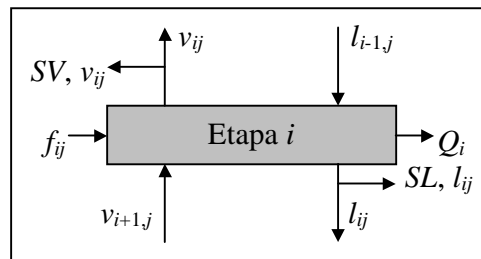


Problema 1:

Para el método riguroso de Naphthali y Sandholm para simular columnas de destilación, plantear un relajamiento para la hipótesis que asume la ausencia de reacciones químicas. ¿Qué debe modificarse en este caso y qué nuevos datos necesita para plantear el modelo? Escriba el sistema de ecuaciones resultantes.

Respuesta:



El modelo de Naphthali y Sandholm considera el caso de una columna de N platos que separa NC componentes, en donde 1 es el plato de tope y N el de fondo. También asume la existencia de extracciones de corrientes laterales de líquido (SL) y vapor (SV). L_i y V_i representan los flujos molares totales de líquido y vapor del plato i . La temperatura T_i y los caudales de vapor y líquido (v_{ij} y l_{ij}) para cada etapa para cada componente son las variables independientes.

Las modificaciones que se deben realizar para relajar la hipótesis que indica la ausencia de reacciones químicas son:

- Balance de energía para cada etapa ($i = 1, 2, \dots, N$)

$$EN_i = -(1 + SV_i) HV_i \sum_{j=1}^{NC} v_{ij} - (1 + SL_i) HL_i \sum_{j=1}^{NC} l_{ij} + HV_{i+1} \sum_{j=1}^{NC} v_{i+1,j} + HL_{i-1} \sum_{j=1}^{NC} l_{i-1,j} + HF_i \sum_{j=1}^{NC} f_{ij} + Q_i + \Delta Hr_i = 0$$

- Balance de materia por componente ($j = 1, 2, \dots, NC$) para cada etapa (i)

$$M_{ij} = -(1 + SV_i)v_{ij} - (1 + SL_i)l_{ij} + v_{i+1,j} + l_{i-1,j} + f_{ij} + RE_{ij} * Vol = 0$$

- Relaciones de equilibrio para cada componente (j) en cada etapa (i)

$$E_{ij} = \frac{\eta_{ij} K_{ij} V_i l_{ij}}{L_i} - v_{ij} + \frac{(1 - \eta_{ij}) v_{i+1,j} V_i}{V_{i+1}} = 0$$

Donde:

a- $RE_{ij} = \sum_{k=1}^m r_{ik} v_k$ (m es el número de reacciones) son los moles reaccionados o producidos por

unidad de tiempo y de volumen de reacción, por cada componente en cada etapa; v_k los coeficientes estequiométricos. La expresión r_{ik} (velocidad para cada reacción) resulta:

$$r_{ik} = K_{D_{ik}} \prod_{j=1}^{NC} (x_{ij} \rho_i)^{\alpha_{jk}} - K_{I_{ik}} \prod_{j=1}^{NC} (x_{ij} \rho_i)^{\beta_{jk}} \quad (\text{con } k = 1, 2, \dots, m). \text{ Siendo } \alpha_{jk} \text{ y } \beta_{jk} \text{ los}$$

exponentes de reacción que podrán o no coincidir con los coeficientes estequiométricos. K_D es la constante directa de la reacción y K_I la constante de reacción inversa. La funcionalidad de las constantes de reacción con la temperatura pueden ser expresadas según:

$$K_{D_{kj}} = K_{0D_k} \exp\left(\frac{-E_{D_k}}{RT}\right)$$

$$K_{I_{kj}} = K_{0I_k} \exp\left(\frac{-E_{I_k}}{RT}\right)$$

K_{0D} y K_{0I} son los factores pre-exponenciales de ambas constantes respectivamente, en cada reacción k , y E_{Dk} y E_{Ik} son las energías de activación de la reacción directa e inversa, k , respectivamente.

b- ΔHr_i es la variación de la entalpía de reacción para cada etapa:

$$\Delta Hr_i = \sum_{j=1}^{Nc} \Delta H_{Pj} v_j - \sum_{j=1}^{Nc} \Delta H_{Rj} v_j$$

ΔH_{Pj} es la entalpía de formación de los productos, ΔH_{Rj} la entalpía de formación de los reactivos y v_j los coeficientes estequiométricos de las reacciones químicas.

Los nuevos datos que se necesitan para plantear el modelo de Napthali y Sandholm con la relajación de la hipótesis de ausencia de reacciones químicas son: K_{0Dk} , K_{0Ik} , E_{Dk} , E_{Ik} , α_{jk} , β_{jk} , v_k , ρ_i , suponiendo que el programa consta de subrutinas para calcular la entalpías de formación.

Las modificaciones que sufre el método son: en el balance de materia por el término, $RE_{ij} Vol_i$, y en el balance de energía por ΔHr_i .

Problema 2:

¿Cómo se puede tener en cuenta el calor intercambiado a través de las paredes de la columna, considerando el cálculo de los respectivos coeficientes peliculares? ¿Complica esto el método de solución del sistema de ecuaciones?

Respuesta:

Balance de energía:

$$EN_i = -(1 + SV_i) HV_i \sum_{j=1}^{NC} v_{ij} - (1 + SL_i) HL_i \sum_{j=1}^{NC} l_{ij} + HV_{i+1} \sum_{j=1}^{NC} v_{i+1,j} + HL_{i-1,j} \sum_{j=1}^{NC} l_{i-1,j} +$$

$$+ HF_i \sum_{j=1}^{NC} f_{ij} + Q_i + Q_{Pi} = 0$$

Donde:

- $i = 1, 2, \dots, N$ etapas de separación.
- Q_i es el calor entregado o extraído.
- $Q_{Pi} = U A (T_i - T_a)$ es el calor intercambiado a través de las paredes, con $T_a =$ temperatura externa.
- $\frac{1}{UA} = \frac{1}{h_{i0}} + \frac{1}{h_0}$; $h_{i0} = h_i \left(\frac{A_i}{A_0} \right)$; h_i es el coeficiente pelicular interno, h_0 el coeficiente pelicular externo, A_i el área de transferencia interna y A_0 el área de transferencia externa.

El método de solución del sistema de ecuaciones no se modifica sustancialmente, pero la convergencia del sistema se hace más dificultosa porque el coeficiente pelicular interno $h_i = h_i(x_{ij}, y_{ij}, T_i)$.

Problema 3:

¿Cómo se puede contemplar en el modelo un extractor líquido-líquido? ¿Es necesario modificar sustancialmente el modelo ya discutido? ¿Y para un sistema que contiene dos fases líquidas y una vapor?

Respuesta:

Para contemplar el modelo de un extractor líquido-líquido, se puede utilizar el modelo desarrollado por Naphthali y Sandholm. En efecto, basta con asignar los símbolos v_{ij} , HV_i y SV_i a la segunda corriente líquida, por ejemplo, la menos densa que sale del extractor líquido-líquido. Obviamente, ahora la constante de equilibrio K_i será la de reparto de cada especie i entre las dos fase líquidas y deberá ser calculada en forma adecuada, utilizando correlaciones fisicoquímicas apropiadas.

Si existe, por las condiciones de la alimentación y las de operación del equipo, la posibilidad de que se presente la existencia de una fase vapor en equilibrio con dos fases líquidas (esto es equilibrio L-L-V), debe incorporarse al modelo planteado (para el caso L-V) las ecuaciones correspondientes al equilibrio líquido-líquido y el balance de materia para cada fase. Por lo tanto, en las condiciones planteadas, el modelo no es válido.

Problema 4:

¿Los métodos rigurosos discutidos, aseguran convergencia cualquiera sea el punto de inicialización utilizado? Teóricamente cuando la mezcla es no-ideal ¿puede demostrarse que la inicialización que toma un perfil lineal es menos adecuada que una estimada resolviendo el sistema con métodos semi-rigurosos?

Respuesta:

Para sistemas altamente no-ideales, la estimación del punto inicial para generar la secuencia iterativa es de suma importancia, ya que una mala inicialización puede provocar un gran tiempo extra de cómputo o, eventualmente, la falta de convergencia.

Las alternativas de inicialización más comunes son:

- A perfil constante: se igualan las composiciones asumidas o especificadas, ya sean de tope y fondo, en todos los platos, para cada componente; tanto para líquidos como para vapores.
- Metodología lineal: consiste en tomar como composiciones del tope y fondo, tanto para líquidos como para vapores, a los valores estimados y/o especificados, para establecer un perfil lineal en función del número de platos entre los valores extremos para cada componente en cada fase.

- Otra estrategia supone utilizar un método semi-riguroso de la matriz tridiagonal para calcular el primer perfil de composiciones (asumiendo comportamiento ideal, $K = f(T)$), no dependiendo de las composiciones de líquido y vapor. O sea, dado el perfil inicial de temperaturas, se obtiene el de composiciones.

Es de destacar que no existe un método eficiente para todos los casos, y no puede asegurarse convergencia (o mayor eficiencia) aplicando una estrategia de inicialización para todos los casos posibles de encontrar en la práctica.

Problema 5:

Plantear un diagrama de flujos para confeccionar un programa que calcule una torre de destilación por el método propuesto por Napthali y Sandholm. Suponer que se dispone de subrutinas para la estimación de las propiedades fisicoquímicas necesarias, al igual que los métodos numéricos de resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas.

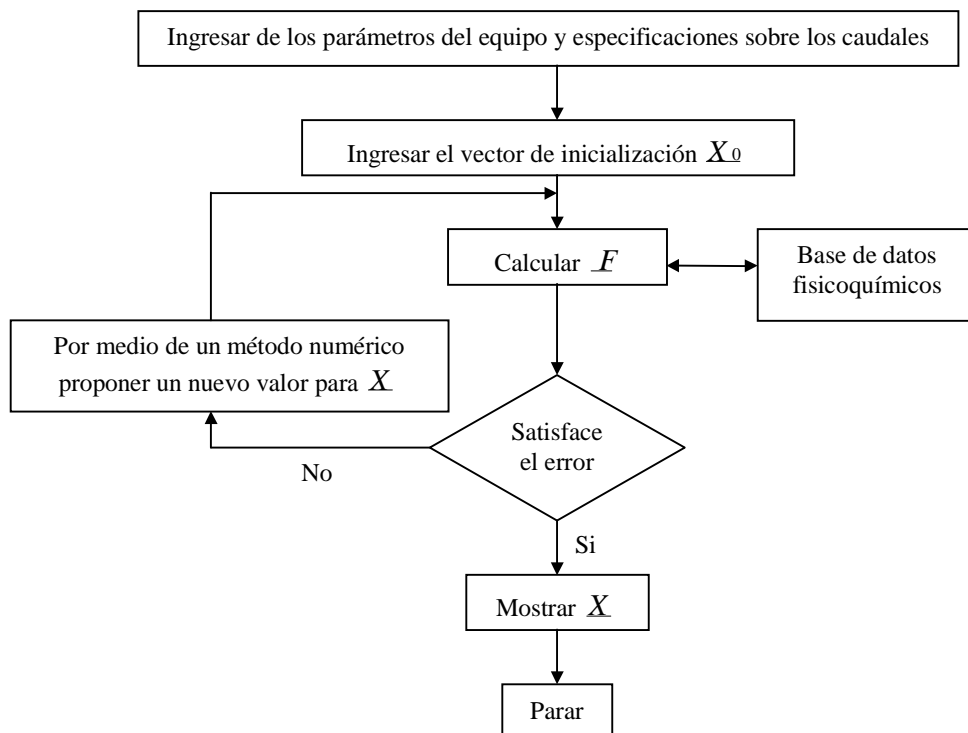
Respuesta:

Sean \underline{X} y \underline{F} :

$$\underline{X} = [X_1, X_2, \dots, X_i, \dots, X_N]$$

$$\underline{F} = [F_1, F_2, \dots, F_i, \dots, F_N]$$

donde X_i es el vector de variables independientes correspondientes al plato i , ordenado de la siguiente manera: $X_i = [v_{i1}, v_{i2}, \dots, v_{i,NC}, T_i, l_{i1}, l_{i2}, \dots, l_{i,NC}]$. Esto es, en primer lugar las NC variables pertenecientes a los caudales molares de vapor de cada componente en la etapa i , luego la temperatura de la etapa i y por último lo NC caudales molares de líquido pertenecientes a la etapa. Por otra parte, F_i es el vector de funciones discrepancia asociadas al plato i ordenado de la siguiente manera: $F_i = [EN_i, M_{i1}, M_{i2}, \dots, M_{i,NC}, E_{i1}, E_{i2}, \dots, E_{i,NC}]$. Esto es, primero el balance de energía y luego las ecuaciones correspondientes a los balances de materia y relaciones de equilibrio, respectivamente.



En el método propuesto por Napthali y Sandholm, las ecuaciones se resuelven simultáneamente en forma iterativa por el método de Mewton-Rapshon, generándose una serie de valores para las variables de iteración, hasta que las funciones de discrepancia de materia (M), equilibrio (E) y energía (EN) son llevadas a cero dentro de un margen de tolerancia, si la serie resulta convergente.

$$\text{Método de Newton-Raphson: } \underline{X}^{k+1} = \underline{X}^k - \underline{F}(\underline{X}^k) \times [\underline{J}(\underline{X}^k)]^{-1}$$

$$\text{con } \underline{J} = \text{Jacobiano} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial X_1} & \frac{\partial F_1}{\partial X_2} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial X_N} \\ \frac{\partial F_2}{\partial X_1} & \frac{\partial F_2}{\partial X_2} & \dots & \frac{\partial F_2}{\partial X_N} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial F_N}{\partial X_1} & \frac{\partial F_N}{\partial X_2} & \dots & \frac{\partial F_N}{\partial X_N} \end{pmatrix}$$

Estructuralmente, la matriz Jacobiana se compone de valores que representan las derivadas de las funciones masa, energía y equilibrio para cada etapa y componente, respecto a todas las variables independientes (composiciones líquido-vapor de cada componente y temperatura, en cada etapa). Cada elemento $[\partial F_i / \partial X_j]$ del Jacobiano es una submatriz de dimensiones $(2 \times NC+1)$, esto es, las variables independientes pertenecientes a cada etapa. En efecto, cada submatriz resulta:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial F_{i,1}}{\partial X_{j,1}} & \frac{\partial F_{i,1}}{\partial X_{j,2}} & \dots & \frac{\partial F_{i,1}}{\partial X_{j,2NC+1}} \\ \frac{\partial F_{i,2}}{\partial X_{j,1}} & \frac{\partial F_{i,2}}{\partial X_{j,2}} & \dots & \frac{\partial F_{i,2}}{\partial X_{j,2NC+1}} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial F_{i,2NC+1}}{\partial X_{j,1}} & \frac{\partial F_{i,2NC+1}}{\partial X_{j,2}} & \dots & \frac{\partial F_{i,2NC+1}}{\partial X_{j,2NC+1}} \end{pmatrix}$$

Esto es, submatrices cuadradas de orden $(2 \times NC+1)$ que agrupan las funciones y variables pertenecientes a cada etapa de la cascada. Debe notarse que las funciones de cada plato i involucran sólo variables de los platos $i-1$, i e $i+1$. Luego, las derivadas parciales de las funciones del plato con respecto a otras variables distintas a las mismas son nulas. Consecuentemente, la matriz Jacobiana adopta la estructura tridiagonal en bloques:

$$\begin{pmatrix} [B_1] & [C_1] & [0] & \dots & [0] & [0] \\ [A_2] & [B_2] & [C_2] & \dots & [0] & [0] \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ [0] & [0] & [0] & \dots & [A_N] & [B_N] \end{pmatrix}$$

Cada bloque o submatriz A_i , B_i o C_i representan una submatriz de orden $(2 \times NC+1)$ correspondiente a las derivadas parciales de las funciones del plato i con respecto a las variables de los platos $i-1$, i e $i+1$, respectivamente. En otras palabras, el sistema contiene submatrices en su mayoría nulas.

Consecuentemente, para resolver el sistema de ecuaciones, se debe invertir una matriz (\underline{J}) de dimensiones $[N \times (2 \times NC+1)]$, pero ordenada de tal forma que resulta poco densa y tridiagonal en bloques. Por lo tanto, el sistema de ecuaciones puede tratarse mediante el algoritmo de Thomas para una matriz tridiagonal en bloques (para más detalles sobre el método de Newton-Raphson o el algoritmo de Thomas para matrices tridiagonales en bloque consultar el Capítulo IV del libro "Modelado, simulación y Optimización de Procesos Químicos").

La ventaja de este procedimiento no sólo se nota en la rapidez y sencillez del cálculo, sino también en el consumo de memoria, tiempo y errores por truncamiento y redondeo. Además, debe remarcarse que la forma que adopta la matriz de coeficientes es dependiente no sólo de la forma en que se ordenan las funciones y variables, sino de la topología del equipo (ver Problema 6)

Problema 6:

¿Se complica el planteo del modelo si se quiere resolver sistemas de columnas acopladas cualquiera sean las conexiones entre ellas? ¿Según su criterio, cuál es el problema más importante a resolver? ¿Proviene de agregar nuevas variables o está asociado a la representación estructural del sistema?

Respuesta:

Si se quiere resolver un sistema de columnas acopladas, cualquiera sean las conexiones entre ellas el planteo del modelo se complica. El problema está asociado a la representación estructural del sistema, ya que difícilmente la matriz Jacobiana adopte la estructura tridiagonal en bloque; lo cual a su vez implica criterios de resolución más complejos para lograr eficiencia en el cómputo.

Problema 7:

¿Cuál es la razón por la cual puede esperarse que una columna de destilación tenga más de un estado estacionario? ¿Qué puede hacer para comprobar si son reales?

Respuesta:

Dado que el sistema de ecuaciones perteneciente al modelo que representa a los equipos de separación multicomponentes en cascada múltiple etapa son por lo general fuertemente no lineales, no debiera extrañar la posibilidad de obtener múltiples soluciones.

Los siguientes factores inciden fuertemente en la posibilidad de encontrar múltiples soluciones:

- Los coeficientes de los términos no-lineales.
- El tipo de modelo fisicoquímico utilizado para la estimación de las propiedades.
- La inicialización.

Si encontramos múltiples soluciones, debemos suponer que todas ellas son soluciones al modelo (no al sistema real) planteado. Si hacemos que el modelo sea cada vez más riguroso (próximo al comportamiento real) y las soluciones aún subsisten, debemos deducir que existen muchas posibilidades acerca de la existencia de múltiples estados estacionarios.

La única manera de identificar múltiples estados estacionarios para un sistema dado es recurriendo a la experimentación, hecho que debe realizarse en una planta piloto.

Problema 8:

¿Cuándo se justifica el empleo de modelos simplificados para estimar costos de columnas de destilación?

Respuesta:

El empleo de modelos simplificados para estimar costos de columnas de destilación se justifica para sistemas relativamente ideales y cuando las volatilidades relativas permanecen prácticamente constantes, ya que esta última es una de las hipótesis que emplean los sistemas simplificados.

También para sistemas relativamente ideales, pero cuyos componentes difieren bastante en volatilidad, la suposición puede dar lugar a errores considerables, pero ya que tales sistemas son fácilmente separables y requieren pocas etapas, el error puede que no sea importante desde el punto de vista práctico. Para separaciones dificultosas o bien para altas purezas, lo contrario es válido.

Problema 9:

¿Puede utilizar el modelo discutido (estacionario) para verificar la performance de un lazo de control? ¿Y para diseñar una columna batch?

Respuesta:

No se puede utilizar el modelo estacionario para verificar la performance de un lazo de control, ya que para esto se necesita plantear un sistema de ecuaciones diferenciales (estado dinámico) para poder estudiar la dinámica de proceso.

Tampoco se puede utilizar para diseñar una columna batch, ya que por definición, para una columna de este tipo, toda la operación es en estado transiente.

Problema 10:

Suponer que debe diseñar una columna con relleno y dispone de un simulador con módulos como los discutidos en el Capítulo XV del libro “Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos”. ¿Cómo debe proceder?

Respuesta:

Para modelar una columna de relleno con un simulador que considera etapas, la solución consiste en introducir el concepto de altura equivalente de relleno de la etapa teórica, o plato teórico, de tal manera de definir una equivalencia entre éste y el volumen de relleno que cumpla la misma tarea de separación, aunque los mecanismos difusivos, de retención de líquido y/o las pérdidas de carga, etc., respondan a mecanismos totalmente diferentes para ambos casos. Esta es solo una aproximación, ya que las caídas de presión, etc., complican la equivalencia en el diseño.

Lo ideal sería utilizar un simulador que contemple directamente la existencia de rellenos y no utilice etapas.