

UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA NACIONAL - FACULTAD REGIONAL
ROSARIO

Departamento de Ingeniería Química - Cátedra Integración IV

Modelado de equipos especiales: Reactor según modelo de Van de Vusse

Sea el proceso cuyo diagrama de flujo se representa en la figura 3. Luego de nombrar las variables restantes, plantear un modelo en estado estacionario que lo represente y proponer una estrategia para su resolución determinando el conjunto mínimo de corrientes de corte y su orden de resolución. Estrategia modular secuencial.

Hipótesis:

A) Reactor: R

Se trata de simular un reactor de comportamiento real (R en el flowsheet y con más detalle en la figura 2) con sus zonas estancas y cortocircuitos utilizando modelos de reactores mezcla completa ideal (modelo de Van de Vusse). Para eso se sustituye el reactor real por 5 ideales de acuerdo a la configuración de la figura 2 con las siguientes hipótesis.

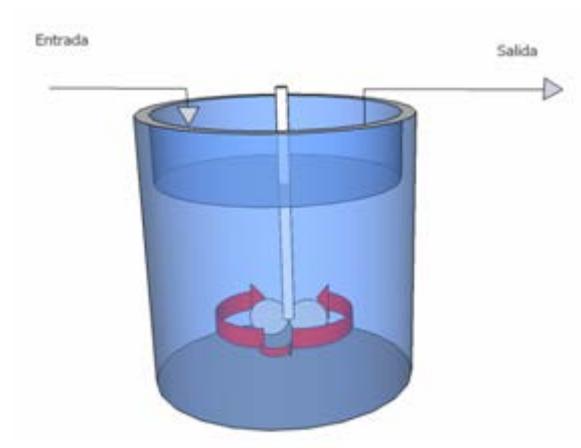


Figura 1

- Cada reactor cilíndrico de volumen V_i con $i=1$ a 5.
- Con reacción química en fase líquida cuya cinética es:



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

- Reacción exotérmica: $(\Delta HR < 0)$
- Presión en cuerpo de vapor conocida y constante.

- Adiabáticos.
- Los sumadores son adiabáticos y las pérdidas de carga son nulas, al igual que los divisores sus relaciones de flujos se asumen conocidas. Sin reacción química ni cambios de estado.

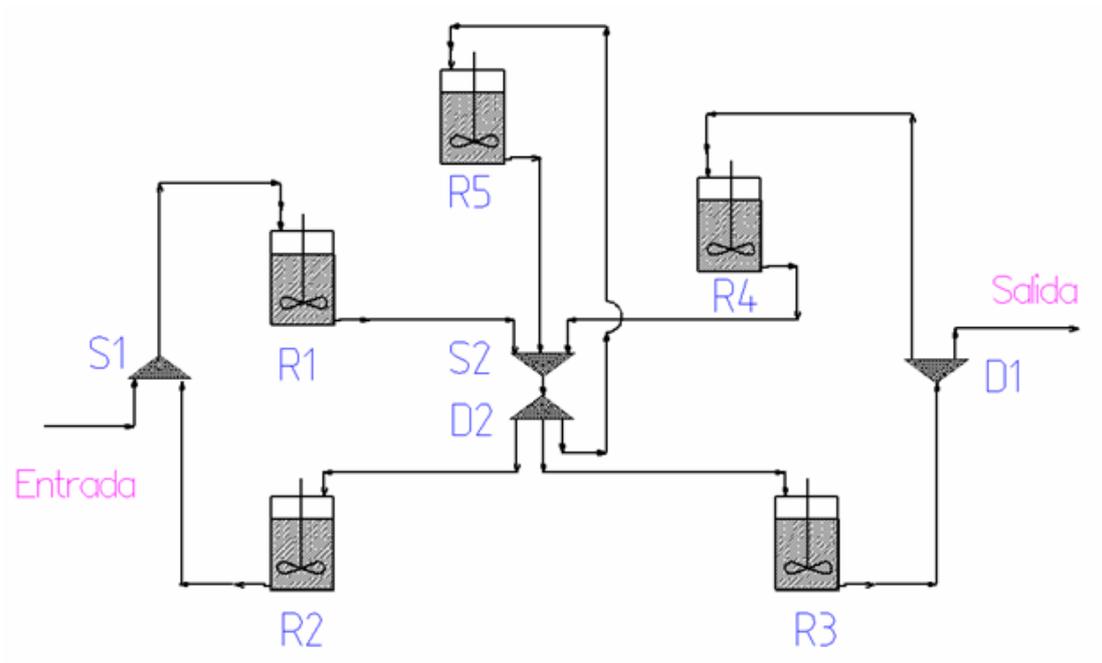


Figura 2

De esta manera se reemplaza el reactor R de la figura 3 por el DFI de la figura 2

B) Evaporador: F1

- Sin reacción química. Equilibrio LV ideal.
- Presión de operación conocida
- Calefaccionado con vapor de agua saturado que entrega sólo su calor latente. (UA) justo y necesario.
- La válvula de entrada forma parte del mismo equipo

C) Corrientes

- F_A : Corriente líquida de A pura de temperatura, caudal y presión conocidos.
- F_B : Corriente líquida de B puro de temperatura, caudal y presión conocidos.
- La corriente de vapor de agua saturada de presión conocida.

D) Sumador: S

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

E) Bomba Centrífuga: BC

- Solo eleva la presión de la recirculación.
- No hay cambio en otras propiedades incluyendo cambio de estado.

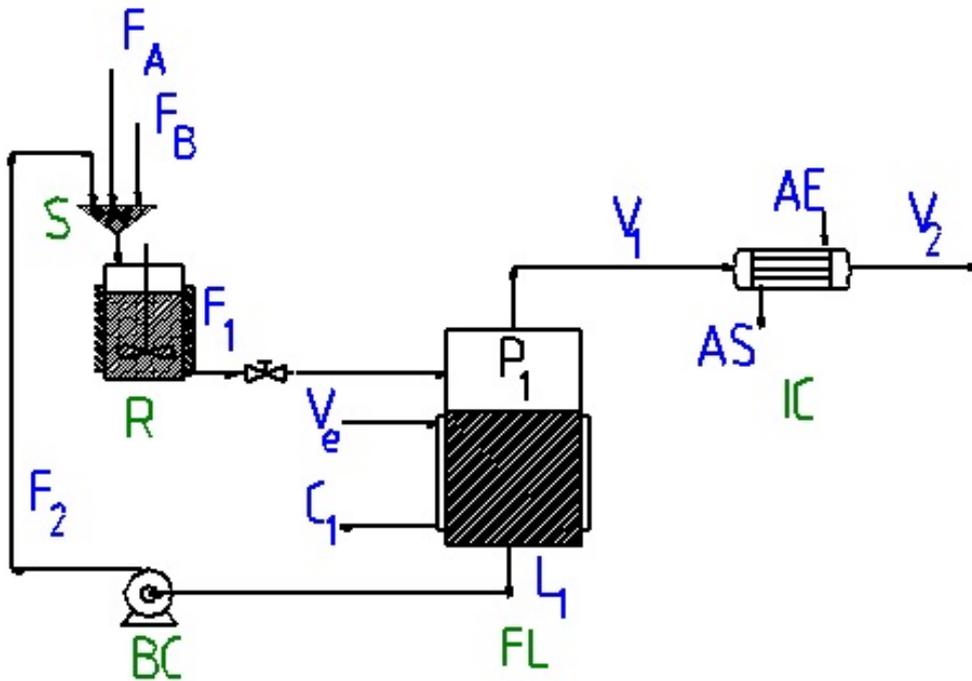
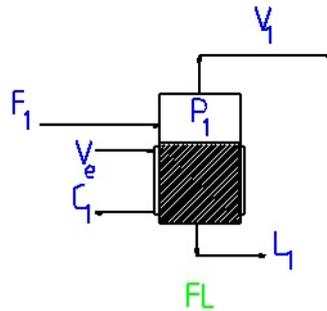


Figura 3

Modelos Matemáticos

Evaporador:



Balance de Materia:

$$F_1 = L_1 + V_1$$

Balance de Materia por Componente:

$$F_1 * z_i = L_1 * x_i + V_1 * y_i$$

$$i = 1 \text{ a } 3 \text{ (A, B y C)}$$

Balance de Energía:

$$F_1 * H_{F1} + Q = L_1 * H_{L1} + V_1 * H_{V1}$$

Camisa:

Balance de Materia: $V_e = C_1$

Balance de Energía:

$$V_e * H_{Ve} = C_1 * H_{C1} + Q$$

$$Q = UA_{FL} * (T_{Ve} - T_{FL})$$

Propiedades termodinámicas:

Entalpía de F_1 :

$$H_{F1} = \sum_{i=1}^{NC} z_i * HF_i(T_{F1})$$

Entalpía de L_1 :

$$H_{L1} = \sum_{i=1}^{NC} x_i * HL_i(T_{FL})$$

Entalpía de V_1 :

$$H_{V1} = \sum_{i=1}^{NC} y_i * HV_i(T_{FL}, P_{FL})$$

Constantes de equilibrio:

$$k_i = \frac{Pv_i(T_{FL})}{P_{FL}}$$

Fracción vaporizada:

$$\theta = \frac{V_1}{F_1}$$

Ecuaciones de restricción:

$$\sum_{i=1}^3 z_i = 1$$

$$\sum_{i=1}^3 x_i = 1$$

$$\sum_{i=1}^3 y_i = 1$$

Resolución:

Empleando el balance global, la definición de fracción vaporizada y la de constante de equilibrio se reemplaza en los balances por componentes:

$$V_1 = \theta * F_1$$

$$F_1 = L_1 + V_1 \rightarrow L_1 = F_1 - V_1 = F_1 - \theta * F_1 = F_1 * (1 - \theta)$$

$$F_1 * z_i = F_1 * (1 - \theta) * x_i + F_1 * \theta * k_i * x_i$$

Se divide todo por F_1 :

$$z_i = (1 - \theta) * x_i + \theta * k_i * x_i = x_i * [(\theta * k_i + 1) - \theta]$$

Despejando x_i y tomando θ como factor común:

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

Como $y_i = k_i * x_i$:

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

Y 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:

$$\sum \frac{(k_i - 1) * z_i}{\theta * (k_i - 1) + 1} = 0$$

- 1 - El método comienza con una temperatura de flash estimada T_{FL}^* . Se calculan los valores de k_i con la temperatura de flash estimada y por medio de un método iterativo de obtención de raíces (N-R) determino la fracción vaporizada (θ).
- 2 - Una vez hallada la fracción vaporizada se calculan los flujos de salida (líquido y vapor), y sus composiciones. (V_1, L_1, X_i, Y_i).
- 3 - Luego es posible hallar sus entalpías (H_{V1}, H_{L1})
- 4 - Planteando el balance de energía de la forma:

$$F_2 * H_{F2} - L_1 * H_{L1} - V_1 * H_{V1} = 0$$

Para evitar grandes incrementos que podrían hacer divergir al método se procede a un normalizado de la expresión dividiendo por una magnitud del mismo orden. Para ello se aplica la entalpía de entrada que es dato.

En lugar de encontrar la temperatura que anula la ecuación se la modifica como sigue para aplicar el método de sustitución directa.

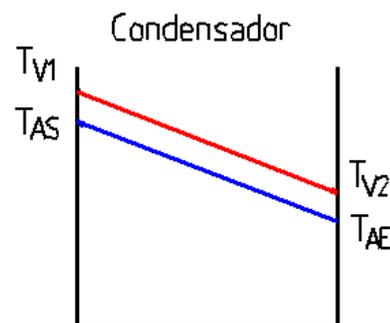
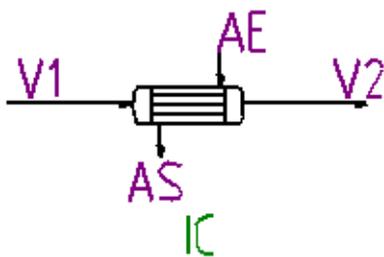
La ecuación queda entonces:

$$\frac{T_{FL}^N}{T_{F1}} = \frac{(F_1 * H_{F1} - L_1 * H_{L1} - V_1 * H_{V1})}{H_{F1} * F_1} + \frac{T_{FL}^*}{T_{F1}}$$

$$T_{FL}^N = \left[\frac{(F_1 * H_{F1} - L_1 * H_{L1} - V_1 * H_{V1})}{H_{F1} * F_1} + \frac{T_{FL}^*}{T_{F1}} \right] * T_{F1}$$

- 5 - Habiendo calculado una nueva temperatura (T_{FL}^N) se la compara con la estimada (T_{FL}^*). Si el error absoluto es mayor que cierto criterio adoptado se toma el nuevo valor para repetir el método. Una vez lograda la convergencia se termina.
- 6 - Una vez calculada la temperatura, fracción vaporizada, composición etc., se definen por completo las corrientes de líquido y vapor.

Condensador Total:



Balance de Materia:

$$V_1 = V_2$$

$$AE = AS$$

Balance de Materia por Componente (no se incluye el agua):

$$V_1 * y_i = V_2 * x_i$$

$$i = 1 \text{ a } 3 \text{ (A, B y C)}$$

Balance de Energía:

$$Q_C = V_1 * [H_{V2}(T_{V2}) - H_{V1}(T_{V1})]$$

$$Q_C = AE * C_{p_a} * (T_{AS} - T_{AE})$$

$$Q_C = UA_C * \frac{(T_{V1} - T_{AS}) - (T_{V2} - T_{AE})}{\ln \left(\frac{T_{V1} - T_{AS}}{T_{V2} - T_{AE}} \right)}$$

Propiedades termodinámicas:

Entalpía Vapor:

$$H_{V1} = \sum_{i=1}^3 HV(T_{V1}) * y_i$$

Entalpía Líquido:

$$H_{V2} = \sum_{i=1}^3 HL(T_{V2}) * x_i$$

Punto de burbuja del líquido:

$$\sum_{i=1}^3 x_i * k_i(T_{V2}, P_{V2}) = 1$$

Resolución:

1 - Habiendo asumido la condensación total, la composición del condensado será igual a la del vapor que ingresa. Esto simplifica los cálculos.

Se comienza calculando la temperatura de salida del condensado, lo cual se hace a través del punto de burbuja del líquido.

2 - De esta manera es posible calcular el calor latente como la diferencia de entalpías entre fases.

$$Q_C = V_1 * [H_{V2}(T_{V1}) - H_{V1}(T_{V2})]$$

3 - La temperatura de salida del agua se la calcula a través del balance de calor del agua de enfriamiento:

$$T_{AS2} = \frac{Q + m_a * C_{p_a} T_{AE}}{C_{p_a} T_{AE}}$$

4 - Ahora es posible calcular el UA como:

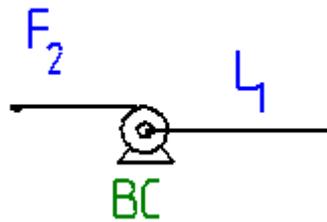
$$(UA) = \frac{Q}{DTLM}$$

Donde

$$DTLM = \frac{(T_{V1} - T_{AS}) - (T_{V2} - T_{AE})}{Ln \frac{(T_{V1} - T_{AS})}{(T_{V2} - T_{AE})}}$$

Observar que excepto los cálculos de los puntos de rocío y burbuja, el resto del mismo es directo no requiriéndose de ninguna iteración.

Bomba



Balace de Materia:

$$F_2 = L_1$$

Balace de Energía:

$$T_{L1} = T_{F2}$$

El incremento de presión se determina por:

$$\Delta P = P_{L1} + P_{F2}$$

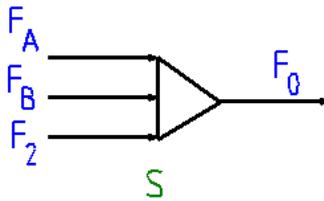
$$P_{R^o} = P_{F2}$$

Resolución:

Planteando los balances de materia y energía se observa que los valores de composición y temperatura a la salida de la bomba son los mismos que en la entrada de la bomba.

Como se conocen los valores de entrada a la bomba y la presión de operación del reactor P_{R^o} se puede calcular el aumento de presión realizado por la bomba centrífuga.

Sumador



Balance de Materia:

$$F_0 = F_A + F_B + F_2$$

Balance de Materia por componente:

$$z_i = \frac{F_A * x_i + F_B * x_i + F_2 * x_i}{F_0}$$

$$i = A, B, C$$

Balance de Energía:

$$H_{F_0} = \frac{F_A * H_A + F_B * H_B + F_2 * H_{F_2}}{F_0}$$

Entalpía de F₀:

$$H_{F_0} = \sum_{i=1}^{NC} z_i * H_i(T_{F_0})$$

Resolución:

Dado que las corrientes F_A y F_B son dato y la corriente F_2 resulta del cálculo de la bomba son conocidos su caudal, composición, temperatura, presión y propiedades derivadas como su entalpía molar son conocidas.

- 1- Del balance de materia global y por componente se obtiene F_0 y su composición.
- 2- Del balance de energía se calcula H_{F_0} y T_{F_0} .

Reactor Real

Siguiendo el modelo de Van de Vusse se sustituye el reactor real por 5 reactores ideales como muestra la siguiente figura

$$\begin{aligned}
 E_j * z_A &= S_j * x_A + (-r_A) * V_j \\
 E_j * z_B &= S_j * x_B - (-r_A) * V_j \\
 E_j * z_C &= S_j * x_C - (-r_A) * V_j
 \end{aligned}$$

Donde:

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

$$k_i = A_i * e^{\left(\frac{-E}{RT_{Sj}}\right)} ; i = D, I$$

Balance de Energía molar:

$$E_j * H_{Ej} = S_j * H_{Sj} - (-r_A) * (-\Delta H_R) * V_j$$

Restricciones:

$$x_A + x_B + x_C = 1$$

$$x_i = C_i / \sum C_i \quad ; i = A, B, C$$

Propiedades fisicoquímicas:

Entalpía de E_j:

$$H_{Ej} = \sum_{i=1}^{NC} z_i * H_i(T_{Ej})$$

Entalpía de S_j:

$$H_{Sj} = \sum_{i=1}^{NC} x_i * H_i(T_{Sj})$$

Resolución:

1- Se conocen las características de la corriente E_j, por lo tanto, es conocido su flujo E_j, temperatura T_{Ej}, presión P_{Ej} y composición Z_i y sus propiedades derivadas como entalpías molares. El método de resolución comienza con una temperatura del reactor estimada (T_{Ej}*). De esta manera se calculan las constantes cinéticas k_D y k_I:

2 - Se resuelve el siguiente sistema de ecuaciones, esto es, hallar los valores de X_A, X_B, X_C; C_A, C_B, C_C y E_j que satisfacen las 7 ecuaciones:

$$\begin{aligned}
 E_j * z_A - S_j * x_A - (k_D * C_A * C_B - k_I * C_C) &= 0 \\
 E_j * z_B - S_j * x_B + (k_D * C_A * C_B - k_I * C_C) &= 0 \\
 E_j * z_C - S_j * x_C + (k_D * C_A * C_B - k_I * C_C) &= 0 \\
 1 - x_A - x_B - x_C &= 0 \\
 x_A &= C_A / (C_A + C_B + C_C) \\
 x_B &= C_B / (C_A + C_B + C_C) \\
 x_C &= C_C / (C_A + C_B + C_C)
 \end{aligned}$$

3 – Una vez obtenidas las 7 variables es posible hallar sus entalpías.

4 - Planteando el balance de energía de la forma:

$$E_j * H_{Ej} - S_j * H_{Sj} + (-r_A) * (-\Delta H_R) * V_j = 0$$

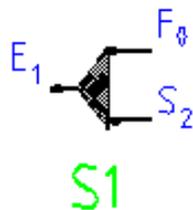
En lugar de encontrar la temperatura que anula la ecuación se la modifica como sigue para aplicar el método de sustitución directa.

La ecuación queda entonces:

$$\begin{aligned}
 \frac{T_{Sj}^N}{T_{Ej}} &= \frac{(E_j * H_{Ej} - S_{Ej} * H_{Sj} + (-r_A) * (-\Delta H_R) * V_j)}{E_j * H_{Ej}} + \frac{T_{Sj}^*}{T_{Ej}} \\
 T_{Sj}^N &= \left[\frac{(E_j * H_{Ej} - S_{Ej} * H_{Sj} + (-r_A) * (-\Delta H_R) * V_j)}{E_j * H_{Ej}} + \frac{T_{Sj}^*}{T_{Ej}} \right] * T_{Ej}
 \end{aligned}$$

5 - Habiendo calculado una nueva temperatura (T_{Sj}^N) se la compara con la estimada (T_{Sj}^*). Si el error absoluto es mayor que cierto criterio adoptado se toma el nuevo valor para repetir el método. Una vez lograda la convergencia se termina.

Sumador S1



Balance de Materia:

$$E_1 = F_0 + S_2$$

Balance de Materia por componente:

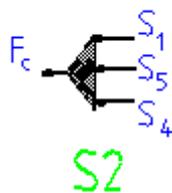
$$z_i = \frac{F_0 * x_i + S_2 * x_i}{E_1}$$

$$i = A, B, C$$

Balance de Energía:

$$H_{E1} = \frac{F_0 * H_{F0} + S_2 * H_{S2}}{E_1}$$

Sumador S2



Balance de Materia:

$$F_c = S_1 + S_5 + S_4$$

Balance de Materia por componente:

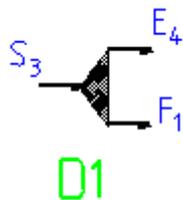
$$z_i = \frac{S_1 * x_i + S_5 * x_i + S_4 * x_i}{F_c}$$

$$i = A, B, C$$

Balance de Energía:

$$H_{F_c} = \frac{S_1 * H_{S1} + S_5 * H_{S5} + S_4 * H_{S4}}{F_c}$$

Divisor D1



Relación de flujo:

$$r_{D1} = \frac{E_4}{S_3} \rightarrow E_4 = r_{D1} * S_3$$

Balance de Materia:

$$F_1 = S_3 - E_4$$

Balance de Materia por componente:

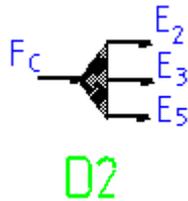
$$S_3 * z_i = E_4 * x_i + F_1 * x_i$$

$$i = A, B, C$$

Balance de Energía:

$$S_3 * H_{S3} = E_4 * H_{E4} + F_1 * H_{F1}$$

Divisor D2



Relaciones de flujo:

$$r_{E2} = \frac{E_2}{F_C} \rightarrow E_2 = r_{E2} * F_C$$

$$r_{E3} = \frac{E_3}{F_C} \rightarrow E_3 = r_{E3} * F_C$$

Balance de Materia:

$$E_5 = F_C - E_2 + E_3$$

Balance de Materia por componente:

$$F_C * z_i = E_2 * x_i + E_3 * x_i + E_5 * x_i$$

$$i = A, B, C$$

Balance de Energía:

$$F_C * H_{F_C} = E_2 * H_{E2} + E_3 * H_{E3} + E_5 * H_{E5}$$

Resolución:

1- Para resolver el sistema planteado que sustituye al reactor ideal (figura 2), tomamos como corriente de corte F_c y se asume conocido su flujo F_c^* , su temperatura T_c^* , presión P_c^* , composición z_i^* y sus propiedades derivadas como entalpía molares H_c^* .

2- Conocida la corriente de corte F_c resuelvo el divisor D2, ya que son conocidas las relaciones de flujo. De este modo se obtienen las corrientes E_2 , E_3 y E_5 .

3- Siguiendo el camino de la corriente E_2 resuelvo el reactor R2 utilizando el modelo de reactor ideal y determino la corriente S_2 . Luego con las corrientes S_2 y F_0 (entrada al sistema) resuelvo el sumador S1 y obtengo E_1 . Resolviendo el reactor ideal R1 encuentro el valor de la corriente S_1 .

4- Después sigo el camino de la corriente E_3 , resuelvo el reactor ideal R3 hallándose S_3 la cual se divide en el divisor D1 con relaciones de flujo conocidas, dando como resultado las corrientes E_4 y F_1 (salida del sistema). Resuelvo el reactor ideal R4 obteniéndose la corriente S_4 .

5- Por ultimo siguiendo el camino de la corriente E_5 , calculo S_5 resolviendo el reactor ideal R5.

6- Determinadas las corrientes S_1 , S_5 y S_4 puedo resolver el sumador S2 y comparo los valores obtenidos con los supuestos para la corriente de corte F_c . Si se comprueba que $|F_c^* - F_c| \leq \varepsilon$; $|z_i^* - z_i| \leq \varepsilon$; $|T_c^* - T_c| \leq \varepsilon$; $|H_c^* - H_c| \leq \varepsilon$ donde ε es el error de tolerancia aceptable. Si ésto no se cumple se debe seguir iterando hasta que se satisfaga, utilizando como nuevos valores los resultantes del calculo de S2.

Resolución global de la planta:

