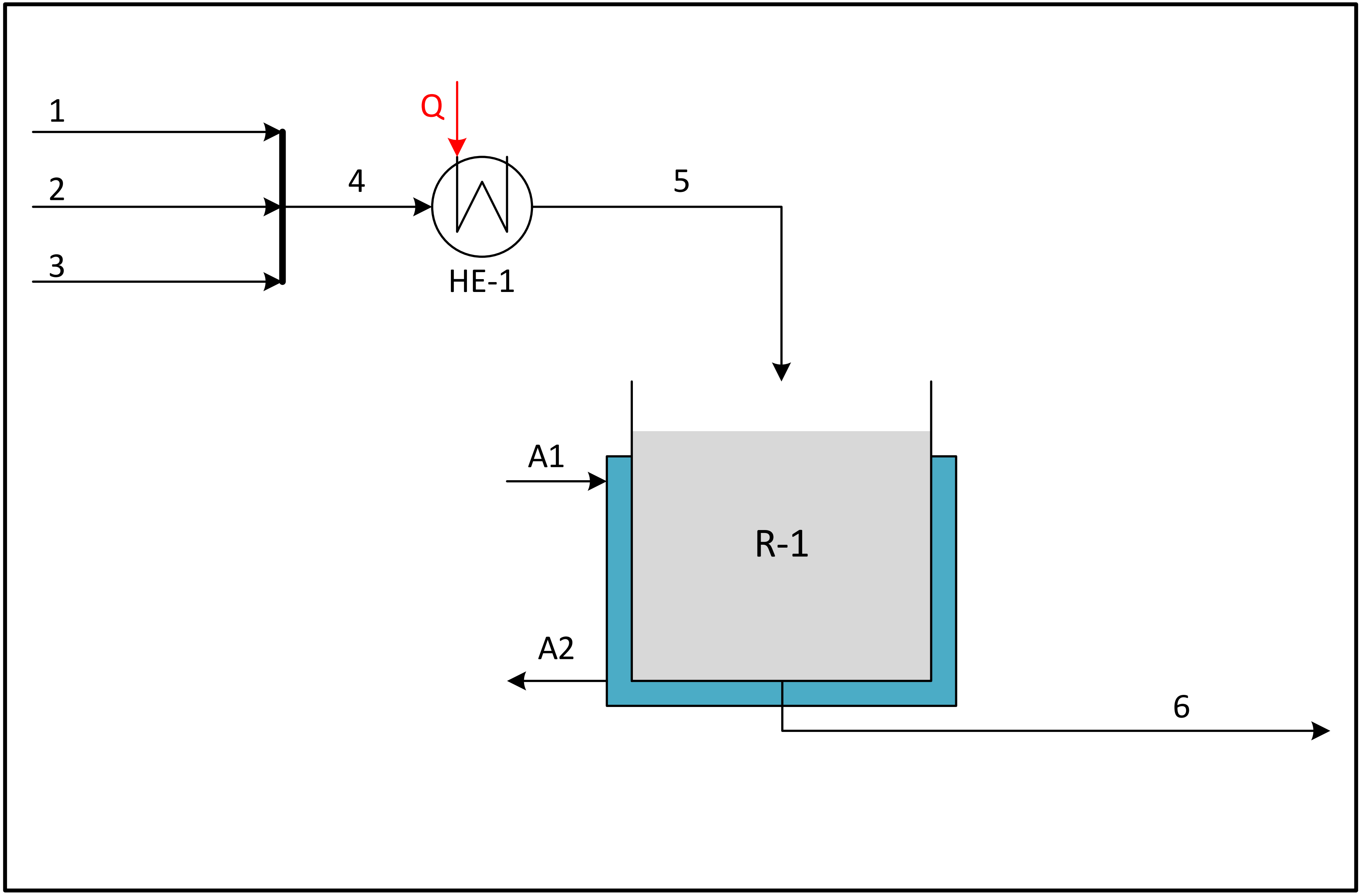
DSOySP

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

2024

Profesor: Dr. Nicolás J. Scenna
JTP: Dr. Néstor H. Rodríguez
Aux. 1ra: Dr. Juan I. Manassaldi

Flowsheet



Representación matemática de los equipos

Sea el proceso cuyo diagrama de flujo se presenta en la figura. 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 (no es necesario aplicar algún algoritmo de particionado, rasgado y ordenamiento). Adoptar una estrategia modular secuencial y asumir el perfil de presiones conocido.

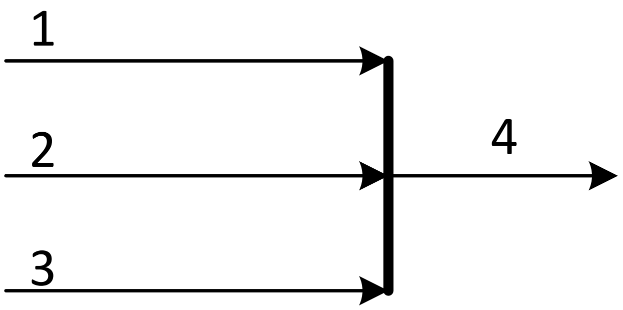
Representación matemática de los equipos

Lineamientos generales:

- Presentar de manera clara el conjunto de hipótesis, ecuaciones y variables que representan a cada equipo.
- Proponer una estrategia de resolución para cada equipo identificando claramente cuáles son las variables que se obtienen en cada paso y a partir de que ecuaciones se las obtiene. De ser necesario definir los criterios de tolerancia y variables de corte seleccionadas.
- Presentar el DFI del proceso y la estrategia de resolución general referenciando los módulos de cálculo antes definidos (equipos individuales).

Si en alguna corriente recurre a la resolución de un flash hipotético presentar su secuencia de resolución.

Modelo de un Mixer (sumador)



<u>Hipótesis</u>:

1. Estado estacionario.
2. No se consideran perdidas de calor con el medio.
3. No se produce cambio de fase.
4. Sin reacción química.
5. Existen tres componentes: A,B y C

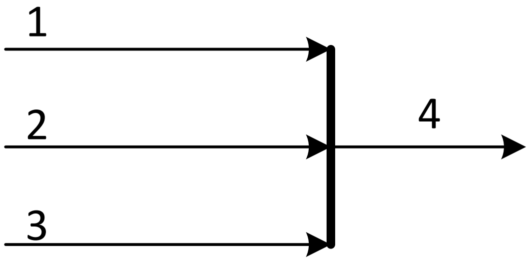
Nodo sumador sin cambio de fase (MS)

$$m_1 x_{1,i} + m_2 x_{2,i} + m_3 x_{3,i} - m_4 x_{4,i} = 0 \qquad i = A, B, C$$

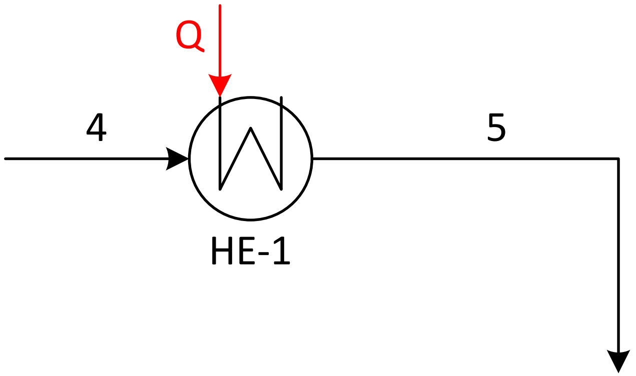
$$x_{4,A} + x_{4,B} + x_{4,C} = 1$$

$$m_1 H_1 + m_2 H_2 + m_3 H_3 - m_4 H_4 = 0$$

$$f\left(H_4, T_4, P_4, x_4\right) = 0$$



Modelo de un Heater (calentador)

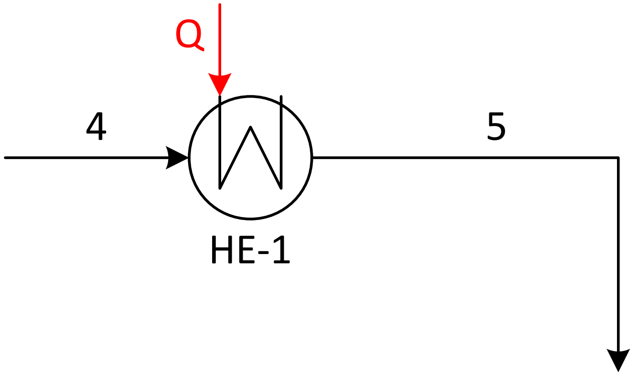


<u>Hipótesis</u>:

1. Estado estacionario.
2. No se consideran perdidas de calor con el medio.
3. El calentamiento del fluido no produce cambio de fase.
4. Sin reacción química.
5. La temperatura de salida es conocida.

Modelo de un Heater (MS)

$$m_4 x_{4,i} - m_5 x_{5,i} = 0 \qquad i = A, B, C$$

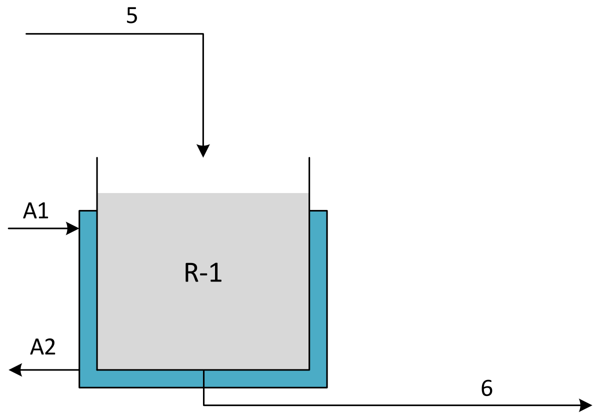


$$x_{5,A} + x_{5,B} + x_{5,C} = 1$$

$$m_4 H_4 + Q_{HE} - m_5 H_5 = 0$$

$$f\left(H_5, T_5, P_5, x_5\right) = 0$$

CSTR (Continuously Stirred Tank Reactor)



$$A \rightarrow B + C$$

$$r_D = Ae^{\left(-\frac{E}{RT}\right)} x_A$$

Hipótesis:

- Se conoce la estequiometría de cada una de las reacciones.
- Se conocen las expresiones de velocidad de reacción (rj).
- Estado estacionario
- Medio de reacción homogéneo.
- Las entalpías están calculadas tomando como base el calor de formación de cada componente.
- Camisa de enfriamiento con agua pura y mezcla completa.
- El reactor opera a temperatura conocida
- UA de la camisa justo y necesario.

CSTR (MS)

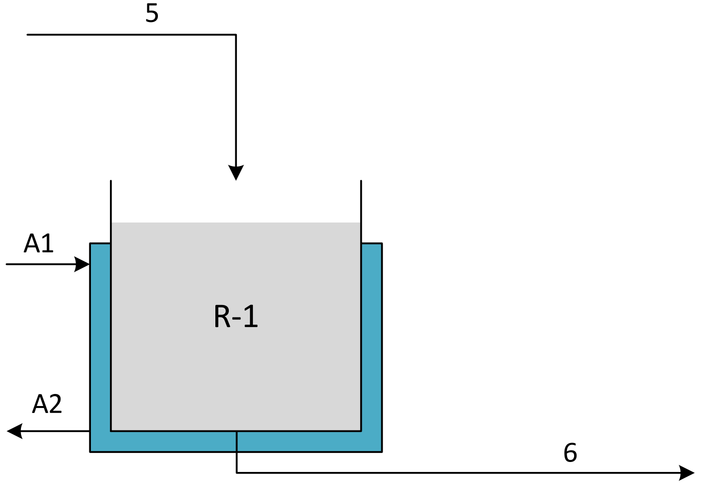
$$m_5 x_{5,i} + r_i V - m_6 x_{6,i} = 0 \qquad i = A, B, C$$

$$r_A = -Ae^{\left(-\frac{E}{RT_6}\right)} x_{6,A} \qquad r_B = Ae^{\left(-\frac{E}{RT_6}\right)} x_{6,A} \qquad r_C = Ae^{\left(-\frac{E}{RT_6}\right)} x_{6,A}$$

$$x_{6,A} + x_{6,B} + x_{6,C} = 1$$

$$m_5 H_5 - Q - m_6 H_6 = 0$$

$$f\left(T_6, P_6, H_6, x_6\right) = 0$$



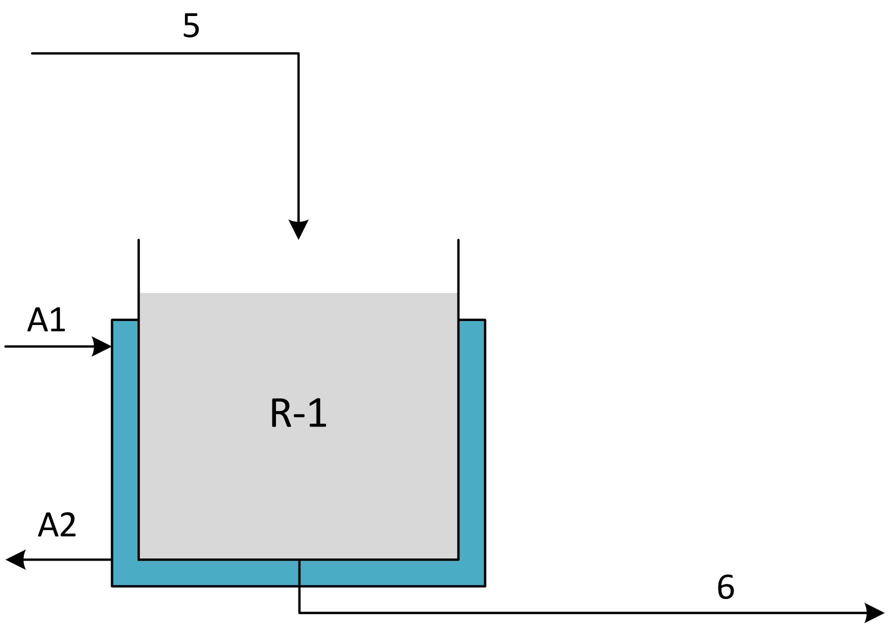
CSTR - Ecuaciones de la camisa (MS)

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

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

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

$$Q = \left(UA\right)\left(T_6 - T_{A2}\right) = 0$$



Proceso Completo modular secuencial

$$m_1 x_{1,i} + m_2 x_{2,i} + m_3 x_{3,i} - m_4 x_{4,i} = 0 \qquad i = A, B, C$$

$$x_{4,A} + x_{4,B} + x_{4,C} = 1$$

$$m_1 H_1 + m_2 H_2 + m_3 H_3 - m_4 H_4 = 0$$

$$f\left(H_4, T_4, P_4, x_4\right) = 0$$

$$m_4 x_{4,i} - m_5 x_{5,i} = 0 \qquad i = A, B, C$$

$$x_{5,A} + x_{5,B} + x_{5,C} = 1$$

$$m_4 H_4 + Q_{HE} - m_5 H_5 = 0$$

$$f\left(H_5, T_5, P_5, x_5\right) = 0$$

$$\left(m_k \; x_{k,A} \; x_{k,B} \; x_{k,C} \; P_k \; T_k \; H_k\right) \; k = 4 \ldots 6$$

$$Q_{HE} \; V \; r_A \; r_B \; r_C \; Q$$

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

$$(UA)$$

32 var

25 ec

7 GL

$$m_5 x_{5,i} + r_i V - m_6 x_{6,i} = 0 \qquad i = A, B, C$$

$$r_A = -Ae^{\left(-E/RT_6\right)} \qquad r_B = Ae^{\left(-E/RT_6\right)} \qquad r_C = Ae^{\left(-E/RT_6\right)} x_{6,A}$$

$$x_{6,A} + x_{6,B} + x_{6,C} = 1$$

$$m_5 H_5 - Q - m_6 H_6 = 0$$

$$f\left(T_6, P_6, H_6, x_6\right) = 0$$

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

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

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

$$Q = (UA)\left(T_6 - T_{A2}\right) = 0$$

Proceso Completo (MS)

$$m_1x_{1,i}+m_2x_{2,i}+m_3x_{3,i}-m_4x_{4,i}=0 \qquad i=A,B,C$$
$$x_{4,A}+x_{4,B}+x_{4,C}=1$$

$$m_1H_1+m_2H_2+m_3H_3-m_4H_4=0$$
$$f\left(H_4,T_4,P_4,x_4\right)=0$$

$$m_4x_{4,i}-m_5x_{5,i}=0 \qquad i=A,B,C$$
$$x_{5,A}+x_{5,B}+x_{5,C}=1$$
$$m_4H_4+Q_{HE}-m_5H_5=0$$
$$f\left(H_5,T_5,P_5,x_5\right)=0$$

$$\left(m_k\ x_{k,A}\ x_{k,B}\ x_{k,C}\ P_k\ T_k\ H_k\right)\ k=4\ldots6$$
$$Q_{HE}\ V\ r_A\ r_B\ r_C\ Q$$
$$m_{A2}T_{A2},P_{A2}\ H_{A2}$$
$$(UA)$$

~~7 GL~~

2 GL

$$m_5x_{5,i}+r_iV-m_6x_{6,i}=0 \qquad i=A,B,C$$
$$r_A=-Ae^{(-E/RT_6)} \qquad r_B=Ae^{(-E/RT_6)} \qquad r_C=Ae^{(-E/RT_6)}\ x_{6,A}$$
$$x_{6,A}+x_{6,B}+x_{6,C}=1$$
$$m_5H_5-Q-m_6H_6=0$$
$$f\left(T_6,P_6,H_6,x_6\right)=0$$

$$m_{A1}-m_{A2}=0$$
$$m_{A1}H_{A1}+Q-m_{A2}H_{A2}=0$$
$$f\left(T_{A2},P_{A2},H_{A2}\right)=0$$
$$Q=(UA)\left(T_6-T_{A2}\right)=0$$

Proceso Completo (MS)

$$m_1x_{1,i}+m_2x_{2,i}+m_3x_{3,i}-m_4x_{4,i}=0 \qquad i=A,B,C$$
$$x_{4,A}+x_{4,B}+x_{4,C}=1$$

$$m_1H_1+m_2H_2+m_3H_3-m_4H_4=0$$
$$f\left(H_4,T_4,P_4,x_4\right)=0$$

$$m_4x_{4,i}-m_5x_{5,i}=0 \qquad i=A,B,C$$
$$x_{5,A}+x_{5,B}+x_{5,C}=1$$
$$m_4H_4+Q_{HE}-m_5H_5=0$$
$$f\left(H_5,T_5,P_5,x_5\right)=0$$

$$\left(m_k\ x_{k,A}\ x_{k,B}\ x_{k,C}\ P_k\ T_k\ H_k\right)\ k=4\ldots6$$
$$Q_{HE}\ V\ r_A\ r_B\ r_C\ Q$$
$$m_{A2}T_{A2},P_{A2}\ H_{A2}$$
$$(UA)$$

2 GL

$$T_5\ \ y\ \ T_6$$

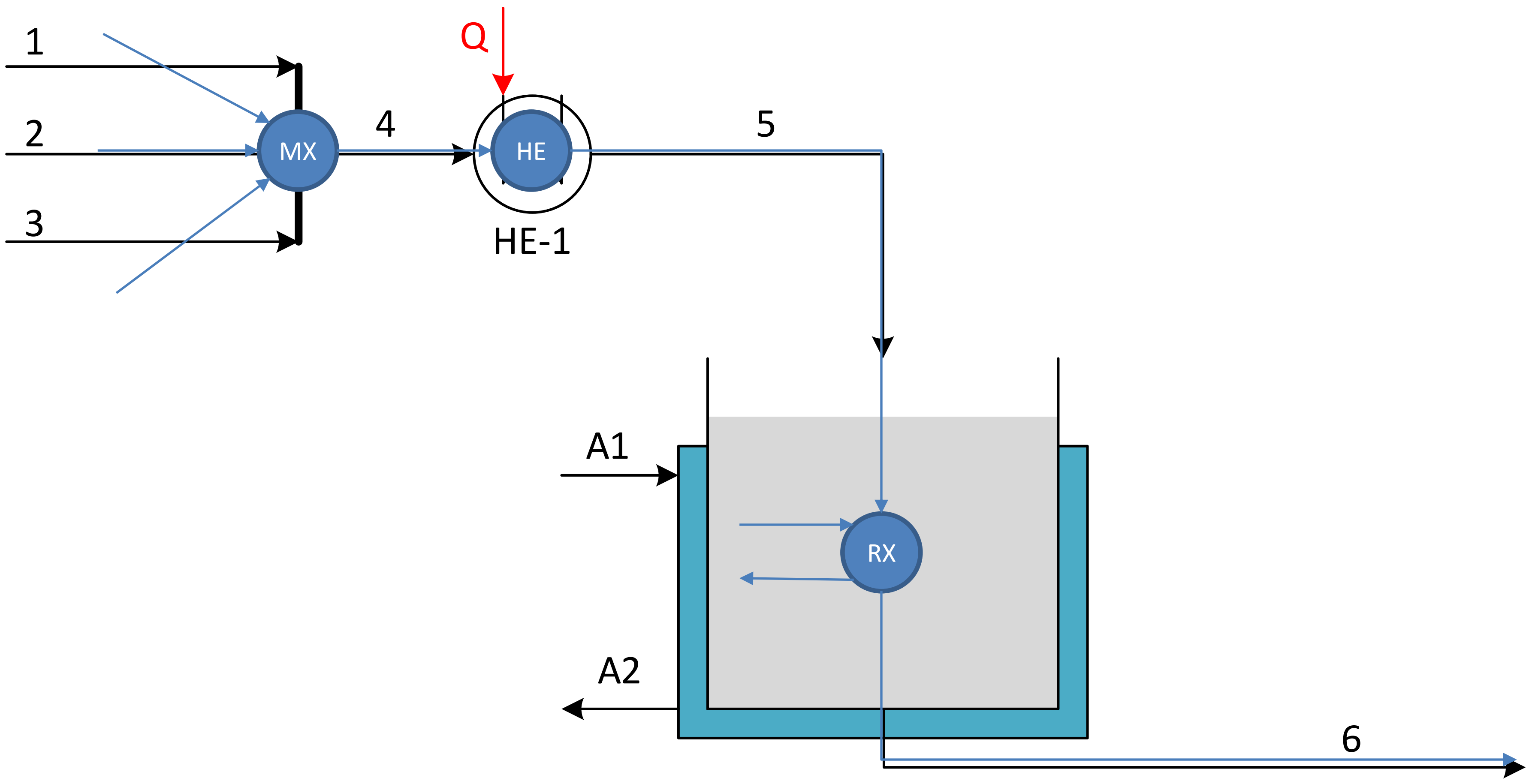
$$m_5x_{5,i}+r_iV-m_6x_{6,i}=0 \qquad i=A,B,C$$
$$r_A=-Ae^{\left(-E/RT_6\right)} \qquad r_B=Ae^{\left(-E/RT_6\right)} \qquad r_C=Ae^{\left(-E/RT_6\right)}\ x_{6,A}$$
$$x_{6,A}+x_{6,B}+x_{6,C}=1$$
$$m_5H_5-Q-m_6H_6=0$$
$$f\left(T_6,P_6,H_6,x_6\right)=0$$

$$m_{A1}-m_{A2}=0$$
$$m_{A1}\ H_{A1}+Q-m_{A2}\ H_{A2}=0$$
$$f\left(T_{A2},P_{A2},H_{A2}\right)=0$$
$$Q=(UA)\left(T_6-T_{A2}\right)=0$$

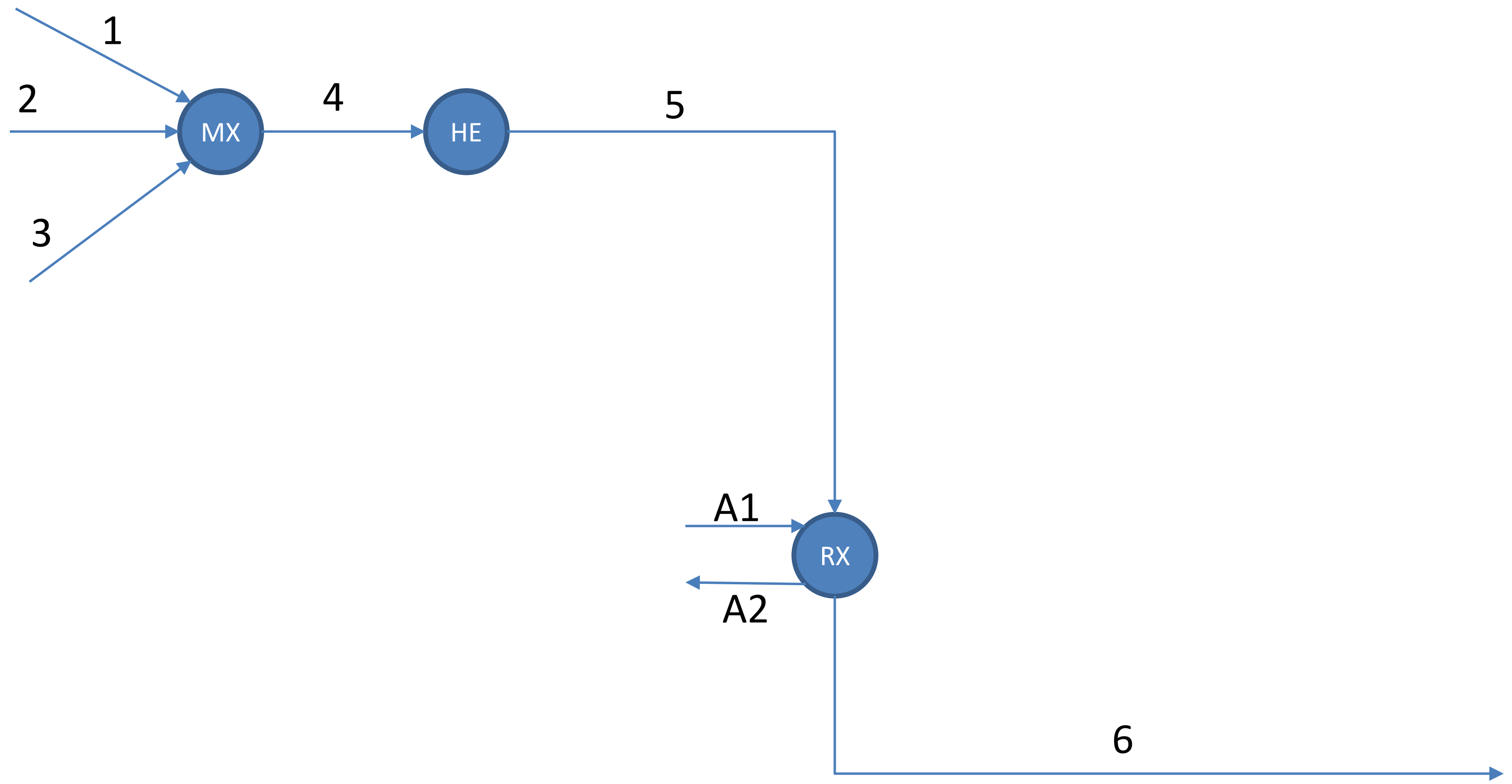
Resolución

- Aplicamos la filosofía modular secuencial a cada uno de los equipos.
- Esto implica que se debe encontrar una secuencia de resolución ya que para poder resolver un equipo se deben conocer sus entradas.
- Para encontrar esta secuencia podemos aplicar los algoritmos de PRyO o analizar el DFI.
- Tener en cuenta que se debe encontrar una secuencia para resolver el modelo del proceso y otra individual para cada equipo.

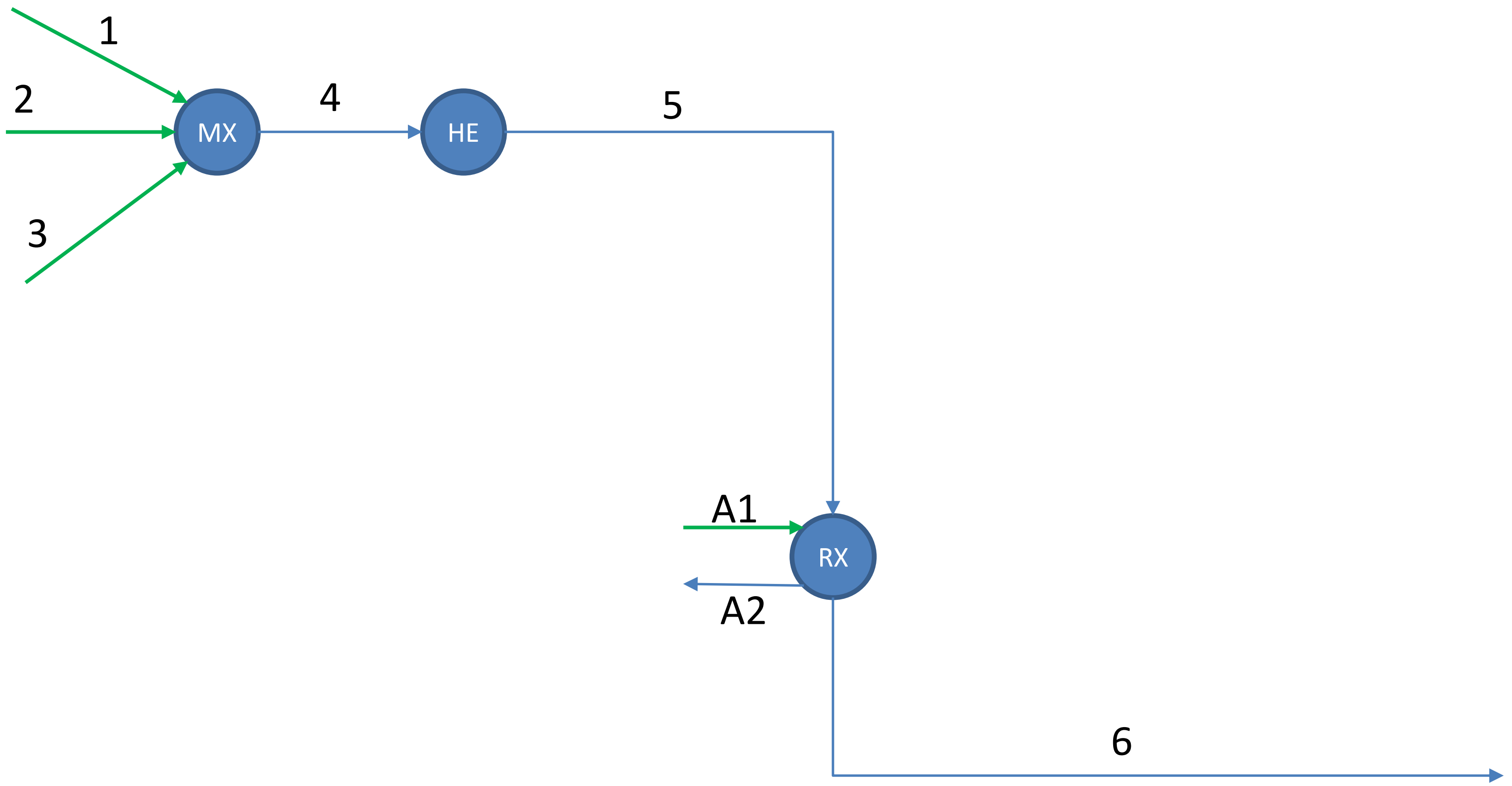
Flowsheet



DFI



DFI – Secuencia de resolución



Resolución

- Una vez que tenemos el orden de resolución del proceso solo resta definir las secuencias de resolución para cada uno de los equipo según las variables seleccionadas para cerrar los grados de libertad.

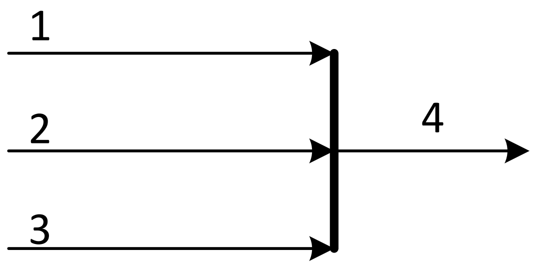
Nodo sumador sin cambio de fase (MS)

$$m_1 x_{1,i} + m_2 x_{2,i} + m_3 x_{3,i} - m_4 x_{4,i} = 0 \qquad i = A, B, C$$

$$x_{4,A} + x_{4,B} + x_{4,C} = 1$$

$$m_1 H_1 + m_2 H_2 + m_3 H_3 - m_4 H_4 = 0$$

$$f\left(H_4, T_4, P_4, x_4\right) = 0$$



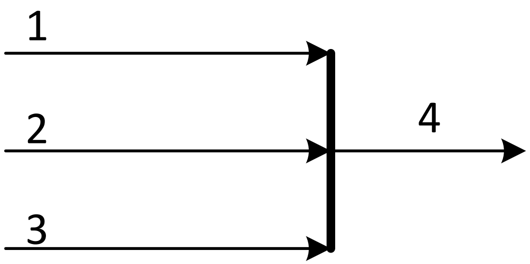
Nodo sumador sin cambio de fase (resolución)

$$m_4 = m_1 + m_2 + m_3$$

$$x_{4,i} = \frac{m_1 x_{1,i} + m_2 x_{2,i} + m_3 x_{3,i}}{m_4} \qquad i = A, B, C$$

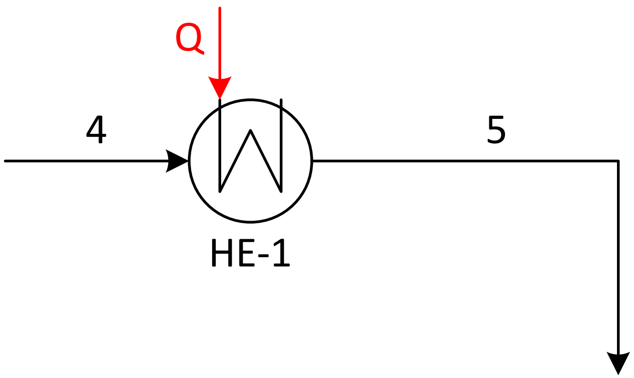
$$H_4 = \frac{m_1 H_1 + m_2 H_2 + m_3 H_3}{m_4}$$

$$f\left(H_4, T_4, P_4, x_4\right) = 0 \rightarrow T_4$$



Modelo de un Heater (MS)

$$m_4 x_{4,i} - m_5 x_{5,i} = 0 \qquad i = A, B, C$$



$$x_{5,A} + x_{5,B} + x_{5,C} = 1$$

$$m_4 H_4 + Q_{HE} - m_5 H_5 = 0$$

$$f\left(H_5, T_5, P_5, x_5\right) = 0$$

Cuidado, sólo en este ejemplo conocemos T_5

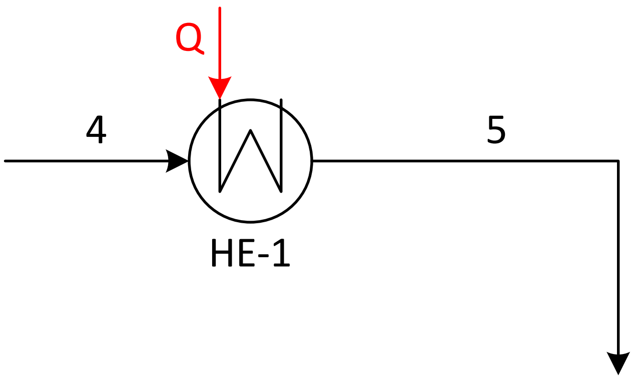
Modelo de un Heater (resolución)

$$m_5 = m_4$$

$$x_{5,i} = x_{4,i} \qquad i = A, B, C$$

$$f\left(H_5, T_5, P_5, x_5\right) = 0 \rightarrow H_5$$

$$Q_{HE} = m_5 H_5 - m_4 H_4$$



CSTR (MS)

$$m_5 x_{5,i} + r_i V - m_6 x_{6,i} = 0 \qquad i = A, B, C$$

$$r_A = -Ae^{\left(-\frac{E}{RT_6}\right)} x_{6,A} \qquad r_B = Ae^{\left(-\frac{E}{RT_6}\right)} x_{6,A} \qquad r_C = Ae^{\left(-\frac{E}{RT_6}\right)} x_{6,A}$$

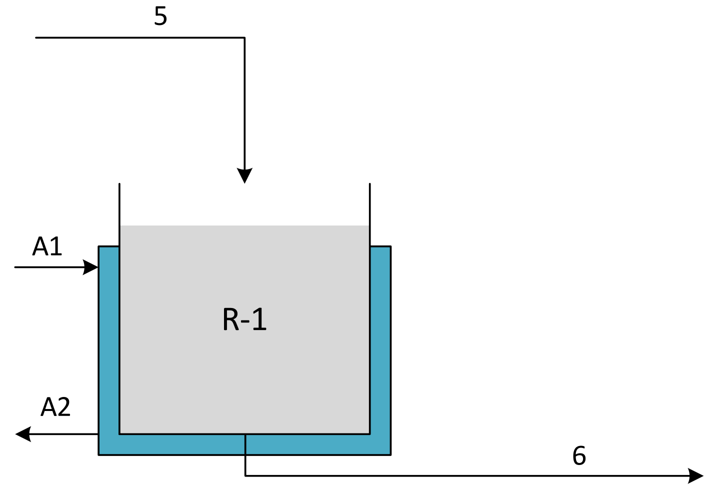
$$x_{6,A} + x_{6,B} + x_{6,C} = 1 \qquad m_5 H_5 - Q - m_6 H_6 = 0 \qquad f\left(T_6, P_6, H_6, x_6\right) = 0$$

$$m_{A1} - m_{A2} = 0 \qquad m_{A1} H_{A1} + Q - m_{A2} H_{A2} = 0$$

$$f\left(T_{A1}, P_{A1}, H_{A1}\right) = 0$$

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

$$Q = (UA)\left(T_6 - T_{A2}\right) = 0$$



Cuidado, sólo en este ejemplo conocemos T_6

CSTR (Resolución)

$$\left(x_{6,i}\right)^*$$

$$r_A = -Ae^{\left(-\frac{E}{RT_6}\right)} x_{6,A} \qquad r_B = Ae^{\left(-\frac{E}{RT_6}\right)} x_{6,A} \qquad r_C = Ae^{\left(-\frac{E}{RT_6}\right)} x_{6,A}$$

$$m_6 = m_5 + V\sum_i r_i \rightarrow m_6 = m_5 + V\left(-r_A\right)$$

$$x_{6,i} = \frac{m_5 x_{5,i} + r_i V}{m_6} \qquad i = A, B, C$$

$$f\left(T_6, P_6, H_6, x_6\right) = 0 \rightarrow H_6$$

$$Q = m_5 H_5 - m_6 H_6$$

$$m_{A2} = m_{A1}$$

$$H_{A2} = \frac{m_{A1} H_{A1} + Q}{m_{A2}}$$

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

$$\left(UA\right) = \frac{Q}{\left(T_6 - T_{A2}\right)}$$

Es un reactor isotérmico

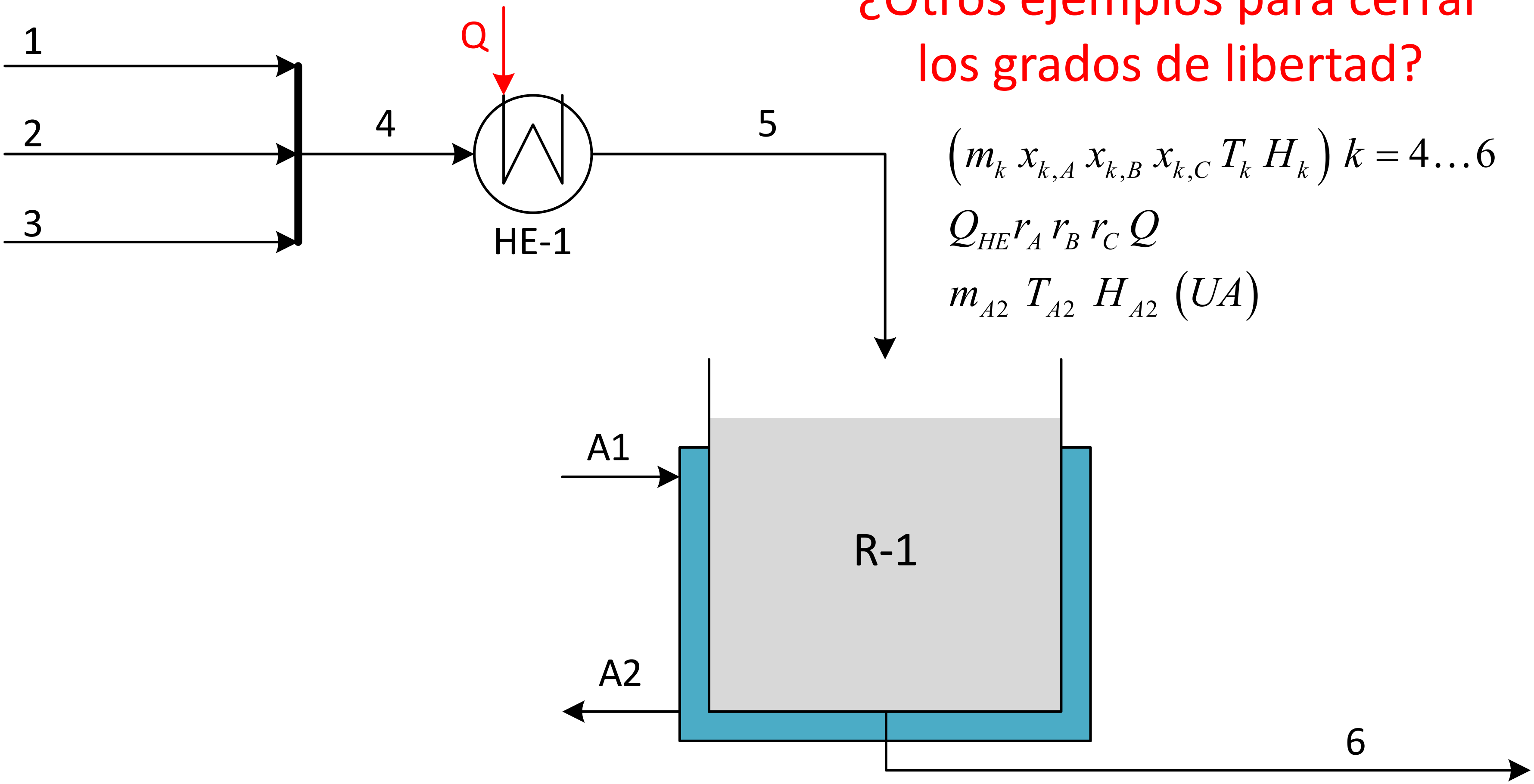
Flowsheet

¿Otros ejemplos para cerrar los grados de libertad?

$$\left(m_k\ x_{k,A}\ x_{k,B}\ x_{k,C}\ T_k\ H_k\right)\ k=4\ldots6$$

$$Q_{HE}\, r_A\ r_B\ r_C\ Q$$

$$m_{A2}\ T_{A2}\ H_{A2}\ \left(UA\right)$$

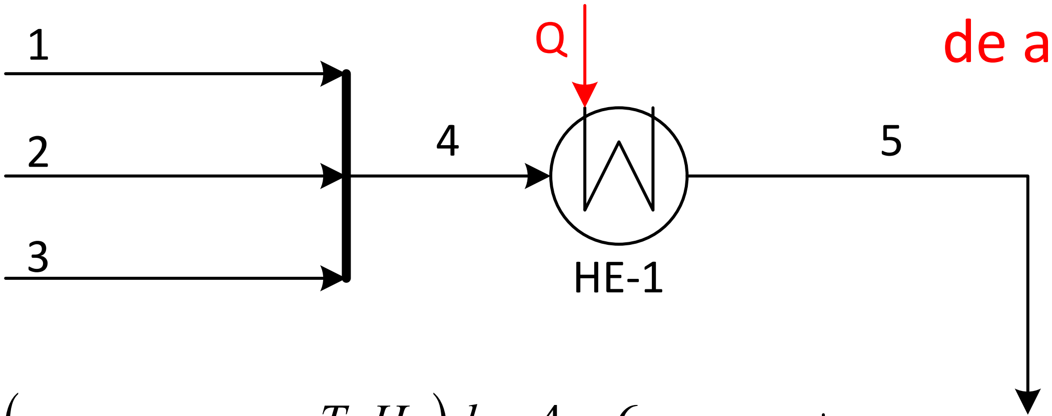


Resolución

- Cambiar las variables seleccionadas para cerrar los grados de libertad solo modifica la secuencia de los equipos pero no la del proceso.
- En el futuro veremos que al utilizar un simulador de procesos se debe seguir la misma secuencia que se propuso para resolver el proceso.
- Definir las secuencias de resolución para cada equipo suponiendo Q_{HE} y *(UA)* conocidos.
- Si nuestro problema no es modular secuencial se deberán realizar las variaciones pertinentes para transformarlo en uno de este tipo.

Propuesta para pensar y realizar fuera de clase

Suponer que deseo conocer el flujo de agua de enfriamiento



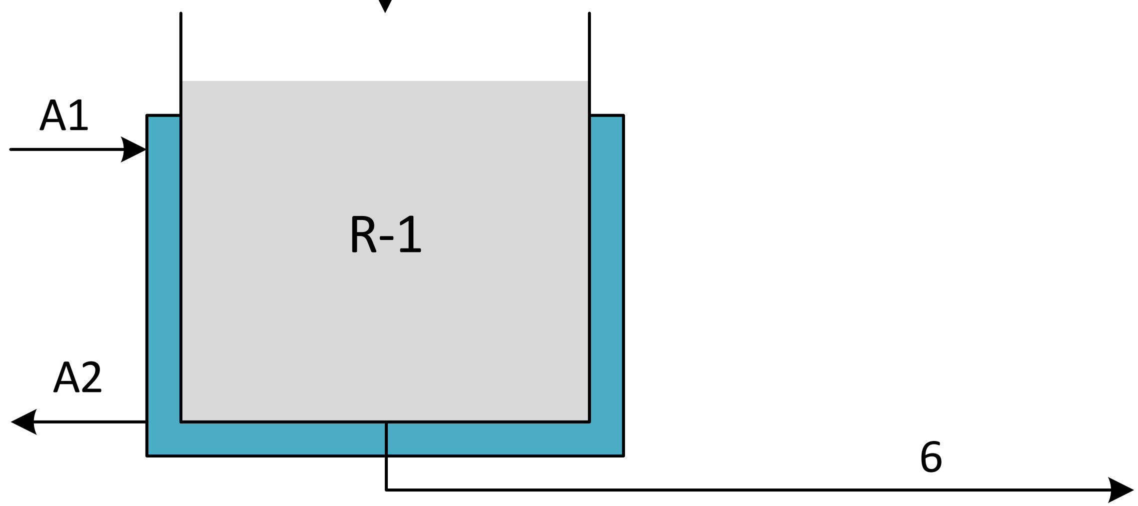
$$\left(m_k \; x_{k,A} \; x_{k,B} \; x_{k,C} \; T_k \; H_k\right) \; k = 4 \ldots 6$$

$$Q_{HE} \; r_A \; r_B \; r_C \; Q$$

$$m_{A2} T_{A2}, H_{A2}, (UA)$$

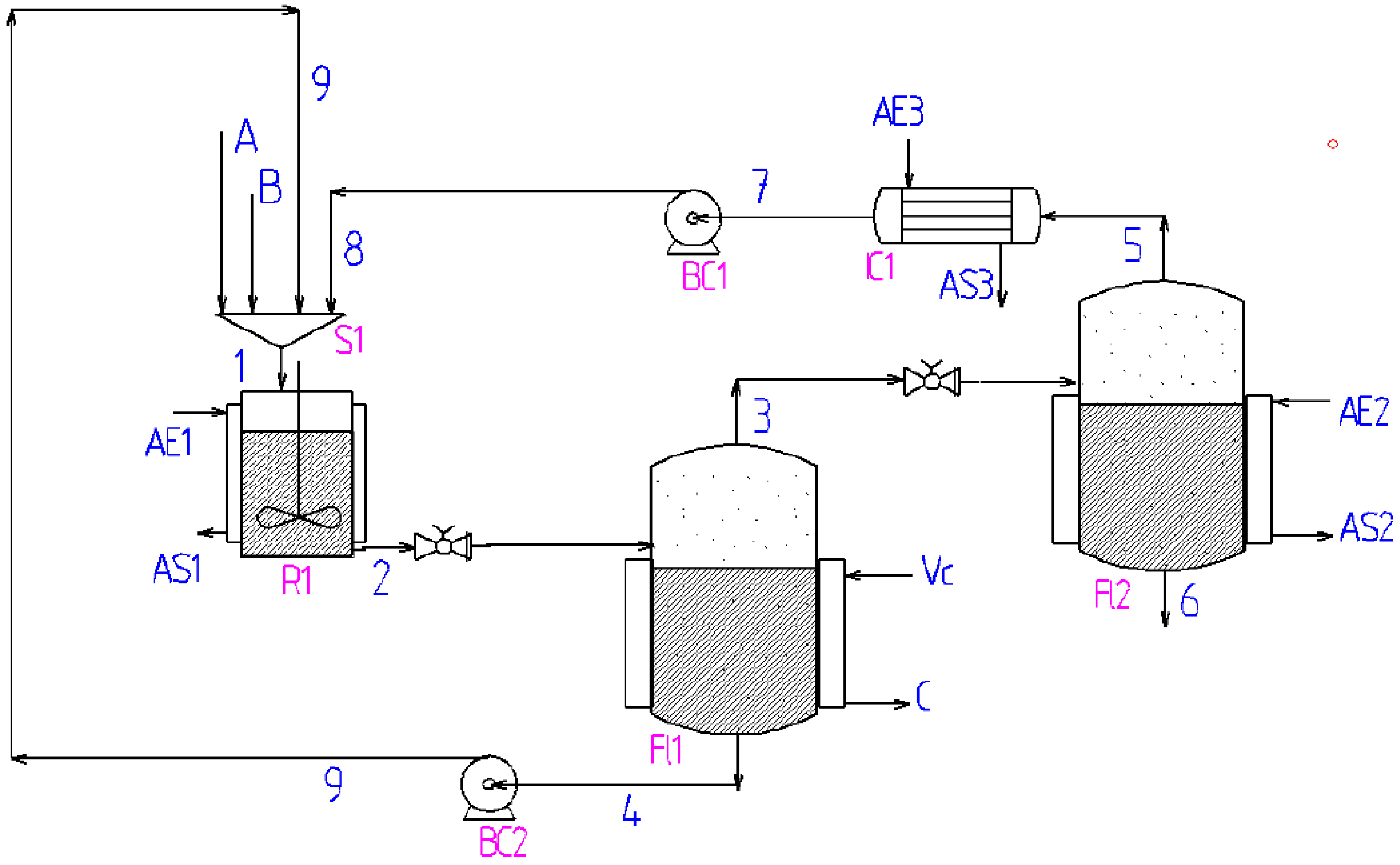
$$m_{A1}$$

Se suma como variable y los grados de libertad pasan a ser 3. El problema deja de ser modular secuencia.

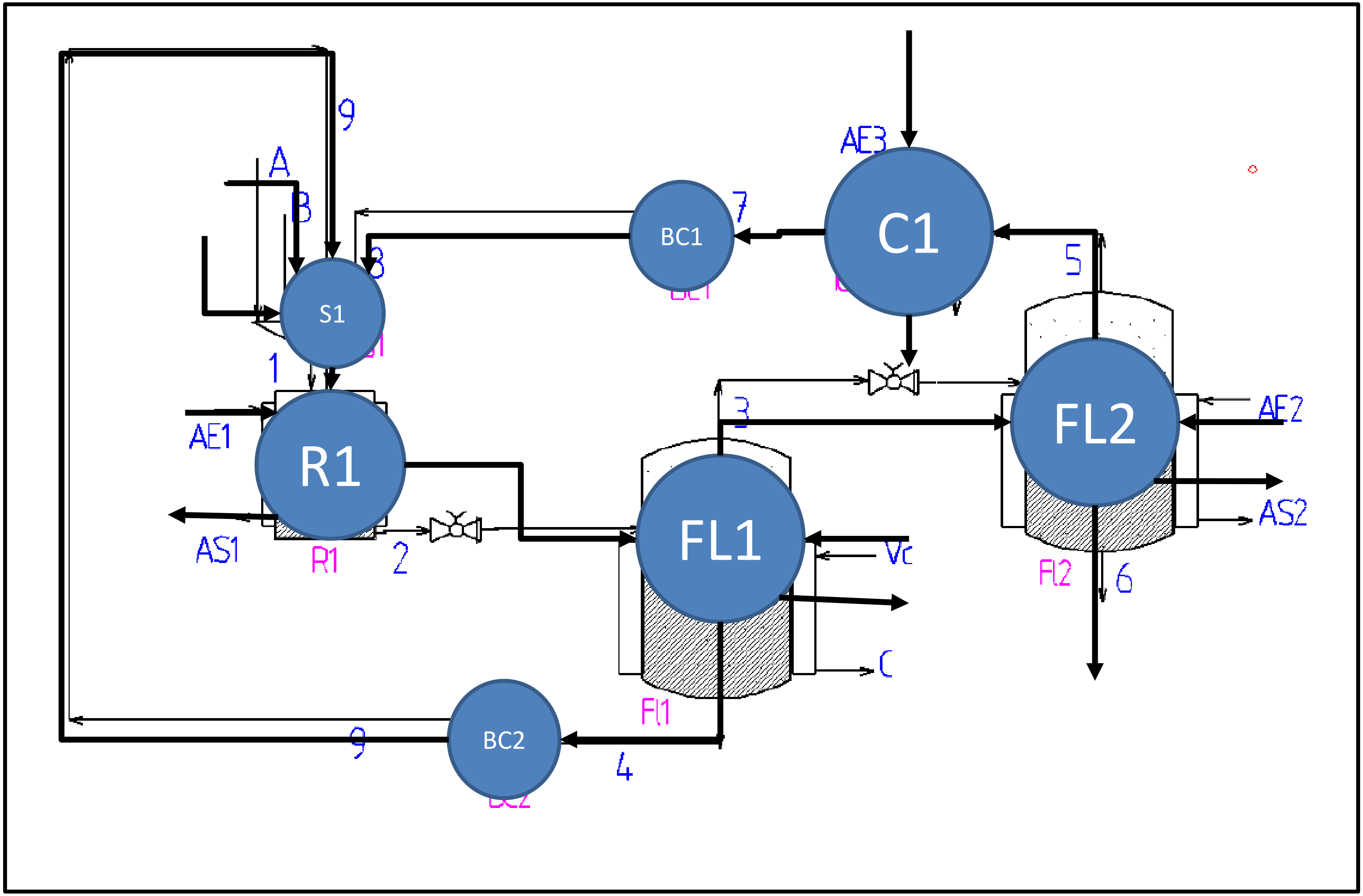


¿Como lo solucionamos?

Ejemplo 2: Encontrar una secuencia de resolución (filosofía MS)

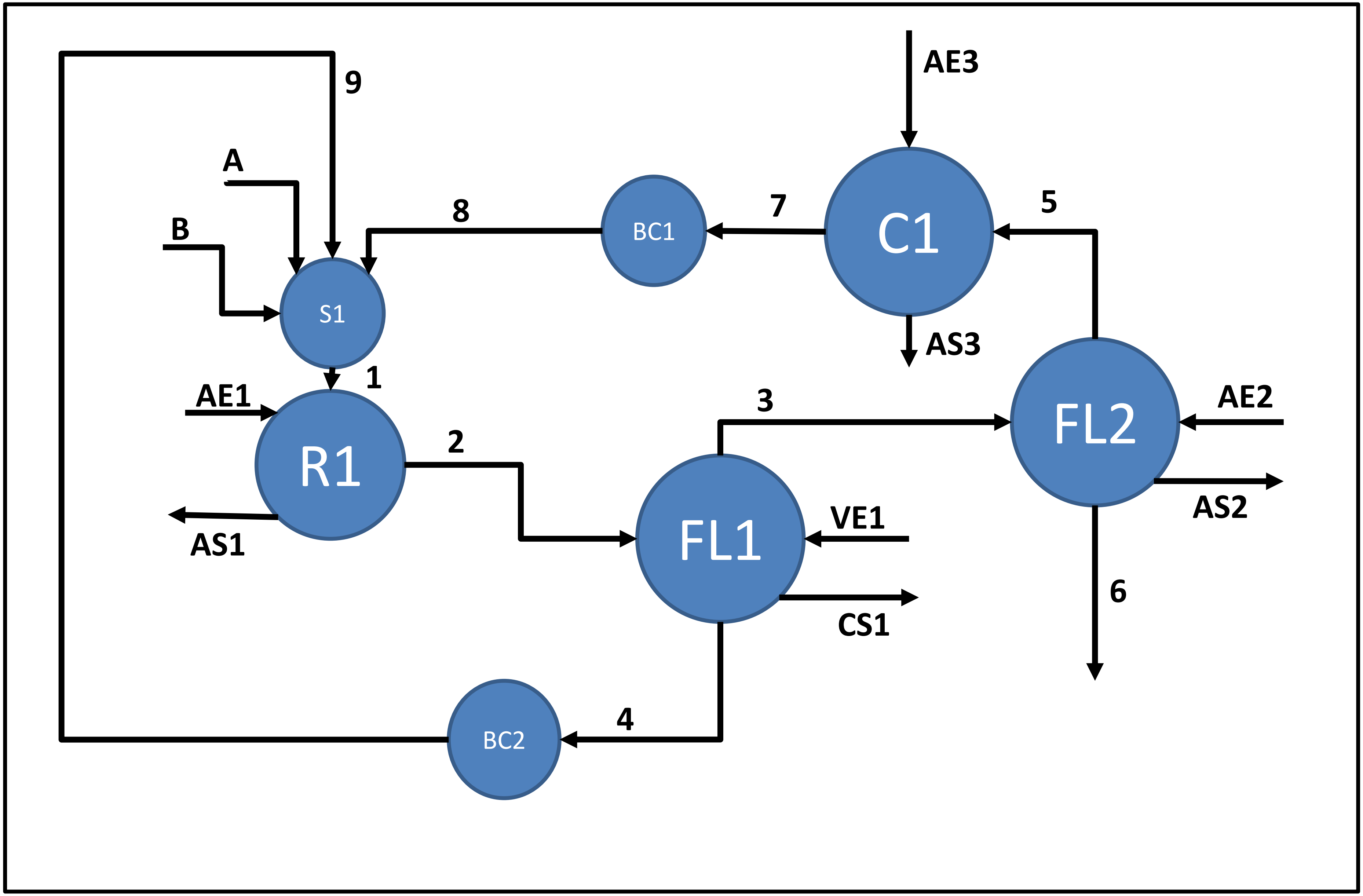


Flowsheet

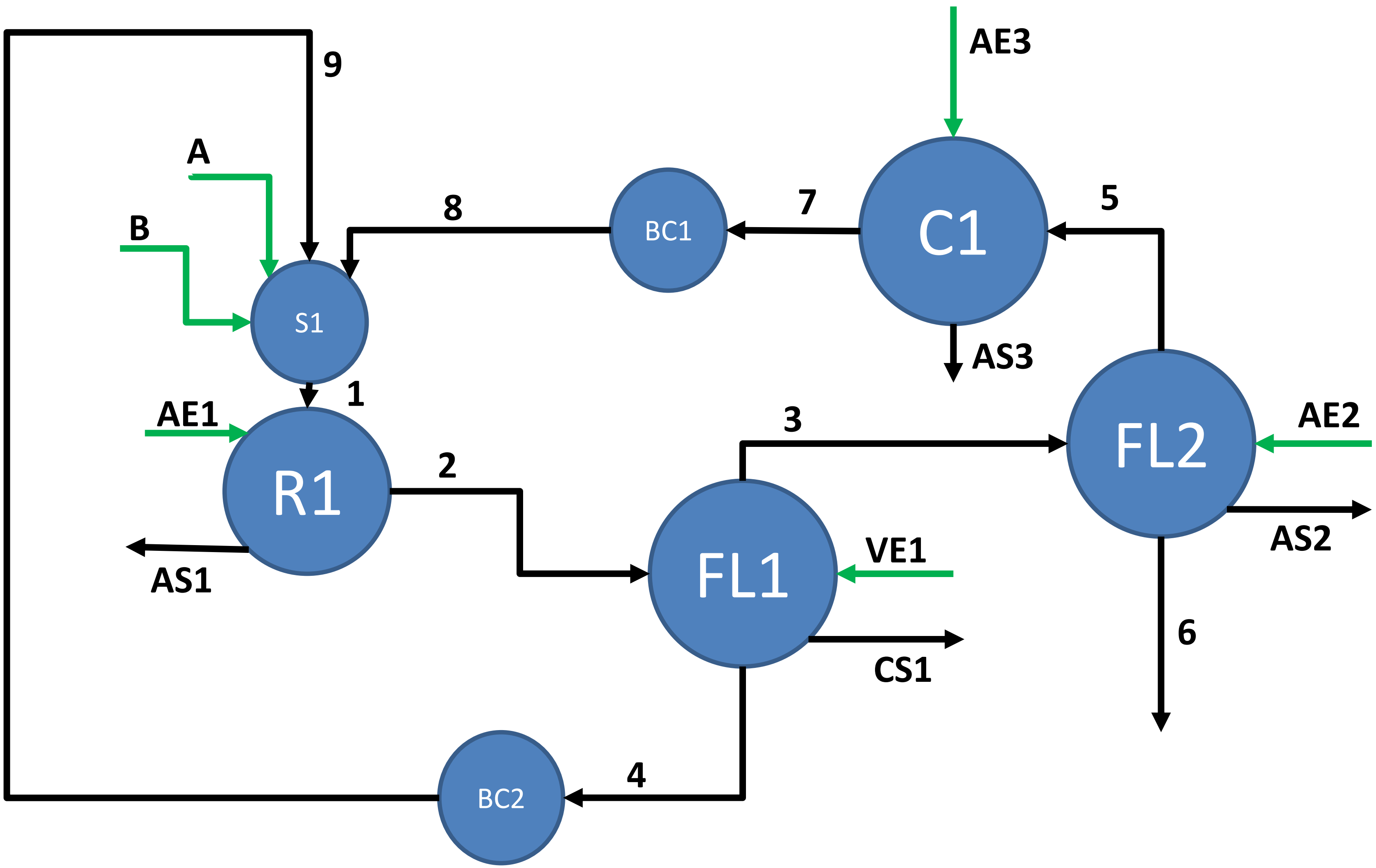


9
A
B
S1
1
8
BC1
7
AE3
C1
5
AE1
R1
AS1
R1
2
3
FL1
FL2
AE2
AS2
Fl2
6
Fl1
BC2
9
4

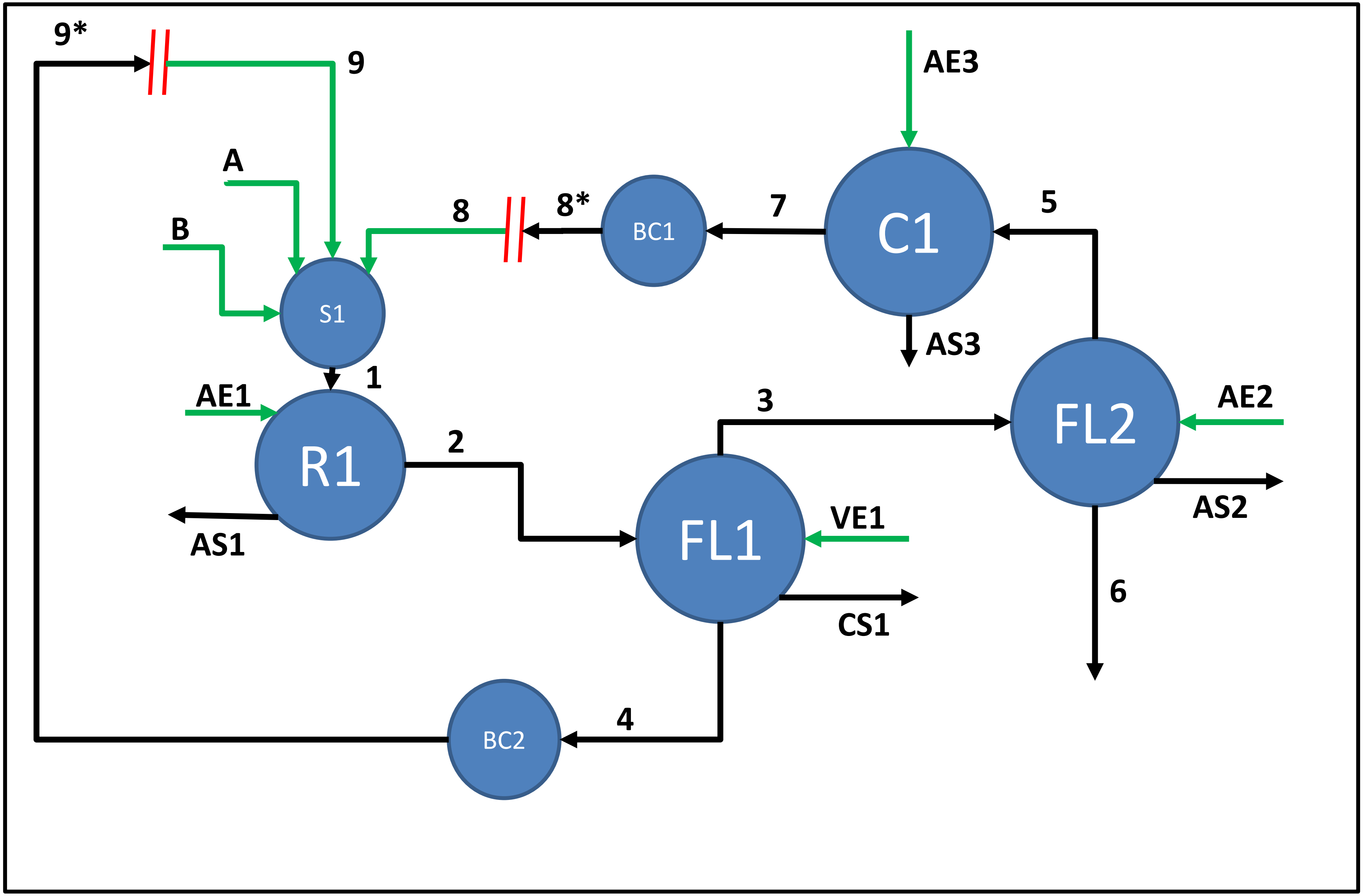
Flowsheet – Proponer Secuencia de Resolución



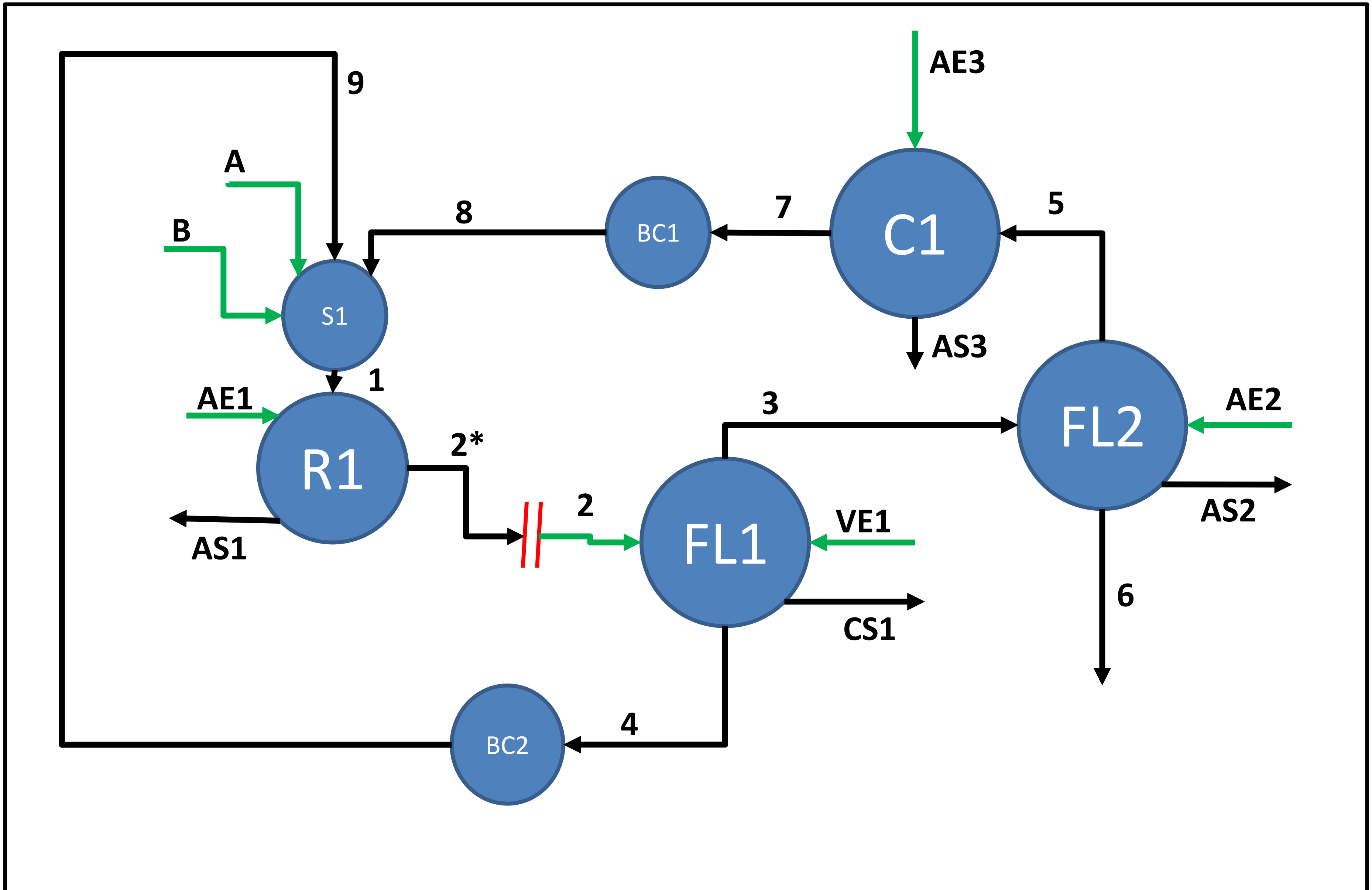
Flowsheet – Proponer Secuencia de Resolución



Flowsheet – Proponer Secuencia de Resolución



Flowsheet – Proponer Secuencia de Resolución



Flowsheet – Proponer Secuencia de Resolución