i = f(T_6, P_{eq})$$

$$P_{eq} = \sum_i x_{6,i} P_i^{vap}(T_6)$$



Modelado - Flash

- Balance de energía:

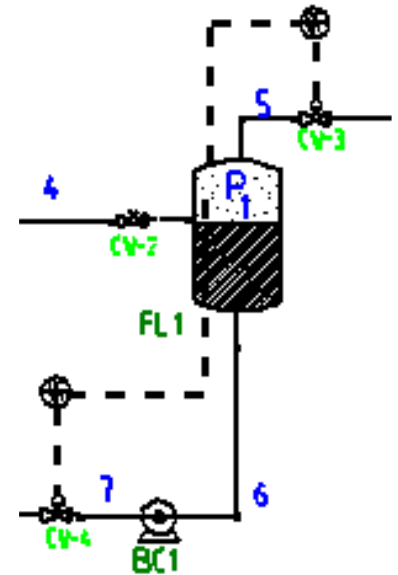
$$\frac{dM_{FL}H_6}{dt} = m_4H_4 - m_VH_V - m_6H_6$$

$$\rho_6 A_{FL} h_{FL} \frac{dH_6}{dt} + \rho_6 A_{FL} H_6 \frac{dh_{FL}}{dt} = m_4H_4 - m_VH_V - m_6H_6$$

$$H_V = f(T_6, y_V)$$

$$H_6 = f(T_6, x_6)$$

$$y_{V,i} = K_i x_{6,i}$$



Modelado - Flash

- Balance de materia total en el vapor:

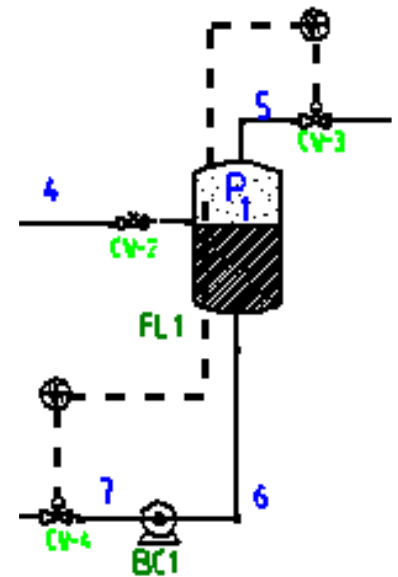
$$\frac{dM_v}{dt} = m_v - m_5$$

- Masa evaporada:

$$W_s = K_{evap} (P_{eq} - P_5)$$

- Moles evaporados:

$$m_v = K_{evap} (P_{eq} - P_5) / \sum_i K_i x_{6,i} MW_i$$

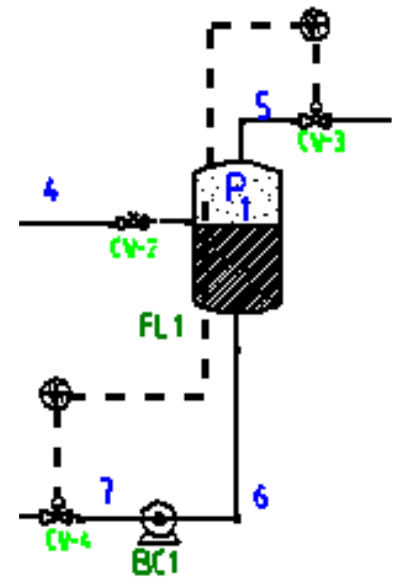


Modelado - Flash

- Balance de materia por componentes en el vapor:

$$\frac{dM_v y_{5,i}}{dt} = m_v K_i x_{6,i} - m_5 y_{5,i}$$

$$M_v \frac{dy_{5,i}}{dt} + y_{5,i} \frac{dM_v}{dt} = m_v K_i x_{6,i} - m_5 y_{5,i}$$



Evaporador Flash – Control de nivel (PID)

$$\varepsilon_L = h_{FL} - h_{sp} \quad \text{Control directo}$$

$$A_P^L = K_P^L \varepsilon_L$$

$$\frac{dA_I^L}{dt} = K_I^L \varepsilon_L$$

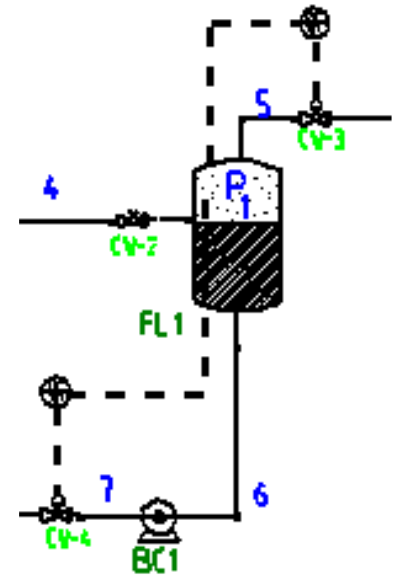
$$A_D^L = K_D^L \frac{dh}{dt}$$

$$AC^L = A_P^L + A_I^L + A_D^L + A_0^L$$

$$x_{CV4} = \max(0, \min(1, AC^L))$$

$$\Delta P_{CV4} = P_8 - P_7$$

$$m_6 = \rho_6 x_{CV4} K_{CV4} \sqrt{\frac{\Delta P_{CV4}}{G_{CV4}}}$$



Evaporador Flash – Control de presión (P)

$$\varepsilon_{PR} = P_5 - P_{sp} \quad \text{Control directo}$$

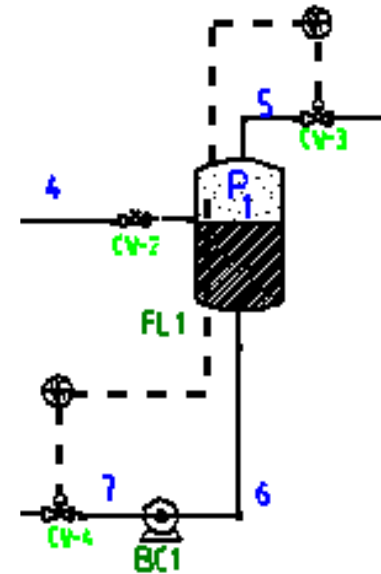
$$A_P^{PR} = K_P^{PR} \varepsilon_{PR}$$

$$AC^{PR} = A_P^{PR} + A_0^{PR}$$

$$x_{CV3} = \max\left(0, \min\left(1, AC^{PR}\right)\right)$$

$$\Delta P_{CV3} = P_5 - P_9 \quad P_5 = \frac{M_v RT_6}{A_{FL} (h_T - h_l)}$$

$$m_5 = \rho_5 x_{CV3} K_{CV3} \sqrt{\frac{\Delta P_{CV3}}{G_{CV3}}}$$



Bomba BC1

$$P_6 = P_5 + \tilde{\rho}_6 g h_l$$

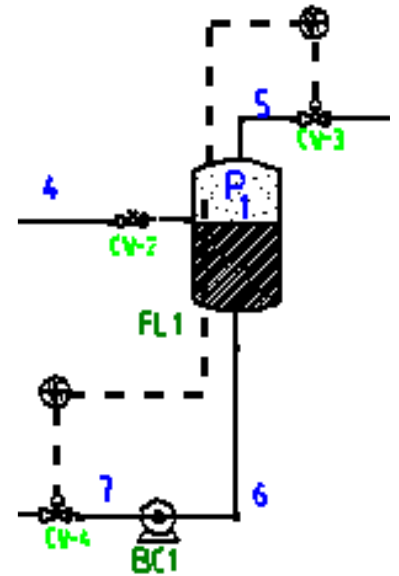
$$\Delta P_{BC} = P_7 - P_6$$

$$T_7 = T_6$$

$$W_{BC} = m_6 \frac{\Delta P_{BC}}{\eta \rho_6}$$

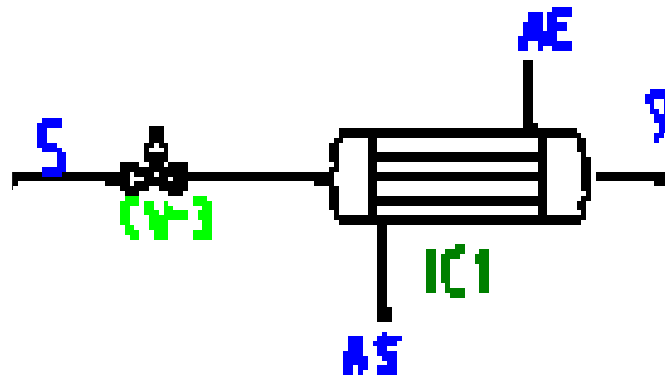
$$m_7 = m_6$$

$$x_{7,i} = x_{6,i} \quad \forall i$$



Hipótesis – Intercambiador de calor

- Caídas de presión nula tanto en coraza como en tubos.
- El vapor condensa totalmente y solo entrega su calor latente.
- $(UA)_{IC}$ desconocido.



Modelado – 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.

$$m_5 = m_9$$

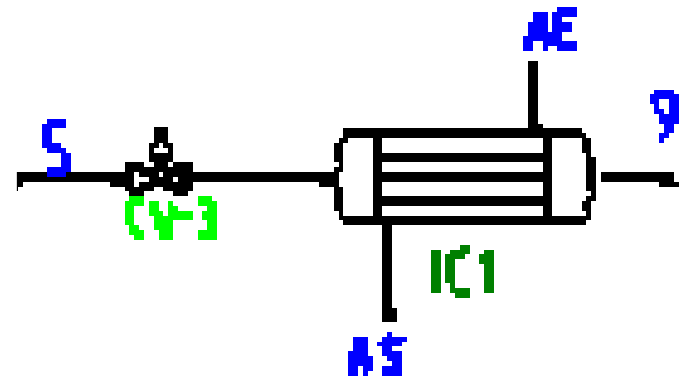
$$x_{5,i} = x_{9,i} \quad \forall i$$

$$m_{AE} = m_{AS}$$

$$Q_{IC} = m_5 (H_5 - H_9) = m_{AE} (H_{AS} - H_{AE})$$

$$H_9 = f(T_9, P_9, x_9)$$

$$H_{AS} = f(T_{AS})$$



Modelado – MIXER S1

$$m_0 = m_8 + m_A$$

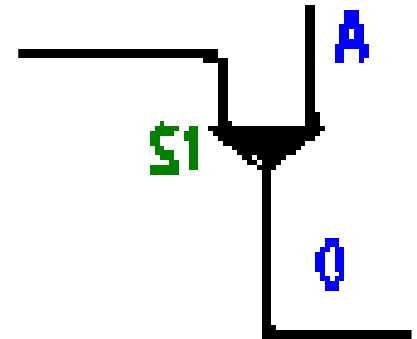
$$m_0 x_{0,i} = m_8 x_{8,i} + m_A x_{A,i} \quad \forall i$$

$$m_0 H_0 = m_8 H_8 + m_A H_A$$

$$H_0 = f(T_0, P_0, x_0)$$

$$H_A = f(T_A, P_A, x_A)$$

$$H_8 = f(T_8, P_8, x_8)$$



Resumen

$$V_{R1} \frac{dc_{A,1}}{dt} = Q_0 (c_{A,0} - c_{A,1}) + r_{A,R1} V_{R1}$$



$$V_{R2} \frac{dc_{A,2}}{dt} = Q_0 (c_{A,1} - c_{A,2}) + r_{A,R2} V_{R2}$$

$$V_{R3} \frac{dc_{A,3}}{dt} = Q_0 (c_{A,2} - c_{A,3}) + r_{A,R3} V_{R3}$$

$$V_{R4} \frac{dc_{A,4}}{dt} = Q_0 (c_{A,3} - c_{A,4}) + r_{A,R4} V_{R4}$$

igual para el componente B

Resumen

$$\rho_1 V_{R1} \frac{dH_1}{dt} = m_0 H_0 - m_1 H_1 + (-r_{A,R1}) V_{R1} (-\Delta H_{rD,R1}) - Q_{R1}$$

II

$$\rho_2 V_{R2} \frac{dH_2}{dt} = m_1 H_1 - m_2 H_2 + (-r_{A,R2}) V_{R2} (-\Delta H_{rD,R2}) - Q_{R2}$$

$$\rho_3 V_{R3} \frac{dH_3}{dt} = m_2 H_2 - m_3 H_3 + (-r_{A,R3}) V_{R3} (-\Delta H_{rD,R3}) - Q_{R3}$$

$$\rho_4 V_{R4} \frac{dH_4}{dt} = m_3 H_3 - m_4 H_4 + (-r_{A,R4}) V_{R4} (-\Delta H_{rD,R4}) - Q_{R4}$$

$$\rho_{AE1} V_{C1} \frac{dH_{AE1}}{dt} = m_{AE0} (H_{AE0} - H_{AE1}) + Q_{R1}$$

$$\rho_{AE2} V_{C2} \frac{dH_{AE2}}{dt} = m_{AE0} (H_{AE1} - H_{AE2}) + Q_{R2}$$

III

$$\rho_{AE3} V_{C3} \frac{dH_{AE3}}{dt} = m_{AE0} (H_{AE2} - H_{AE3}) + Q_{R3}$$

$$\rho_{AE4} V_{C4} \frac{dH_{AE4}}{dt} = m_{AE0} (H_{AE3} - H_{AE4}) + Q_{R4}$$

Resumen

$$\frac{dA_I}{dt} = K_I \varepsilon \quad \textcircled{\text{IV}}$$

$$\frac{dA_I^L}{dt} = K_I^L \varepsilon_L \quad \textcircled{\text{X}}$$

$$\rho_6 A_{FL} \frac{dh_{FL}}{dt} = m_4 - m_V - m_6 \quad \textcircled{\text{V}}$$

$$\rho_6 A_{FL} h_{FL} \frac{dx_{6,A}}{dt} + \rho_6 A_{FL} x_{6,A} \frac{dh_{FL}}{dt} = m_4 x_{4,A} - m_V K_i x_{6,A} - m_6 x_{6,A}$$

VI

$$\rho_6 A_{FL} h_{FL} \frac{dx_{6,B}}{dt} + \rho_6 A_{FL} x_{6,B} \frac{dh_{FL}}{dt} = m_4 x_{4,B} - m_V K_i x_{6,B} - m_6 x_{6,B}$$

$$\rho_6 A_{FL} h_{FL} \frac{dH_6}{dt} + \rho_6 A_{FL} H_6 \frac{dh_{FL}}{dt} = m_4 H_4 - m_V H_V - m_6 H_6 \quad \textcircled{\text{VII}}$$

$$\frac{dM_v}{dt} = m_V - m_5 \quad \textcircled{\text{VIII}}$$

$$M_v \frac{dy_{5,i}}{dt} + y_{5,i} \frac{dM_v}{dt} = m_V K_i x_{6,i} - m_5 y_{5,i} \quad \textcircled{\text{IX}}$$

Sistema de EDOS – Valores iniciales

Condiciones iniciales:

$$C_{A,1}^{(0)}, C_{A,2}^{(0)}, C_{A,3}^{(0)}, C_{A,4}^{(0)}$$

$$C_{B,1}^{(0)}, C_{B,2}^{(0)}, C_{B,3}^{(0)}, C_{B,4}^{(0)}$$

$$H_1^{(0)}, H_2^{(1)}, H_3^{(2)}, H_4^{(3)}$$

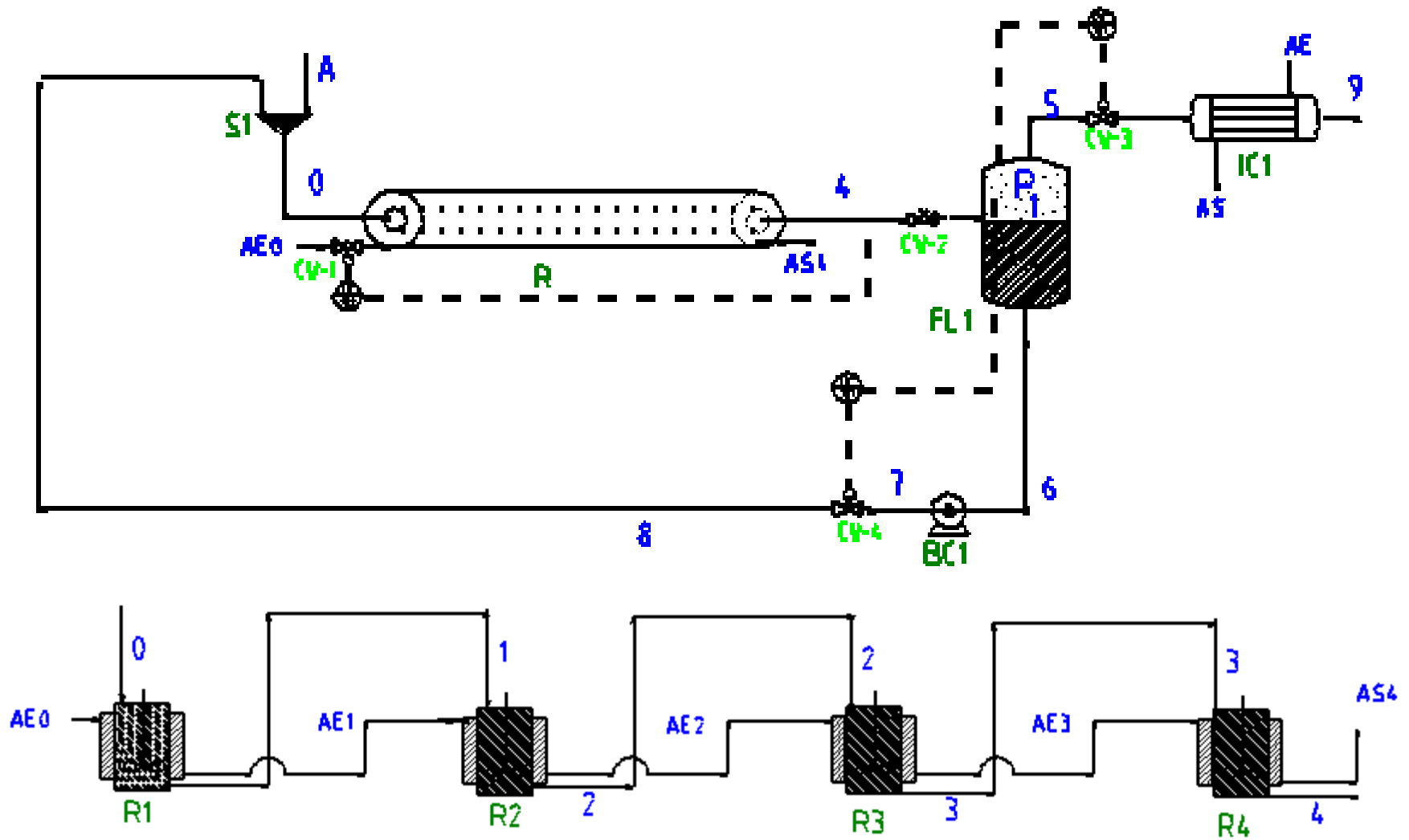
$$H_{AE1}^{(0)}, H_{AE2}^{(0)}, H_{AE3}^{(0)}, H_{AE4}^{(0)}$$

$$A_I^{(0)}$$

$$h_{FL}^{(0)}, x_6^{(0)}, H_6^{(0)}, M_v^{(0)}, y_5^{(0)}$$

$$A_I^{L(0)}$$

Flowsheet



Sistema de EDOS – Resolución

$$P_0^{(0)} = P_1^{(0)} = P_2^{(0)} = P_3^{(0)} = P_4^{(0)} = P_8^{(0)} = P_A \quad P_{AE1}^{(0)} = P_{AE2}^{(0)} = P_{AE3}^{(0)} = P_{AE4}^{(0)}$$

$$x_{A,k} = \frac{c_{A,k}}{c_{A,k} + c_{B,k}} \quad k = 1, \dots, 4$$

$$H_k = f(T_k, x_k) \rightarrow T_k^{(0)} \quad k = 1, \dots, 4$$

$$H_{AEk} = f(T_{AEk}) \rightarrow T_{AEk}^{(0)} \quad k = 1, \dots, 4$$

$$\left. \begin{aligned} k_{D,Rk} &= f(T_{Rk}) \\ k_{I,Rk} &= f(T_{Rk}) \\ r_{A,Rk} &= -k_{D,Rk} c_{A,Rk} + k_{I,Rk} c_{B,Rk} \\ r_{B,Rk} &= k_{D,Rk} c_{A,Rk} - k_{I,Rk} c_{B,Rk} \\ \Delta H_{rD,Rk} &= f(T_k) \\ Q_{Rk} &= UA_{Rk} (T_k - T_{AEk}) \end{aligned} \right\} \rightarrow \begin{aligned} &k_{D,Rk}^{(0)}, k_{I,Rk}^{(0)}, r_{A,Rk}^{(0)}, r_{B,Rk}^{(0)} \\ &\Delta H_{rD,Rk}^{(0)}, Q_{Rk}^{(0)} \\ &k = 1, \dots, 4 \end{aligned}$$

Sistema de EDOS – Resolución

$$H_6 = f(T_6, x_6) \rightarrow T_6^{(0)}$$

$$P_5 = \frac{M_v RT_6}{A_{FL} (h_T - h_l)} \rightarrow P_5^{(0)}$$

$$\left. \begin{aligned} P_{eq} &= \sum_i x_{6,i} P_i^{vap}(T_6) \\ K_i &= f(T_6, P_{eq}) \\ m_v &= K_{evap} (P_{eq} - P_5) / \sum_i K_i x_{6,i} MW_i \end{aligned} \right\} P_{eq}^{(0)}, K_i^{(0)}, m_v^{(0)}$$

$$P_6 = P_5 + \tilde{\rho}_6 g h_l \rightarrow P_6^{(0)}$$

$$P_9 = P_5 \rightarrow P_9^{(0)}$$

$$T_7 = T_6 = T_8 \rightarrow T_7^{(0)}, T_8^{(0)}$$

Sistema de EDOS – Resolución

$$\left. \begin{aligned}
 \varepsilon &= T_4 - T_{sp} \\
 A_p &= K_p \varepsilon \\
 AC &= A_p + A_I + A_0 \\
 x_{CV1} &= \max(0, \min(1, AC)) \\
 \Delta P_{CV1} &= P_{AE0} - P_{AE4} \\
 Q_{AE0} &= x_{CV1} K_{CV1} \sqrt{\frac{\Delta P_{CV1}}{G_{CV1}}}
 \end{aligned} \right\} \rightarrow Q_{AE0}^{(0)}, m_{AE0}^{(0)}$$

$$\left. \begin{aligned}
 \varepsilon_{PR} &= P_5 - P_{sp} \\
 A_p^{PR} &= K_p^{PR} \varepsilon_{PR} \\
 AC^{PR} &= A_p^{PR} + A_0^{PR} \\
 x_{CV3} &= \max(0, \min(1, AC^{PR})) \\
 \Delta P_{CV3} &= P_5 - P_9 \\
 \rho_5 &= \frac{P_5}{RT_6} \\
 m_5 &= \rho_5 x_{CV3} K_{CV3} \sqrt{\frac{\Delta P_{CV3}}{G_{CV3}}}
 \end{aligned} \right\} \rightarrow m_5^{(0)}$$

Sistema de EDOS – Resolución

$$\left(\frac{dh}{dt}\right)^* \rightarrow$$

$$\varepsilon_L = h_{FL} - h_{sp}$$

$$A_D^L = K_D^L \left(\frac{dh}{dt}\right)^*$$

$$A_P^L = K_P^L \varepsilon_L$$

$$AC^L = A_P^L + A_I^L + A_D^L + A_0^L$$

$$x_{CV4} = \max\left(0, \min\left(1, AC^L\right)\right)$$

$$\Delta P_{CV4} = P_8 - P_7$$

$$m_6 = \rho_6 x_{CV4} K_{CV4} \sqrt{\frac{\Delta P_{CV4}}{G_{CV4}}}$$

} $m_6^{(0)}$

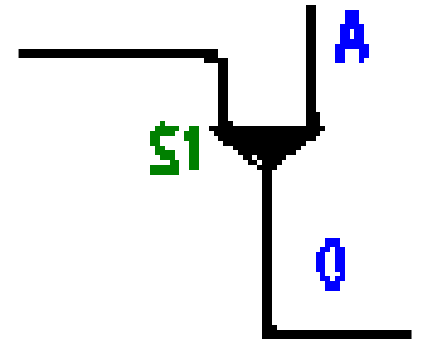
Sistema de EDOS – Resolución

$$m_0 = m_8 + m_A$$

$$x_{0,i} = \frac{m_8 x_{8,i} + m_A x_{A,i}}{m_0} \quad \forall i$$

$$H_0 = \frac{m_8 H_8 + m_A H_A}{m_0}$$

$$H_0 = f(T_0, P_0, x_0) \rightarrow T_0$$



Sistema de EDOS – Resolución

$$m_9 = m_5$$

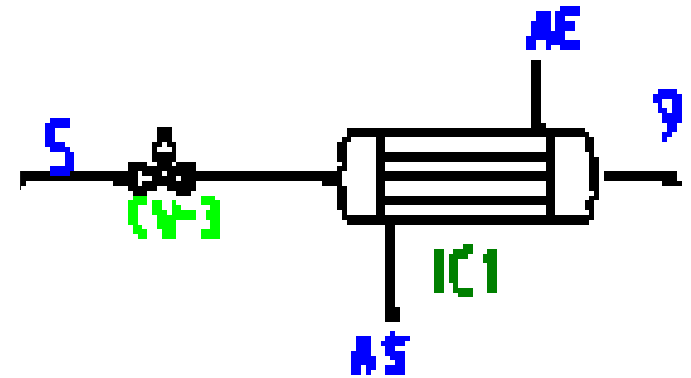
$$x_{9,i} = x_{5,i} \quad \forall i$$

$$m_{AE} = m_{AS}$$

$$FLASH_{P\theta} (P_9, x_9, \theta = 0) \rightarrow H_9, T_9$$

$$H_{AS} = H_{AE} + \frac{m_5 (H_5 - H_9)}{m_{AE}}$$

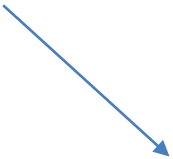
$$H_{AS} = f(T_{AS}) \rightarrow T_{AS}$$



Modelado – Intercambiador de calor

$$\left(\frac{dc_{A,k}}{dt}\right)^{(0)} \left(\frac{dH_k}{dt}\right)^{(0)} \left(\frac{dH_{AEk}}{dt}\right)^{(0)} \quad k = 1, \dots, 4$$

$$\left(\frac{dh_{FL}}{dt}\right)^{(0)} \left(\frac{dx_{6,i}}{dt}\right)^{(0)} \left(\frac{dH_6}{dt}\right)^{(0)} \left(\frac{dM_v}{dt}\right)^{(0)} \left(\frac{dy_{5,i}}{dt}\right)^{(0)}$$


$$i \left\| \left(\frac{dh_{FL}}{dt}\right)^{(0)} - \left(\frac{dh_{FL}}{dt}\right)^* \right\| \leq tol?$$

$$\left(\frac{dA_I}{dt}\right)^{(0)} \left(\frac{dA_I^L}{dt}\right)^{(0)}$$