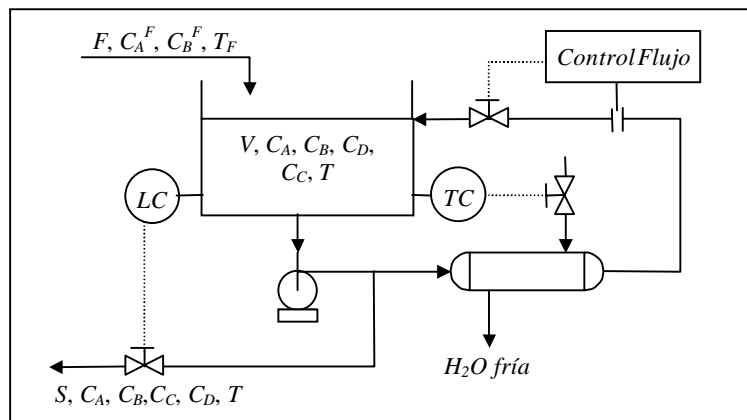


Problema 1:

Plantear un simulador dinámico para el reactor ejemplificado en la figura, en la cual se produce la siguiente reacción química: $A + 2B \rightarrow 3C + 2D$, donde A y B son componentes que ingresan según lo planteado en el esquema. Suponga que el control de temperatura y de nivel son perfectos. Desarrolle su conjunto de hipótesis.



Hipótesis:

- Reactor tanque agitado ideal (mezcla completa).
- Temperatura del reactor (T): conocida y constante (control perfecto de la temperatura).
- Presión del reactor (P): conocida y constante.
- Caudal de alimentación (F): conocido.
- Holdup líquido del reactor (V): conocido y constante (control de nivel perfecto).
- Densidad del líquido (ρ): constante.
- Constante cinética (k): conocida y constante.
- Reacción exotérmica; siendo el calor liberado (ΔH_r) conocido y función de la temperatura
- Ecuación cinética conocida e igual a $kC_A C_B^2$.
- La entalpía de la mezcla líquida en las corrientes de entrada y salida (HL_e y HL_s , respectivamente) al reactor son función de la temperatura, presión y composición del líquido.

Balance de materia:

$$F - S = 0 \quad (1)$$

Balance por componentes:

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F}{V} C_A^F - \frac{S}{V} C_A - k C_A C_B^2 \quad (2)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = \frac{F}{V} C_B^F - \frac{S}{V} C_B - 2k C_A C_B^2 \quad (3)$$

Balace de energía:

$$\rho V \frac{d HL_s}{dt} = \rho F HL_e - \rho S HL_s + \Delta Hr + Q \quad (4)$$

donde:

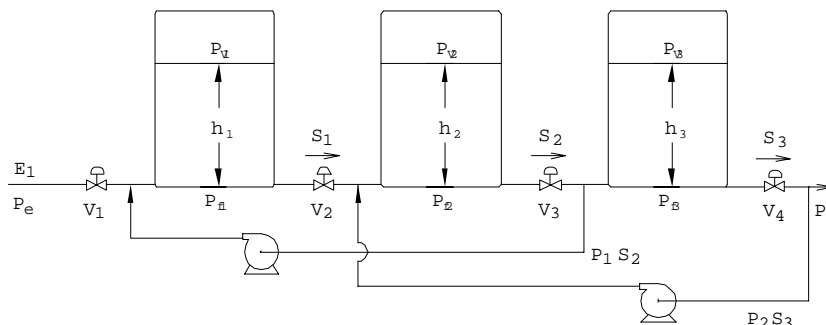
- V es el holdup líquido en el reactor.
- F y S son los caudales volumétricos de entrada y salida, respectivamente.
- HL_e , HL_s son las entalpías de la mezcla líquida en el reactor, en la corriente de entrada y en la corriente de salida, respectivamente.
- $\Delta Hr = k C_A C_B^2 V (3 H_f^{C_C} + 2 H_f^{C_D} - k H_f^{C_A} - 2 H_f^{C_B})$, es el calor absorbido liberado por la reacción (exotérmica).
- $H_f^{C_i}$ es el calor de formación del compuesto $i = A, B, C$ y D , a la temperatura T de reacción.
- $Q = U A_h (T - T_a)$ es el calor cedido al H_2O de enfriamiento; siendo A_h el área de intercambio.

Esquema de cálculo:

1. Ingresar los parámetros del reactor, del intercambiador y de la corriente de entrada.
2. Ingresar la condición inicial $C_A(t=0)$, $C_B(t=0)$, $C_C(t=0)$, $C_D(t=0)$, $T(t=0)$.
3. Adoptar el paso de integración: h
4. Definir el criterio por el cual se considera que el sistema llegó al estado estacionario.
5. Resolver el sistema de ecuaciones diferenciales constituido por (2) y (3), por alguno de los métodos conocidos: Euler, Euler-Gauss o Runge-Kutta. Dichos métodos se pueden implementar ya que se puede calcular el lado derecho de cada ecuación diferencial. Por ejemplo para las ecuaciones que conforman el balance de materia por componentes F , S , V y k son datos perfectamente conocidos, mientras que C_A , C_B , C_C y C_D son dados por la condición inicial. Lo mismo ocurre con el balance de energía: ρ , F , S , V , k , T_e (temperatura de las corrientes de entrada) U , A_h y $H_f^{C_i}$ son conocidos, mientras que C_A , C_B , T están dados por la condición inicial.
6. Cuando se satisfaga el criterio adoptado en el punto 4, pasar al punto 6.
7. Mostrar los valores obtenidos para cada tiempo para cada una de las variables: C_A , C_B , C_C , C_D y HL .
8. Parar

Problema 2:

Confeccionar un programa para el cálculo de la variación de la altura de cada recipiente indicado en la Figura XIV.8b del libro “Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos”. Asumir que dispone de las subrutinas matemáticas correspondientes.



Respuesta:

Assumiendo las mismas hipótesis y significado de las variables del ejemplo de la Figura XIV.8b del libro, el sistema a resolver resulta:

$$A_{T1} \frac{dh_1}{dt} = E_1 + P_1 S_2 - S_1 \quad (1)$$

$$A_{T2} \frac{dh_2}{dt} = S_1 + P_2 S_3 - S_2 \quad (2)$$

$$A_{T3} \frac{dh_3}{dt} = S_2(1 - P_1) - S_3 \quad (3)$$

Donde:

- $E_1 = \Phi(P_e, P_{f1}) = C_{v1} f \sqrt{P_e - P_{f1}}$
- $S_1 = \Phi(P_{f1}, P_{f2}) = C_{v2} f \sqrt{P_{f1} - P_{f2}}$
- $S_2 = \Phi(P_{f2}, P_{f3}) = C_{v3} f \sqrt{P_{f2} - P_{f3}}$
- $S_3 = \Phi(P_{f3}, P_4) = C_{v4} f \sqrt{P_{f3} - P_4}$
- $P_{fi} = \Phi(h_i, P_{vi}) = P_{vi} + \rho_l g h_i(t)$, con $i = 1, 2, 3$
- $P_{vi} = \Phi(M_i, T_{Gi}, V_{Gi}) = \frac{n_i R T_{Gi}}{V_{Gi}}$, con $i = 1, 2, 3$
- $V_{Gi} = V_T - A_i h_i$, con $i = 1, 2, 3$
- f es un factor de conversión de unidades.
- C_v es la constante característica de la válvula con las unidades dimensionales adecuadas.
- n_i (números de moles de gas) es constante y dato, y T_{Gi} (temperatura del gas) se asume igual a la temperatura del líquido T .
- ρ_l es la densidad del líquido.
- g es la aceleración de la gravedad.
- V_{Gi} es el volumen ocupado por el gas del componente i .
- P_{vi} es la presión de vapor del componente i .
- V_T es el volumen del tanque.

Reemplazando en las Ecs. (1), (2) y (3) se tiene:

$$A_{T1} \frac{dh_1}{dt} = C_{v1} f \sqrt{P_e - \left(\frac{n_1 R T}{V_{T1} - A_{T1} h_1(t)} + \rho_l g h_1(t) \right)} + P_1 C_{v3} f \sqrt{\left(\frac{n_2 R T}{V_{T2} - A_{T2} h_2(t)} + \rho_l g h_2(t) \right) - \left(\frac{n_3 R T}{V_{T3} - A_{T3} h_3(t)} + \rho_l g h_3(t) \right)} - C_{v2} f \sqrt{\left(\frac{n_1 R T}{V_{T1} - A_{T1} h_1(t)} + \rho_l g h_1(t) \right) - \left(\frac{n_2 R T}{V_{T2} - A_{T2} h_2(t)} + \rho_l g h_2(t) \right)} \quad (4)$$

$$A_{T2} \frac{dh_2}{dt} = C_{v2} f \sqrt{\left(\frac{n_1 R T}{V_{T1} - A_{T1} h_1(t)} + \rho_l g h_1(t) \right) - \left(\frac{n_2 R T}{V_{T2} - A_{T2} h_2(t)} + \rho_l g h_2(t) \right)} + P_2 C_{v4} f \sqrt{\left(\frac{n_3 R T}{V_{T3} - A_{T3} h_3(t)} + \rho_l g h_3(t) \right) - P_4} - C_{v3} f \sqrt{\left(\frac{n_2 R T}{V_{T2} - A_{T2} h_2(t)} + \rho_l g h_2(t) \right) - \left(\frac{n_3 R T}{V_{T3} - A_{T3} h_3(t)} + \rho_l g h_3(t) \right)} \quad (5)$$

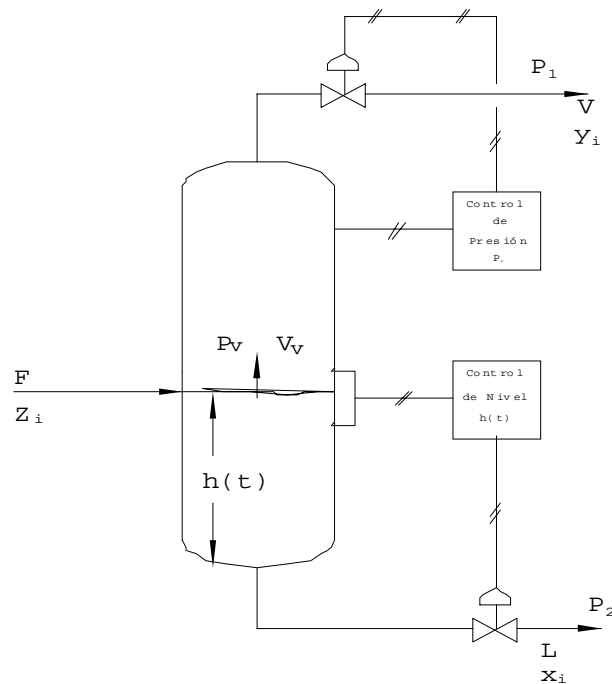
$$A_{T3} \frac{dh_3}{dt} = (1 - P_1) C_{v3} f \sqrt{\left(\frac{n_2 R T}{V_{T2} - A_{T2} h_2(t)} + \rho_l g h_2(t) \right) - \left(\frac{n_3 R T}{V_{T3} - A_{T3} h_3(t)} + \rho_l g h_3(t) \right)} + C_{v4} f \sqrt{\left(\frac{n_3 R T}{V_{T3} - A_{T3} h_3(t)} + \rho_l g h_3(t) \right) - P_4} \quad (6)$$

Esquema de cálculo:

1. Ingresar el valor de las variables A_{T1} , A_{T2} , A_{T3} , Cv_1 , Cv_2 , Cv_3 , Cv_4 , P_e , P_4 , ρ , g , P_1 , P_2 , R , T , n_i y V_{Ti} (con $i = 1, 2, 3$), que se suponen conocidas y el valor del paso de integración "k" que se utilizará en el método de resolución del sistema de ecuaciones diferenciales.
2. Ingresar las condiciones iniciales para $h_i(t = 0)$, con $i = 1, 2, 3$.
3. Ingresar el tiempo máximo de integración para el método.
4. Ingresar el criterio para detener el método de resolución del sistema de ecuaciones diferenciales (condición de estado estacionario).
5. Por medio de alguna subrutina matemática (Euler-Gauss, Runge-Kutta) calcular evolución en el tiempo de las Ecs. (4), (5) y (6). Notar que las variables del miembro derecho se conocen en su totalidad (h_1 , h_2 y h_3 quedan definidas por la condición inicial y el resto se ingresan en el paso 1) y por ende, se puede calcular el miembro izquierdo para cada paso de integración. Si para el tiempo t se satisface alguno de los criterios definidos en los apartados 3 ó 4, detener el método de cálculo y pasar al paso 6.
6. Mostrar los valores encontrados para $h_i = h_i(t)$, con $i = 1, 2, 3$.
7. Parar

Problema 3:

Plantear un modelo para un evaporador flash isotérmico (control perfecto de temperatura). Suponga que dispone de controladores de nivel cuya variable manipulada es el caudal de líquido de salida y un controlador de presión que manipula el caudal de vapor.



Hipótesis:

- El vapor y el líquido tienen el tiempo de residencia suficiente para lograr equilibrio de fases. Equilibrio instantáneo frente a la evolución temporal de las otras variables.
- Existe sólo una fase líquida y otra vapor.
- No existen reacciones químicas.
- Sistema isotérmico.

Balance de materia por componente ($i = 1, 2, \dots, NC$):

$$\frac{dM_i}{dt} = F z_i - V y_i - L x_i \quad (1)$$

Balance de energía:

$$\frac{dHL}{dt} = F HF - V HV - L HL + Q \quad (2)$$

donde los M_i representa el holdup de materia por componente en la fase líquida, HL la acumulación de contenido energético total y Q el calor absorbido o liberado.

Se asume conocido el estado de las variables para el tiempo inicial. Como se puede observar, el sistema cuenta con $NC + 1$ ecuaciones diferenciales.

El caudal de entrada (F), el vector de composiciones (z_i), la temperatura (T_F) y la presión (P_F) de la alimentación se suponen datos y constantes. Los contenidos entálpicos son función de la temperatura, presión y composición del líquido y vapor; cuyas expresiones son conocidas.

Por definición, dados los valores M_i (en moles), se sabe que las fracciones molares se calculan según la siguiente expresión:

$$x_i = \frac{M_i}{\sum_{i=1}^{NC} M_i} \quad (3)$$

Además, dado que se supone un estado de equilibrio, se debe cumplir:

$$y_i = K_i(x, y, T, P) x_i \quad (4)$$

Independientemente del número de ecuaciones diferenciales que se deben agregar para la especificación de los controladores, es posible disponer de expresiones que brindan las corrientes de salida del equipo. Agregando a las ecuaciones ya planteadas, aquellas que permitan vincular el caudal de vapor y líquido con las variables diferenciales.

En este caso, suponiendo controladores proporcionales no se agregan ecuaciones diferenciales a las existentes. Por ejemplo, sea el error en el nivel:

$$E_h = h - h_{set},$$

la señal del controlador proporcional será:

$$A_{yh} = K_{ph}^*(E_h),$$

y sea la expresión que vincula el caudal del líquido (variable manipulada) con la constante de la válvula (C_{v_l}), el gradiente de presión entre el fondo de la cámara flash y la presión de descarga (P_{dl} , que se supone constante) y la señal del controlador la siguiente:

$$L = A_{yl} C_{v_l} \sqrt{(P_v + \rho gh(t)) - P_{dl}} \quad (5)$$

Igualmente, si se supone:

$$E_{pv} = P_v - P_{set},$$

$$A_{yp} = K_{pv}^*(E_{pv}),$$

$$V = A_{yP} C_{vP} \sqrt{(P_v - P_{dv})} \quad (6)$$

donde E_{Pv} es el error en la presión (es el error en el controlador), A_{yP} la señal (en este caso proporcional al error) y la expresión (6) supone la funcionalidad entre el caudal de vapor (variable manipulada), la señal del controlador, el factor de la válvula (C_{vP}) y el gradiente de presiones entre el tambor flash y la presión de descarga (P_{dv}) que se supone constante.

Poniendo las NC ecuaciones (1) en función de la altura, y reemplazando L y V por sus expresiones, se está en condiciones de resolver las mismas.

Dado que se supone en este caso temperatura constante, si se desprecian las variaciones de composición y holdup durante los transientes, se puede asumir que las variaciones del holdup energético son despreciables. Con lo cual la Ec. (2) se convierte en una ecuación algebraica, de la cual se puede calcular el calor intercambiado a cada instante:

$$Q = F HF - V HV - L HL \quad (7)$$

Luego, conociendo los valores iniciales de M_i para $t = 0$, se pueden calcular los valores de x_i por medio de la Ec. (3) y luego a través de la Ec. (4) los valores de y_i para dicho tiempo. El resto de las variables como se mencionó anteriormente son datos y perfectamente conocidas. De esta manera, conocidas todas las variables del lado derecho se puede calcular el valor de M_i para el tiempo $t + \Delta t$ y así sucesivamente.

Problema 4:

Suponer que el área del tanque (del Ejemplo 1 del libro “Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos” - Capítulo XIV-), varía según una cierta ley $f(h)$, esto es, una función explícita de la altura. Plantear las ecuaciones diferenciales para este nuevo caso, según las hipótesis restantes del mismo ejemplo.

Respuesta:

Ejemplo 1 del libro “Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos” - Capítulo XIV-: tanque abierto con flujo de salida gravitatorio.

Balance de materia:

$$\frac{dV(t)}{dt} = E_1 + E_2 - S \quad (1)$$

donde E_1 y E_2 representan los caudales volumétricos de entrada (constantes), S el caudal volumétrico de salida y V el volumen lleno del tanque. Además:

$$V(t) = A[h(t)] * h(t) \quad (2)$$

siendo A el área transversal del tanque (que una función de la altura) y h es la altura llena del tanque (que es función del tiempo).

Derivando la Ec. (2) respecto del tiempo se llega a la siguiente ecuación:

$$\frac{dV(t)}{dt} = \frac{d(A[h(t)] * h(t))}{dt} = h(t) \frac{dA[h(t)]}{dt} + A[h(t)] \frac{dh(t)}{dt} \quad (3)$$

luego, reemplazando en la Ec. (1) se tiene: $h(t) \frac{dA[h(t)]}{dt} + A[h(t)] \frac{dh(t)}{dt} = E_1 + E_2 - S$ y por último despejando $\frac{dh(t)}{dt}$ se obtiene:

$$\frac{dh(t)}{dt} = \left(E_1 + E_2 - S - h(t) \frac{dA[h(t)]}{dt} \right) \frac{1}{A[h(t)]} \quad (4)$$

El caudal de salida depende también de la altura, a partir de la ecuación que se obtiene de la expresión de Bernoulli; en efecto, la velocidad de salida se puede expresar como:

$$v_s = \sqrt{2 g h(t)} \quad (5)$$

donde g es la aceleración de la gravedad y $h(t)$ la altura de líquido por encima del orificio de salida. Por lo tanto el caudal volumétrico de salida, S , se puede obtener de la siguiente expresión:

$$S = A_s v_s(t) \quad (6)$$

siendo A_s el área del orificio de salida.

Por lo tanto la ecuación diferencial a resolver para este caso es la siguiente:

$$\frac{dh(t)}{dt} = \left(E_1 + E_2 - A_s \sqrt{2 g h(t)} - h(t) \frac{dA[h(t)]}{dt} \right) \frac{1}{A[h(t)]} \quad (7)$$

Problema 5:

Suponga que el tanque (del Ejemplo 2 del libro “Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos” - Capítulo XIV-), se pincha debido a corrosión, por lo que produce un agujero de área A_g y a una distancia H_s de la base. ¿Cambia el modelo del equipo?

Respuesta:

Ejemplo 2: tanque abierto por descarga regulada por una válvula. Se asumen idénticas hipótesis a las planteadas en el mismo.

Balance de materia:

$$A_T \frac{dh(t)}{dt} = E - S - D \quad (1)$$

donde E y S son los caudales volumétricos de entrada (constante y conocido) y salida, respectivamente, D es el caudal volumétrico de salida debido a la rotura y A_T el área de la base del tanque (supuesta constante con la altura del mismo).

El caudal de salida, S , se puede representar por la expresión:

$$S = C_v \sqrt{\Delta P} = C_v \sqrt{P_f - P_s} = C_v f \sqrt{h(t)} \quad (2)$$

siendo C_v la constante característica de la válvula, P_f la presión en el fondo del tanque y P_s la presión de descarga (constante y conocida). Dado que el tanque se supone abierto y descarga a la atmósfera, la

caída de presión entre ambos puntos es simplemente la altura, h , del líquido; donde f es un factor que considera el cambio de unidades respectivo para homogeneizar dimensionalmente la ecuación.

El caudal de salida debido a la pinchadura, D , se puede representar por medio de la ecuación:

$$D = Ag v_s(t) \quad (3)$$

donde Ag es el orificio de provocado por la picadura y v_s es la velocidad de salida, que a través de la ecuación de Bernoulli se puede expresar como:

$$v_s = \sqrt{2g(h(t) - H_s)} \quad (4)$$

siendo g la aceleración gravitatoria y H_s la altura desde el orificio al fondo.

Notar que este conjunto de ecuaciones tiene validez $\forall t/(h(t) \geq H_s)$ y cuando $\forall t/(h(t) < H_s) \Rightarrow D = 0$.

Cuando $h(t) \geq H_s$, el conjunto de ecuaciones a resolver es el siguiente:

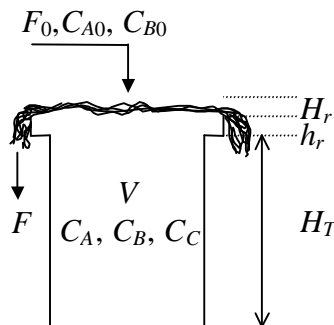
$$\begin{cases} \frac{dh(t)}{dt} = \frac{E - S - D}{A_T} \\ S = C_v \sqrt{\Delta P} = C_v \sqrt{P_f - P_s} = C_v f(\sqrt{h(t)}) \\ D = Ag v_s(t) = Ag \sqrt{2g(h(t) - H_s)} \end{cases}$$

Mientras que para $h(t) \leq H_s$, el conjunto de ecuaciones se reduce a:

$$\begin{cases} \frac{dh(t)}{dt} = \frac{E - S}{A_T} \\ S = C_v \sqrt{\Delta P} = C_v \sqrt{P_f - P_s} = C_v f(\sqrt{h(t)}) \end{cases}$$

Problema 6:

Para un caudal de un flujo que rebosa puede aplicarse la siguiente fórmula $F = K H_r^{2/3}$, siendo k una constante y H_r la altura del líquido sobre el rebosadero (que no puede asumirse constante e igual al valor de diseño para el rebosadero h_r). Suponga que la descarga del tanque es bajo esta forma. Escribir el conjunto de ecuaciones diferenciales que gobierna el sistema. Confeccionar un diagrama de flujo del procedimiento de cálculo para resolverlas numéricamente.



Respuesta:

Para hallar el conjunto de ecuaciones que gobierna el sistema se plantea el Balance de Materia para el mismo:

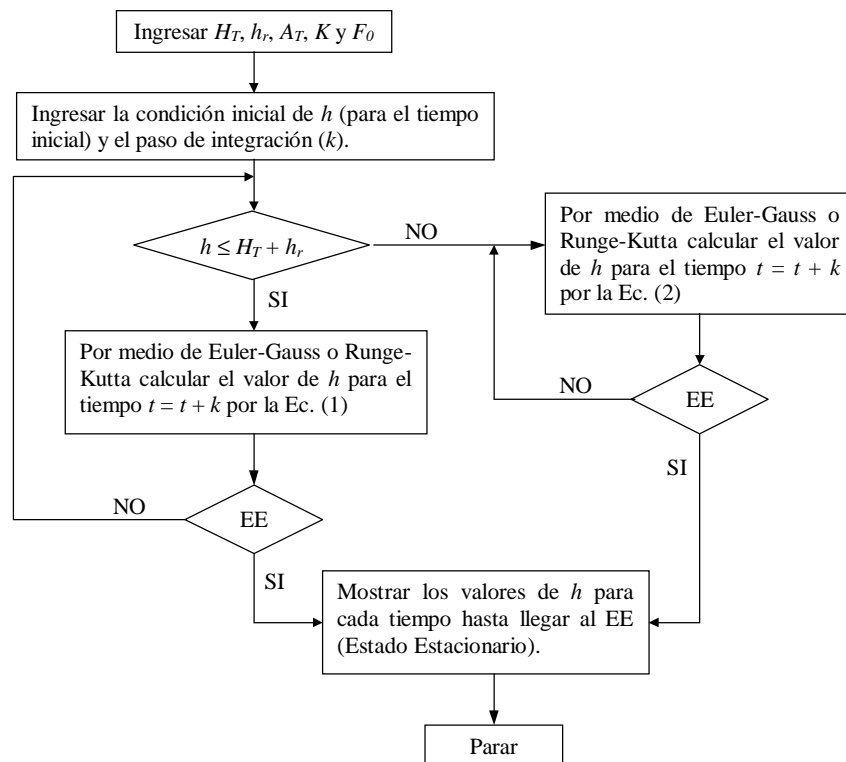
$$A_T \frac{dh}{dt} = F_0, \quad \forall h \leq (H_T + h_r) \quad (1)$$

donde A_T es el área transversal del tanque que se supone constante y H_T la altura total del tanque por debajo del rebosadero.

Para el caso en que $h > (H_T + h_r)$, el Balance de Materia se ve representado por la siguiente expresión:

$$A_T \frac{dh}{dt} = F_0 - F = F_0 - K H r^{2/3} = F_0 - K (h - (H_T + h_r))^{2/3} \quad (2)$$

Un diagrama de flujo para el procedimiento de cálculo puede ser el que se detalla a continuación (H_T es la altura total del tanque por debajo del rebosadero):



Problema 7:

Sea un tanque similar al analizado en el *Problema 6*, en el cual se produce una reacción química. Suponer calor de reacción despreciable y densidad constante. La reacción es: $2A + 3B \rightarrow C$. Obtener el modelo dinámico correspondiente y determinar la variación de la composición de A, B, C con el tiempo. Se conocen todos los valores indicados en la entrada del tanque y las características del mismo. Despreciar para el cálculo de la conversión de reactivos en productos el volumen del líquido por encima de la altura H .

Hipótesis:

- Para todo tiempo el volumen del tanque se encuentra lleno: $V = A_T H$.
- El calor de reacción es despreciable.
- Densidad (ρ) del líquido constante.
- La constante cinética, $k = k(T, P)$
- Sistema isotérmico.
- H_r constante $\Rightarrow F = K H_r^{2/3} = \text{constante}$.
- Se desprecia el cálculo de la conversión de los reactivos en productos en el volumen de líquido por encima de la altura H .
- Reacción elemental: $r = k C_A^2 C_B^3$
- Las entalpías específicas sólo son función de la temperatura.

Balance de materia por componentes:

$$\begin{cases} F_0 C_{A0} = F C_A + 2k C_A^2 C_B^3 V + V \frac{dC_A}{dt} \\ F_0 C_{B0} = F C_B + 3k C_A^2 C_B^3 V + V \frac{dC_B}{dt} \\ k C_A^2 C_B^3 V = F C_C + V \frac{dC_C}{dt} \end{cases}$$

Balance de energía:

$$\frac{d(\rho V HF)}{dt} = F_0 HF_0 - F HF - Q$$

donde Q es el calor intercambiado con el medio positivo: exotérmico negativo: endotérmico.

Por lo tanto el sistema de ecuaciones diferenciales a resolver para encontrar la variación de C_A , C_B , C_C y T en función de la temperatura, por medio de métodos numéricos a partir de una condición inicial es:

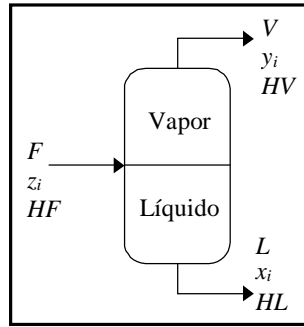
$$\begin{aligned} \frac{dC_A}{dt} &= \frac{F_0}{V} C_{A0} - \frac{K H_r^{2/3}}{V} C_A + 2k C_A^2 C_B^3 \\ \frac{dC_B}{dt} &= \frac{F_0}{V} C_{B0} - \frac{K H_r^{2/3}}{V} C_B + 3k C_A^2 C_B^3 \\ \frac{dC_C}{dt} &= -\frac{K H_r^{2/3}}{V} C_C + k C_A^2 C_B^3 V \\ \frac{dHF}{dt} &= \frac{F_0 HF_0 - K H_r^{2/3} HF - Q}{\rho V} \end{aligned}$$

Como se puede ver del lado derecho del sistema de ecuaciones queda en función de C_A , C_B , C_C y T ; ya que el resto de las variables se suponen perfectamente conocidas o son funciones de C_A , C_B , C_C y T , y por lo tanto, se puede calcular.

Problema 8:

¿Cómo se modifica el planteo del modelo de un equipo flash si existe en la fase líquida una reacción química? ¿Qué datos necesita esta nueva situación? ¿Cuáles hipótesis deben revisarse con respecto a las asumidas por ejemplo para el caso adiabático?

Respuesta:



Las hipótesis ahora deben contemplar la reacción química:

- El vapor y el líquido tienen el tiempo de contacto suficiente para lograr el equilibrio.
- Existe solo una fase líquida y vapor (L-V).
- Flash adiabático ($Q = 0$).
- Las presiones de descarga P_1 y P_2 son datos y constantes.
- La densidad del líquido (ρ), conocida y constante.
- Holdup del vapor constante y despreciable.
- Existe reacción química en la fase líquida.
- Constante cinética de reacción (k_i), conocida y constante.
- $r_k = u_i dC_i/dt$, donde u_i es el coeficiente estequiométrico ((-) reactivos, (+) productos).

Balance de materia por componentes ($i = 1, 2, \dots, NC$)

$$\frac{dM_i}{dt} = F z_i - V y_i - L x_i + RE_i Vol \quad (1)$$

Balance de energía:

$$\frac{dHE}{dt} = F HF - V HV - L HL + HR Vol \quad (2)$$

donde los M_i representan el holdup de materia por componente en la fase líquida, RE_i es los moles reaccionados o producidos por unidad de tiempo y de volumen, por cada componente, Vol es el volumen del holdup (que es a su vez una función de $h(t)$) y HE la acumulación de contenido energético total ($HE/M = HL$).

RE_i se puede expresar como: $RE_i = \sum_{k=1}^m r_k v_{ik}$, donde m es el número de reacciones, v_{ik} son los coeficientes estequiométricos de cada componente i en cada reacción k , y la expresión r_k (velocidad para cada reacción) resulta: $r_k = \rho K_D^k (C_i)^{\alpha_k} - \rho K_I^k (C_i)^{\beta_k}$, con k de 1 a m . Donde: α_k, β_k son los exponentes de reacción que podrán o no coincidir con los coeficientes estequiométricos. K_D^k es la constante directa de la reacción y K_I^k la constante de reacción inversa.

Se supone que las válvulas V_1 y V_2 son manuales y con una posición fija. El flujo bajo estas condiciones se supone que responde, para el líquido y el vapor, a las siguientes expresiones: $L = Cv_2 \sqrt{P_f - P_2} = Cv_2 \sqrt{P_v + \rho gh(t) - P_2}$ y $V = Cv_1 \sqrt{P_v - P_1}$. Siendo Cv_1 y Cv_2 son las constantes características de las válvulas, P_v la presión de vapor en el interior del flash, y g la aceleración de la gravedad.

Por lo tanto para poder calcular la variación del holdup del líquido (M_i), el contenido entálpico total (HE) y del volumen líquido ($A_T h(t)$) en el tiempo se deben conocer las condiciones iniciales (para $t = 0$) de $h(t)$, $M_i(t)$ y $HE(t)$ y los datos arriba mencionados.

Aquí se supone que la presión del flash P_v es la de equilibrio y que se conoce su funcionalidad con respecto a la temperatura. Luego, para el cálculo del miembro derecho se debe conocer V , L y T . A partir del valor del contenido energético HE , se puede calcular la temperatura conociendo el holdup líquido y las composiciones. A partir de estos valores y los demás datos pueden calcularse las variables diferenciales en el próximo tiempo $t + dt$.

Problema 9:

Modifique el diagrama de flujo de cálculo propuesto para los Ejemplos 6 y 7 (del libro “Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos” - Capítulo XIV-), si se utiliza un método explícito predictor-corrector para la integración numérica del sistema de ecuaciones correspondientes. ¿Cambia en algo este hecho el procedimiento o estrategia de resolución?

Respuesta:

La utilización de un método de integración numérica predictor-corrector en los Ejemplos 6 y 7 no cambia el procedimiento o estrategia de resolución. Ya que lo único que se hace es cambiar un método de integración numérica por otro que presenta menores errores de aproximación con respecto al valor real, para el mismo sistema de ecuaciones.

Como ejemplo de estos métodos se puede mencionar el de Euler-Gauss:

$$\begin{aligned} \underline{y}_{i+1} &= \underline{y}_i + h * \underline{f}(t_i, \underline{y}_i) \\ \underline{y}_{i+1}^{(c)} &= \underline{y}_i + \frac{h}{2} (\underline{f}(t_{i+1}, \underline{y}_{i+1}) + \underline{f}(t_i, \underline{y}_i)) \\ \underline{y}_{i+1}^{(p)} &= \underline{y}_i^{(c)} + h * \underline{f}(t_i, \underline{y}_i^{(c)}) \end{aligned}$$