

Curso de Postgrado de Actualización

MODELADO, SIMULACIÓN Y SINTESIS DE PROCESOS

S. Benz, A. Santa Cruz, N. Scenna

Centro de Aplicaciones Informáticas en el Modelado de
Ingeniería

UTN - Facultad Regional Rosario

2008

Biblioteca de Módulos de Equipos en un Simulador Modular Secuencial.

- *A través de la simulación de procesos por computadora se resuelven los balances de materia y energía de una planta dada.*



En un simulador de procesos, con los módulos representativos de los equipos y fisicoquímica asociada a los mismos, se tiende a reproducir la operación real de la planta, la cual genera las transformaciones necesarias para alcanzar el (los) producto (s) deseado (s).

INTRODUCCIÓN A LAS CARACTERÍSTICAS DE UN SIMULADOR MODULAR SECUENCIAL

ESTRUCTURA DE UN SIMULADOR MODULAR SECUENCIAL EN ESTADO ESTACIONARIO

Para comprender el desempeño de un simulador modular secuencial es necesario estudiar la estructura y la arquitectura del mismo.

Básicamente podríamos diferenciar tres funciones o secciones perfectamente diferenciadas:

1. La lógica central o general del simulador.

2. Sección encargada de la estimación de las propiedades fisicoquímicas.

1. La biblioteca de módulos de equipos: por ejemplo válvulas, intercambiadores, separador flash, bombas, sumadores, divisores, compresores, reactores, columnas de destilación, etc.

Lógica general o central o de administración

Comprende :

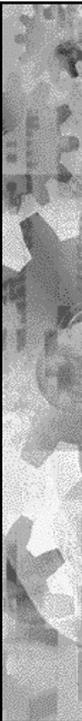
- ***La sección de entrada***
- ***La sección de salida de resultados***
- ***La lógica general de administración***

La lógica general de administración es la que está encargada de administrar los distintos procesos que deben ejecutarse para lograr la simulación de una planta dada.

➤ ***Lograda la convergencia, procederá a detener el proceso de simulación, almacenar en el lugar correspondiente todos los valores convergidos de las corrientes del proceso, los valores y parámetros internos de los equipos, por ej.: perfiles internos de torres, composiciones, caudales, temperatura y presiones de cada etapa, etc.***

➤ ***Si no se lograra convergencia luego de una cantidad de iteraciones previamente estipulada, la lógica central del simulador detendrá el proceso iterativo e informará al usuario, por medio del mensaje de error que corresponda.***

- 
- **En un simulador modular secuencial, se debe almacenar la topología del proceso (DFI), se necesita ejecutar algoritmos de particionado, rasgado y ordenamiento, para detectar los ciclos, y definir las corrientes iteradoras a los efectos de solicitar al usuario sus valores iniciales. También se debe solicitar al usuario los valores de inicialización para las variables iteradoras en cada equipo de la planta, si no es posible hacerlo automáticamente.**
 - **En cuanto al sistema de entrada/salida de datos, es una parte fundamental de todo simulador de uso general. En efecto, deberá caracterizarse por su flexibilidad y amigabilidad al usuario.**



La adecuada selección de las variables especificadas y de los parámetros de funcionamiento para los módulos; sus modos de cálculo y la fisicoquímica correspondiente son los responsables de la convergencia o no del sistema y del tiempo de cómputo total utilizado



La responsabilidad de las hipótesis adoptadas, los niveles de cálculo seleccionados, y la interpretación de los resultados, será siempre una tarea exclusiva del operador del simulador, es decir el ingeniero de procesos.

Desarrollo de Módulos Generales para un Simulador Modular.

➤ *Esquema de funcionamiento de un módulo generalizado:*

Se deben contemplar las posibles variantes o tipos de datos a manipular (corrientes de entrada, salidas, etc.), los grados de libertad o parámetros a especificar en cada equipo, interfaz gráfica, filosofía de cálculo, relación con el sistema general, etc.

➤ *Interrelación módulo de equipo-base de datos:*

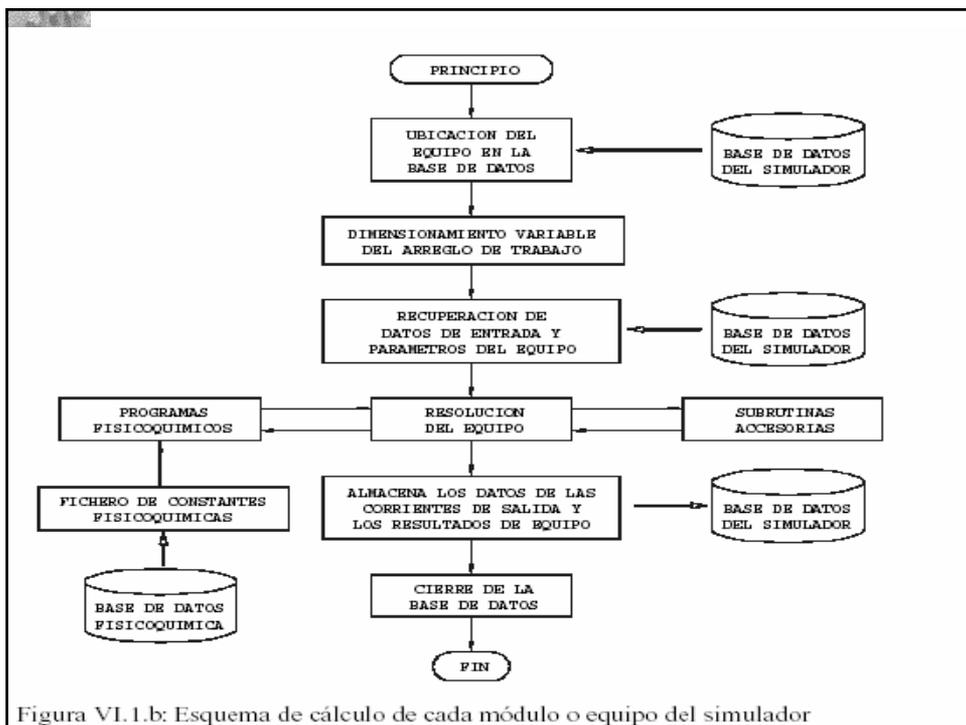
Estructura general de conexión (intercambio de datos) entre el módulo de simulación (equipo) y el sistema de almacenamiento de datos del simulador (constantes fisicoquímicas, parámetros de equipos, sistema de entrada-salida, etc).

➤ *Niveles de cálculo:*

En este punto se identifica la rigurosidad del cálculo que se desea (grados de simplificación)

➤ *Interrelación módulo de equipo-fisicoquímica:*

Describe el esquema que relaciona los módulos de equipos con los programas de estimación de propiedades fisicoquímicas.



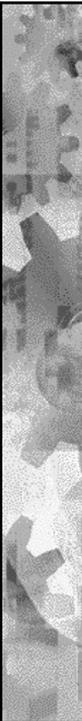
MODELADO DE EQUIPOS PARA SIMULACIÓN DE PROCESOS MODULAR SECUENCIAL

- *La resolución de un módulo de simulación de un equipo en particular significa obtener como resultados las variables de salida a partir de las variables de entrada, parámetros de funcionamiento y fisicoquímica*
- *Desarrollaremos una noción acerca de la tarea de lograr la construcción de los módulos a través de ejemplos sencillos, a los efectos de poder enfrentar con éxito la construcción de módulos específicos.*



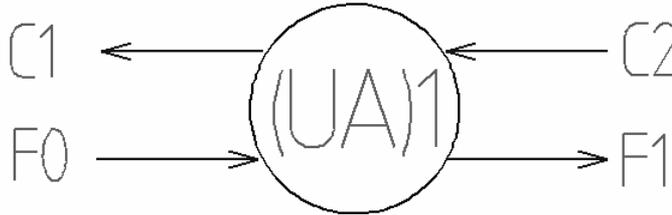
Características fundamentales de los módulos de simulación de equipos :

- *Tipo o clase: esto es la operación unitaria que representa,*
- *La topología: la cantidad de entradas y salidas, variantes operativas, etc (diferentes variantes o versiones del mismo equipo)*
- *La rigurosidad de cálculo, que implica los distintos conjuntos de hipótesis que definen el nivel de exactitud de los resultados provistos.*



**Ejemplo: módulo
simplificado de
intercambio de calor**

- **Suponemos una filosofía modular secuencial, que impone como vimos la especificación de las corrientes de entrada al módulo.**
- **Deben plantearse las ecuaciones de balance, y obtener los grados de libertad del sistema**



Hipótesis

- **Se contempla únicamente transferencia de energía entre dos fluidos sin cambio de fases.**
- **El valor $(U A)$ es suficiente como para alcanzar las temperaturas de salida especificadas. U constante.**
- **No se considera caída de presión en ambos fluidos.**
- **No se considera la influencia de la geometría en el intercambio.**
- **Sistema adiabático.**

➤ **Balance de materia**

Puesto que cada corriente entra y sale del equipo sin intercambiar fluidos unas con otras el caudal de salida es igual al de entrada

$$C_1 = C_2$$

$$F_0 = F_1$$

Donde:

C_i : caudales másicos de la corriente caliente

F_i : caudales másicos de la corriente fría

➤ ***Relaciones fisicoquímicas***

➤ ***Debido a las simplificaciones introducidas, solamente será necesario el cálculo de la capacidad calorífica de los fluidos, que en forma funcional se puede expresar como:***

$$C_p = C_p (T, P, X_i, \dots, X_{NC})$$

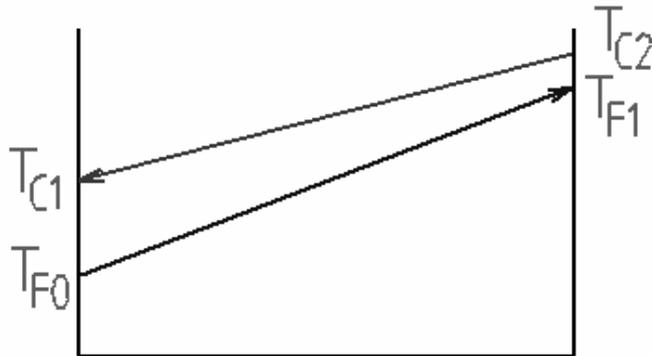
X_{i=1...NC} composición de cada componente (i) en la mezcla de NC componentes.

➤ ***Balance de cantidad de movimiento***

Se ha supuesto que la presión de descarga es igual a la de entrada para ambos fluidos:

$$P_{e_2} = P_{s_2}$$

➤ **Balace de energía:**



- Fluido caliente: (Cp no es función de la temperatura)

$$Q = m_C * C_{p_C} * (T_{C2} - T_{C1}) \quad (1)$$

- Fluido frío:

$$Q = m_F * C_{p_F} * (T_{F1} - T_{F0}) \quad (2)$$

- Calor intercambiado:

$$Q = (U.A)_1 \frac{(T_{C1} - T_{F0}) - (T_{C2} - T_{F1})}{\ln \frac{(T_{C1} - T_{F0})}{(T_{C2} - T_{F1})}} \quad (3)$$

Especificaciones

- *Se definen los grados de libertad (número de ecuaciones menos incógnitas). En este caso $(2 \times NC) + 7$.*
- *Se cubren con los valores de las corrientes de entrada $((2 \times NC + 6))$ y el siguiente parámetro de operación $(U A)$*

Donde:

U (coeficiente global de intercambio) y

A (área total de transferencia).

- *Tenemos un sistema de 3 ecuaciones con 3 incógnitas $(Q, T_{C1}$ y $T_{F1})$.*
- *Para evitar los inconvenientes inherentes a la resolución de sistemas de ecuaciones no lineales, se planteará un esquema de resolución que se basa en el reemplazo de Q .*
- *Así, reemplazando la Q de las ecuaciones 2 y 3 por la de la ecuación 1, el sistema se reduce a sólo dos ecuaciones con dos incógnitas $(T_{C1}$ y $T_{F1})$*

$$m_C * Cp_C * (T_{C2} - T_{C1}) = m_F * Cp_F * (T_{F1} - T_{F0}) \quad (4)$$

$$m_C * Cp_C * (T_{C2} - T_{C1}) = (U.A)_1 \frac{(T_{C1} - T_{F0}) - (T_{C2} - T_{F1})}{Ln \frac{(T_{C1} - T_{F0})}{(T_{C2} - T_{F1})}} \quad (5)$$

Se puede despejar una de las incógnitas de la ecuación (4) (ejemplo T_{F1}) y reemplazarla en la ecuación (5). De esta forma se reduce el problema a una sola ecuación no lineal con una sola incógnita que se resuelve por los métodos numéricos tradicionales

$$T_{F1} = \frac{m_C * Cp_C * (T_{C2} - T_{C1}) + m_F * Cp_F * T_{F0}}{m_F * Cp_F} \quad (6)$$

Reemplazando T_{F1} en la ecuación (5) se llega a una función que se puede igual a cero

$$f(T_{C1}) = 0 \quad (7)$$

Para resolver la ecuación (7) se puede utilizar el método de Newton-Raphson



Módulo para la simulación de evaporadores flash



Descripción:

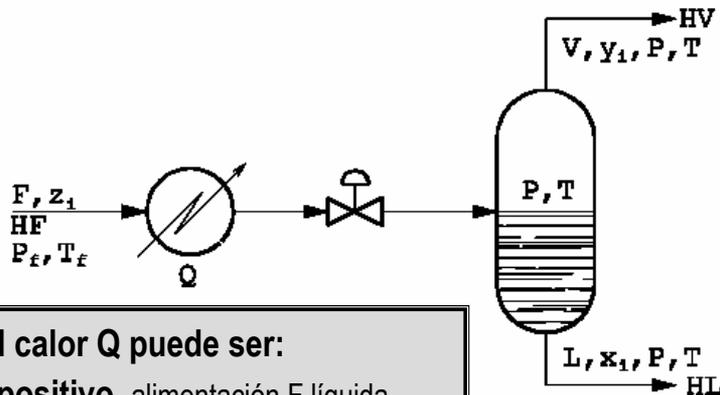
- *Es un equipo que consiste de una etapa simple, en equilibrio,*
- *La alimentación es parcialmente vaporizada o condensada*
- *El modelo de evaporador flash puede contemplar:*
 - *al equilibrio líquido-vapor (L-V), líquido-líquido (L-L) o bien a la formación de dos fases líquidas en equilibrio con la fase vapor (L-L-V).*
 - *mezclas multicomponentes*
 - *comportamientos no - ideales*

Desde el punto de vista conceptual

➤ Este sencillo equipo de proceso está relacionado con el modelado de varias operaciones unitarias o cálculos diversos:

- cálculos de las temperaturas de rocío o burbuja,
- el estado de fase de una corriente dada,
- el cálculo de equipos hervidores y condensadores parciales,
- válvulas, bombas y todo equipo que procese mezclas multicomponentes luego de operaciones de transferencia de calor y/o cantidad de movimiento.
- los equipos de contacto múltiple etapa en contracorriente para la separación de mezclas multicomponentes (extractores líquido-líquido, absorbedores, strippers, columnas de destilación, etc) constituyen, en principio, una cascada de equipos flash conectados de cierta forma, según sea la topología del separador.

Esquema representativo de un equipo flash estacionario



El calor Q puede ser:

- **positivo**, alimentación F líquida
- **negativo**, con F vapor, comportándose como un condensador parcial

- 
- **Modelo**
 - **Módulo para simulador secuencial modular (conozco entradas, calculo salidas).**
 - **La alimentación intercambia calor o no según el tipo de flash**
 - **La alimentación se expande en forma adiabática a través de la válvula, en caso de existir.**
 - **Se producen dos fases, las cuales son separadas gracias al tiempo de contacto que permite el tambor separador.**

El flash es todo el sistema, no sólo el tanque.

Hipótesis:

- 
- **El vapor y líquido tienen el tiempo de contacto suficiente para lograr equilibrio (no se tienen en cuenta los parámetros geométricos).**
 - **La presión de líquido y vapor son las del tambor separador ($\Delta P = 0$). Esto implica que no consideramos componentes usuales en el equipo como ser separadores de gotas, etc, y la caída de presión que se origina en ellos.**
 - **Existe sólo una fase líquida y vapor (L-V).**
 - **No existen reacciones químicas.**

Ecuaciones

➤ **Balance de materia global:**

$$F = L + V \quad (1)$$

➤ **Balance de materia por componente:**

$$Fz_i = Vy_i + Lx_i \quad (2)$$
$$i = 1, \dots, NC$$

F: caudal molar de la alimentación, **V:** caudal molar de la corriente vapor

L: caudal molar de la corriente líquida

Z_i: fracción molar del componente *i* en la alimentación

Y_i: fracción molar del componente *i* en la corriente vapor.

X_i: fracción molar del componente *i* en la corriente líquida.

i = 1, ..., NC (indica que existirán NC ecuaciones)

➤ **Balance de energía:**

$$Q + F * H_F = V * H_V + Lh_L \quad (3)$$

➤ **Relaciones de equilibrio:**

$$y_i = k_i * x_i \quad (4)$$

Q: calor incorporado (o extraído) en el equipo de intercambio térmico

H_F: entalpía específica de la alimentación

H_L: entalpía del líquido

H_V: entalpía específica del vapor

K_i: constante de equilibrio para el componente *i*. (*i*:1, ..., NC).

➤ **Relaciones termodinámicas:**

$$h_L = f(P, T, x) \quad (5)$$

$$H_F = f(T_F, P_F, z) \quad (6)$$

$$H_V = f(T, P, y) \quad (7)$$

$$k_i = f(T, P, x, y) \quad (8)$$

Existen varios métodos para estimar entalpías y relaciones de equilibrio, por lo cual según cada caso deberá optarse por el más conveniente

➤ **Relaciones entre las fracciones molares:**

$$\sum_{i=1}^{NC} z_i = 1 \quad (9)$$

$$\sum_{i=1}^{NC} y_i = 1 \quad (10)$$

$$\sum_{i=1}^{NC} x_i = 1 \quad (11)$$

Número de incógnitas - número de ecuaciones independientes
= número de variables a ser especificadas

$$= (NC + 5).$$

- ***Siguiendo la filosofía modular secuencial pura, se asumen conocidos los valores de las corrientes de entrada (según el sentido físico de orientación de las corrientes en la planta), con lo que P_F , T_F , F y (NC) composiciones, esto es, $(NC + 2)$ valores, se asumen conocidos.***
- ***Sólo dos variables son libres de ser especificadas.***
- ***existen varias alternativas según sea la asignación***

FLASH ISOTÉRMICO

- *Una especificación común es la que corresponde al flash isotérmico.*
- *En este caso, se especifican la presión y temperatura de operación del equipo (de ahí el nombre, ya que la temperatura se fija).*
- *Como consecuencia de las hipótesis adoptadas, la presión y temperatura (equilibrio entre fases) de las corrientes de salida son iguales a las especificadas para el equipo.*

➤ **Balance de energía**

$$Q + F * H_F = V * H_V + Lh_L \quad (12)$$

➤ **Balance de materia**

$$F = L + V$$

$$Fz_i = Vy_i + Lx_i \quad (13)$$

➤ **Relaciones de equilibrio**

$$y_i = k_i * x_i$$

- se define a la fracción vaporizada θ como la relación caudal de vapor producido a caudal de alimentación

$$\theta = \frac{V}{F}$$

- operando matemáticamente

$$F \times z_i = \theta \times F \times k_i \times x_i + F \times (1 - \theta) \times x_i$$

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

$$x_i = \frac{z_i}{\theta(k_i - 1) + 1} \quad (14) \quad y_i = \frac{k_i \times z_i}{\theta(k_i - 1) + 1} \quad (15)$$

- Como la sumatoria de las fracciones molares debe ser igual a 1:

$$\sum_{i=1}^{NC} y_i - \sum_{i=1}^{NC} x_i = 0 \quad (16)$$

- Reemplazando las Ecuaciones (14) y (15) en la (16) se obtiene:

$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{(k_i + 1) \times z_i}{\theta \times (k_i - 1) + 1} = 0 \quad (17)$$

Esta última ecuación permite fácilmente calcular θ , ya que ésta es la única incógnita, suponiendo que K_i es una función sólo de T y P , ya conocidas

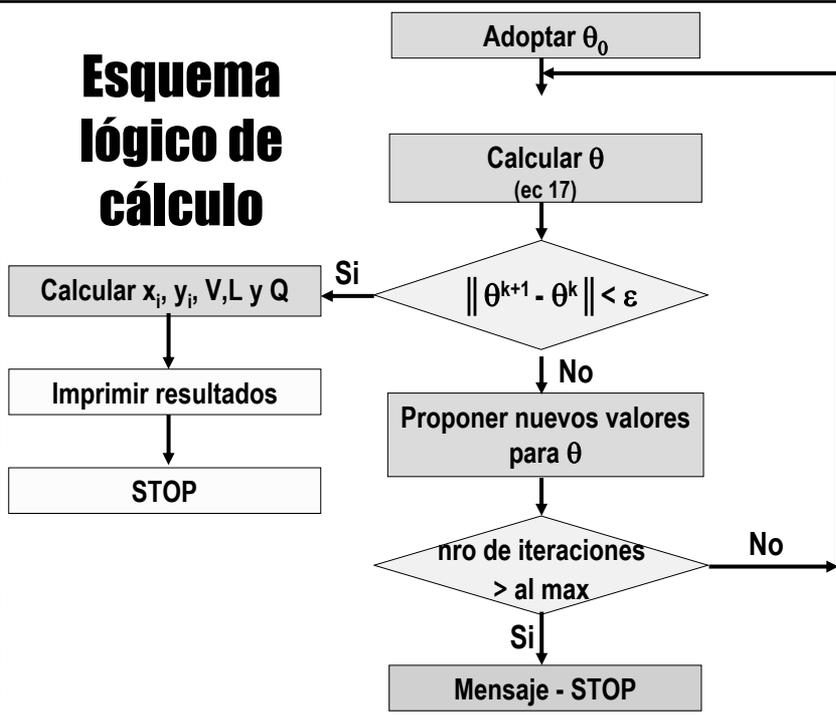
Estrategia de resolución

(mezcla ideal)

- **Adoptar un valor inicial para θ .**
- **Resolver la Ecuación (17) por algún procedimiento iterativo (por ejemplo, Newton-Raphson (N-R)).**
- **Obtenido el valor de θ que satisface a la Ecuación (17), calcular los valores x_i e y_i utilizando las Ecuaciones (14) y (15).**

- ***Obtener los caudales molares de las corrientes de vapor y de líquido a partir de la fracción vaporizada: $V = \theta F$, $L = F - V$.***
- ***Conociendo los valores de los caudales y las composiciones, utilizar el balance de energía para calcular el valor Q (calor intercambiado) utilizando la Ecuación (12).***
- ***Imprimir resultados o depositarlos en el banco de datos del simulador.***

Esquema lógico de cálculo



- *El esquema de cálculo propuesto anteriormente es válido cuando las mezclas presentan un comportamiento ideal y la constante de equilibrio no depende de las composiciones del líquido y del vapor.*
- *Si la constante de equilibrio es fuertemente dependiente de las composiciones del líquido y del vapor (mezclas de comportamiento no ideal) no resulta posible el esquema anteriormente planteado.*
- *Una estrategia a adoptar es el agregado de un nuevo lazo de iteración, que contempla la variación de k con las composiciones.*

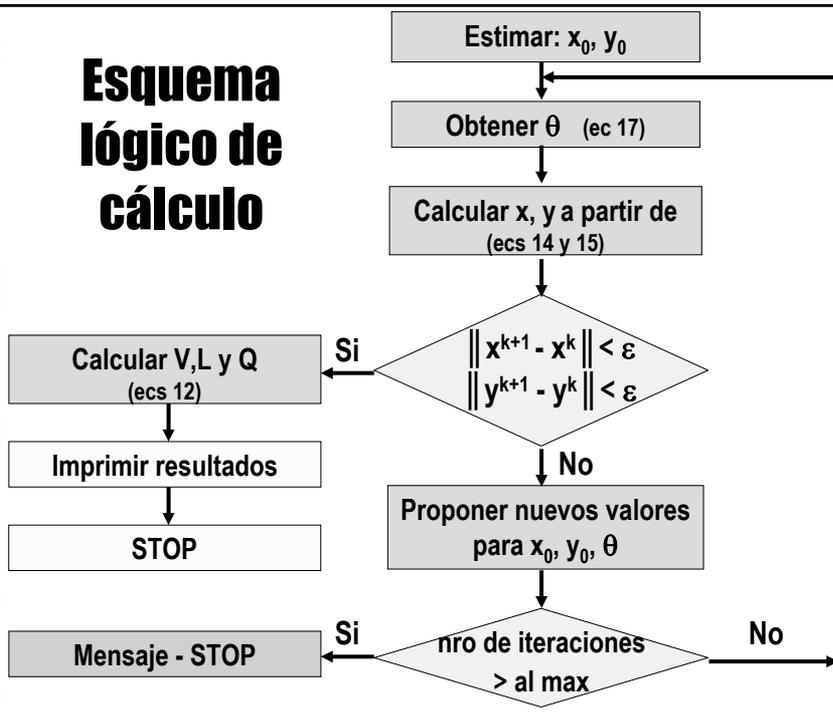
Estrategia de resolución

(mezcla no ideal)

- *Estimar valores iniciales para x e y .*
- *Resolver la Ecuación (17) para el valor de θ con la misma técnica anterior.*
- *Calcular, a partir de θ , el valor de las composiciones x e y , utilizando las Ecuaciones (14) y (15).*

- *Comparar los valores obtenidos para x e y con los utilizados (supuestos) en la iteración anterior. Si coinciden, pasar al paso (4). De lo contrario, volver a (1).*
- *Usar los valores recientemente calculados de x e y para la nueva iteración (sustitución directa) o bien utilizar métodos acelerados (Wegstein).*
- *Con el valor de θ , y los valores de x e y , obtener los caudales de vapor y de líquido.*
- *Calcular, utilizando la Ecuación (12), el calor intercambiado.*

Esquema lógico de cálculo



Otra forma de ver la estrategia:

- *Iterar sobre los valores de composición en un lazo externo*
- *Dado que ahora conocemos la composición, podemos calcular los valores de K_i , por lo que procedemos a resolver el flash isotérmico en el lazo interno (como si fuera mezcla ideal)*
- *El problema converge, cuando los valores de las composiciones recalculadas cumple el criterio de error del lazo externo.*

Algunas consideraciones:

- *El cálculo de H_V , h_L y K_i implica funciones muy complejas. Para el caso de mezclas no ideales, como las azeotrópicas, por ejemplo, el esfuerzo de cálculo y la complejidad de las funciones respectivas es muy importante y no debe subestimarse.*
- *La mayor parte del tiempo de cómputo es empleado en realizar los cálculos de las propiedades fisicoquímicas.*
- *Debe seleccionarse un método adecuado para la estimación de propiedades, ya que de lo contrario, todo el esfuerzo en ganar exactitud en los criterios de error asignados a los balances respectivos no se compadecerá con la realidad física del problema a resolver. Pequeños errores en la estimación de las propiedades respectivas pueden generar errores importantes en los resultados finales.*

FLASH ADIABÁTICO

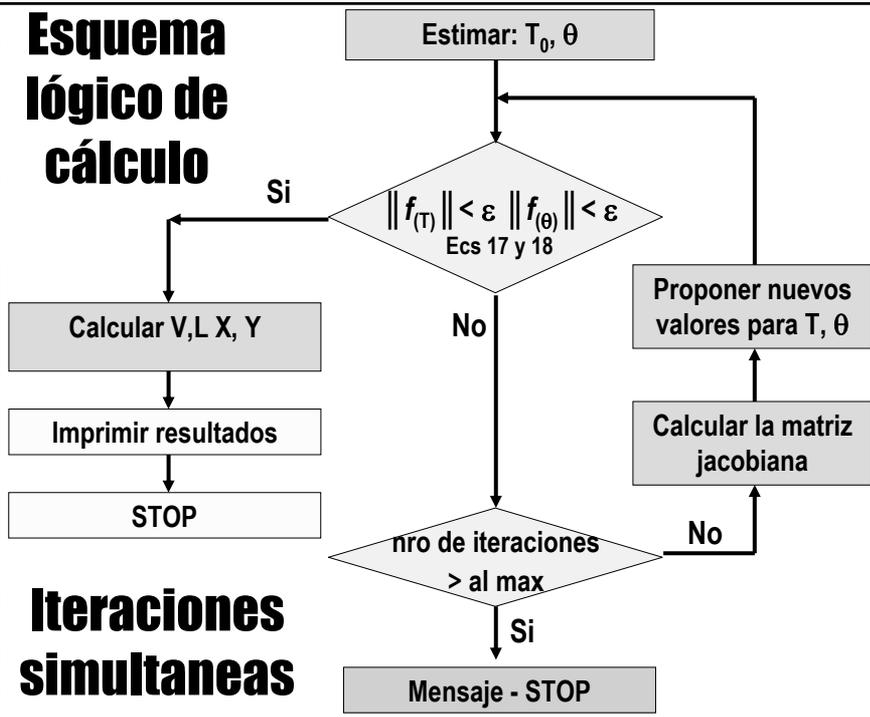
- *Una especificación muy común es la que corresponde a un flash adiabático: conocemos P y ($Q = 0$).*
- *Quedan por calcularse la temperatura y demás propiedades de las corrientes de salida.*
- *Dado que se desconoce la temperatura, el balance de energía, contrariamente al caso isotérmico, queda acoplado y debe resolverse simultáneamente.*

- **Cuando la constante de equilibrio no depende de las composiciones, puede utilizarse un método iterativo simultáneo (Newton-Raphson) en las dos variables (θ , T).**
- **En la ecuación del balance de energía se divide todos los términos por F y utilizando la relación ($L = F - V$) se introduce θ .**
- **Se dividen además todos los términos por el valor conocido (constante) de la entalpía de alimentación, a los efectos de lograr magnitudes similares al balance de materia, lo cual elimina problemas numéricos y errores de redondeo durante el proceso de iteración.**

$$1 - \theta \times \frac{H_V}{H_F} - (1 - \theta) \times \frac{h_L}{H_F} = 0 \quad (17)$$

1. **Estimar un valor inicial para la temperatura y la fracción vaporizada.**
2. **Comparar el valor de las funciones con respecto al error (energía y función sumatoria (17) y (18)). Si se satisface el criterio, ir a (6). De lo contrario, seguir con el paso (3).**
3. **Generar la matriz Jacobiana evaluando las derivadas parciales de ambas funciones con respecto a ambas variables (matriz de 2 x 2).**
4. **Calcular, resolviendo el sistema correspondiente, los incrementos para la temperatura y fracción vaporizada. Calcular el nuevo valor de las variables independientes (T y θ).**
5. **Si se ha cubierto el número preestablecido de iteraciones, terminar, utilizando un mensaje que advierta que no se ha logrado la convergencia. De lo contrario ir a (2).**
6. **Calcular demás valores, Imprimir resultados o archivarlos en el banco de datos del simulador. Pare.**

Esquema lógico de cálculo

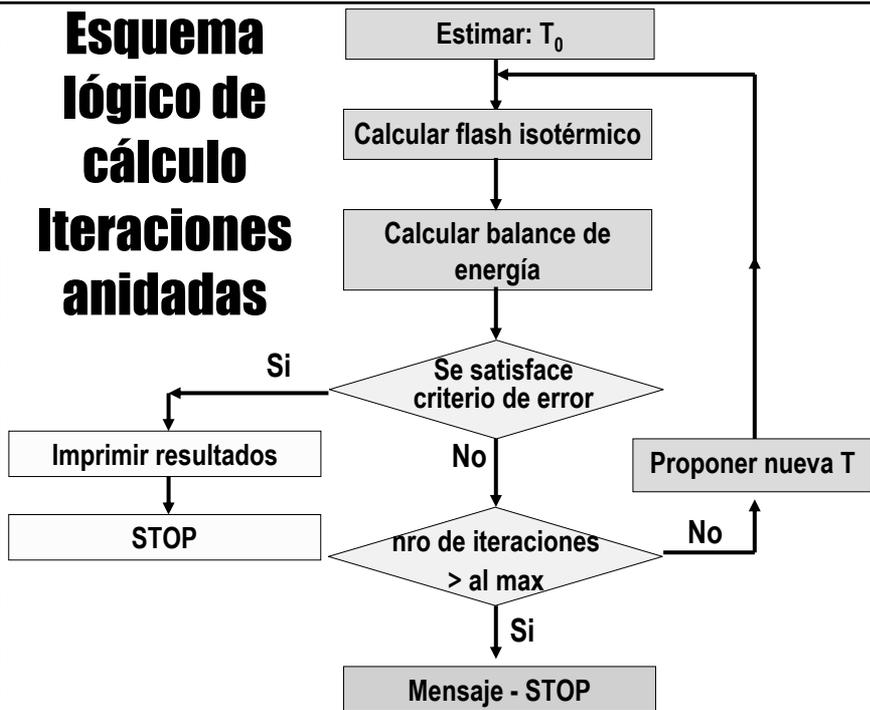


Iteraciones simultaneas

- *En lugar de adoptar la estrategia anterior, pueden utilizarse dos niveles anidados de iteración, uno para la temperatura y otro para la fracción vaporizada.*
- *Si se utiliza por ejemplo un lazo de iteraciones externo para la temperatura, el lazo interno resulta equivalente al problema del flash isotérmico; por lo que el mismo puede resolverse utilizando parcialmente un procedimiento conocido y tal vez ya implementado computacionalmente. No obstante, el orden de convergencia (y por lo tanto la velocidad) es menor que en el caso anterior.*

1. Se adopta una temperatura inicial.
2. Fijada la temperatura, se resuelve el problema del flash isotérmico según ya se ha explicado.
3. Se calcula, según las composiciones y temperaturas resultantes, el balance de energía. Si éste es satisfecho según el error establecido, detener el cálculo (ir a (5)); de lo contrario, seguir con (4).
4. Calcular, por Newton-Raphson la nueva temperatura. Si se supera el número de iteraciones permitidas detener y escribir un mensaje de advertencia. De lo contrario, ir a (2).
5. Imprimir resultados o bien almacenarlos en el banco de datos del simulador.
6. Pare.

Esquema lógico de cálculo iteraciones anidadas



Cálculos de hervidores y condensadores parciales

- En esta opción se asumen como datos especificados la presión y la fracción vaporizada (licuificada).
- Se asume despreciable el ΔP -caída de presión- a través del equipo.
- Dadas la alimentación, la presión de operación y la fracción de evaporación (condensación) deseadas, se calculan los caudales y composiciones de las corrientes de salida y el calor intercambiado para la tarea especificada.

➤ Caso I – “k no depende de x e y” :

Para resolver este problema, puede observarse a partir de la Ecuación (17) que dado el valor de θ , se deberá utilizar un procedimiento iterativo para obtener a partir de la misma, la temperatura, y con ella, mediante el balance de energía, el calor intercambiado.

➤ Caso II – “k depende de x e y” :

En caso que la constante de equilibrio sea función de las composiciones, debe utilizarse un lazo de iteración externo para converger dichas variables

Estrategia de resolución – Caso I

- Asuma T inicial.
- Usando la Ecuación (17), verificar convergencia. Si se cumple el criterio de error permitido, pasar a (3). De lo contrario, proponer una nueva temperatura por algún método (N-R). Si se cumple el número de iteraciones máximo permitido, detener el proceso, imprimiendo un mensaje de advertencia.
- Obtenida la convergencia en T , utilizando el balance de energía, calcular el valor de Q intercambiado.
- Parar.

Estrategia de resolución – Caso II

1. Asuma x e y .
2. Asuma T .
3. Usando la Ecuación (17), verificar convergencia. Si se cumple, pasar a (3). De lo contrario, proponer una nueva temperatura por algún método por ejemplo (N-R). Si se cumple el número de iteraciones establecido detener el proceso, imprimiendo un mensaje de advertencia.
4. Obtenida la temperatura, mediante las Ecuaciones (14) y (15), calcular x e y . Si se cumple el criterio de convergencia (comparando los valores de dichas composiciones entre dos iteraciones sucesivas), pasar a (4). De lo contrario, retornar a (2), proponiendo antes nuevos valores de x e y mediante sustitución directa o Wegstein). Si se excede el número de iteraciones permitidas detener el proceso e imprimir un mensaje de error.
5. Con los valores calculados y mediante el balance de energía, determinar Q .
6. Imprimir resultados o almacenarlos en el banco de datos del simulador. Pare



Aplicaciones de los Algoritmos para Simulación de equipos Flash



Cálculos de Puntos de Burbuja y Rocío

- Temperatura de burbuja es la temperatura (a una dada presión) a la cual se forma la primera burbuja en la mezcla.
- Temperatura de rocío (a una dada presión) es la temperatura a la cual se forma la primera gota de condensado en la mezcla.

Temperatura de Burbuja

- Si aplicamos la definición de temperatura de burbuja y analizamos la Ecuación:

$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{(k_i + 1) \times z_i}{\theta \times (k_i - 1) + 1} = 0$$

- Dada la presión, encontrar la temperatura a la cual aparece la primer burbuja de vapor en la mezcla líquido-vapor en equilibrio, equivale conceptualmente a la siguiente condición límite:

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} \left\{ \sum_{i=1}^{NC} \frac{(k_i + 1) \times z_i}{\theta \times (k_i - 1) + 1} \right\} = 0 \quad (19)$$

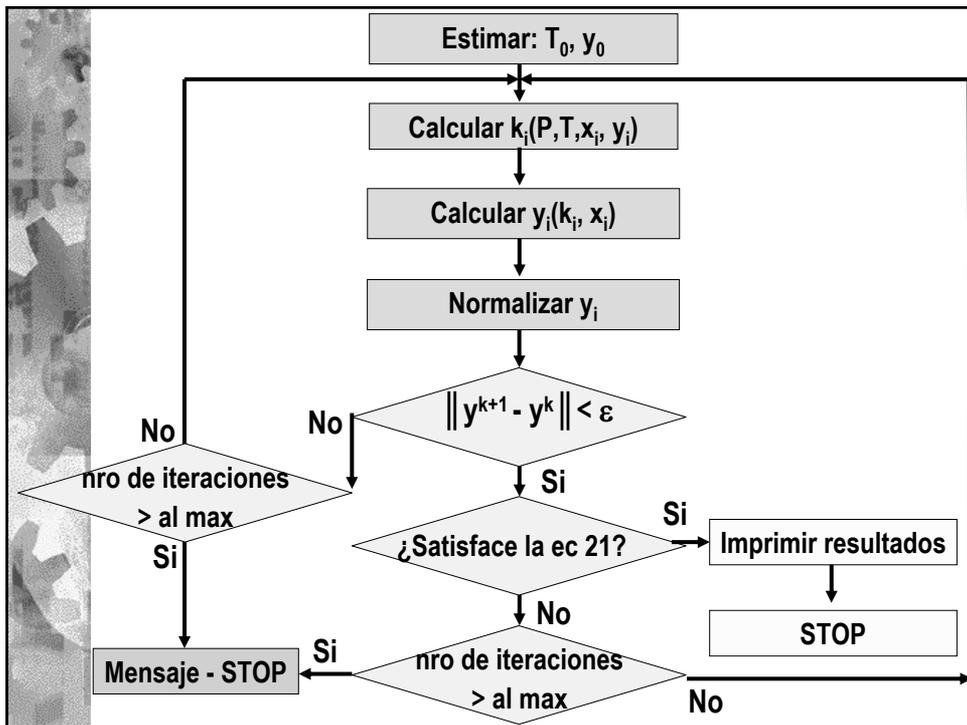
- Resolviendo, en el límite se tiene:

$$\sum_{i=1}^{NC} z_i - \sum_{i=1}^{NC} k_i * z_i = 0 \quad (20)$$

- De donde debe satisfacerse:

$$\sum_{i=1}^{NC} k_i * z_i = 1 \quad (21)$$

como condición de punto de burbuja.



Temperatura de Rocío

Siguiendo el mismo razonamiento que en el caso anterior, debemos encontrar la condición de equilibrio a la cual (fijada la presión) aparece la primer gota de condensado; la condición que debe cumplirse es el límite cuando la fracción líquida tiende a cero (o bien la fracción vaporizada tiende a uno). Es decir:

$$\lim_{\theta \rightarrow 1} \left\{ \sum_{i=1}^{NC} \frac{(k_i + 1) \times z_i}{\theta \times (k_i - 1) + 1} \right\} = 0 \quad (22)$$

Que resuelta queda:

$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{z_i}{k_i} = 1 \quad (23)$$

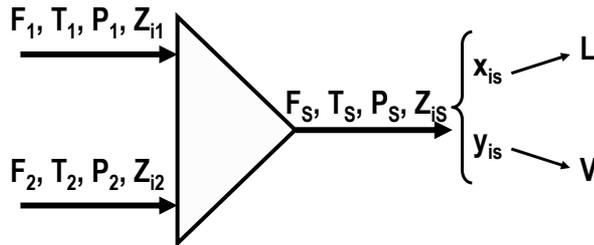
Algunas consideraciones:

- Para mezclas ideales, se anula el lazo de composiciones.
- Si en lugar de las temperaturas deben calcularse las presiones de burbuja y rocío, el procedimiento en cada caso es similar.

Modelos básicos de nodos sumadores y divisores

NODO SUMADOR

Representar la unión de dos o mas corrientes de proceso



En un nodo sumador:

- puede haber caída de presión propia del accesorio (en este caso se resta a la $\min[P_1, P_2]$)
- P_1 puede ser igual o no a P_2 .
- Normalmente se adopta, $P_s = \min[P_1, P_2]$
- La diferencia de condiciones entre las corrientes de entrada puede provocar un cambio de fase en la corriente de salida. Se debe asumir una separación de fases y determinar el estado de la corriente de salida (flash adiabático –presión de la corriente de salida-).

Hipótesis

- No existe reacción química
- Estado estacionario
- Corrientes de entrada en una sola fase
- Adiabático

Balance de materia

- Global:

$$F_1 + F_2 = F_S \quad (1)$$

$$F_S = L + V$$

$$\theta = \frac{V}{F_S}$$

$$L = (1 - \theta_S) \times F_S \quad (2)$$

➤ **Por componente:**

$$Z_{i1} \times F_1 + Z_{i2} \times F_2 = Z_{iS} \times F_S$$

$$Z_{iS} \times F_S = x_{iS} \times (1 - \theta_S) \times F_S + y_{iS} \times \theta_S \times F_S \quad (*)$$

$$\sum_{i=1}^{NC} x_{iS} - \sum_{i=1}^{NC} y_{iS} = 0$$

➤ **Equilibrio líquido vapor:**

$$k_{iS} = f(T_S, x_{iS}, y_{iS})$$

Para vapor ideal: $k_{iS} = \frac{y_{iS}}{x_{iS}} \quad (*)$

$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{(k_i - 1) \times z_i}{\theta_S \times (k_i - 1) + 1} = 0 \quad (3)$$

Balance de energía:

$$h_i \times F_1 + h_2 \times F_2 = h_s \times (1 - \theta_s) \times F_s + H_s \times \theta_s \times F_s \quad (4)$$

$$h_1 = f(T_1, P_1, Z_{i1})$$

$$h_2 = f(T_2, P_2, Z_{i2})$$

$$h_s = f(T_s, P_s, x_{is}) \quad (5)$$

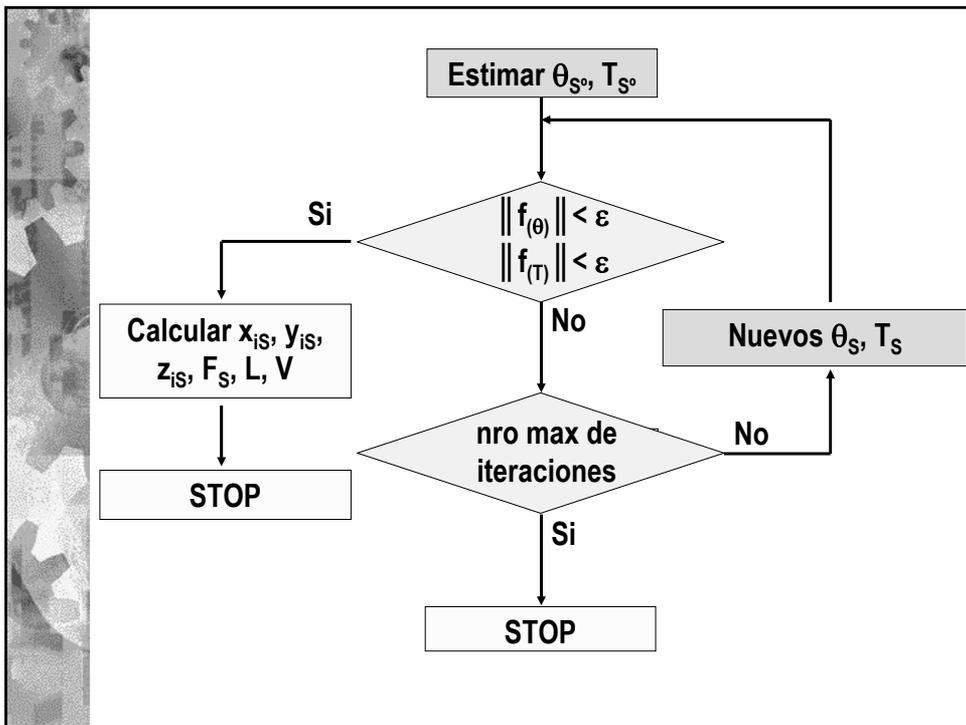
$$H_s = f(T_s, P_s, y_{is}) \quad (6)$$

Estrategia de cálculo

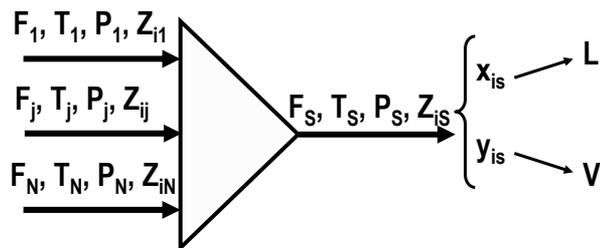
➤ Incógnitas: 3NC + 8

(F_s , L , V , θ_s , Z_{is} , x_{is} , y_{is} , T_s , k_i , h_s , H_s)

➤ Ecuaciones: 3NC + 6



Caso N corrientes de entrada – 1 corriente de salida



$$(j = 1, \dots, N)$$

Balance de materia

➤ Global:

$$\sum_{j=1}^N F_j = F_S$$

$$F_S = L + V$$

$$\theta = \frac{V}{F_S}$$

$$L = (1 - \theta_S) \times F_S$$

➤ Por componente:

$$\sum_{j=1}^N Z_{ij} \times F_j = Z_{iS} \times F_S$$

$$Z_{iS} = x_{iS} \times (1 - \theta_S) + y_{iS} \times \theta_S$$

$$\sum_{i=1}^{NC} x_{iS} - \sum_{i=1}^{NC} y_{iS} = 0$$

Balance de energía:

$$\sum_{j=1}^N h_j \times F_j = h_S \times (1 - \theta_S) \times F_S + H_S \times \theta_S \times F_S$$

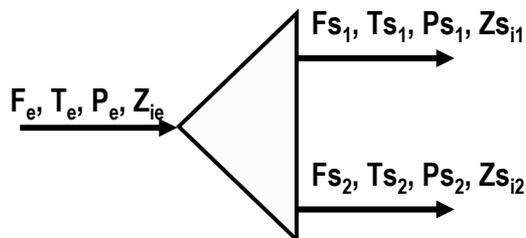
$$h_j = f(T_j, P_j, Z_{ij})$$

$$h_S = f(T_S, P_S, x_{iS})$$

$$H_S = f(T_S, P_S, y_{iS})$$

NODO DIVISOR

Representar la bifurcación de una corriente de proceso



Se debe especificar el parámetro básico “R”

Relación de división

$$R_{1e} = \frac{F_{S1}}{F_e}$$

$$R_{2e} = \frac{F_{S2}}{F_e}$$

- 
- Físicamente representa accesorios de cañerías de proceso.
 - Usualmente se asume que la caída de presión debido al accesorio es nula o bien si es dato, no es suficiente para provocar un cambio de fase.
 - Sistema Adiabático.
 - Sin reacción química



Hipótesis

- **No existe reacción química**
- **Estado estacionario**
- **Corrientes de entrada en una sola fase**
- **Adiabático**

Balance de materia

➤ Global:

$$F_e = F_{S1} + F_{S2}$$

$$F_{S1} = R_{S1} \times F_e$$

$$F_{S2} = F_e - (R_{1e} \times F_e) = F_e (1 - R_{1e})$$

➤ Por componente:

$$Z_{ie} = Z_{iS1} = Z_{iS2}$$

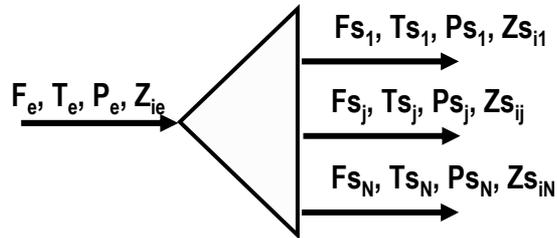
$$(i = 1, \dots, NC)$$

Balance de energía:

$$h_{S1} = h_{S2} = h_e$$

$$h_e = f(T_e, P_e, Z_{ie})$$

Caso 1 corriente entrada y N corrientes de salida



$$(j = 1, \dots, N)$$

➤ Se deben especificar $(N - 1) R_{je}$ $R_{je} = \frac{F_{Sj}}{F_e}$

Balance de materia

➤ Global:

$$F_e = \sum_{j=1}^N F_{Sj}$$

$$F_e = \sum_{j=1}^N R_{je} \times F_e$$

➤ Por componente:

$$Z_{ie} = Z_{iSj}$$

$$(i = 1, \dots, NC)$$

Balance de energía:

$$h_j = h_e$$

$$h_e = f(T_e, P_e, Z_{ie})$$