

# CAPÍTULO XVII

## SIMULACIÓN DINÁMICA DE EQUIPOS ESPECÍFICOS

Por  
Enrique E. Tarifa y Nicolás J. Scenna

### XVII.1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo se presentarán simuladores dinámicos específicos desarrollados en base a las técnicas presentadas en los Capítulos XIV y XV. Los equipos que se simularán son: Un evaporador de propano, un desalador MSF y un reactor *batch* productor de sulfoleno. Estos ejemplos fueron seleccionados porque las características de los equipos cubren un amplio rango de casos reales, desde un equipo simple hasta procesos de grandes dimensiones y procesos *batch*.

En todos los casos se construirán modelos globales u orientados a ecuaciones. Este es el enfoque más conveniente para desarrollar simuladores. En efecto, así es posible su utilización en diversos tipos de problemas, como ser adaptaciones del modelo para resolver problemas de optimización, síntesis de lazos de control, etc. Además, ya vimos que se caracterizan por su eficiencia y velocidad de cálculo.

Los modelos que se presentarán en este capítulo están constituidos por dos sistemas de ecuaciones acoplados. El primero es un sistema de ecuaciones algebraicas mientras el segundo es un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, con el tiempo como variable independiente. Es este último, como ya conocemos, el que hace que los modelos sean dinámicos. En general, se aplicarán los pasos ya vistos en el modelado de diversos equipos analizados en los Capítulos XIV y XV.

### XVII.2 EVAPORADOR DE PROPANO

#### XVII.2.1 Descripción del Proceso

En la Figura (XVII.1) se muestra el esquema del equipo a simular. El sistema toma propano líquido de un depósito a través de la bomba *BL*. La presión y la temperatura en el depósito se mantienen constantes. El líquido que llega al evaporador es calentado por un serpentín por el cual circula agua caliente. El agua es suministrada por la bomba *BP*. El vapor producido es destinado a una batería de equipos que mantienen la presión de descarga  $P_2$  constante.

El sistema se completa con tres controladores del tipo  $P+I$ . El primero se encarga de mantener el nivel de líquido  $L$  manipulando la válvula  $VL$  de la línea de entrada de propano líquido. El segundo controla la presión  $P$  regulando la válvula de alimentación de agua caliente  $VP$ . Finalmente, está el controlador del caudal de salida  $W_2$ , que determina la apertura de la válvula  $VW$ .

---

**Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - 81999

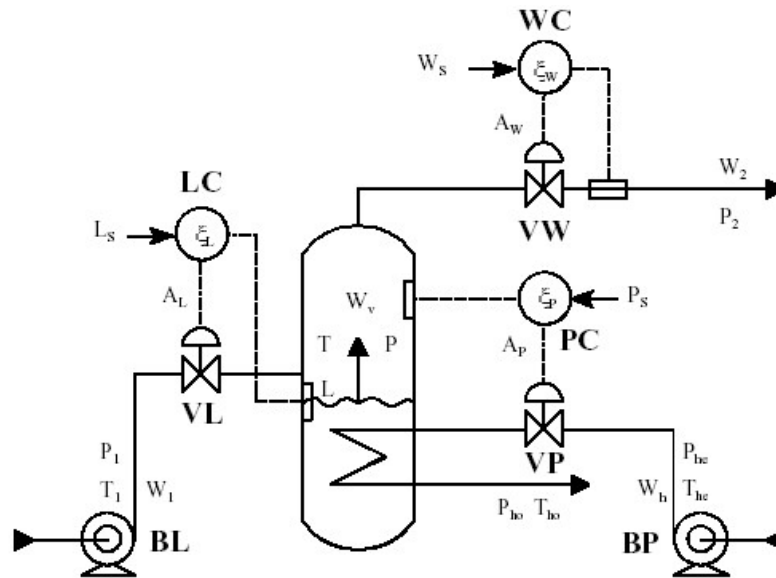


Figura XVII.1: Evaporador de propano.

### XVII.2.2 Construcción del Modelo

Las hipótesis adoptadas durante la construcción del modelo son:

- La temperatura del vapor es la misma que la del líquido en todo instante.
- La presión del vapor es igual a la presión de equilibrio correspondiente a la temperatura del vapor.
- El vapor se comporta idealmente.

Como ya se planteó, el modelo estará constituido por un sistema de ecuaciones diferenciales y otro de ecuaciones algebraicas. El sistema de ecuaciones diferenciales correspondiente surge de plantear los balances en forma dinámica. También dan origen a ecuaciones diferenciales el comportamiento especial de algunos equipos, como por ejemplo los controladores con efecto integral. Por otro lado, el sistema de ecuaciones algebraicas está integrado por las ecuaciones de estado, correlaciones, relaciones geométricas, etc. En este caso, dan origen a ecuaciones algebraicas los balances que se plantean en sistemas con constantes de tiempo muy pequeñas. Por ejemplo, cuando se aplica el balance de materia en una unión de tuberías se considera que el transitorio es despreciable; por lo tanto, el balance involucra una ecuación algebraica.

A continuación se discutirá la construcción de ambos sistemas de ecuaciones para el evaporador. En primer lugar, los balances de materia y energía en la fase líquida dan origen a las siguientes ecuaciones:

$$\rho_l S \frac{dL}{dt} = W_i - W_v \quad (1)$$

$$C_{p_l} \rho_l S \frac{d(LT)}{dt} = C_{p_l} W_i T - (C_{p_l} T + \lambda_v) W_v + Q \quad (2)$$

donde:

- $W_i$ : Caudal de alimentación.
- $W_v$ : Caudal de líquido evaporado.
- $Q$ : Calor transferido desde el serpentín hacia la fase líquida.
- $S$ : Área transversal del evaporador.
- $L$ : Altura del nivel del líquido.
- $T$ : Temperatura en el evaporador.
- $\rho_l$ : Densidad del líquido.
- $C_{p_l}$ : Capacidad calorífica del líquido.
- $\lambda_v$ : Calor de evaporación a la temperatura y presión del evaporador.

Hasta aquí se han planteado los balances que se consideran que rigen la dinámica del sistema. Ahora queda plantear las correlaciones que se utilizarán para calcular las propiedades físico-químicas, las relaciones funcionales de algunos equipos, balances estacionarios, etc.

Un ejemplo de balance pseudo-estacionario es el balance de vapor que se realiza en la campana:

$$W_v = W_2 \quad (3)$$

donde se considera que la masa  $M$  de vapor en la campana alcanza rápidamente el equilibrio.

Al considerar la fase gas ideal y que la presión del vapor es la correspondiente al equilibrio líquido-vapor, se puede plantear la ecuación de Antoine:

$$\ln(P) = \gamma_1 - \frac{\gamma_2}{T + \gamma_3} \quad (4)$$

donde  $\gamma_i$  son las constantes correspondientes para el propano.

Planteando la ley de los gases ideales se obtiene:

$$P(V - S L) = \frac{M}{PM} RT \quad (5)$$

expresión que podemos utilizar para determinar  $M$ , donde:

$V$ : Volumen total del evaporador.

$V - SL$ : Volumen de la campana del evaporador (volumen total menos el volumen ocupado por la masa líquida).

$PM$ : Peso molecular del propano.

$R$ : Constante de los gases ideales.

La bomba  $BL$  es una bomba centrífuga con la siguiente curva característica:

$$P_1 = \beta_1 + \beta_2 W_1 + \beta_3 W_1^2 \quad (6)$$

donde:

$P_1$ : Presión de descarga.

$W_1$ : Caudal bombeado.

$\beta_i$ : Constantes cuando se fija el tipo de bomba, la presión de carga, el diámetro de impulsor y las revoluciones.

De la misma forma se modela la bomba  $BP$ . Por otra parte, la válvula  $VP$ , válvula del tipo lineal, da origen a la siguiente ecuación:

$$W_h = C_{v_p} A_p \sqrt{\rho_h (P_{he} - P_{h0})} \quad (7)$$

donde:

$A_p$ : Fracción de abertura de la válvula, varía entre 0 y 1.

$P_{he}$ : Presión de descarga de la bomba  $BP$ .

$P_{h0}$ : Presión del serpentín.

$C_{v_p}$ : Capacidad de la válvula.

En cambio la válvula  $VL$ , del tipo igual porcentaje, se modela con:

$$W_l = C_{v_L} \alpha_L^{A_L-1} \sqrt{\rho_l (P_l - P)} \quad (8)$$

donde:

$A_L$ : Fracción de abertura de la válvula (varía entre 0 y 1).

$P$ : Presión del evaporador.

$C_{v_L}$ : Capacidad de la válvula.

La válvula  $VW$  también es del tipo igual porcentaje pero ahora se tiene una fase vapor, la ecuación es:

$$W_2 = C v_w \alpha_L^{A_w - 1} \sqrt{(P^2 - P_2^2) \frac{PM}{T}} \quad (9)$$

donde:

- $A_w$ : Fracción de abertura de la válvula (varía entre 0 y 1).
- $P_2$ : Presión de descarga del evaporador.
- $W_2$ : Caudal de vapor que sale del evaporador.
- $T$ : Temperatura del evaporador.

Por otra parte, dado que la masa del serpentín y los cambios esperados en la temperatura del líquido de calefacción son despreciables frente los relacionados con el evaporador, se toma el balance de energía como pseudo-estacionario. Entonces, se tiene:

$$Q = W_h C p_h (T_{he} - T_{h0}) \quad (10)$$

Otra relación la brinda el planteo de la correspondiente ecuación de transferencia:

$$Q = UA \Delta T_{ml} \quad (10)$$

$$\Delta T_{ml} = \frac{T_{he} - T_{h0}}{\ln\left(\frac{T_{he} - T}{T_{h0} - T}\right)} \quad (11)$$

donde:

- $UA$ : Es el producto del coeficiente global de transferencia con el área de intercambio.
- $\Delta T_{ml}$ : Es el la diferencia de temperatura media logarítmica.

Todos los controladores involucrados en el ejemplo bajo análisis son del tipo  $P+I$ . El controlador de nivel está representado por las siguientes ecuaciones:

$$A_L = L_L \left( \xi_L + \frac{60}{\theta_L} \int \xi_L dt \right) + A_{L0} \quad (13)$$

$$\xi_L = L_S - L \quad (14)$$

donde  $A_L$  está limitado entre 0 y  $I$ .

A fin de eliminar el término integral de la Ecuación. (13) se define la variable intermedia  $AI_L$  de la siguiente manera:

$$AI_L = \int \xi_L dt \quad (15)$$

Por lo tanto, la Ecuación (13) es reemplazada por una ecuación algebraica y otra diferencial:

$$A_L = K_L \left( \xi_L + \frac{60}{\theta_L} AI_L \right) + A_{L0} \quad (16)$$

$$\frac{dA_L}{dt} = \xi_L \quad (17)$$

De manera similar se modela el control de presión y el control de caudal de descarga.

### XVII.2.3 Resolución del Modelo

Como se mencionó en los Capítulos XIII y XIV, para resolver el sistema se deben conocer previamente los valores de las variables diferenciales. Los valores iniciales de estas variables deben ser suministrados como datos de entrada al simulador. Estos valores iniciales permiten que se resuelva el sistema de ecuaciones algebraico para determinar los valores de las restantes variables, si no fueran ingresadas como dato. De esta manera, al conocer el valor de todas las variables, se ha determinado el estado inicial del sistema.

El próximo paso es calcular, a partir del estado actual, el siguiente estado. En otras palabras, conocido el estado en el tiempo  $t$ , se determinará el estado que corresponde al tiempo  $t+\Delta t$ . Para ello, como vimos en los capítulos anteriores, se integra el sistema de ecuaciones diferenciales a fin de obtener los nuevos valores de las variables diferenciales correspondientes al tiempo  $t+\Delta t$ . Luego, se resuelve el sistema de ecuaciones algebraicas para determinar por completo el nuevo estado. Repitiendo este procedimiento, es posible calcular todos los estados por los que evolucionará el sistema.

En el caso del evaporador, las variables diferenciales son:  $L$  (nivel del líquido),  $T$  (temperatura en el evaporador), y los  $AI_i$  (los efectos integrales de los controladores). Por lo tanto, habrá que suministrar los valores iniciales. Se deja al lector el análisis del esquema de cálculo del miembro derecho, dadas las variables diferenciales.

En las Figuras (XVII.2) y (XVII.3) se puede ver la evolución de las

variables más importantes del proceso cuando se simula una elevación del *set point*  $L_S$  en el controlador *LC* para un ejemplo particular, dándole valores específicos a los parámetros del problema. Dado que el sistema está altamente controlado, las variables retornan a su valor normal, excepto  $L$ , cuyo valor se pretende variar.

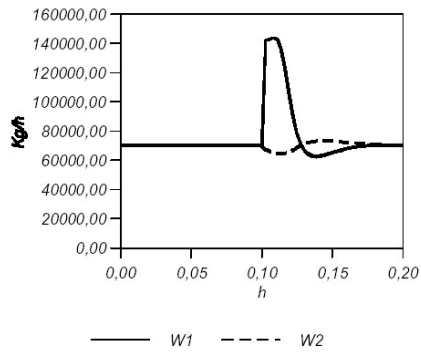


Figura XVII.3: Respuesta a la elevación de  $L_S$ .

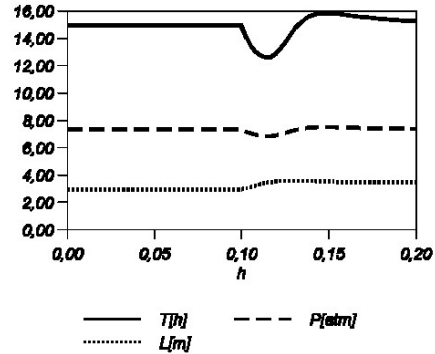


Figura XVII.2: Respuesta a la elevación de  $L_S$ .

En las Figuras (XVII.4) y (XVII.5) se muestra lo que ocurre con estas variables cuando se simula una disminución en el *set point* de dicho controlador. Nuevamente, la mayoría de las variables retoman su valor original, mientras  $L$  adopta el nuevo valor de consigna que se dio al controlador.

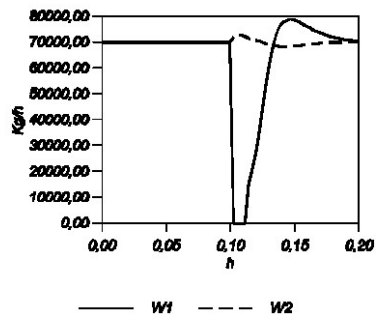


Figura XVII.4: Respuesta a la disminución de  $L_S$ .

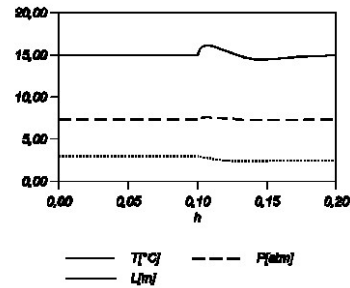


Figura XVII.5: Respuesta a la disminución de  $L_S$ .

En este caso, como en la mayoría de los modelos resueltos en los capítulos anteriores (salvo el modelo riguroso para una torre de destilación), se ha utilizado una rutina de integración explícita, concretamente Runge-Kutta de cuarto orden.

En la próxima sección analizaremos un ejemplo en el cual se incorporan varias unidades en serie, de una dimensión similar al evaporador ya visto. El proceso es un evaporador múltiple flash, para desalación de aguas de mar, que ya hemos discutido en los Capítulos II y V. Allí comentamos que para analizar la performance

de las distintas estructuras posibles para el sistema, teniendo en cuenta todas las variables y métodos operativos, era imprescindible desarrollar un simulador dinámico. También comentamos que resulta difícil encontrar en un simulador genérico, módulos para este proceso, por lo que, o bien construimos un simulador particular, o bien desarrollamos un módulo como el propuesto utilizando las facilidades de los simuladores comerciales genéricos que permiten incorporar programas desarrollados por el usuario. En cualquier caso, necesitaremos desarrollar un modelo.

### XVII.3 DESALADOR POR EVAPORACIÓN MÚLTIPLE FLASH

#### XVII.3.1 Descripción del Proceso

El segundo ejemplo que se estudiará en este capítulo es un modelo para la simulación dinámica de un sistema de desalación del tipo MSF (Múltiple Stage Flash, o sistema de evaporación flash múltiple etapa). Este sistema ya fue descrito en el Capítulo V cuando se analizó el diagrama de flujo asociado al proceso. En este ejemplo trataremos un equipo “académico” compuesto por diez unidades secuenciales de flasheo (ver Figura (XVII.6)).

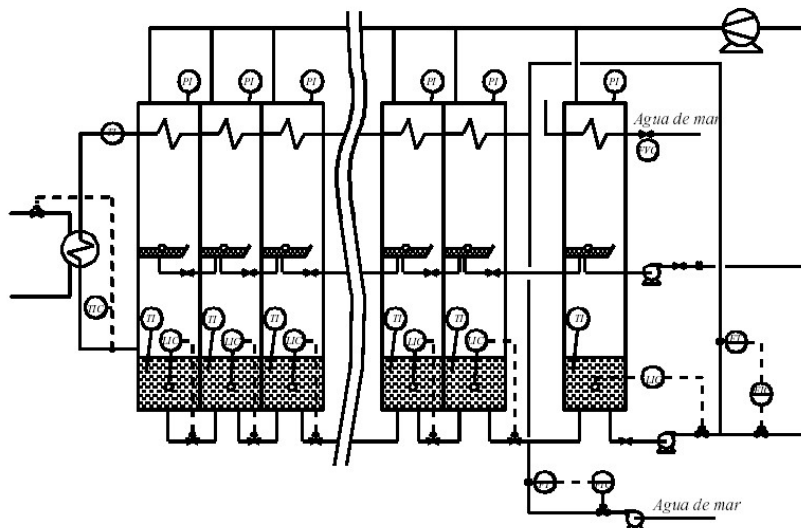


Figura XVII.6: Desalador MSF.

A diferencia del esquema mostrado en el Capítulo V, aquí se utiliza un diagrama del equipo de evaporación un poco más completo, aunque aún no se considera un número importante de equipos auxiliares, cañerías, etc.

El proceso, según vimos, consiste en una serie de etapas de flasheo donde se produce la evaporación de agua de mar para obtener agua destilada. La corriente de condensado, al pasar de una etapa a otra, también sufre evaporaciones parciales

debido al gradiente de presiones que se mantiene entre las etapas. La fracción de condensado que se evapora es del 10% al 15%. Debido a problemas de corrosión, la temperatura del calentador principal no puede superar los 120 °C. Por el mismo motivo, la corriente de agua de mar que alimenta al proceso es previamente tratada en forma adecuada. Para minimizar los costos de este tratamiento, una fracción de la salmuera concentrada es reciclada. El reciclo tiene un límite fijado por la máxima concentración promedio admisible en el equipo (es función de los materiales y de la vida útil del diseño).

Tanto la salmuera como el destilado evolucionan en contracorriente con la corriente de alimentación de agua de mar (agua fresca más el reciclo) a los efectos de aprovechar la diferencia de temperatura existente para producir la condensación del vapor junto con el precalentamiento de la corriente de alimentación. Esto se lleva a cabo en los intercambiadores ubicados en la parte superior de cada evaporador. Tanto la condensación del vapor como el empleo de una bomba para retirar los incondensables originan un gradiente de presiones entre las etapas.

Dentro de este contexto, el simulador dinámico debe contemplar todos los aspectos citados a fin de que los resultados obtenidos sean lo más exactos posibles. Además, deberá ser lo suficientemente robusto a fin de poder manejar sin problemas las perturbaciones provocadas en las simulaciones.

### XVII.3.2 Construcción del Modelo

El modelo a desarrollar será global u orientado a ecuaciones. Sin embargo, dado el gran tamaño del sistema, para construir el modelo global conviene analizar al proceso por etapas.

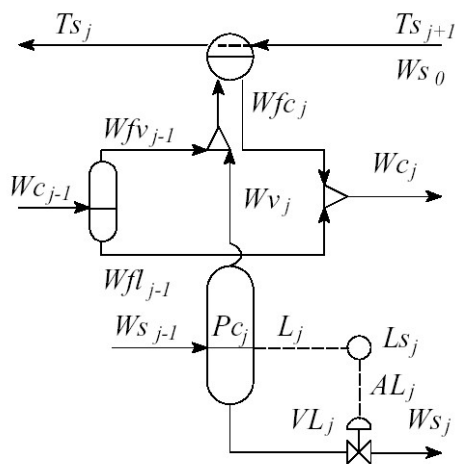


Figura XVII.7: Etapa *j* del desalador.

En las Figuras (XVII.7) a (XVII. 9) se pueden apreciar las etapas que se originan a partir de esta división: una etapa general  $j$  que representa a todas las etapas intermedias, una etapa inicial y una final. Luego, se construirán los modelos correspondientes a cada etapa. Finalmente, estos modelos se ensamblarán para dar origen al modelo global deseado. Nótese que al existir etapas, el modelo será muy similar a los discutidos para el caso de torres de destilación (cascadas múltiple etapa), si bien los fenómenos de transferencia de calor y materia que se producen sean de naturaleza diferente.

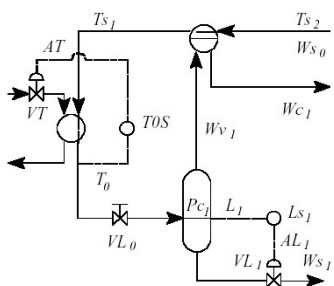


Figura XVII.8: Primera etapa.

condensado).

- *Un sumador para las corrientes de condensado*: Suma la corriente de condensado principal (proveniente de condensar el vapor) con la de condensado secundario (que es el condensado no evaporado).
- *Un intercambiador de calor*: Es el equipo que se utiliza como condensador del vapor, y como precalentador de la corriente de alimentación del sistema.

Al igual que el ejemplo de la sección anterior, el modelo dinámico del desalador está compuesto por un sistema de ecuaciones diferenciales y un sistema de ecuaciones algebraicas. La nomenclatura a emplearse corresponde a las Figuras (XVII.7) a (XVII.9).

En la construcción del modelo, se adoptan las siguientes hipótesis:

- Únicamente se considera la dinámica de los evaporadores de salmuera.
- Se desprecian las pérdidas calóricas del equipo.
- Se desprecia la variación de los coeficientes peliculars de transferencia de calor con la temperatura, caudal, etc.
- No se modela la dinámica del equipo de vacío. Se considera que todos los

Como ya se discutió en el Capítulo V, cada etapa puede ser considerada como una integración de los siguientes módulos:

- *Una unidad flash para la salmuera*: Es el equipo principal de la etapa.
- *Una unidad flash para el condensado*: Sirve para modelar la evaporación parcial del condensado que llega de la etapa anterior a la considerada.
- *Un sumador para las corrientes de vapor*: Suma la corriente de vapor principal (proveniente de la salmuera) con la secundaria (proveniente de la evaporación parcial del

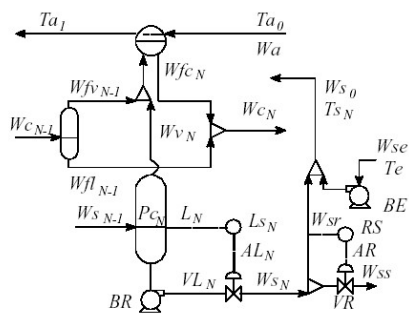


Figura XVII.9: Última etapa.

**Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.  
ISBN: 950-42-0022-2 - 81999

incondensables que ingresan son adecuadamente extraídos por el sistema de vacío y en forma instantánea.

- Se considera que el agua de mar es una solución acuosa de una única especie: el cloruro de sodio, denominada en adelante sal.

Las ecuaciones de los balances de materia para una *etapa j* son:

$$\frac{dMw_j}{dt} = Ws_{j-1}(1 - X_{j-1}) - Wve_j - Ws_j(1 - X_j) \quad (18)$$

$$\frac{dMs_j}{dt} = Ws_{j-1} X_{j-1} - Ws_j X_j \quad (19)$$

$$\frac{dMv_j}{dt} = Wve_j + Wfv_{j-1} - Wv_j \quad (20)$$

donde  $Mw$  es el *holdup* de agua,  $Ms$  es el *holdup* de sal,  $Mv$  es el *holdup* de vapor, y  $X$  es la concentración de sal.

Se puede demostrar que el balance de energía en la *etapa j* da lugar a la siguiente ecuación:

$$Mt_j Cps_j \frac{dT_j}{dt} = Ws_{j-1} Cps_{j-1} (T_{j-1} - T_j) - Wve_j \lambda vs_j \quad (21)$$

donde  $Mt$  es el *holdup* de salmuera (suma del *holdup* de sal y agua),  $\lambda vs$  es el calor latente del agua,  $Wve$  es el caudal evaporado y  $Cps$  es la capacidad calorífica de la salmuera.

Dado que en el modelo del proceso tiene varios controladores, son necesarias nuevas ecuaciones diferenciales para modelar su comportamiento de la misma forma que se hizo con el evaporador de propano. En efecto, en esa sección se vio que otra fuente de ecuaciones diferenciales es la parte integral de los controladores  $P+I$ . Por lo tanto, cada controlador dará lugar a una ecuación diferencial de la forma:

$$\frac{dAIy}{dt} = Ey \quad (22)$$

donde  $AIy$  es la acción integral del controlador y  $Ey$  es el error de la variable controlada.

Hasta aquí se plantearon las ecuaciones diferenciales del modelo, ahora es el turno de las ecuaciones algebraicas. Para cada unidad  $j$  ( $j = 1, \dots, N$ ), se plantean las

siguientes ecuaciones algebraicas:

$$Mt_j = Mw_j + Ms_j \quad (23)$$

$$X_j = \frac{Ms_j}{Mt_j} \quad (24)$$

$$L_j = \frac{Mt_j}{\rho s_j S_j} \quad (25)$$

donde  $S$  es la sección transversal de la unidad, y  $\rho s$  es la densidad de la salmuera.

Considerando la hidráulica del sistema se plantea la caída de presión entre dos etapas según:

$$\Delta P_j = Pc_j - Pc_{j+1} + g(L_j \rho s_j - L_{j+1} \rho s_{j+1}) \quad (26)$$

donde  $L$  es la altura de salmuera,  $Pc$  la presión en cada etapa y  $g$  es la aceleración de gravedad.

Para la campana (parte superior) perteneciente a la *etapa j* se puede escribir:

$$Vc_j = V_j - L_j S_j \quad (27)$$

$$Pc_j = \frac{R Mv_j T_j}{PM Vc_j} \quad (28)$$

donde  $V$  es el volumen total de la unidad,  $L.S$  es el volumen de la salmuera,  $PM$  es el peso molecular del agua, y  $Vc$  es el volumen de la campana.

La masa evaporada o flujo de vapor es calculada según la siguiente expresión:

$$Wve_j = KLA_j S (P_j - Pc_j) \quad (29)$$

donde  $P_j$  es la presión de equilibrio entre el vapor y la salmuera en cada etapa, y  $KLA$  es el pseudocoefficiente global de transferencia de materia introducido en el Capítulo XIV.

Para los precalentadores se pueden escribir las siguientes ecuaciones:

$$Ws_0 Cps_0 (Ts_j - Ts_{j+1}) = UA_j \Delta Tm_j \quad (30)$$

$$UA_j \Delta Tm_j = Wv_j \lambda vsc_j \quad (31)$$

$$\Delta Tm_j = \frac{(Tc_j - Ts_j) + (Tc_j - Ts_{j+1})}{2} \quad (32)$$

donde  $U$  es el coeficiente global de transferencia de energía,  $A$  es el área de transferencia,  $Cps$  es la capacidad calorífica de la salmuera,  $\Delta Tm$  es la diferencia de temperatura media, y  $\lambda vsc$  es el calor latente del vapor condensado. Observe que en la Ecuación (31) se ha despreciado el aporte de energía de  $Wfv$ . Esto facilita grandemente la resolución del sistema de ecuaciones. Un conjunto similar de ecuaciones se utiliza para modelar el condensador de la etapa final (*etapa N*) y del calentador principal (*etapa 1*).

Para modelar la evaporación de los condensados se plantean las siguientes ecuaciones:

$$Wfv_{j-1} = \frac{Wc_{j-1} Cpw_j (Tc_{j-1} - Tc_j)}{\lambda vsc_j} \quad (33)$$

$$Wfl_{j-1} = Wc_{j-1} - Wfv_{j-1} \quad (34)$$

$$Wfc_j = Wfv_{j-1} + Wv_j \quad (35)$$

$$Wc_j = Wfc_j + Wfl_{j-1} \quad (36)$$

donde  $Cpw$  es la capacidad calorífica del agua.

Para modelar el sistema de recirculación se emplean las siguientes ecuaciones:

$$Wsr = Ws_0 - Wse \quad (37)$$

$$Ws_N = Wss - Wsr \quad (38)$$

$$X_0 = \frac{Wse Xe + Wsr Xr}{Ws_0} \quad (39)$$

$$Ts_N = \frac{Wse Xe + Wsr Xr}{Ws_0} \quad (40)$$

donde los  $X$  son las concentraciones de sal en las respectivas corrientes y los  $Cp$  son las capacidades caloríficas.

Cada controlador  $P+I$  puede modelarse de acuerdo a las siguientes expresiones generales:

$$Ey = yS - y \quad (41)$$

$$Ay = A0y - Ky \left( Ey + \frac{1}{\theta y} AIy \right) \quad (42)$$

donde  $Ey$  es el error de la variable controlada  $y$  con respecto al *set point*  $yS$ ,  $Ay$  es la salida del controlador y es equivalente a la apertura de la válvula de control (está limitada al intervalo  $[0,1]$ ),  $A0y$  es la apertura inicial,  $\theta y$  es la constante de tiempo del efecto integral,  $Ky$  es la ganancia del controlador y  $AIy$  es el efecto integral. Esta última variable da origen a una de las ecuaciones diferenciales planteada anteriormente.

Las válvulas se pueden modelar utilizando la siguiente expresión general:

$$Wy = Cvy \alpha^{(Ay-1)} \sqrt{\rho y \Delta Py} \quad (43)$$

donde  $Cvy$  y  $\alpha y$  son parámetros de la válvula,  $Ay$  es la salida del controlador que la gobierna,  $\rho y$  es la densidad del fluido que la atraviesa y  $\Delta Py$  es la diferencia de presión entre sus extremos.

Para modelar las bombas se pueden emplear las mismas ecuaciones utilizadas en el ejemplo del evaporador:

$$Py = \beta y_0 + \beta y_1 Wy + \beta y_2 Wy^2 \quad (44)$$

donde los  $\beta$  son parámetros de la bomba que dependen de la presión de entrada, diámetro de impulsor y las revoluciones por minuto.

Adicionalmente, un conjunto de correlaciones deben emplearse para estimar las propiedades físico-químicas tales como condiciones de equilibrio ( $P$  y  $Tc$ , se supone aplicable la expresión de Antoine, aunque con la presencia de electrolitos, esta suposición debe considerarse según la exactitud que se necesite), calores latentes ( $\lambda vs$  y  $\lambda vs c$ ), elevación del punto de ebullición (EBP), capacidades caloríficas ( $Cps$  y  $Cpw$ ), etc.

**XVII.3.3 Resolución del Modelo**

La forma de resolver el modelo (la secuencia de resolución) del sistema de ecuaciones diferenciales y el sistema de ecuaciones algebraicas sigue el lineamiento visto en los capítulos anteriores. Al igual que en el capítulo XV, el tamaño del modelo hace que se complique la resolución. En efecto, ahora el sistema de ecuaciones diferenciales está integrado por 50 ecuaciones, mientras que el sistema de ecuaciones algebraicas tiene más de 200 ecuaciones.

Para la solución numérica del sistema de ecuaciones diferenciales se utiliza un sistema explícito (Runge-Kutta de 4to. orden). En cuanto al tiempo de cómputo, el tamaño del sistema de ecuaciones diferenciales afecta directamente al tiempo de resolución pero lo hace en forma lineal. En cambio, el tamaño del sistema de ecuaciones algebraicas afecta exponencialmente al tiempo de cálculo. Por lo tanto, es necesario manipular este sistema previamente a fin de reducir el costo computacional. Esto puede hacerse mediante adecuadas simplificaciones y/o el empleo de técnicas de ordenamiento como las vistas en el Capítulo IV para evitar procedimientos iterativos. Se deja al lector el análisis de la metodología de resolución dadas las condiciones iniciales.

j	X x 100	T [° C]	Pc x 10 [Kg/cm <sup>2</sup> ]	Ts [° C]	Ws x 10 <sup>-4</sup> [Kg/h]
1	4.56	72.4	3.41	67.9	2.04
2	4.59	67.9	2.80	63.3	2.03
3	4.62	63.4	2.30	58.8	2.01
4	4.65	58.8	1.85	54.2	2.00
5	4.69	54.3	1.49	49.5	1.98
6	4.72	49.8	1.19	44.9	1.97
7	4.75	45.4	0.94	40.3	1.96
8	4.78	41.1	0.75	35.6	1.94
9	4.81	36.8	0.59	31.1	1.93
10	4.86	30.4	0.38	26.5	1.91

T <sub>0</sub> [°C]	X <sub>0</sub>	W <sub>so</sub> [Kg/h]	W <sub>sr</sub> [Kg/h]	W <sub>ss</sub> [Kg/h]	W <sub>c10</sub> [Kg/h]	W <sub>se</sub> [Kg/h]
77	4.64x10 <sup>-2</sup>	2.05x10 <sup>4</sup>	15420	3720	1472	5140

La Tabla (XVII.1) muestra el estado estacionario determinado por el simulador para el desalador. Sin embargo, al igual que en el caso del evaporador de

propano, las aplicaciones más interesantes son aquellas que involucran simulación dinámica.

Las Figuras (XVII.10) a (XVII.12) muestran la evolución de las variables más importantes cuando se simula una disminución en el *set point* del calentador principal. A pesar de que la perturbación es simulada mediante una función escalón en  $T_{0S}$ ,  $T_0$  decrece lentamente (Figura (XVII.10)). Más exactamente,  $T_0$  cae bruscamente desde  $77\text{ }^{\circ}\text{C}$  a  $68\text{ }^{\circ}\text{C}$ , igualando a la temperatura  $T_{S1}$ , debido a que el escalón en  $T_{0S}$  provoca que el controlador cierre el paso de vapor al calentador. El lento descenso que se observa posteriormente se debe a que la disminución de la temperatura en el primer evaporador provoca una disminución en la evaporación; esto significa menor precalentamiento de la alimentación y menor  $T_{S1}$ , lo que origina una nueva disminución de temperatura en el primer evaporador. Este mismo proceso se repite en todas las otras etapas.

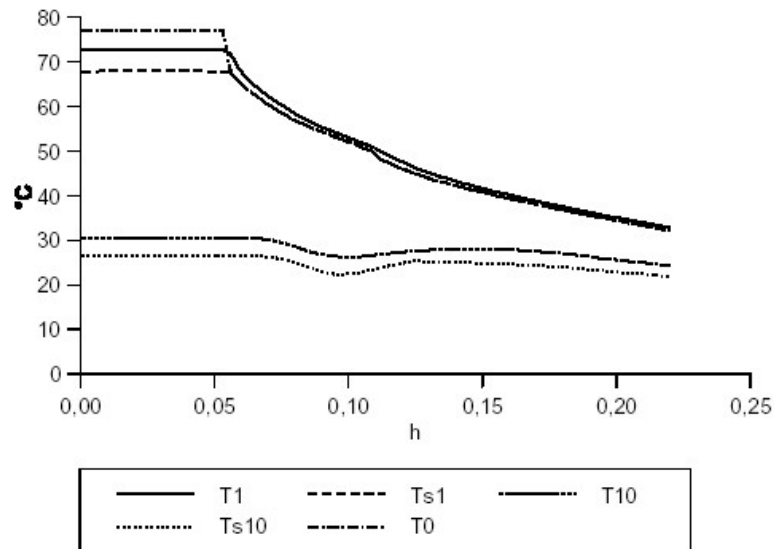


Figura XVII.10: Respuestas a la disminución de  $T_{0S}$ .

De una manera similar se puede explicar la evolución de las presiones (ver Figura (XVII.11)). La disminución de la temperatura, provoca la disminución de la presión. De esta forma, la perturbación introducida en el control de temperatura también afecta a las presiones.

En cuanto al nivel del líquido (ver Figura (XVII.11)), puede notarse que  $L_1$  aumenta inicialmente debido a la disminución en la evaporación, pero el controlador de nivel actúa sobre  $W_{S1}$  (ver Figura (XVII.12)) para que  $L_1$  recupere finalmente su valor original. Algo parecido ocurre con niveles de las otras etapas, donde los

controladores actúan sobre los respectivos caudales provocando grandes perturbaciones (ver Figura (XVII.12)).

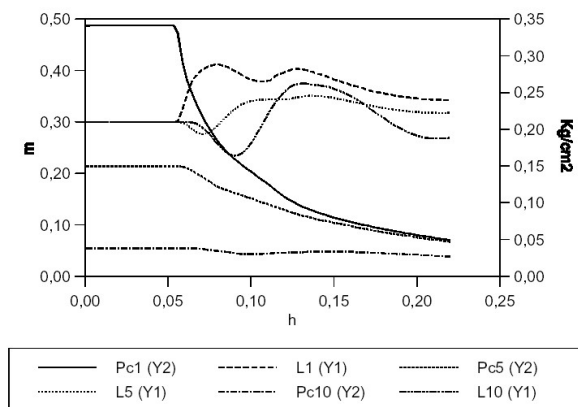


Figura XVII.11: Respuestas a la disminución de TOS.

Note cómo una perturbación que inicialmente afectaba a las temperaturas, terminó afectando seriamente a los caudales. Situaciones similares son frecuentes en las plantas modernas, donde todas las etapas están altamente integradas y controladas. Ahora, trate de comprender el esfuerzo que debe realizar el operador para determinar a partir de la evolución de las variables (Figuras (XVII.10 - 12)) qué cosa está funcionando mal en el proceso. En otras palabras, el operador debe identificar la falla que está afectando a la planta a partir de la evolución de las variables, en este caso: un *set point* erróneo.

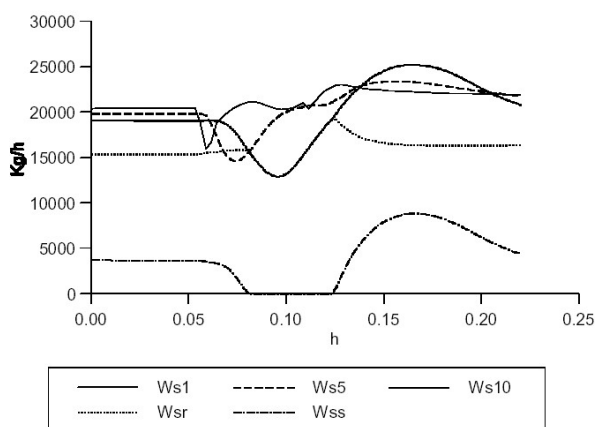


Figura XVII.12: Respuestas a la disminución de TOS.

En realidad, la situación es más compleja aún ya que en los casos reales las lecturas están afectadas por ruidos, el operador enfrenta situaciones para la cual no fue entrenado, está sometido a una situación de alto *stress*, numerosas alarmas pueden activarse simultáneamente, etc. Por todo esto, es necesario contar con herramientas para entrenar a los operadores y otras que le brinden apoyo durante las situaciones de emergencia. Los simuladores dinámicos son excelentes herramientas para el entrenamiento, siendo sólo superados por los simuladores de tiempo real que se verán en el Capítulo XXI. En cambio, como herramienta de apoyo al operador para superar situaciones de emergencia se están desarrollando los sistemas de diagnóstico (Tarifa, 1995). Estos sistemas procesan las lecturas obtenidas de la planta para identificar las fallas que posiblemente están afectando al proceso. Esto es una gran ayuda, ya que si bien el operador continúa siendo el responsable de la identificación de la falla, puede ahora concentrarse sobre el grupo limitado sugerido por el sistema de diagnóstico.

#### XVII. 4 REACTOR PRODUCTOR DE SULFOLENO

##### XVII.4.1 Descripción del Proceso

El proceso a simular en esta sección es el reactor batch productor de sulfoleno que se muestra en la Figura (XVII.13) (Tarifa, 1995):

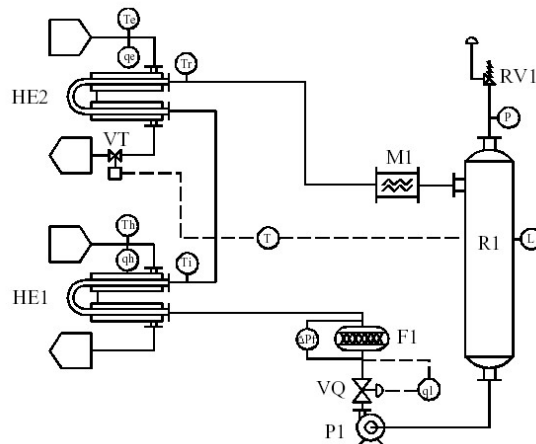


Figura XVII.13: Reactor productor de sulfoleno.

Este proceso es una etapa intermedia en la producción de sulfolano. En efecto, para obtener sulfoleno primero se realiza una reacción de adición que produce sulfolano; luego, el sulfoleno es hidrogenado para obtener el producto final. La reacción de adición es fuertemente exotérmica:



Como se observa, se combina un mol de anhídrido sulfuroso con un mol de butadieno para producir un mol de sulfoleno. La reacción es en fase líquida y el dióxido se encuentra en exceso.

Al ser un proceso batch, las condiciones del proceso no se mantienen constantes durante la operación normal. Es más, la estructura misma del proceso (topología) también puede cambiar.

La Figura (XVII.14) muestra la evolución de la temperatura durante un ciclo completo desarrollado en forma normal.

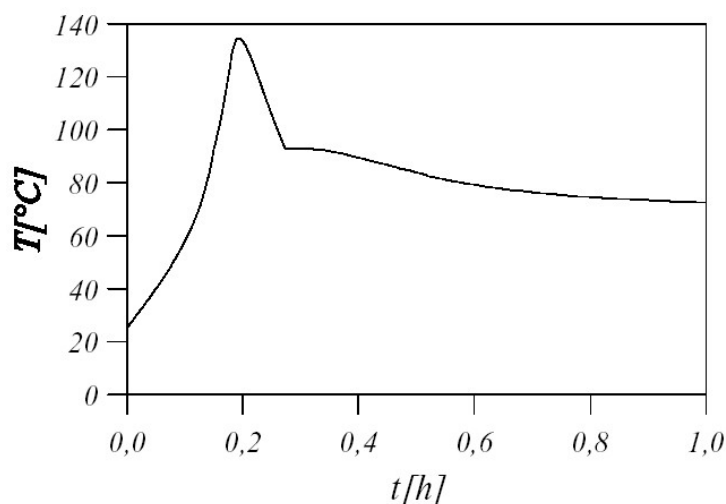


Figura XVII.14: Evolución normal de la temperatura.

Los reactivos están inicialmente a 25 °C. El dióxido se encuentra en un exceso de 4:1 con respecto al butadieno. A esta temperatura la velocidad de la reacción es despreciable, por lo tanto es necesario que toda la mezcla sea recirculada a través del calentador *HE1*. Este calentador tiene la misión de encender la reacción. El mismo recibe agua a una temperatura fijada en 70 °C. Una vez que la reacción se inicia, el calor producido por la misma es suficiente para continuar calentando la mezcla. De esta manera la temperatura se eleva rápidamente hasta superar los 70 °C del agua suministrada al equipo *HE1*. A partir de ese momento dicho equipo se comporta como un enfriador de la mezcla.

La reacción es tan exotérmica que es necesario agregar un enfriador adicional para evitar la destrucción del reactor. Este enfriador es el equipo *HE2* que es habilitado por el sistema de control de temperatura cuando la misma supera los 93 °C (esto es un cambio en la topología del proceso). El *HE2* recibe agua de enfriamiento a 25 °C. De esta manera se atenúa la reacción hasta que la misma

comienza a apagarse. A partir de ese momento la temperatura desciende. Cuando la misma está por debajo de 83 °C, el controlador de temperatura procede a retirar de servicio el enfriador *HE2*, mientras el *HE1* sigue habilitado. Se permite que la temperatura descienda para lograr el mayor grado de conversión posible pero se evita que sea inferior a 70 °C porque el producto puede solidificar.

#### XVII.4.2 Construcción del Modelo

Al igual que en las secciones anteriores, se optó por un modelo global orientado a ecuaciones. Aunque ahora se está modelando un proceso *batch*, el modelo a plantear también consiste en un sistema de ecuaciones algebraicas y un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden.

Al plantear el balance de materia para cada componente *i* en la fase vapor del reactor, surge la siguiente ecuación:

$$\frac{dMv_i}{dt} = qv_i \quad (46)$$

donde  $Mv_i$  es el *holdup* de vapor del compuesto *i*, mientras que  $qv_i$  es el flujo de componente *i* desde el líquido hacia el vapor.

El balance para la fase líquida es:

$$\frac{dMl_i}{dt} = qr Cr_i - ql C_i + \gamma_i RE - qv_i \quad (47)$$

donde  $Ml_i$  es el *holdup* líquido del compuesto *i*,  $\gamma_i$  es el coeficiente estequiométrico,  $RE$  es la velocidad de reacción,  $ql$  es el caudal líquido de salida,  $qr$  es el caudal de entrada,  $C_i$  es la concentración del compuesto *i* en la corriente de salida, mientras  $Cr_i$  lo es en la entrada.

En el balance de energía, se asume que la variación de energía en la fase vapor es despreciable, mientras que en la fase líquida se plantea:

$$Cpl Mtl \frac{dT}{dt} = qr \rho r (Cpr Tr - Cpl T) - \Delta H RE - \sum qv_i \lambda v_i \quad (48)$$

donde los  $Cp$  son las capacidades caloríficas en las distintas corrientes,  $Mtl$  es la masa líquida,  $\rho r$  es la densidad del líquido en la corriente de entrada,  $\lambda v_i$  es el calor de evaporación del compuesto *i*, las  $T$  son las temperaturas en las distintas corrientes, y  $\Delta H$  es el calor producido por la reacción.

Finalmente, se agrega una ecuación más para simular la acción integral  $AIq$  del controlador del caudal de recirculación:

$$\frac{dAIq}{dt} = \xi q \quad (49)$$

donde  $\xi q$  es la diferencia entre el valor deseado y el medido para el caudal de recirculación.

Por otra parte, entre las ecuaciones algebraicas se puede citar la empleada para calcular la elevación de presión  $\Delta Pt$  producida por la bomba de recirculación:

$$\Delta Pt = \beta_0 + \beta_1 ql + \beta_2 ql^2 \quad (50)$$

donde los  $\beta$  son coeficientes que dependen de la presión de entrada, del diámetro del impulsor y de las revoluciones por minuto.

El controlador del caudal de recirculación es modelado con:

$$Aq = 0.5 + Kq \left( \xi q + \frac{1}{\theta q} AIq \right) \quad (51)$$

$$\xi q = qls - ql \quad (52)$$

donde  $Aq$  es la salida del controlador y es equivalente a la apertura de la válvula de control.  $Kq$  y  $\theta q$  son parámetros del controlador.  $\xi q$  es el error y  $qls$  es el *set point*.

El controlador de temperatura es del tipo *on-off* y su modelo es:

$$At_n \begin{cases} 100\% & \text{si } T > 93^\circ C \\ 0\% & \text{si } T < 83^\circ C \\ AT_{n-1} & \text{si } 83^\circ C \leq T \leq 93^\circ C \end{cases} \quad (53)$$

$$AT_0 = 0\%$$

donde  $AT_n$  es la salida del controlador y equivale a la apertura de la válvula de control. Como puede observarse, la salida del controlador no sólo depende de la variable controlada sino que depende también de la salida anterior o estado del controlador.

La caída de presión en el filtro está dada por:

$$\Delta Pf = \left( \frac{ql}{Cqf} \right)^2 \rho l \quad (54)$$

donde  $Cqf$  es la capacidad del filtro.

La válvula de control es modelada con:

$$ql = Cqv \alpha q^{Aq-1} \sqrt{\frac{\Delta P v}{\rho l}} \quad (55)$$

donde  $Cqv$  y  $\alpha q$  son parámetros de la válvula.

La cinética está dada por las siguientes ecuaciones que contemplan dependencia de las concentraciones y la temperatura:

$$K_i = A_i e^{-\frac{E_i}{R T}} \quad (56)$$

$$RE = VI(K_1 CA CB - K_2 CC) \quad (57)$$

donde  $CA$ ,  $CB$  y  $CC$  son las concentraciones molares del dióxido de azufre, del butadieno y del sulfoleno respectivamente.  $VI$  es el volumen del líquido. Los  $K_i$  son las constantes cinéticas. Los  $E_i$  y los  $A_i$  son parámetros de las reacciones.  $R$  es la constante de los gases.

La presión en la campana se calcula usando gases ideales:

$$P = \frac{R Mtv T}{Vv} \quad (58)$$

donde  $Vv$  es el volumen de la campana, y  $Mtv$  es la cantidad total de moles de vapor.

La velocidad de evaporación del compuesto  $i$  es calculada como:

$$qv_i = Kt_i (x_i Pv_i - y_i P) \quad (59)$$

donde  $Kt_i$  es el coeficiente global de transferencia de materia para el compuesto  $i$ ,  $x_i$  es la fracción molar del compuesto  $i$  en la fase líquida,  $y_i$  es la fracción molar del compuesto  $i$  en la fase vapor, y  $Pv_i$  es la presión de vapor del compuesto  $i$  puro a la temperatura  $T$ .

Para el calentador  $HEI$  se plantean las siguientes ecuaciones:

$$Q_{HEI} = ql \rho l Cpl (Ti - T) \quad (60)$$

$$Q_{HEI} = qh \rho h Cph (Th - T_h) \quad (61)$$

$$Q_{HEI} = UA h \Delta T m \quad (62)$$

$$\Delta T_m = \frac{(Th_s - T) + (Th - Ti)}{2} \quad (63)$$

Para el enfriador *HE2* se plantea un conjunto similar de ecuaciones.

Al igual que en las secciones anteriores, el sistema de ecuaciones algebraicas se completa con correlaciones, relaciones geométricas, balances estacionarios en equipos menores, etc.

#### XVII.4.3 Resolución del Modelo

A pesar de tratarse de un proceso *batch*, la resolución del modelo se hace aplicando las técnicas ya descritas en capítulos anteriores para procesos continuos. Las diferencias están en el estado inicial y en las funciones de control. Cuando se simula un transitorio entre diferentes estados estacionarios, el estado inicial que se adopta es precisamente el estado estacionario correspondiente al punto de partida (por ejemplo, la operación normal del proceso). En cambio, cuando se simula un proceso *batch*, se adopta el estado inicial del proceso como el estado en el cual éste debe comenzar a procesar los materiales objeto de la transformación especificada. Ya sea por el estado mismo del proceso o por las acciones de los controladores o de los operarios; el estado inicial no es un estado estacionario. Entonces, el proceso comenzará a evolucionar. Por lo tanto, durante la operación normal de un proceso *batch* no se tiene un *estado estacionario normal*, sino que se tiene una *evolución normal* o deseada. Además, existe una gran diferencia al simular procesos *batch* completos o *equipos batch*. Todos estos puntos serán analizados en el Capítulo XIX.

A lo largo de la evolución normal, los controladores o los operarios pueden introducir cambios en la topología y en las condiciones de operación de la planta. Todo esto debe ser contemplado por el simulador.

Con el simulador es posible encontrar la evolución normal de un proceso dado. En el caso del reactor, la evolución normal de la temperatura mostrada en la Figura (XVII.14) fue obtenida con el modelo analizado. En la Figura (XVII.15) se presenta la evolución de las concentraciones durante la operación normal obtenidas también con el simulador.

Para terminar, los operadores que supervisan un proceso *batch* deben enfrentar el problema que representa la constante evolución de las variables. Ahora no sólo es un problema identificar una falla a partir de las lecturas anormales, sino que también es un problema determinar cuáles son las lecturas anormales. En efecto, en un proceso estacionario basta con observar qué variables cambian de valor; pero en un proceso *batch*, todas las variables cambian de valor durante la operación normal. Por lo tanto, el operador deberá estar suficientemente entrenado (o asistido) para poder discriminar entre cambios normales y cambios anormales de las variables.

Nuevamente, la simulación dinámica y la de tiempo real son excelentes herramientas para el entrenamiento (ver Capítulo XXI), y un sistema de diagnóstico

se vuelve imprescindible (Tarifa, 1995).

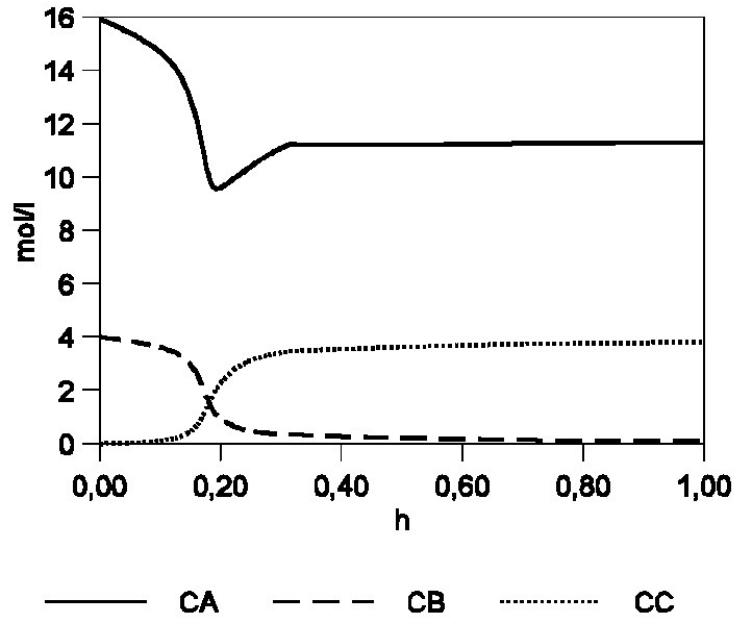


Figura XVII.15: Evolución normal de las concentraciones.

Concluyendo, en este capítulo se presentó el desarrollo de modelos para tres casos distintos de procesos químicos. La importancia de la simulación dinámica para el diseño de plantas y el entrenamiento de operadores fue destacada a través de varios ejemplos. Estos ejemplos sugieren la necesidad de contar con sistemas de diagnóstico que asistan al operador en situaciones de emergencia. Finalmente, se mencionó la importancia de los simuladores de tiempo real. Estos simuladores serán objeto de estudio del Capítulo XXI.

#### BIBLIOGRAFÍA CITADA

- Tarifa, E.E., *Diagnosis de Fallas en Plantas Químicas Complejas: Plantas de Grandes Dimensiones y Procesos Batch*, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina (1995).
- Tarifa, E.E., D. Humana, G. Vázquez, S. Franco y N. J. Scenna, *Simulación Dinámica en Tiempo Real. Pasteurizador HTST*, UNJu (1997).