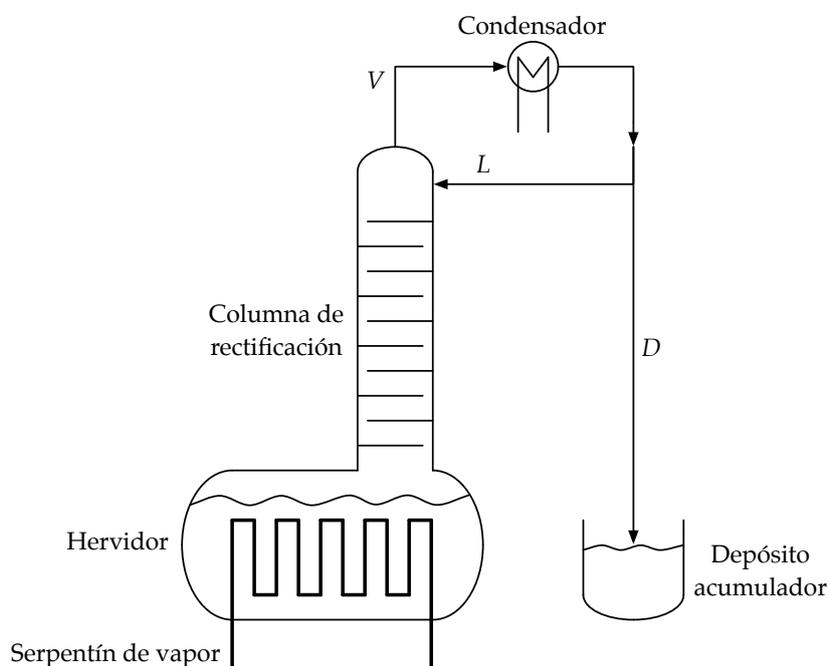


Examen de Simulación Dinámica

Modelado y Simulación en Ingeniería Química

Jueves, 1 de julio de 2010

Se desea simular la puesta en marcha y la operación de una columna de destilación batch (discontinua) como la mostrada en la figura.



La columna tiene un hervidor en el que se cargan 500 kmol de una mezcla **bicomponente** con una composición del 50 % molar de cada uno de los dos componentes. La volatilidad relativa —empleada para la ecuación que establece un equilibrio L-V ideal entre los componentes es $\alpha = 2$. Para el cálculo de equilibrio considere la siguiente ecuación,

$$y = \frac{\alpha \cdot x}{1 + (\alpha - 1) \cdot x}$$

en donde x representa la fracción molar del líquido e y la fracción molar del vapor en equilibrio con el líquido.

El hervidor dispone de un serpentín por el que se circula vapor saturado a 400°C. El serpentín presenta un coeficiente de transmisión de calor de 100 kJ/min · K · m² y un área total de intercambio de 5 m². Inicialmente, la mezcla bicomponente que se alimenta está a una temperatura de 20°C y tiene un calor específico de 80 kJ/kmol · K. El hervidor produce una corriente de vapor (V) de 2 kmol/min.



La columna consta de 10 platos (incluido el hervidor) y la cantidad que se acumula en cada plato se considera constante e igual a 0,5 kmol, pudiéndose despreciar la cantidad acumulada en el condensador (que recircula líquido saturado). Considere una composición inicial en cada uno de los platos nula en el componente volátil. La corriente condensada se divide en dos, un caudal de reflujo (L) y una extracción de destilado (D) que se lleva a un depósito acumulador. En dicho depósito inicialmente hay 0,2 kmol con una composición nula en el componente volátil.

El proceso de puesta en marcha de la columna consta de tres etapas. En la primera de ellas se calienta el contenido del hervidor, manteniéndose cerrado de modo que no hay salida de materia del hervidor. Esta primera etapa se designará como *calentamiento*. La segunda etapa, que se designará como *estabilización*, se inicia cuando el hervidor alcanza los 300°C. En esta etapa se abre la salida de vapor del hervidor y la temperatura del mismo se mantiene constante en 300°C. Durante este periodo la columna opera a reflujo total, esto es, la corriente de destilado es nula.

La tercera etapa (*operación*) comienza cuando el líquido del plato superior de la columna llega a una fracción molar de 0,8. En este momento se abre la salida de destilado, fijándose su caudal en el 30 % de la corriente de vapor. Esta etapa termina cuando la fracción molar del líquido en el depósito llega a 0,8. En las etapas de *operación* y *estabilización* a efectos del balance de energía, puede suponerse que la entalpía en el hervidor no varía.

Se pide:

1. Plantear las ecuaciones que constituyen el modelo dinámico del equipo indicando las suposiciones e hipótesis adoptadas, los volúmenes de control escogidos y el tipo de ecuaciones empleadas: conservación, constitutivas, etc. No es necesario realizar ningún balance de energía a los platos de la columna, sólo al hervidor (4 puntos).
2. Implementar en MATLAB la etapa de *calentamiento* del hervidor y representar la evolución de la temperatura en función del tiempo sin considerar los balances de materia de la columna. En una hoja anotar el tiempo en el que se alcanza la temperatura de 300°C y esbozar la gráfica de la temperatura frente al tiempo (1,5 puntos).
3. Implementar en MATLAB la etapa de *estabilización* sin tener en cuenta el balance de energía al hervidor (considerar que éste ya se encuentra a la temperatura deseada). Representar la evolución temporal de las composiciones del líquido en los platos de la columna. Anotar en una hoja el tiempo en que se alcanza la concentración de 0,8 en el plato superior de la columna y esbozar la evolución de su composición en función del tiempo. (2,5 puntos).
4. Implementar en MATLAB el ciclo completo de funcionamiento de la columna considerando las tres etapas. Representar la evolución temporal de las composiciones en los platos y en el depósito acumulador. Anotar en una hoja la duración del ciclo completo de funcionamiento (2 puntos).

Notas:

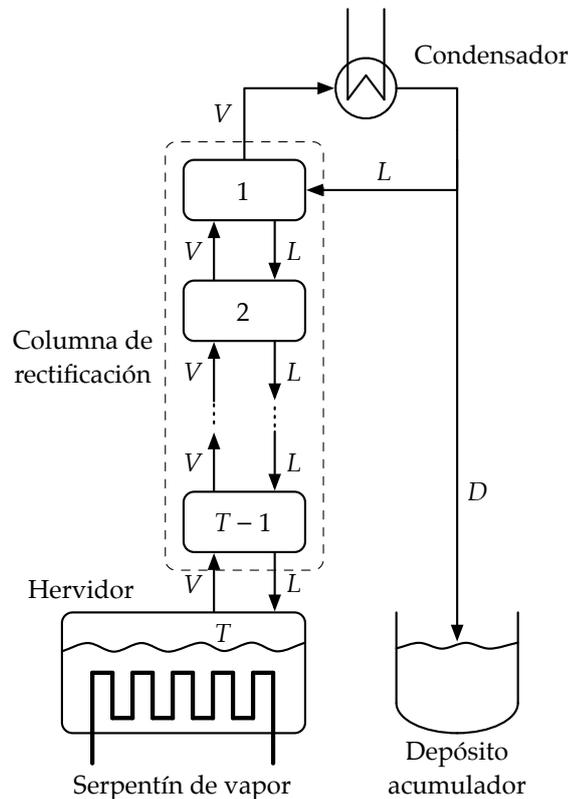
1. Se entregará en papel al finalizar el examen las respuestas a los apartados 1, 2, 3 y 4; indicando nombre y número de matrícula.
2. Se enviarán por e-mail los archivos *.m a la dirección de correo manuel.rodriquezh@upm.es, correspondientes a los apartados 2, 3 y 4.
3. Duración del examen: **2** horas.

Resolución

1.- Modelo dinámico

Suposiciones e hipótesis

1. El caudal de líquido y de vapor en la columna es constante en todos los platos siendo el caudal de vapor el procedente del hervidor y el de líquido el procedente del condensador, introducido como reflujo.
2. Se considerará un equilibrio líquido-vapor ideal en todas las etapas de la columna, siendo la relación de composiciones de ambas fases la especificada en el enunciado.
3. Durante la etapa de calentamiento se supondrá que el calor específico molar de la mezcla bifásica no varía con la temperatura.
4. Para el desarrollo de modelo dinámico se utilizará el siguiente esquema:



Leyenda

T : Número total de etapas.

N_i : Moles totales en la etapa i con $i = 1, 2, \dots, T$ (kmol).

N_i^A : Moles de A en la etapa i con $i = 1, 2, \dots, T$ (kmol).

N_D : Moles totales en el depósito acumulador (kmol).



N_D^A : Moles de A en el depósito acumulador (kmol).

x_i : Fracción molar de A en el líquido de la etapa i con $i = 1, 2, \dots, T$.

x_D : Fracción molar de A en el depósito acumulador.

y_i : Fracción molar de A en el vapor de la etapa i con $i = 1, 2, \dots, T$.

L : Caudal de reflujo en la columna (kmol/min).

V : Caudal de vapor en la columna (kmol/min).

D : Caudal de destilado (kmol/min).

H_T : Entalpía en el hervidor (kJ).

C_e : Calor específico molar (kJ/kmol K).

U : Coeficiente global de transmisión de calor (kJ/min K m²).

A : Área de intercambio (m²).

T_T : Temperatura en el hervidor (K).

T_j : Temperatura del vapor en el serpentín (K).

Q : Tasa de calor intercambiado entre el hervidor y el serpentín (kJ/min).

α : Volatilidad relativa de la mezcla bicomponente.

t : Tiempo (min).

Balances de materia

Los balances de materia se pueden descomponer en cuatro bloques principales: hervidor, platos de la columna 2 a $T - 1$, primer plato de la columna y depósito acumulador.

1. Primer plato de la columna.

Si se realiza un balance de materia global (en moles) al primer plato de la columna se tiene que

$$\frac{dN_1}{dt} = L + V - L - V = 0 \implies N_1 = cte \quad (1)$$

como se especificaba en el enunciado.

Si se realiza un balance de A en moles al primer plato de la columna se tiene

$$\frac{dN_1^A}{dt} = L \cdot y_1 + V \cdot y_2 - L \cdot x_1 - V \cdot y_1 \quad (2)$$

pero como $N_1 = cte$ se tiene que

$$N_1^A = x_1 \cdot N_1 \implies \frac{dN_1^A}{dt} = \frac{d}{dt}(x_1 \cdot N_1) = N_1 \cdot \frac{dx_1}{dt} \quad (3)$$

por lo que se llega a

$$\frac{dx_1}{dt} = \frac{1}{N_1} \cdot (L \cdot y_1 + V \cdot y_2 - L \cdot x_1 - V \cdot y_1) \quad (4)$$

Nótese que la composición del caudal de reflujo que se introduce en la columna es el mismo que el del vapor que sale del plato, esto es así ya que se trata de la misma corriente pero en fase líquida.

2. Platos 2 a $T - 1$.

Si se realiza un balance de materia global (en moles) se tiene que

$$\frac{dN_i}{dt} = L + V - L - V = 0 \quad \implies \quad N_i = cte \quad \text{con } i = 2, 3, \dots, T - 1 \quad (5)$$

como se especificaba en el enunciado.

Si se realiza un balance de A en moles se tiene

$$\frac{dN_i^A}{dt} = L \cdot x_{i-1} + V \cdot y_{i+1} - L \cdot x_i - V \cdot y_i \quad \text{con } i = 2, 3, \dots, T - 1 \quad (6)$$

pero como $N_i = cte$ se tiene que

$$N_i^A = x_i \cdot N_i \quad \implies \quad \frac{dN_i^A}{dt} = \frac{d}{dt}(x_i \cdot N_i) = N_i \cdot \frac{dx_i}{dt} \quad \text{con } i = 2, 3, \dots, T - 1 \quad (7)$$

por lo que se llega a

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{N_i} \cdot (L \cdot x_{i-1} + V \cdot y_{i+1} - L \cdot x_i - V \cdot y_i) \quad \text{con } i = 2, 3, \dots, T - 1 \quad (8)$$

3. Hervidor.

El balance de materia global al hervidor quedaría

$$\frac{dN_T}{dt} = L - V \quad (9)$$

mientras que si se considera el balance de moles de A se tiene

$$\frac{dN_T^A}{dt} = L \cdot x_{T-1} - V \cdot y_T \quad (10)$$

Nótese que en este caso, no se puede expresar el balance de moles de A en función de la fracción molar, como ocurría en los platos de la columna. Esto se debe a que el número de moles totales en el hervidor varía a lo largo del tiempo, por lo que no se puede extraer de la derivada.

4. Depósito acumulador.

El balance de materia global es

$$\frac{dN_D}{dt} = D \quad (11)$$

mientras que el del componente A sería

$$\frac{dN_D^A}{dt} = D \cdot y_1 \quad (12)$$

Nótese que en el depósito, al igual que en el hervidor, no se puede expresar este último balance en función de la fracción molar ya que el número de moles totales varía a lo largo del tiempo.

Debe notarse también que la composición molar de la corriente que entra al depósito es la misma que la del vapor que sale del primer plato de la columna (es la misma corriente pero en fase líquida).

Balance de energía

Sólo es necesario realizar un balance de energía al hervidor, de modo que

$$\frac{dH_T}{dt} = Q \quad (13)$$

pero como durante la etapa de calentamiento no entra ni sale nada del hervidor, el número de moles en el hervidor N_T permanece constante durante esta etapa, por lo que

$$H_T = N_T \cdot C_e \cdot T_T \quad \Longrightarrow \quad \frac{dH_T}{dt} = \frac{d}{dt}(N_T \cdot C_e \cdot T_T) = N_T \cdot C_e \cdot \frac{dT_T}{dt} \quad (14)$$

quedando el balance de energía

$$\frac{dT_T}{dt} = \frac{Q}{N_T \cdot C_e} \quad (15)$$

No obstante, es necesario diferenciar entre la etapa de calentamiento y el resto de etapas, en las que la temperatura se mantiene constante, por lo que $\frac{dT_T}{dt} = 0$, quedando finalmente el balance de energía

$$\frac{dT_T}{dt} = \begin{cases} \frac{Q}{N_T \cdot C_e} & \text{si } T_T < 573 \text{ K} \\ 0 & \text{si } T_T = 573 \text{ K} \end{cases} \quad (16)$$

Ecuaciones auxiliares y restricciones

- Fracciones molares del líquido en el depósito y en el hervidor

$$x_T = \frac{N_T^A}{N_T} \quad ; \quad x_D = \frac{N_D^A}{N_D} \quad (17)$$

- Fracciones molares del vapor en todas las etapas

$$y_i = \frac{\alpha \cdot x_i}{1 + (\alpha - 1) \cdot x_i} \quad \text{con } i = 1, 2, \dots, T \quad (18)$$

- Calor intercambiado en el hervidor

$$Q = U \cdot A \cdot (T_j - T_T) \quad (19)$$

- Caudal de vapor en la columna

$$V = \begin{cases} 0 & \text{si } T_T \leq 573 \text{ K} \\ 2 \text{ kmol/min} & \text{si } T_T > 573 \text{ K} \end{cases} \quad (20)$$

- Caudal de destilado en la columna

$$D = \begin{cases} 0 & \text{si } x_1 \leq 0,8 \\ 0,3 \cdot V & \text{si } x_1 > 0,8 \end{cases} \quad (21)$$

- Relación entre caudales de reflujo, vapor y destilado

$$L + D = V \quad (22)$$

2.- Simulación de la etapa de *calentamiento*

Para la simulación de este apartado sólo se considera el balance de energía al hervidor, tomando como valor inicial la temperatura de 20°C, esto es, $T_T(0) = 293$ K. El cuerpo principal del programa implementado en MATLAB es:

```
close all
clear all
clc

global NT Tj U A Ce TRef

% PARAMETROS DEL SISTEMA
NT = 500;          % Moles en el hervidor en kmol
Tj = 400+273;     % Temperatura del vapor en K
U = 100;          % Coef. Transm. Calor en kJ/min.K.m2
A = 5;            % Area de intercambio en m2
Ce = 80;          % Calor especifico molar en kJ/kmol.K
TRef = 300+273;  % Temperatura final de calentamiento en K

% CONDICIONES DE INTEGRACION
TTO = 20+273;     % Temperatura inicial en K
time = [0 150];  % Tiempo de integracion en min

% INTEGRACION DEL SISTEMA
[t,T] = ode15s('examen2',time,TTO);
```

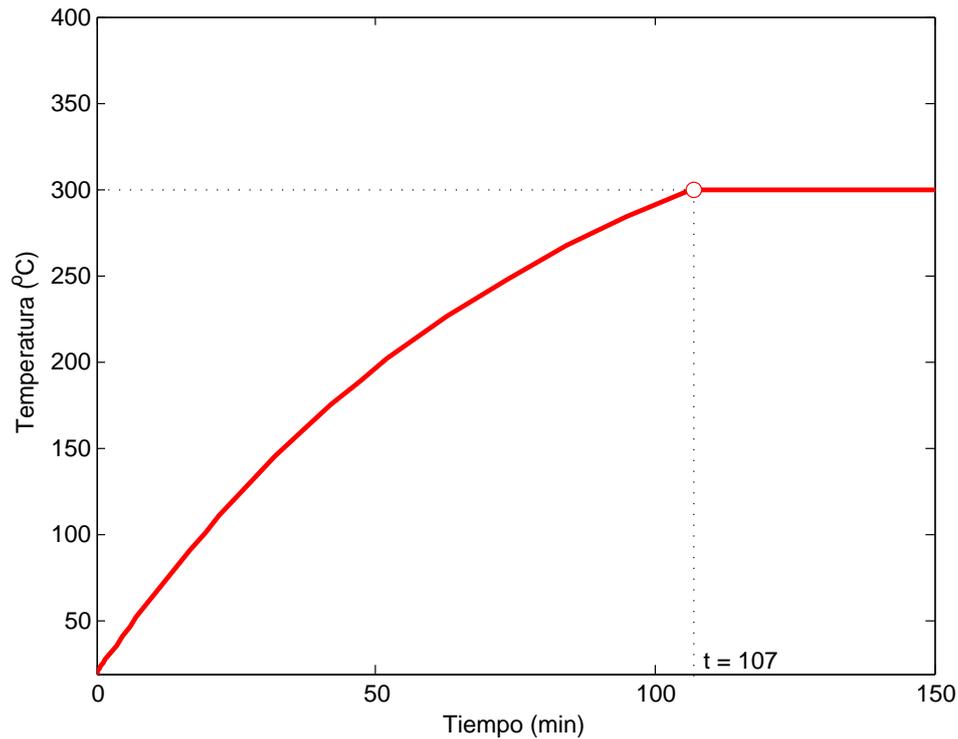
Y la función con el modelo del sistema:

```
function d = examen2(t,T)

global NT Tj U A Ce TRef

if T < TRef
    Q = U*A*(Tj-T); % Calor intercambiado en kJ/min
    d = Q/(Ce*NT); % dT/dt
else
    d = 0;          % Se mantiene la temperatura constante
end
```

De este modo se obtiene la siguiente evolución de la temperatura mostrada en la gráfica. Leyendo en la gráfica se tiene que el tiempo que se alcanzan los 300°C es en torno al minuto 107 desde que comenzó el calentamiento.



3.- Simulación de la etapa de *estabilización*

Para la simulación de la etapa de estabilización sólo es necesario considerar los balances de materia a cada una de las etapas de la columna, incluido el hervidor. No se considera ni el balance de energía al hervidor ni los balances de materia al depósito.

Tomando como condiciones iniciales las composiciones del líquido en cada plato $x_i(0) = 0$ con $i = 1, 2, \dots, T - 1$, los moles iniciales en el hervidor $N_T(0) = 500$ kmol y los moles iniciales de A en el hervidor $N_T^A(0) = x_T(0) \cdot N_T(0) = 0,5 \cdot 500 = 250$ kmol se implementa el siguiente cuerpo principal del programa:

```
close all
clear all
clc

global T Vr x1Ref alpha Ni

% PARAMETROS DEL SISTEMA
T = 10;      % Numero de etapas de la columna
Vr = 2;      % Caudal de vapor en kmol/min
x1Ref = 0.8; % Fraccion molar de finalizacion de etapa
alpha = 2;   % Volatilidad relativa
Ni = 0.5;    % Moles en cada plato en kmol (i = 1,2,...,T-1)

% CONDICIONES DE INTEGRACION
NT0 = 500;  % Moles iniciales en el hervidor en kmol
xT0 = 0.5;  % Fraccion molar inicial en el hervidor
NTA0 = NT0*xT0; % Moles iniciales de A en el hervidor en kmol
```

```
Y0 = [zeros(1,T-1) NTA0 NT0];
time = [0 10]; % Tiempo en min
```

```
% INTEGRACION DEL SISTEMA
[t,Y] = ode15s('examen3',time,Y0);
```

Siendo la función con el modelo del sistema:

```
function d = examen3(t,var)
% var = [x1 x2 ... xT-1 NTA NT]

global T Vr x1Ref alpha Ni

% ASIGNACION DE VARIABLES
% Fracciones molares de las etapas 1 a T-1
for i = 1:T-1
    x(i) = var(i);
end
% Fraccion molar del hervidor (etapa T)
x(T) = var(T)/var(T+1);

% CALCULOS PREVIOS
% Fracciones molares del vapor
for i = 1:T
    y(i) = alpha*x(i)/(1 + (alpha-1)*x(i));
end

% Caudales de la columna
V = Vr; % Caudal de vapor en kmol/min
D = 0; % Caudal de destilado en kmol/min
L = V - D; % Caudal de reflujo en kmol/min

% ECUACIONES DIFERENCIALES
% Balance de A en el primer plato
% dx1/dt
d(1,1) = (L*y(1) + V*y(2) - L*x(1) - V*y(1))/Ni;

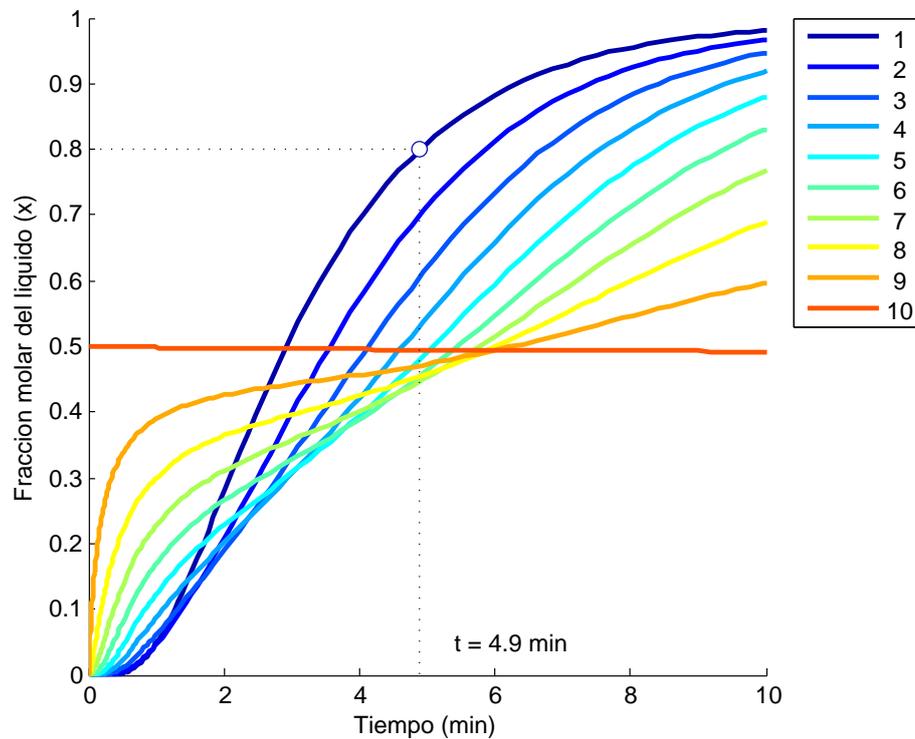
% Balances de A en los platos 2 a T-1
% dxi/dt
for i = 2:T-1
    d(i,1) = (L*x(i-1) + V*y(i+1) - L*x(i) - V*y(i))/Ni;
end

% Balance de A en el hervidor
% dNTA/dt
d(T,1) = L*x(T-1) - V*y(T);

% Balance de materia global al hervidor
% dNT/dt
d(T+1,1) = L - V;
```

De este modo, se obtiene la evolución temporal de las composiciones en cada una de las etapas que se obtiene

es la recogida en la siguiente gráfica, en la que se puede leer que el primer plato de la columna alcanza una fracción molar de 0,8 cuando han transcurrido 4,9 minutos.



4.- Simulación del ciclo completo

Para la simulación del ciclo completo de operación del sistema se toman todas las ecuaciones del modelo dinámico y todas las restricciones. Las condiciones iniciales para la integración son:

- $x_i(0) = 0 \quad i = 1, 2, \dots, T - 1$
- $N_T(0) = 500 \text{ kmol}$
- $N_T^A(0) = x_T(0) \cdot N_T(0) = 0,5 \cdot 500 = 250 \text{ kmol}$
- $N_D(0) = 0,2 \text{ kmol}$
- $N_D^A(0) = x_D(0) \cdot N_D(0) = 0 \cdot 0,2 = 0 \text{ kmol}$
- $T_T(0) = 293 \text{ K}$

De este modo, el cuerpo principal del programa implementado sería:

```
close all
clear all
clc
```

```
global Ni T Vr Ratio alpha Ce U A Tj TRef x1Ref condition
```



```
% PARAMETROS DEL SISTEMA
Ni = 0.5;          % Moles iniciales en cada plato (2 a T-1) en kmol
T = 10;           % Numero de platos (incluido el hervidor)
Vr = 2;           % Caudal de vapor en la columna en kmol/min
Ratio = 0.3;      % Relacion D/V: D = V*Ratio
alpha = 2;        % Volatilidad relativa
Ce = 80;          % Calor especifico molar en kJ/kmol.K
U = 100;          % Coef. Trans. de calor en kJ/min.K.m2
A = 5;            % Area de intercambio en m2
Tj = 400+273;     % Temperatura del vapor en K
TRef = 300+273;   % Temperatura final de calentamiento en K
x1Ref = 0.8;      % Fraccion molar de referencia del primer plato
condition = 0;    % Condicion de finalizacion

% CONDICIONES DE INTEGRACION
NTO = 500;        % Moles iniciales en el hervidor en kmol
xTO = 0.5;        % Fraccion molar inicial en el hervidor
NTAO = NTO*xTO;   % Moles iniciales de A en el hervidor en kmol
NDO = 0.2;        % Moles iniciales en el hervidor en kmol
xD0 = 0;          % Fraccion molar inicial en el deposito
NDAO = NDO*xD0;   % Moles iniciales de A en el deposito en kmol
TTO = 20+273;     % Temperatura inicial del hervidor en K

YO = [zeros(1,T-1) NTAO NTO NDAO NDO TTO];
time = [0 800];

condition = 0;
[t,Y] = ode15s('examen4',time,YO);

Siendo la función con el modelo dinámico del sistema:

function d = examen4(t,var)

% var = [x1 x2 ... xT-1 NTA NT NDA ND TT]

global Ni T Vr Ratio alpha Ce U A Tj TRef x1Ref condition

% ASIGNACION DE VARIABLES
% Fracciones molares de liquido
x = var(1:T-1);    % Platos 1 a T-1
x(T) = var(T)/var(T+1); % Hervidor

NTA = var(T);      % Moles de A en el hervidor en kmol
NT = var(T+1);     % Moles en el hervidor en kmol
NDA = var(T+2);    % Moles de A en el deposito en kmol
ND = var(T+3);     % Moles en el deposito en kmol
xD = NDA/ND;       % Fraccion molar en el deposito
TT = var(T+4);     % Temperatura en el hervidor en K

% CALCULOS PREVIOS
% Fracciones molares del vapor
for i = 1:T
```

```

    y(i) = alpha*x(i)/(1 + (alpha-1)*x(i));
end

if TT < TRef
    V = 0;
else
    V = Vr;
end

if x(1) >= x1Ref
    condition = 1;
end

if condition
    D = Ratio*V;
else
    D = 0;
end

L = V - D;

% ECUACIONES DIFERENCIALES
% Balance de A en el primer plato
% dx1/dt
d(1,1) = (L*y(1) + V*y(2) - L*x(1) - V*y(1))/Ni;

% Balances de A en los platos 2 a T-1
% dxi/dt
for i = 2:T-1
    d(i,1) = (L*x(i-1) + V*y(i+1) - L*x(i) - V*y(i))/Ni;
end

% Balance de A en el hervidor
% dNTA/dt
d(T,1) = L*x(T-1) - V*y(T);

% Balance de materia global al hervidor
% dNT/dt
d(T+1,1) = L - V;

% Balance de A en el deposito
% dNDA/dt
d(T+2,1) = D*y(1);

% Balance de materia global al deposito
% dND/dt
d(T+3,1) = D;

% Balance de energia al hervidor
% dTT/dt
if TT < TRef

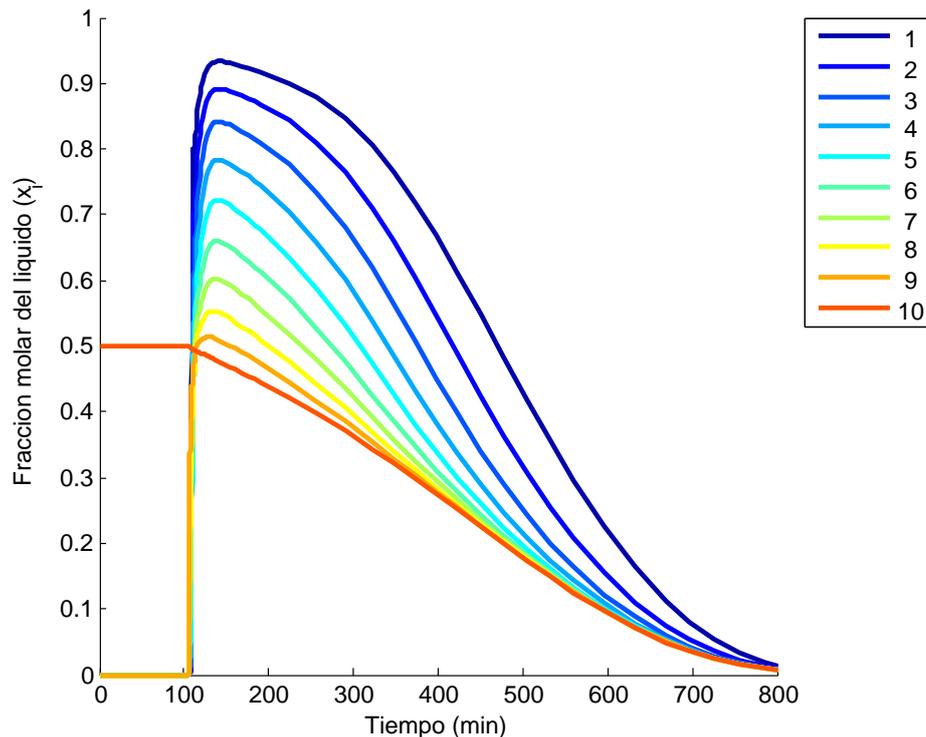
```

```

% Calor intercambiado en kJ/min
Q = U*A*(Tj-TT);
d(T+4,1) = Q/(Ce*NT);
else
% Se mantiene la temperatura constante
d(T+4,1) = 0;
end

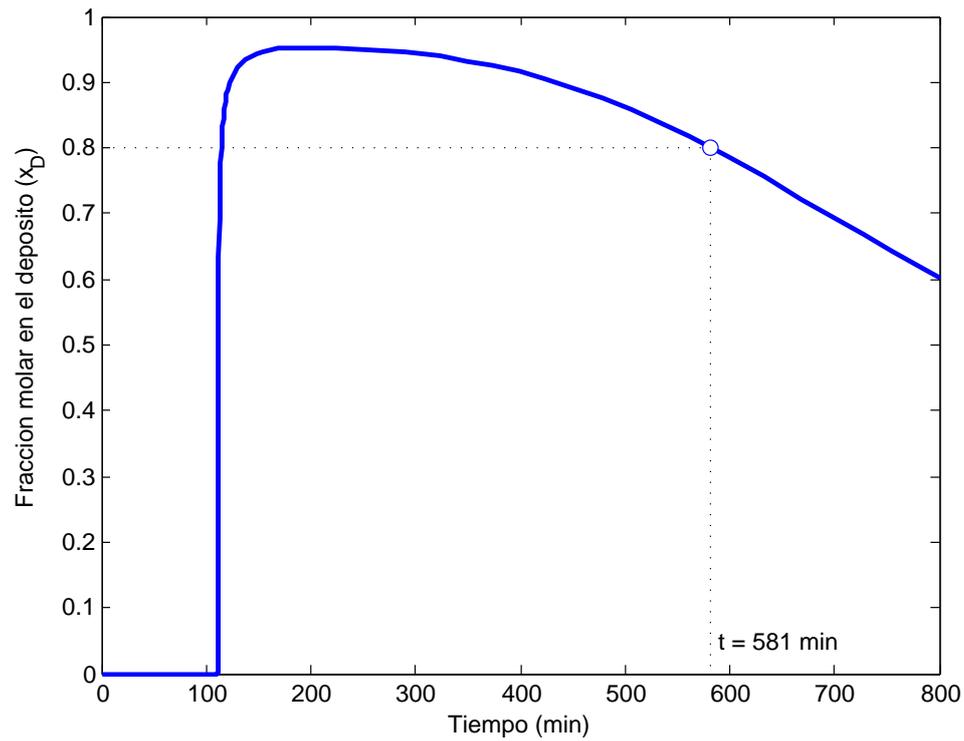
```

De este modo, la evolución temporal de las composiciones que se obtiene viene dada por



Se observa claramente como, en la primera etapa, no varían las composiciones en ninguna de las etapas ya que el caudal de salida de vapor se encuentra cerrado. Una vez se abre la salida de vapor (en el instante $t = 107$ min) la columna alcanza rápidamente la condición en la que comienza la tercera y última etapa, tan sólo 4,9 minutos. Una vez comienza a extraerse el destilado, las concentraciones en los platos caen progresivamente.

Para determinar el instante en que termina el ciclo es necesario representar la evolución de la composición en el depósito en función del tiempo, obteniéndose la siguiente gráfica:



En esta gráfica se aprecia claramente la primera de las etapas, la transición a la segunda y se puede leer el instante en el que la composición de destilado alcanza el 0.8, que es el tiempo total que dura el ciclo. El ciclo completo de calentamiento, estabilización y operación dura aproximadamente 581 minutos.

Calificación de los apartados

1. Modelo dinámico (4 puntos):
 - Balances de materia: 1,5 puntos.
 - Balance de energía: 0,5 puntos.
 - Ecuaciones auxiliares: 1 punto.
 - Restricciones: 1 punto.
2. Simulación de la etapa de *calentamiento* (1,5 puntos):
 - Implementación del m-file: 1 punto.
 - Resultados obtenidos: 0,5 puntos.
3. Simulación de la etapa de *estabilización* (2,5 puntos):
 - Implementación del m-file: 1,75 puntos.
 - Resultados obtenidos: 0,75 puntos
4. Simulación del ciclo completo (2 puntos):
 - Implementación del m-file: 1,5 puntos.
 - Resultados obtenidos: 0,5 puntos.