

OPERACIONES BÁSICAS DE INGENIERÍA QUÍMICA

Trabajo 1

Curso 00/01

BALANCE DE MATERIA Y ENERGÍA DE UN PROCESO

El objetivo de este trabajo es desarrollar los métodos de cálculo para los balances de materia y energía en régimen estacionario de un proceso continuo cuyos elementos principales son equipos de separación por transferencia de materia. Para este fin es necesario resolver conjuntamente las ecuaciones de cada elemento pues todos ellos están relacionados. Esto es lo que hacen los llamados simuladores de procesos que se usan en la industria.

El proceso que se considera es un grupo de equipos de la unidad de separación de proceso de hidrodesalquilación de tolueno. En particular, referido al diagrama de las páginas de red, los definidos por los siguientes límites:

1. Corrientes de entrada: 4 y 8
2. Corrientes de salida: 9, Fuel Gas, 12 y 13

Esto incluye un reciclo y dos columnas.

Las funciones de cálculo (desarrolladas con matlab) se dividirán en cinco grupos:

1. Propiedades físicas
2. Cálculo de equilibrio
3. Algoritmo BP para destilación multicomponente
4. Algoritmo SR para destilación multicomponente
5. Cálculo de dimensiones de columnas

Cada grupo de funciones será realizado por tres o cuatro personas de forma individual de acuerdo con las indicaciones que se dan más adelante. Estas funciones serán ofertadas en la página de red de la asignatura y su resultado representará dos terceras partes de la nota del trabajo.

Eligiendo entre las funciones presentadas, de forma individual se construirá el proceso y los métodos de convergencia de forma que se resuelvan los balances de materia y energía del proceso. La selección de paquetes puede influir en la nota de aquel o aquella que los haya realizado, esto es, los paquetes más elegidos (si realmente son mejores que los otros) podrían tener mejor nota.

Las funciones que los paquetes deben proporcionar son:

1. Propiedades físicas. Proporcionará las siguientes funciones:

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}(P, T, \mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad (1)$$

$$hL = hL(P, T, \mathbf{x}) \quad (2)$$

$$hV = hV(P, T, \mathbf{y}) \quad (3)$$

$$(4)$$

utilizando los modelos de Redlich-Kwong-Soave, UNIQUAC y Henry según corresponda. Se usará el banco de datos que se incluye en la página.

2. Cálculo de equilibrio. Funciones para flash isoterma y flash no adiabático, así como punto de burbuja y rocío:

$$[L, V, Q] = flash1(F, P, T) \quad (5)$$

$$[L, V, T] = flash2(F, P, Q) \quad (6)$$

$$Tb = Tb(F) \quad (7)$$

$$Tr = Tr(F) \quad (8)$$

donde F , L y V son vectores que representan las corrientes con la siguiente estructura:

{Caudal (kmol/h), Composición, Presión (bar), Temperatura (C) }

siendo la composición a su vez un vector con las fracciones molares de los 5 componentes con el siguiente orden:

[Hidrógeno, Metano, Benceno, Tolueno, Bifenilo]

3. Destilación multicomponente con algoritmo BP. Función de cálculo de una columna de destilación multicomponente con algoritmo BP con las siguientes características:

- Se tendrá una única alimentación, no habiendo extracciones laterales, ni aportes de calor distintos a los del hervidor o el condensador, que podrá ser parcial.
- Se considerará que la presión es constante en toda la columna.
- Hay libertad para elegir la forma o formas de especificar la columna. Ésta irá al final de los argumentos de entrada de la función.

- La forma de la función será por tanto:

$$[DL, DV, B, QH, QC, PER] = \text{colfrac}(F, N, nf, P, P1, P2, \dots)$$

donde DL , DV y B son las corrientes de destilado líquido y vapor y de fondo con la estructura descrita más arriba; QH y QC los calores *aportados* en el hervidor y condensador; y PER una matriz que para cada etapa, por filas da los siguientes datos:

$$[L, V, P, T, \mathbf{x}, \mathbf{y}]$$

F es la corriente de alimentación, N el número de etapas teóricas incluyendo el condensador (1) y el hervidor (N); nf la etapa de alimentación, P la presión de la columna y $P1$, $P2$, ... los parámetros adicionales necesarios para especificar la columna.

4. Destilación multicomponente con algoritmo SR. Igual que el anterior pero cambiando el algoritmo de cálculo.
5. Dimensionamiento de una columna. Se calcularán las dimensiones para cada plato de una columna a partir de la matriz PER obtenida en las funciones anteriores, estimando si fuera necesario los datos que falten.

$$[Dt, PLA] = \text{dimcol}(PER, P1, P2, \dots)$$

con Dt el diámetro del plato y $PLA = [Flv, Uf, ht, hdf]$ los datos por plato referentes a factor de flujo, velocidad de inundación, pérdida de carga total y altura de líquido en el vertedero. $P1$, $P2$, ... son los parámetros de diseño que se definan.

Las funciones así como su descripción (métodos de cálculo y estructura de subfunciones) y modo de uso se ubicarán en la página de red de los trabajos. Para ello se enviarán por correo electrónico a sgalan@diquma.upm.es los ficheros .m con las funciones y la documentación en formato HTML o pdf, antes de la fecha límite indicada.

Hay que tener en cuenta que la documentación debe dar la información necesaria para que otros puedan utilizar las funciones más que repetir lo que ya está en los libros, aunque debe quedar claro que se comprenden los aspectos importantes de lo que se hace. (Los manuales de ASPEN PLUS que están en las páginas del departamento son una buena referencia). Con el mismo sentido práctico, y a pesar del carácter individual del trabajo, hay que resaltar que sólo la cooperación entre todos permitirá que el conjunto final funcione correctamente.

La segunda parte consistirá en la simulación del conjunto de equipos del diagrama de flujo. En la presentación del trabajo se incluirá una tabla de balance de materia y energía para todas las corrientes, los datos de diseño de las columnas y la explicación del método de convergencia.

Para este fin se podrán usar las funciones presentadas en el seminario de matlab así como las adicionales que se crea conveniente.