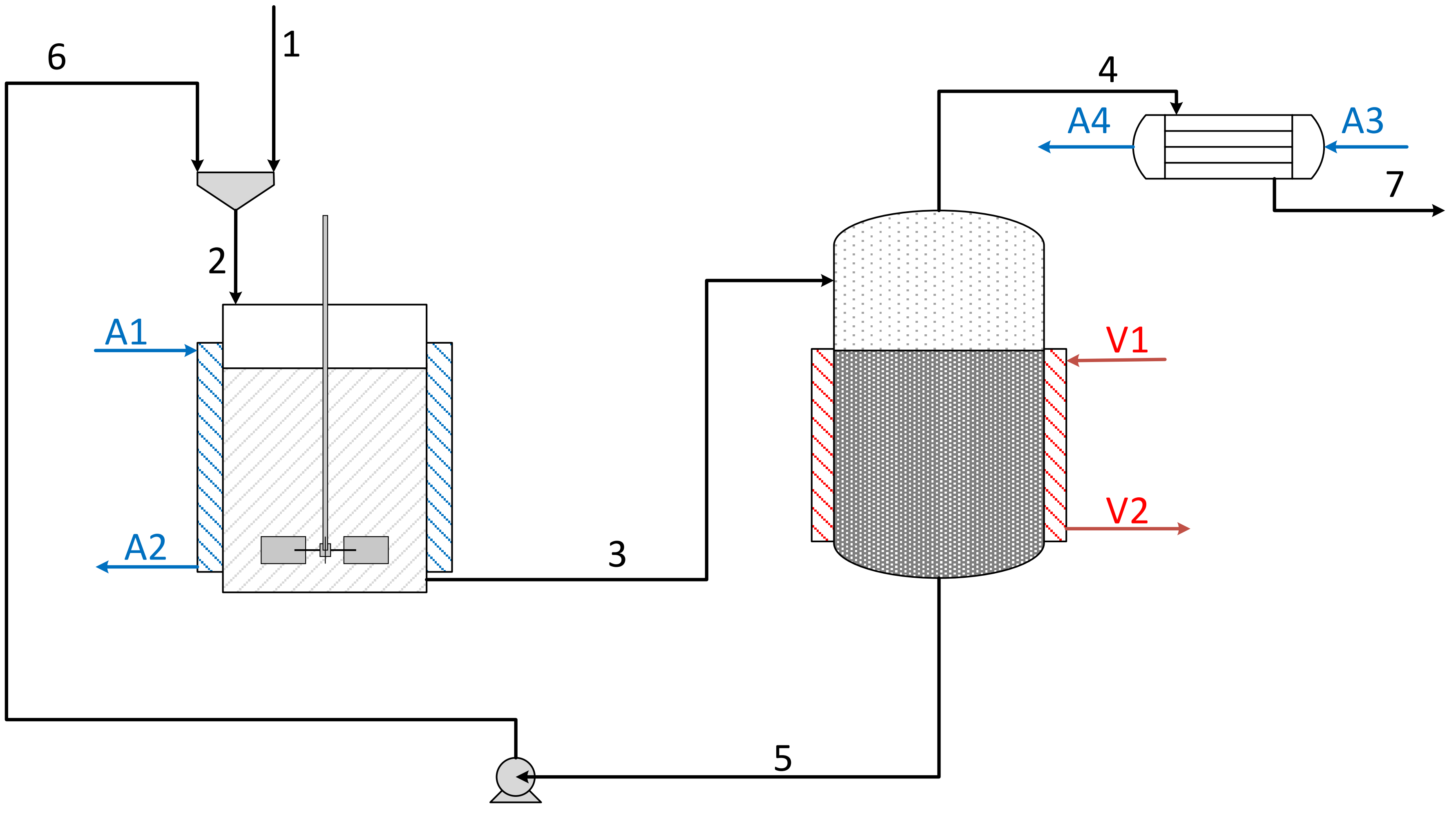
Integración IV

Modelado de Equipos de una Planta según la Filosofía Modular Secuencial. Ejemplo de aplicación IV.

2023

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

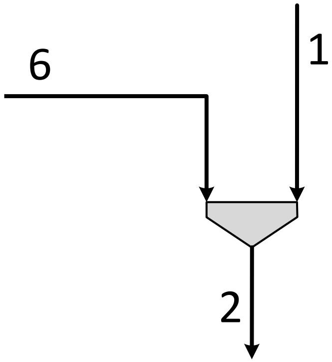
Flowsheet



Propuesta

- 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

Mezclador

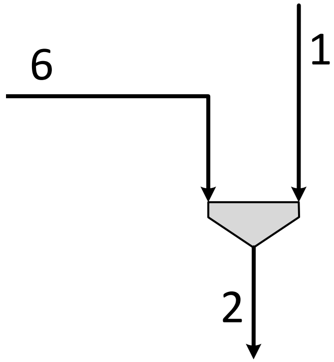


Hipótesis:

- Estado estacionario
- 4 componentes: A, B, C, D y E
- Adiabático
- Sin reacción química
- No hay cambios de fase
- Se desprecia la caída de presión
- La presión de descarga es conocida

Mezclador - Modelado

$$m_1 x_{1,i} + m_6 x_{6,i} - m_2 x_{2,i} = 0 \qquad \forall i$$



$$\sum_i x_{2,i} = 1$$

$$m_1 H_1 + m_6 H_6 - m_2 H_2 = 0$$

$$m_2 \;\; x_{2,i} \;\; T_2 \;\; H_2$$

$$f\left(T_2, P_2, x_2, H_2\right) = 0$$

0 Grados de libertad

Mezclador - Resolución

$$m_2 = m_1 + m_6$$ 1

$$x_{2,i} = \frac{m_1 x_{1,i} + m_6 x_{6,i}}{m_2} \qquad \forall i$$ 2

$$H_2 = \frac{m_1 H_1 + m_6 H_6}{m_2}$$ 3

$$f\left(T_2, P_2, x_2, H_2\right) \rightarrow T_2$$ (sin cambio de fase) 4

Reactor Mezcla completa enfriado con agua

$$A + B \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} C$$

$$C + D \xrightarrow{k_3} E$$

$$r_1 = k_1 C_A C_B$$

$$r_2 = k_2 C_C$$

$$r_3 = k_3 C_C C_D$$

$$r_A = -k_1 C_A C_B + k_2 C_C$$

$$r_B = -k_1 C_A C_B + k_2 C_C$$

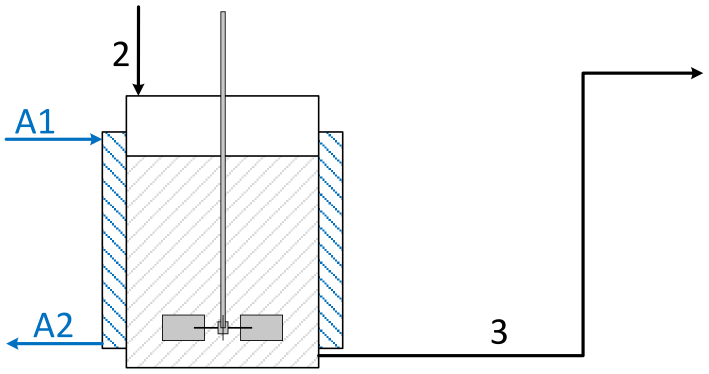
$$r_C = k_1 C_A C_B - k_2 C_C - k_3 C_C C_D$$

$$r_D = -k_3 C_C C_D$$

$$r_E = k_3 C_C C_D$$

Hipótesis:

- Estado estacionario
- Tanque y camisa de enfriamiento mezcla completa
- Se conoce la cinética de las reacciones químicas
- No hay cambios de fase
- Nivel al 75% del volumen.
- Reacción química en fase líquida
- Enfriado por agua pura.
- (UA)R es dato.



Reactor Mezcla completa - Modelado

$$m_2 x_{2,i} + r_i V - m_3 x_{3,i} = 0 \qquad \forall i$$

$$r_A = -k_1 C_A C_B + k_2 C_C \qquad r_B = -k_1 C_A C_B + k_2 C_C$$

$$r_C = k_1 C_A C_B - k_2 C_C - k_3 C_C C_D \qquad r_D = -k_3 C_C C_D \qquad r_E = k_3 C_C C_D$$

$$C_i = \rho_3 x_{3,i} \qquad \forall i$$

$$k_1 = f\left(T_3\right)$$

$$\sum_{i=1}^{NC} x_{3,i} = 1$$

$$k_2 = f\left(T_3\right)$$

$$k_3 = f\left(T_3\right)$$

Variables: 23

Ecuaciones: 22

$$m_2 H_2 - Q_R - m_3 H_3 = 0$$

$$f\left(T_3, P_3, H_3, x_3\right) = 0$$

$$f\left(T_3, P_3, \rho_3, x_3\right) = 0$$

$r_i \ m_3 \ x_{3,i}$

$H_3 \ T_3 \ k_{D1} \ k_{I1} \ k_{D1}$

$Q_R \ C_i \ \rho_3$

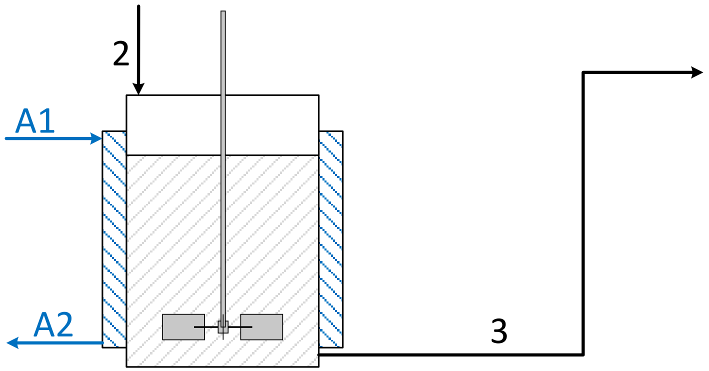
Camisa - Modelado

$$m_{A1} - m_{A2} = 0$$

$$f\left(T_{A2}, P_{A2}, H_{A2}\right) = 0$$

$$m_{A1}H_{A1} + Q_R - m_{A2}H_{A2} = 0$$

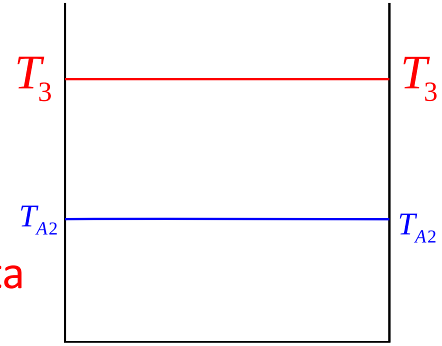
$$Q_R = \left(UA\right)_R \left(T_3 - T_{A2}\right)$$



m_{A2} T_{A2} H_{A2}

Variables: 3

Ecuaciones: 4



Camisa mezcla completa

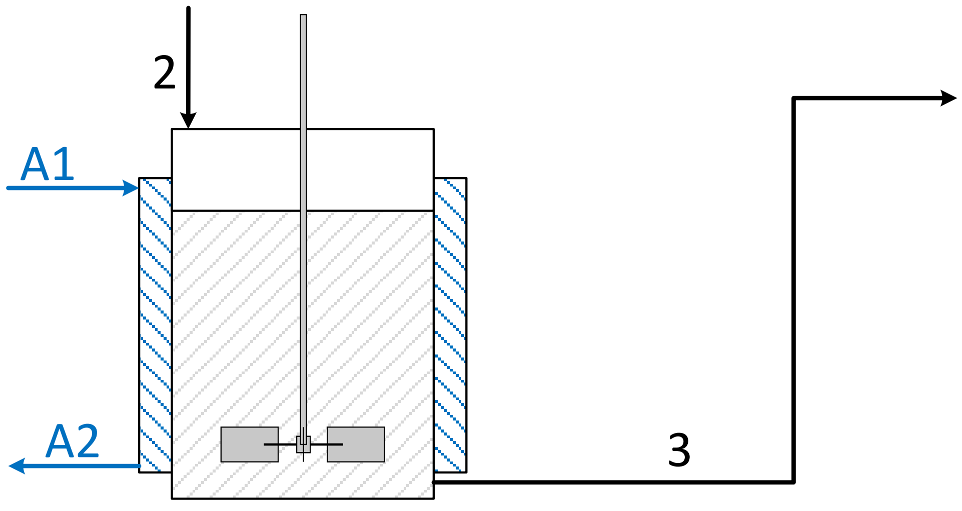
Reactor Mezcla completa enfriado con agua

$r_i \; m_3 \; x_{3,i}$

$H_3 \;\; T_3 \;\; k_{D1} \;\; k_{I1} \;\; k_{D1}$

$Q_R \;\; C_i \;\; \rho_3$

$m_{A2} \;\; T_{A2} \;\; H_{A2}$



Variables: 23

Ecuaciones: 22

Variables: 3

Ecuaciones: 4

Variables: 26

Ecuaciones: 26

GL: 0

Reactor Mezcla completa enfriado con agua – Resolución (I)

Propongo: T_3^*

Resuelvo el reactor CSTR isotérmico a la temperatura propuesta:

$$\begin{pmatrix} r_i \; m_3 \; x_{3,i} \\ H_3 \;\; k_{D1} \;\; k_{I1} \;\; k_{D1} \\ Q_R \;\; C_i \;\; \rho_3 \end{pmatrix}^*$$

Calculamos la temperatura de salida de la camisa:

$$m_{A2} = m_{A1} \qquad H_{A2} = \frac{m_{A1} H_{A1} + Q_R^*}{m_{A2}}$$

$$f\left(T_{A2}, P_{A2}, H_{A2}\right) = 0 \rightarrow T_{A2}$$

Chequemos la ecuación de transferencia de calor:

$$Q_R = (UA)_R \left(T_3^* - T_{A2}\right)$$

$$¿Q_R = Q_R^*? \begin{cases} si: \text{ Terminamos} \\ no: \text{Proponemos } T_3^* = \dfrac{Q_R^*}{(UA)_R} + T_{A2} \end{cases}$$

Reactor Mezcla completa enfriado con agua – Resolución (II)

Propongo: $T_3^{\ *}$

Resuelvo el reactor CSTR isotérmico a la temperatura propuesta:

$$\begin{pmatrix} r_i \; m_3 \; x_{3,i} & & & \\ H_3 & k_{D1} & k_{I1} & k_{D1} \\ Q_R & C_i & \rho_3 & \end{pmatrix}^*$$

Calculamos la temperatura de salida de la camisa:

$$m_{A2} = m_{A1} \qquad H_{A2} = \frac{m_{A1} H_{A1} + Q_R^{\ *}}{m_{A2}}$$

$$f\left(T_{A2}, P_{A2}, H_{A2}\right) = 0 \rightarrow T_{A2}$$

Obtenemos T_3 de la ecuación de diseño:

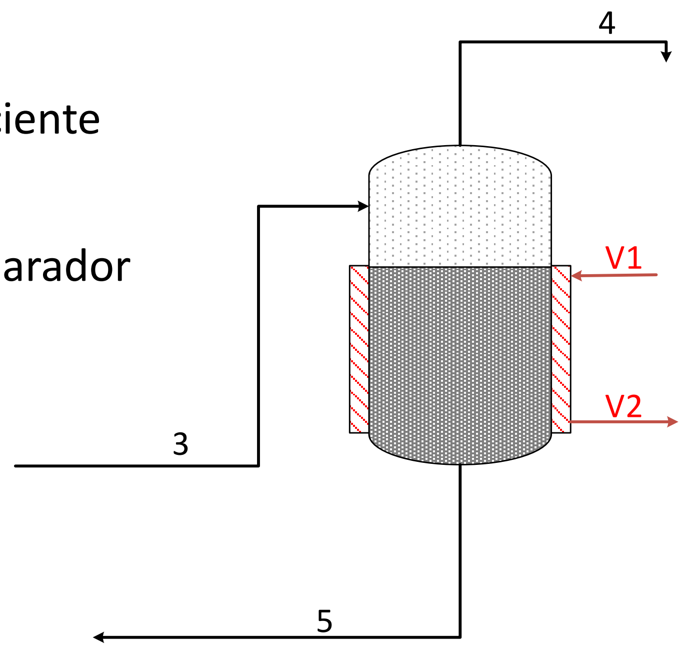
$$T_3 = \frac{Q_R^{\ *}}{(UA)_R} + T_{A2}$$

$$¿T_3 = T_3^{\ *}? \begin{cases} si: \text{ Terminamos} \\ no: \text{Proponemos } T_3^{\ *} = T_3 \end{cases}$$

Flash calefaccionado

<u>Hipótesis</u>:

- El vapor y líquido tienen el tiempo de contacto suficiente para lograr equilibrio.
- La presión de líquido y vapor son las del tambor separador ($\Delta P = 0$).
- Existe sólo una fase líquida y otra de vapor (L-V).
- No existen reacciones químicas.
- Equilibrio L-V ideal.
- Calefaccionado con vapor saturado de una mezcla binaria que se condensa parcialmente.
- (UA)F dato.
- No hay reacción química.
- La válvula forma parte del equipo.



Flash calefaccionado - Modelado

$$m_3 x_{3,i} - m_4 x_{4,i} - m_5 x_{5,i} = 0 \qquad \forall i$$

$$\sum_i x_{4,i} = 1 \qquad \sum_i x_{5,i} = 1$$

$$m_3 H_3 - m_4 H_4 - m_5 H_5 + Q = 0$$

$$x_{4,i} = K_i x_{5,i} \qquad \forall i$$

$$K_i = f\left(T, P\right) \quad \forall i$$

$$H_4 = f_V\left(T, P, x_{4,i}\right)$$

$$H_5 = f_L\left(T, P, x_{5,i}\right)$$

$$m_4 = \theta m_3$$

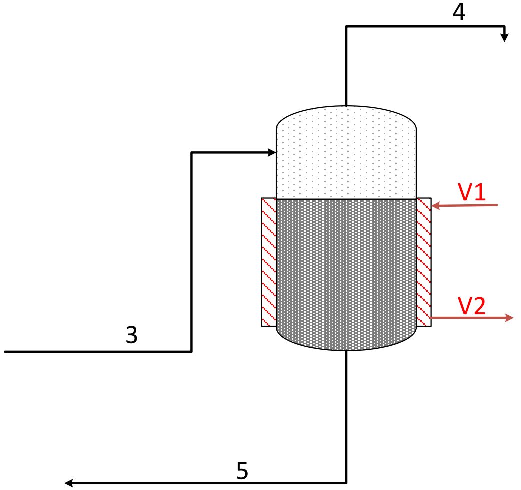
$m_4 \;\; x_{4,i} \;\; H_4$

$m_5 \;\; x_{5,i} \;\; H_5$

$K_i \;\; Q_{FL} \;\; T \;\; \theta$

22 variables

21 ecuaciones



Camisa de calefacción - Modelado

$$m_{V1}x_{V1,i} - m_{V2}x_{V2,i} = 0 \quad \forall i$$

$$\sum_i x_{V2,i} = 1$$

$$m_{V1}H_{V1} - Q_{FL} - m_{V2}H_{V2} = 0$$

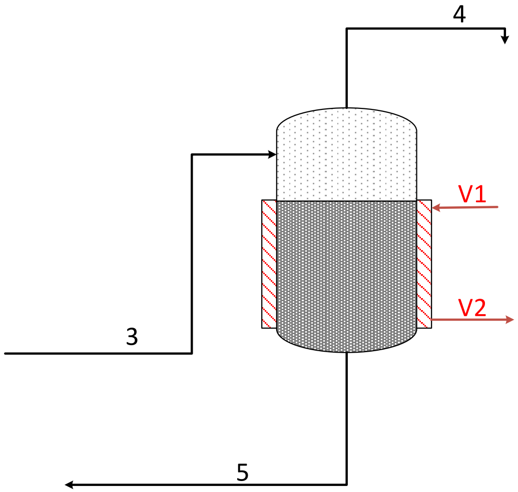
$$Q_{FL} = (UA)_{FL}\left(T_{V2} - T\right)$$

$$f\left(T_{V2}, P_{V2}, H_{V2}, x_{V2}\right) = 0$$

m_{V2} T_{V2} H_{V2} $x_{V2,i}$

5 variables

6 ecuaciones



Flash calefaccionado

$m_4 \ \ x_{4,i} \ \ H_4$

$m_5 \ \ x_{5,i} \ \ H_5$

$K_i \ \ Q_{FL} \ \ T \ \ \theta$

$m_{V2} \ \ T_{V2} \ \ H_{V2} \ \ x_{V2,i}$

22 variables

21 ecuaciones

5 variables

6 ecuaciones

27 variables

27 ecuaciones

0 GL!

Flash calefaccionado - Resolución

Propongo T* y resuelvo el flash isotérmico a P y T*

Del punto anterior acoplamos la camisa mediante el calor intercambiado Q^*_{FL}:

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

$$x_{V2,i} = x_{V1,i} \qquad \forall i$$

$$m_{V1} H_{V1} - Q^*_{FL} - m_{V2} H_{V2} = 0 \rightarrow H_{V2}$$

$$f\left(T_{V2}, P_{V2}, H_{V2}, x_{V2}\right) = 0 \;\; \rightarrow T_{V2} = FLASH\left(P_{V2}, H_{V2}, x_{V2}\right) \rightarrow \theta_{V2}$$

$$Q_{FL} = \left(UA\right)_{FL}\left(T_{V2} - T^*\right)$$

$$¿\, Q_{FL} = Q_{FL}{}^*\, ? \qquad \begin{cases} si: \text{ Terminamos} \\ no: \text{Proponemos } T^* = \dfrac{Q_{FL}{}^*}{\left(UA\right)_{FL}} + T_{V2} \end{cases}$$

Resolución secuencial (flash isotérmico eq. ideal)

$$K_i = f_{ideal}(T,P) \qquad \forall i$$ 1

$$\sum_i \frac{(K_i - 1) z_i}{\theta (K_i - 1) + 1} = 0 \qquad \rightarrow \theta$$ (método iterativo) 2

$$x_i = \frac{z_i}{\theta (K_i - 1) + 1} \qquad \forall i \qquad y_i = K_i x_i \qquad \forall i$$ 3

$$H_V = f(T,P,y) \qquad H_L = f(T,P,x)$$ 4

$$L = F(1-\theta) \qquad V = F\theta$$ 5

$$Q = -H_F + \theta H_V + (1-\theta) H_L$$ 6

¡Balance de energía desacoplado!

Flash calefaccionado – Resolución (II)

Propongo T* y resuelvo el flash isotérmico a P y T* (VER APUNTE)

Del punto anterior acoplamos la camisa mediante el calor intercambiado Q^*_{FL}:

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

$$x_{V2,i} = x_{V1,i} \qquad \forall i$$

$$m_{V1} H_{V1} - Q^*_{FL} - m_{V2} H_{V2} = 0 \rightarrow H_{V2}$$

$$f\left(T_{V2}, P_{V2}, H_{V2}, x_{V2}\right) = 0 \quad \rightarrow T_{V2} = FLASH\left(P_{V2}, H_{V2}, x_{V2}\right)$$

$$T = \frac{{Q_{FL}}^*}{(UA)_{FL}} + T_{V2}$$

$$¿T = T^*? \quad \begin{cases} si: \text{ Terminamos} \\ no: \text{Proponemos } T^* = T \end{cases}$$

Flash calefaccionado – Resolución (III)

Propongo T* y resuelvo el flash isotérmico a P y T* (VER APUNTE)

Del punto anterior acoplamos la camisa mediante el calor intercambiado $Q*_{FL}$:

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

$$x_{V2,i} = x_{V1,i} \qquad \forall i$$

$$m_{V1} H_{V1} - Q_{FL}^{*} - m_{V2} H_{V2} = 0 \rightarrow H_{V2}$$

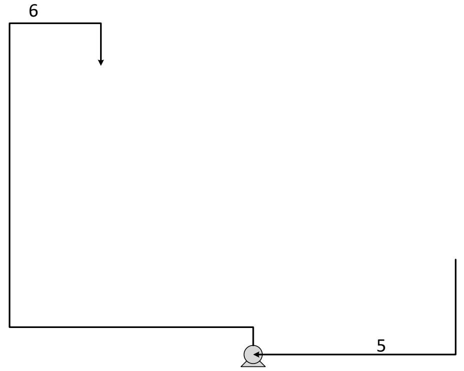
$$f\left(T_{V2}, P_{V2}, H_{V2}, x_{V2}\right) = 0 \rightarrow H_{V2} = FLASH\left(P_{V2}, \theta, x_{V2}\right) \xrightarrow{\text{iterando con } \theta} \theta \rightarrow T_{V2}$$

$$T = \frac{Q_{FL}{}^{*}}{(UA)_{FL}} + T_{V2} \qquad ¿T = T^{*}? \qquad \begin{cases} si: \text{ Terminamos} \\ no: \text{Proponemos } T^{*} = T \end{cases}$$

Bomba - Modelado

Hipótesis

- Eleva la presión para la recirculación.
- No hay modificación en otras propiedades ni cambio de estado.



$$m_5 x_{5,i} - m_6 x_{6,i} = 0 \qquad \forall i$$

$$\sum_i x_{6,i} = 1$$

$$W = \frac{m_5 \Delta P_{rec}}{\eta\, \rho_5}$$

$$H_6 = f\left(T_6, P_6, x_6\right)$$

$$m_6 \quad x_{6,i} \; H_6 \; W$$

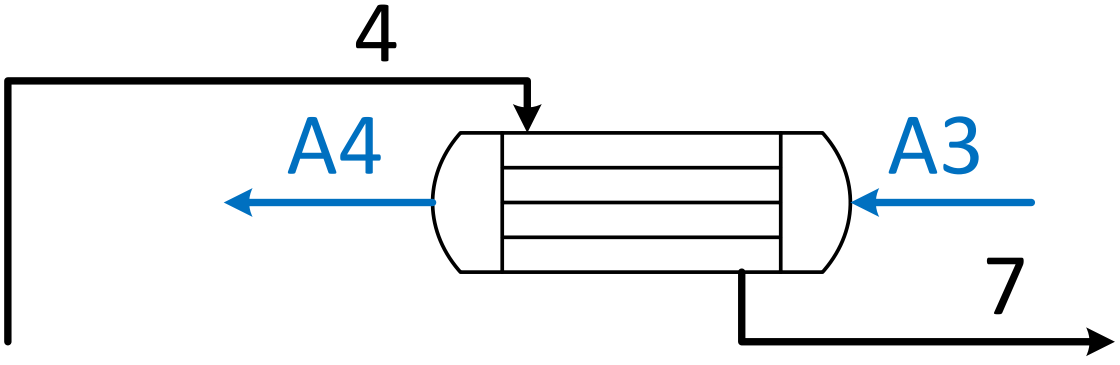
8 variables

–

8 ecuaciones

0 Grados de libertad

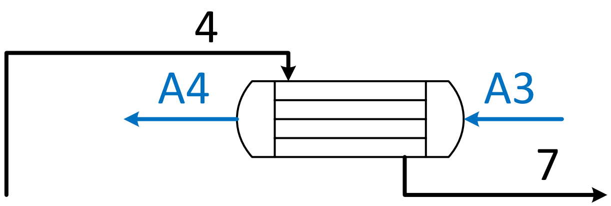
Condensador - Modelado



Hipótesis

- Sin reacción química.
- Enfriado con agua pura (no cambia de fase)
- El vapor se condensa y sub-enfría 2 grados.

Condensador - Modelado



$$m_4 x_{4,i} - m_7 x_{7,i} = 0 \qquad \forall i$$

$$m_{A3} - m_{A4} = 0$$

$$Q = m_4 \, H_4 - m_7 \, H_7$$

$$Q = m_{A4} \, H_{A4} - m_{A3} \, H_{A3}$$

$$\sum_{i=1}^{NC} x_{7,i} = 1$$

$$f\left(T_{A4}, P_{A4}, H_{A4}\right) = 0$$

$$f\left(T_7, P_7, x_7, H_7\right) = 0$$

Variables: 11

Ecuaciones: 11

$$m_{A4} \;\; T_{A4} \;\; H_{A4}$$

$$m_7 \;\; H_7 \;\; x_{7,i}$$

$$Q$$

Resolución

Resolvemos los balances de materia

$$m_{A4} = m_{A3}$$

$$m_7 = m_4$$

$$x_{7,i} = x_{4,i} \qquad \forall i$$

Calculamos la temperatura de burbuja de la corriente 7: $T_7^{bubble} = FLASH\left(P_7, \theta = 0, x_7\right)$

Calculamos la temperatura de la corriente 7: $T_7 = T_7^{bubble} - 2$

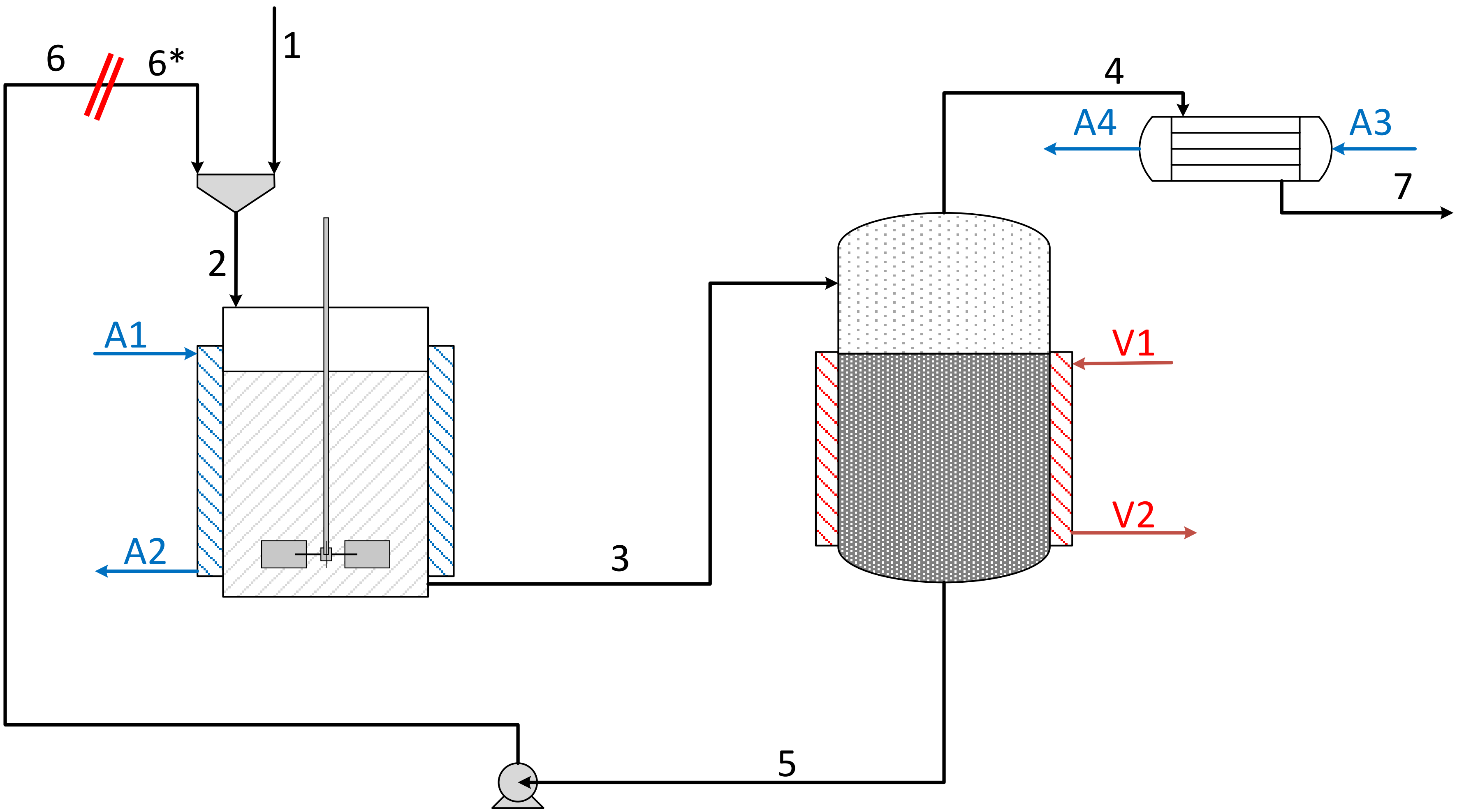
Resolvemos el balance de energía:

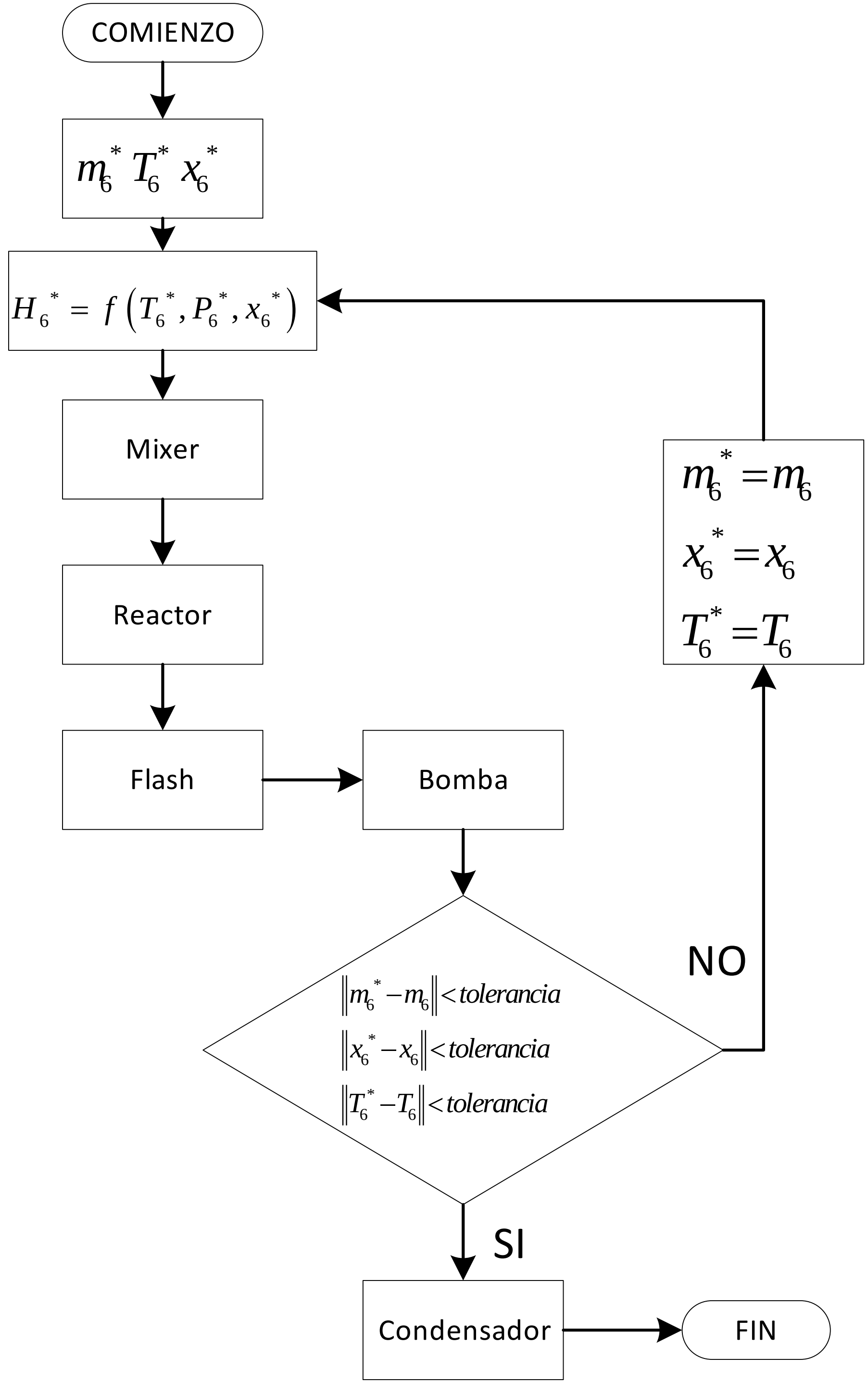
$$f\left(T_7, P_7, x_7, H_7\right) = 0 \rightarrow H_7$$

$$Q = m_4 H_4 - m_7 H_7$$

$$H_{A4} = \frac{Q + m_{A3} H_{A3}}{m_{A4}} \qquad f\left(T_{A4}, P_{A4}, H_{A4}\right) = 0 \rightarrow T_{A4}$$

Resolución del Flow sheet




COMIENZO
$m_6^* \; T_6^* \; x_6^*$
$H_6^* = f\left(T_6^*, P_6^*, x_6^*\right)$
Mixer
Reactor
Flash
Bomba
$\left\| m_6^* - m_6 \right\| < tolerancia$
$\left\| x_6^* - x_6 \right\| < tolerancia$
$\left\| T_6^* - T_6 \right\| < tolerancia$
NO
$m_6^* = m_6$
$x_6^* = x_6$
$T_6^* = T_6$
SI
Condensador
FIN